

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПРОГРЕВА УГЛЕРОДОСОДЕРЖАЩЕГО МАТЕРИАЛА

MATHEMATICAL SIMULATION OF CARBON-CONTAINING MATERIAL HEATING PROCESS

Ларионов А.Н., доктор физико-математических наук, профессор, профессор, ФГБОУ ВО «Воронежский государственный аграрный университет им. императора Петра I», Воронеж, Россия

Larionov A.N., DrSc in Physics and Mathematics, Professor, Professor, Voronezh State Agrarian University named after Emperor Peter the Great, Voronezh, Russia

Машин В.Н., кандидат педагогических наук, доцент, доцент, ФГКВУ ВО Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия им. профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», Воронеж, Россия

Mashin V.N., PhD in Pedagogical Sciences, Docent, Associate professor, Military Educational and Scientific Center of the Air Force «N.E. Zhukovsky and Y.A. Gagarin Air Force Academy», Voronezh, Russia

Чёнгин В.Ю., старший преподаватель, ФГКВУ ВО Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия им. профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», Воронеж, Россия

Chyongin V.Yu., Senior lecturer, Military Educational and Scientific Center of the Air Force «N.E. Zhukovsky and Y.A. Gagarin Air Force Academy», Voronezh, Russia

Машина А.В., старший научный сотрудник, ФГКВУ ВО Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия им. профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», Воронеж, Россия

Machina A.V., Senior Researcher, Military Educational and Scientific Center of the Air Force «N.E. Zhukovsky and Y.A. Gagarin Air Force Academy», Voronezh, Russia

Аннотация. Анализируется процесс активации углеродных материалов. Представлено решение задач прогрева углеродных частиц, имеющих форму пластинки вдоль центральной части, цилиндрических образцов вдоль радиуса, эллипсоидов. Выполнено обобщение задачи для частиц, полученных в результате дробления углеродосодержащих материалов. Сильная зависимость продолжительности процесса прогрева от размеров образца указывает на необходимость фиксации геометрических параметров частиц в узком интервале.

Ключевые слова: углеродные материалы, поверхностное обгорание, активация, окислитель, тепловой поток.

Abstract. The activation process of carbon materials is analyzed. The solution of the problems of heating carbon particles having the shape of a plate along the central part, cylindrical samples along the radius, and ellipsoids is presented. The problem is generalized for particles obtained as a result of crushing carbon-containing materials. The strong dependence of the duration of the heating process

on the sample size indicates the need to fix the geometric parameters of the particles in a narrow range.

Keywords: carbon materials, surface combustion, activation, oxidizer, heat flow.

Угольные ископаемые составляют более 87 % прогнозируемых ресурсов ископаемого топлива Земли [1]. Физический процесс активации углеродных материалов заключается в газификации коксового остатка окислительными газами. При газификации, в местах вскрытия пор, образованных при термическом разложении исходных органических веществ, происходит частичное превращение твердой фазы в газовую. В коксовом остатке формируется пористая структура. В процессе активации необходимо свести к минимуму поверхностное обгорание частиц и получить активированный уголь с развитой пористой структурой. Это достигается проведением процесса при относительно низкой температуре ($300\div 1000$ °C), когда определяющим звеном является скорость химической реакции (кинетический предел) и диффузия газов в поры частиц [2].

В качестве окислительных газов могут использоваться водяной пар, углекислый газ и некоторые другие. Газификация вызывает значительную эрозию углеродной поверхности – тем более сильную, чем менее активен окислитель. Поскольку этот процесс идет с поглощением тепла (энергии), то его интенсивность зависит, в том числе и от транспорта энергии: она выше в локально более горячих точках. Это способствует глубокому развитию пор, и, одновременно, сохранению тонких стенок между порами, которые были «охлаждены» ранее реализованными эндотермическими актами.

В данном случае конкурируют два фактора – подвод тепла к месту реакции по массиву углеродного материала, и его поступление вместе с реагентом с водяным паром (H_2O). В случае преобладания вклада первого фактора идет глубокое развитие пор, если преобладает вклад второго фактора, то идет равномерный обгар поверхности и прогар перегородок – укрупнение пор. Таким образом, активация без обгорания невозможна, для сокращения обгорания следует нагрев вещества производить по отдельному, не связанному с H_2O каналу [1, 3]. Например, индукционно, когда с развитием пор, индукционный разогрев будет смещаться внутрь массива углерода, обеспечивая условия развития глубокой пористости.

Решение задачи о прогреве углеродосодержащего материала основано на теории теплопроводности [2, 4]. Поток тепла, обусловленный теплопроводностью твердого тела, описывается законом Фурье

$$\frac{dQ}{dt} = \int_S dS_i \lambda_{ik} \nabla_k T, \quad (1)$$

где $\lambda_{ik} = \text{diag}(\lambda_{\parallel} \lambda_{\parallel} \lambda_{\perp})$ – матрица теплопроводности, которая определяется коэффициентами теплопроводности вдоль слоистого материала $\lambda_{\parallel}$ и перпендикулярно слоям $\lambda_{\perp}$; $\nabla_k T$ – градиент температуры [2, 5].

Повышение температуры тела определяет тепловой поток

$$\frac{dQ}{dt} = \int_V dV \rho c \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (2)$$

Из уравнений (1) и (2) следует

$$\int_S dS_i \lambda_{ik} \nabla_k T = \int_V dV \rho c \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (3)$$

Следовательно

$$\int_V dV \nabla_i \lambda_{ik} \nabla_k T = \int_V dV \rho c \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (4)$$

Окончательно

$$\nabla_i \lambda_{ik} \nabla_k T = \rho c \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (5)$$

Уравнение температуропроводности однородного слоистого материала имеет вид

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \alpha_{\parallel}^2 \nabla_{ik} \nabla_k T = 0, \quad (6)$$

где

$$\alpha = \sqrt{\frac{\lambda}{\rho c}} - \quad (7)$$

коэффициент температуропроводности. Уравнение (6) можно преобразовать к виду [5]

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \alpha_{\parallel}^2 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) - \alpha_{\perp}^2 \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0. \quad (8)$$

При решении конкретных задач удобно заменить

$$x \rightarrow \alpha_{\parallel} x, \quad y \rightarrow \alpha_{\parallel} y, \quad z \rightarrow \alpha_{\perp} z.$$

Такая замена позволяет преобразовать уравнение температуропроводности (8) к виду [3]

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \Delta T = 0. \quad (9)$$

Задача анализа нагрева цилиндрической частицы вдоль оси моделирует прогрев плоского образца (например, чешуйки, пластинки) вдоль его центральной части.

В этом случае граничные условия для функции $T(t, z)$ следует записать в виде $T(0, z) = T_0$; $T(t, 0) = T(t, \ell) = T_1$. Здесь ℓ – длина цилиндра.

Температуропроводность в направлении перпендикулярно слоям $\alpha^2 = \alpha_{\perp}^2$. Уравнение теплопроводности запишется в виде

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_{\perp}^2 \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}.$$

Решение уравнения теплопроводности с учетом указанных граничных условий

$$\begin{aligned} T(t, z) = T_1 + \frac{2}{\pi} (T_1 - T_0) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\left(k - \frac{1}{2}\right)} \cos \frac{\pi}{\ell} \left(k - \frac{1}{2}\right) \left(z - \frac{\ell}{2}\right) \times \\ \times \exp \left[-\frac{4\alpha_{\perp}^2}{\ell^2} \pi \left(k - \frac{1}{2}\right)^2 t \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

Задача прогрева диска вдоль радиуса моделирует прогрев цилиндрических образцов (иглы, волокна, опилки) в направлении, перпендикулярном оси [2, 4].

Для этой задачи граничные условия для функции $T(t, r)$ можно записать в виде $T(0, r) = T_0$; $T(t, R) = T_1$.

Уравнение теплопроводности имеет вид

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r}, \quad (11)$$

где

$$r = \sqrt{\frac{x^2}{\alpha_{\parallel}^2} + \frac{z^2}{\alpha_{\perp}^2}}.$$

Решение уравнения (11) с учетом граничных условий запишется в виде

$$T = T_1 - 2(T_1 - T_0) \left\{ 0,7J_0 \left(\frac{2,4r}{R} \right)^{-\left(\frac{2,4}{R}\right)^2 t} + 0,45J_0 \left(\frac{5,5r}{R} \right)^{-\left(\frac{5,5}{R}\right)^2 t} + \right. \\ \left. + 0,46J_0 \left(\frac{8,7r}{R} \right)^{-\left(\frac{8,7}{R}\right)^2 t} + \dots \right\}. \quad (12)$$

Здесь J_0 – функция Бесселя нулевого порядка.

Решение задачи прогрева эллипсоида моделирует прогрев среднестатистического образца материала (гранулы, близкой к сферической и любой другой существенно трехмерной формы).

Граничные условия для функции $T(t, r)$ следует записать в виде $T(0, r) = T_0$, $T(t, R) = T_1$.

Уравнение теплопроводности для данной задачи

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r}, \quad (13)$$

Здесь

$$r = \sqrt{\frac{x^2}{\alpha_{\parallel}^2} + \frac{y^2}{\alpha_{\parallel}^2} + \frac{z^2}{\alpha_{\perp}^2}}.$$

Решение уравнения (13) следует искать в виде

$$T = T_1 - \frac{2}{\pi} (T_1 - T_0) \frac{R}{r} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} \sin \frac{\pi k r}{R} \exp \left[- \left(\frac{\pi k}{R} \right)^2 t \right]. \quad (14)$$

Из приведенных примеров следует, что распределение температуры внутри образца нагреваемого материала существенно зависит от его формы. Полученные выражения распределения температур для правильных геометрических форм, позволяют судить о распределении температур в близких по форме образцах.

Можно обобщить задачу, вводя понятие о «средней» форме образца, например, для материалов, получаемых дроблением [1]. Учитывая возможную анизотропию их свойств, как это имеет место для антрацитов и различных их производных, такой формой следует признать

эллипсоид с осями, длины которых пропорциональны величинам их механических характеристик таких, как механическая прочность вдоль соответствующих направлений.

Несмотря на различие выражений для распределения температур в образцах различных форм, из них удастся получить близкие по смыслу и значению оценки времени (τ) прогрева образца

$$\tau \sim \frac{R^2}{\alpha^2},$$

где, как отмечалось раньше α – температуропроводность, средневзвешенная по направлениям; R – условный геометрический размер, например радиус шара, диска.

Физический смысл времени прогрева τ – время, необходимое для достижения температуры внутри образца, отличающееся от максимально возможного при данных граничных условиях приблизительно на одну треть, то есть

$$T(\tau) = T_{\max} - \frac{1}{e} T_{\max} = T_{\max} \frac{e - 1}{e}.$$

Такую оценку можно проиллюстрировать анализом решения задачи для эллипсоида.

При $t \rightarrow 0$ и $r \rightarrow 0$

$$T = T_1 + \frac{2}{\pi} (T_1 - T_0) \frac{R}{r} \left(-\frac{\pi r}{2R} \right) = T_0,$$

а при $t \rightarrow \infty$ и $T = T_1$

При этом учтено, что

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} \sin kx = -\frac{x}{2}.$$

В текущий момент времени t температура определяется выражением

$$T = T_1 - T_1 \tilde{\alpha} \exp \left(-\frac{t}{\tau} \right).$$

Здесь $\tilde{\alpha}$ – коэффициент, учитывающий форму образца.

Установленная сильная зависимость времени прогрева от размеров образца указывает на необходимость выбора для термообработки более узкого по крупности состава сырья [1, 3]. Она не может не оказывать влияния на технологию, и непосредственно влияет на качество продукта, которое определяется температурой нагрева и временем выдержки при максимальной температуре.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Передрий, М. А. Антрацит как сырье для получения сорбентов для различных направлений использования / М. А. Передрий, Ю. И. Кураков, В. С. Самофалов // Углерод: фундаментальные проблемы науки, материаловедения, технология : материалы 2-й Международной конференции. – Москва : МГУ, 2003. – С. 170.
2. Передерий, М. А. Дробленые и гранулированные сорбенты из антрацита / М. А. Передерий, Ю. И. Кураков, В. С. Самофалов // Химия твердого топлива. – 2004. – № 3. – С. 46-59.
3. Теоретические основы термодинамики и теплопередачи : учеб. пособие /

А. Н. Ларионов, Ю. И. Кураков, В. С. Воищев [и др.]. – Воронеж : Воронежский государственный аграрный университет им. Императора Петра I, 2015. – 199 с.

4. Маликов, И. Н. Углеродные сорбенты для ликвидации разливов нефти и нефтепродуктов / И. Н. Маликов, Ю. И. Кураков, М. А. Передрий // Актуальные проблемы нефтехимии : материалы II Всероссийской конференции. – Уфа, 2005. – С. 210.

5. Ларионов, А. Н. Физика : Учеб. пособие (курс лекций) / А. Н. Ларионов, В. П. Шацкий. – Воронеж : Воронежский государственный аграрный университет им. Императора Петра I, 2022. – 320 с.

REFERENCES

1. Peredriy, M. A. Anthracite as a raw material for obtaining sorbents for various applications / M. A. Peredriy, Yu. I. Kurakov, V. S. Samofalov // Carbon: Fundamental Problems of Science, Materials Science, and Technology : Proceedings of the 2nd International Conference. – Moscow : Moscow State University, 2003. – P. 170.

2. Perederiy, M. A. Crushed and granulated sorbents from anthracite / M. A. Perederiy, Yu. I. Kurakov, V. S. Samofalov // Solid Fuel Chemistry. – 2004. – No. 3. – P. 46-59.

3. Theoretical foundations of thermodynamics and heat transfer : Textbook / A. N. Larionov, Yu. I. Kurakov, V. S. Voishchev [et al.]. – Voronezh : Voronezh State Agrarian University. Emperor Peter the Great, 2015. – 199 p.

4. Malikov, I. N. Carbon Sorbents for Eliminating Oil and Petroleum Product Spills / I. N. Malikov, Yu. I. Kurakov, M. A. Peredriy // Actual Problems of Petrochemistry: Proceedings of the II All-Russian Conference. – Ufa, 2005. – P. 210.

5. Larionov, A. N. Physics: Textbook (Lecture Course) / A. N. Larionov, V. P. Shatsky. – Voronezh: Voronezh State Agrarian University named after Emperor Peter the Great, 2022. – 320 p.