

К.т.н. Скачков В.А., Иванов В.И., к.п.н. Мосейко Ю.В., Карпенко А.В.
Запорожская государственная инженерная академия, Украина
**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГАЗИФИКАЦИИ УГЛЕРОДНЫХ
КОМПОЗИТОВ**

Изучение закономерностей развития внутренней структуры углеродных композитов при взаимодействии с газовыми реагентами в процессе газификации позволяет определить технологические параметры, необходимые для формирования заданной плотности и пористости по толщине материала.

Если толщина углеродного композита значительно больше толщины слоя, в котором локализуется реакция газификации, то процесс формирования плотности данного материала описывается системой дифференциальных уравнений:

$$v \cdot \frac{d\rho}{dx} = \beta \cdot k \cdot S \cdot C ; \quad (1)$$

$$v \cdot \frac{dC}{dx} = \frac{d}{dx} \left(D \cdot \frac{dC}{dx} \right) - k \cdot S \cdot C , \quad (2)$$

где ρ – плотность углеродного композита;

C – концентрация газового реагента;

D – коэффициент диффузии;

S – удельная реакционная поверхность;

k – константа скорости газификации;

v – линейная скорость движения фронта газификации;

β – стехиометрический фактор реакции газификации;

x – координата, направленная с поверхности в глубину композита.

Величины параметров D и S определяются пористостью композита, а, следовательно, являются функциями его плотности ρ .

Для решения системы уравнений (1)...(2) задаются краевые условия:

$$C|_{x=0} = C_S ; C|_{x \rightarrow \infty} = 0 ; \rho|_{x=0} = \rho_S ; \rho|_{x \rightarrow \infty} = \rho_0 \quad (3)$$

где C_S – удельная поверхностная концентрация газового реагента;

ρ_S – удельная поверхностная плотность композита.

Из системы уравнений (1)...(2) получают:

$$\beta \cdot D \cdot \frac{dC}{dx} = v \cdot (\rho - \rho_0) . \quad (4)$$

Тогда можно записать соотношение, которое определяет изменение плотности углеродного композита:

$$v^2 \cdot (\rho - \rho_0) \cdot \frac{d\rho}{dC} = \beta^2 \cdot k \cdot S \cdot D \cdot C . \quad (5)$$

Интегрирование выражения (5) требует наличия зависимости $S = f_1(\rho)$ и $D = f_2(\rho)$. Для этого используют известные соотношения:

$$S = A \cdot \theta \cdot (1 - \theta) ; D = \frac{D_c \cdot \theta}{\zeta} , \quad (6)$$

где θ – пористость углеродного композита;

D_c – коэффициент диффузии в свободном пространстве;

ζ – коэффициент извилистости пор, $\zeta = 1/\theta$;

A – константа.

Для исключения константы A можно использовать соотношение:

$$\frac{S}{S_0} = \frac{\theta \cdot (1 - \theta)}{\theta_0 \cdot (1 - \theta_0)}, \quad (7)$$

где S_0 – начальная удельная реакционная поверхность.

Учитывая зависимость плотности углеродного композита ρ от его пористости θ , можно записать

$$\theta = 1 - \frac{\rho}{\rho_{\text{ест}}}, \quad (8)$$

где $\rho_{\text{ист}}$ – истинная плотность углеродного композита.

Следовательно, соотношения (6) с учетом выражений (7) и (8) будут иметь вид

$$S = S_0 \cdot \frac{\rho}{\rho_0} \cdot \frac{\left(1 - \frac{\rho}{\rho_{\text{ест}}}\right)}{\left(1 - \frac{\rho_0}{\rho_{\text{ест}}}\right)}, \quad (9)$$

$$D = D_c \cdot \left(1 - \frac{\rho}{\rho_{\text{ест}}}\right)^2. \quad (10)$$

Выполняя подстановку соотношений (9) и (10) в выражение (5), получают разрешающее уравнение

$$K_s^2 \cdot (\omega - \omega_0) \cdot \frac{d\omega}{dC} = \frac{\beta^2 \cdot k \cdot S_0 \cdot (1 - \omega)^3 \cdot \omega \cdot D_c \cdot C \cdot \omega_0}{1 - \omega_0}, \quad (11)$$

где $\omega = \frac{\rho}{\rho_{\text{ест}}}$; $\omega_0 = \frac{\rho_0}{\rho_{\text{ест}}}$.

Уравнение (11) определяет зависимость плотности углеродного композита от концентрации газового реагента. Определяющим параметром данного уравнения является константа скорости газификации k , величину которой находят экспериментальным путем.

Решение уравнения (11) с учетом краевых условий (3) можно записать в виде

$$\tilde{N} = \frac{1}{\varphi} \cdot \left[\frac{1 - \omega_0}{2\omega_0 \cdot (1 - \omega)^2} - \frac{1 - 2\omega}{2\omega_0 \cdot (1 - \omega)} - \frac{1}{1 - \omega} - \ln \frac{\omega \cdot (1 - \omega_0)}{\omega_0 \cdot (1 - \omega)} \right]^{0.5}, \quad (12)$$

где $\varphi = \frac{\beta^2 \cdot k \cdot S_0 \cdot D_c}{(2K_s)^2}$.

После подстановки соотношений (8) и (11) в уравнение (1) и несложных преобразований получают уравнение, которое описывает распределение плотности по толщине углеродного композита:

$$\frac{dt}{dx} = \frac{2K_s \cdot (t-1) \cdot t}{\beta \cdot D_c \cdot t_0} \cdot \left[\frac{t_0}{2(1-t_0) \cdot t^2} + \frac{1-2t}{2(1-t_0) \cdot t} - \frac{1}{t} - \ln \frac{(1-t) \cdot t_0}{t \cdot (1-t_0)} \right]^{0.5}, \quad (13)$$

где $t = 1 - \omega$; $t_0 = 1 - \omega_0$.

Численное решение данного уравнения позволяет оценивать распределение плотности по толщине углеродного композита, изменение его пористой структуры и реализовать температурно-временные параметры, обеспечивающие заданный градиент пористости материала.