

УДК 621.002:661.666

**МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ УЩІЛЬНЕННЯ  
ПОРИСТОЇ СТРУКТУРИ ВУГЛЕЦЕВИХ КОМПОЗИЦІЙНИХ  
МАТЕРІАЛІВ З УРАХУВАННЯМ РОЗПОДІУ ПОР ЗА ВЕЛИЧИНОЮ  
ДІАМЕТРА**

**Скачков В.О., Іванов В.І., Нестеренко Т.М., Бережна О.Р., Мосейко Ю.В.**

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА УПЛОТНЕНИЯ  
ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ  
МАТЕРИАЛОВ С УЧЕТОМ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОР ПО ВЕЛИЧИНЕ  
ДИАМЕТРА**

**Скачков В.А., Иванов В.И., Нестеренко Т.Н., Бережная О.Р., Мосейко Ю.В.**

**MODELING OF COMPACTION PROCESS FOR  
POROUS STRUCTURE OF CARBON COMPOSITE MATERIALS WITH  
ACCOUNTING OF DISTRIBUTION FOR PORES ON DIAMETER SIZE**

**Skachkov V., Ivanov V., Nesterenko T., Berezhnaya O., Mosejko Yu.**

**Запорожская государственная инженерная академия  
г. Запорожье, Украина,  
[colourmet@zgia.zp.ua](mailto:colourmet@zgia.zp.ua)**

*Виконано моделювання процесу ущільнення пористої структури вуглецевих композиційних матеріалів у робочому об'ємі плоского реактора. Запропонована методика розрахунку передбачає визначення розподілу концентрації реакційного газу за довжиною реактора з урахуванням його доставляння до нагрітих поверхонь і подальшої дифузії в пористу структуру ущільнюваних композиційних матеріалів.*

**Ключові слова:** вуглецеві композиційні матеріали, плоский реактор, пориста структура, ущільнення, моделювання

*Выполнено моделирование процесса уплотнения пористой структуры углеродных композиционных материалов в рабочем объеме плоского реактора. Предложенная методика расчета предусматривает определение распределения концентрации реакционного газа по длине реактора с учетом его доставки к нагретым поверхностям и последующей диффузии в пористую структуру уплотняемых композиционных материалов.*

**Ключевые слова:** углеродные композиционные материалы, плоский реактор, пориста структура, уплотнение, моделирование

*Modeling of compaction process of porous structure of carbon composite materials in the working volume of flat reactor is made. Proposed calculation methodology involves determination of distribution of reaction gas concentration along reactor length taking into account its delivery to heated surfaces and subsequent diffusion in porous structure of sealed composite materials.*

**Keywords:** carbon composite materials, flat reactor, a porous structure, compaction, modeling

### Вступ

Поширення галузі застосування вуглецевих композиційних матеріалів визначається їх собівартістю, яка, в свою чергу, залежить від зниження енерговитрат на їх виробництво. Так, зниження температури ущільнення пористої структури вуглецевих композиційних матеріалів до 600-700 °С під час використання зріджених газів дозволяє знайти підхід до проблеми енергозбереження [1].

Питання ущільнення пористої структури вуглецевих композиційних матеріалів розглянуто у роботах [2-4]. Проте в роботах [2,4] не подано реальну структуру пор цих матеріалів і не оцінено вплив її на процес ущільнення. У роботі [3] зроблено спробу врахувати пористу структуру під час ущільнення вуглецевих композиційних матеріалів, яку представляли ефективною пористістю з характерним радіусом усередненої пори.

### Постановка завдання

Завданням досліджень є моделювання даного процесу та розробка методики розрахунків процесу ущільнення вуглецевих композиційних матеріалів у плоскому реакторі з урахуванням дифузії реакційного газу до реальної пористої структури за умов ізотермічного нагрівання.

### Основна частина досліджень

Відомо, що реальна пориста структура вуглецевих композиційних матеріалів представляється програмою з розподілом ефективного радіусу пор у межах від декількох нанометрів до декількох сотень мікрометрів. Точніше обчислення процесів ущільнення реальних конструкцій з вуглецевих композиційних матеріалів спричинює необхідність врахування у розрахунковій моделі реальної структури їх пористого об'єму.

Диференціальне рівняння перенесення реакційного газу дифузиею в модельній порі з ефективним радіусом  $r$  за умов його розкладання на поверхні пори записують як [3]:

$$\frac{d^2C}{d\ell^2} = \frac{2k}{r \cdot D} \cdot C, \quad (1)$$

де  $C$  – концентрація реакційного газу;  $\ell$  – координата за довжиною пори;  $k$  – константа швидкості розкладання реакційного газу на нагрітій поверхні;  $D$  – коефіцієнт дифузії у порі.

Граничні умови для рівняння (1) мають вид:

$$C|_{\ell=0} = C_0^i; \quad (2)$$

$$\left. \frac{dC}{d\ell} \right|_{\ell=h} = 0, \quad (3)$$

де  $C_0^i$  – концентрація реакційного газу біля входу до пори;  $h$  – половина товщини ( $2h$ ) стінки композиційного матеріалу.

Вирішення рівняння (1) з урахуванням умов (2) і (3) записують як

$$C(\ell) = C_0^i \cdot \left[ \frac{\exp(z \cdot \ell)}{1 + \exp(2z \cdot h)} + \frac{\exp(-z \cdot \ell)}{1 + \exp(-2z \cdot h)} \right], \quad (4)$$

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ  
ТА БІОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І СИСТЕМ

де  $z$  – корінь характеристичного рівняння,  $z = (2k / r \cdot D)^{0,5}$ .

Розподіл пор у вуглецевих композиційних матеріалах характеризується порограмою, що має чотири характерні групи [5]:

- перша група пор розподілена у діапазоні розмірів ефективних радіусів від 0,001 до 0,03 мкм;
- друга група - в діапазоні 0,03-2,50 мкм;
- третя група - в діапазоні 2,50-10,0 мкм;
- четверта група - в діапазоні 10-200 мкм.

Частка пор першої групи складає 38 %, другої групи – 32 %, третьої – 19 % і четвертої – 11 %.

У об'ємі проточного реактора реалізуються два дифузійні потоки реакційного газу, один потік спрямовано від центру реактора на його безпористу стінку, другий – на пористу поверхню вуглецевого композиційного матеріалу.

Потік на безпористу поверхню реактора можна визначити методом рівнодоступних поверхонь Франк-Каменецького [6]. У цьому разі концентрацію реакційного газу на поверхні реактора  $C_0^P$  обчислюють за формулою

$$C_0^P = \frac{\beta \cdot C_0^C}{\beta + k}, \quad (5)$$

де  $C_0^C$  – концентрація реакційного газу в центрі реактора;  $\beta$  – константа швидкості дифузії.

На поверхні вуглецевого композиційного матеріалу реакційний газ розкладається на безпористих ділянках, дифундує у пори з осадженням піролітичного вуглецю на їх поверхні.

Тоді концентрацію реакційного газу на пористій поверхні вуглецевих композиційних матеріалів  $C_0^i$  визначають як

$$C_0^i = \frac{\beta \cdot \tilde{N}}{\left[ \beta + k \cdot (1 - q_n) + q_n \cdot \pi \cdot \sum_{i=1}^N \Omega_i \right]}, \quad (6)$$

де  $q_n$  – пористість поверхні вуглецевого композиційного матеріалу;

$$\Omega_i = r_i^2 \cdot D_i \cdot z_i \cdot p_i \cdot \left[ \frac{\exp(-2z_i \cdot h) - \exp(2z_i \cdot h)}{2 + \exp(2z_i \cdot h) + \exp(-2z_i \cdot h)} \right]; \quad r_i, p_i - \text{середній ефективний радіус } i$$

відносна частка  $i$ -ої характерної групи пористої структури композиційного матеріалу, відповідно;  $N$  – кількість характерних груп пор.

Розглядали плоский реактор шириною  $b_p$  і довжиною  $L$ , в центрі якого, між бічними стінками розташовували плоску пластину вуглецевого композиційного матеріалу шириною  $b_n$  і товщиною  $2h$ . Реакційний газ (пропан) рівномірно обтікає пластину з обох боків, дифундує на поверхню стінок реактора та пластини. Стінки реактора та пластина нагріті до постійної температури  $T$ , за якої пропан розкладається на нагрітих поверхнях з відкладенням твердого осаду, – піролітичного вуглецю - відповідно до рівняння



КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ  
ТА БІОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І СИСТЕМ

де  $k$  – константа швидкості розкладання пропану ( $C_3H_8$ ) у рівнянні (7), яку задають у вигляді співвідношення Ареніуса.

Диференціальне рівняння перенесення реакційного газу за довжиною плоского реактора з урахуванням його розкладання можна записати як

$$\frac{d(C \cdot U)}{dx} = -k \cdot \beta \cdot C \cdot \left[ \frac{b_p}{\beta + k} + \frac{b_n}{\beta + k \cdot (1 - q_n) + q_n \cdot \pi \cdot \sum_{i=1}^N \Omega_i} \right], \quad (8)$$

де  $U$  – швидкість течії реакційного газу за довжиною реактора;  $x$  – координата, що спрямована за довжиною реактора.

З рівняння (7) виходить:

$$\begin{aligned} C_{C_3H_8} &= C_{\hat{a}\hat{o}}^{N_3H_8} \cdot (1 - \alpha); \\ C_{H_2} &= C_{\hat{a}\hat{o}}^{C_3H_8} \cdot 4\alpha; \\ U &= U_{\hat{a}\hat{o}} \cdot (1 + 3\alpha), \end{aligned} \quad (9)$$

де  $C_{\hat{a}\hat{o}}^{C_3H_8}$  – концентрація пропану на вході до реактора;  $\alpha$  – питома міра розкладання пропану за довжиною реактора.

З урахуванням співвідношень (9) рівняння (8) має вид:

$$\frac{2(1 - 3\alpha)}{1 - \alpha} \cdot \frac{d\alpha}{dx} + \frac{k \cdot \beta}{U_{\hat{a}\hat{o}}} \cdot \left[ \frac{b_p}{\beta + k} + \frac{b_n}{\beta + k \cdot (1 - q_n) + q_n \cdot \pi \cdot \sum_{i=1}^N \Omega_i} \right] = 0. \quad (10)$$

Рівняння (10) задає міру розкладання пропану за довжиною реактора, яка враховує процеси осадження піролітичного вуглецю на стінках реактора та у пористій структурі пластини вуглецевого композиційного матеріалу.

Після розділення змінних параметрів у рівнянні (10) та інтегрування його лівої частини від 0 до  $\alpha$ , а правої частини – від 0 до  $x$ , з урахуванням малого значення питомої міри розкладання пропану рівняння можна записати

$$\alpha(x) = 0,25 \left[ (1 + 8\gamma \cdot x)^{0,5} - 1 \right]. \quad (11)$$

Під час визначення величини константи швидкості дифузії  $\beta$  знаходили дослідним шляхом швидкість виходу реакційних газів  $U_{\hat{a}\hat{o}}$  та обчислювали граничну міру розкладання пропану на виході з реактора

$$\alpha(L) = \frac{1}{3} \cdot \left( \frac{U_{\hat{a}\hat{o}}}{U_{\hat{a}\hat{o}}} - 1 \right). \quad (12)$$

Після підставлення співвідношення (12) до рівняння (11) для  $x = L$  з урахуванням змінних параметрів, що входять у рівняння (10), можна записати

$$\beta + Q + (Q^2 - G)^{0.5}, \quad (13)$$

де

$$G = \frac{V \cdot k \cdot F}{V - b_p - b_n}; \quad V = \frac{U_{\text{до}} \left[ (4\alpha + 1)^2 - 1 \right]}{8k \cdot L}.$$

Співвідношення (13) дозволяє визначити константу швидкості дифузії пропану від центра реактора до поверхні розкладання.

### Висновки

Виконано математичне моделювання та розроблено методику обчислення розподілу концентрації реакційного газу за довжиною плоского реактора з урахуванням його доставляння до нагрітих поверхонь, наступної дифузії у пористу структуру вуглецевих композиційних матеріалів і розкладання реакційного газу з осадженням піролітичного вуглецю.

### Література

1. Скачков В. А. Определение кинетических параметров процесса осаждения пиролитического углерода / В. А. Скачков, Р. А. Шаповалов, В. И. Иванов // *Металлургия (Научные труды ЗГИА)*. – Запорожье: ЗГИА, 2000. – Вып. 3. – С. 52-55.
2. Колесников С. А. Уплотнение углеродных заготовок путем пиролиза газа в промышленных печах / С. А. Колесников, В. И. Костиков, А. М. Васильева // *Химия твердого топлива*. – 1991. – №. 6. – С. 114-122.
3. *Математические модели* процессов температурной обработки и уплотнения в производстве углеродных композиционных материалов / В. А. Скачков, В. Д. Карпенко, В. И. Иванов, Е. В. Скачков // *Вопросы атомной науки и техники*. – Харьков: 1999. – Вып. 4 (76). – С. 3-12.
4. Гурин В. А. Исследование газофазного уплотнения пироуглеродом пористых сред методом радиально движущейся зоны пиролиза / В. А. Гурин, И. В. Гурин, С. Г. Фурсов // *Вопросы атомной науки и техники*. – Харьков: 1999. – Вып. 4 (76). – С. 32-45.
5. Байгушев В. В. Технология производства композиционных углерод-углеродных материалов электротермического назначения. Диссертация кандидата техн. наук: / Владимир Владимирович Байгушев. – Днепропетровск, 2006. – 140 с.
6. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике / Д. А. Франк-Каменецкий. – М.: Наука, 1967. – 491 с.