

УДК 620.1.08

*А. В. Медведева**

ФИЗИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНЫХ СЫПУЧИХ МАТЕРИАЛОВ

Расширение сферы применения пористых материалов, а также круга связанных с ними научных и практических задач в металлургии, атомной и электронной технике, энергомашиностроении, электрохимии, физической химии и других областях повлекло неуклонный рост интереса к таким материалам [1].

При разработке методов и средств контроля параметров пористости материалов наиболее важным этапом является физическое и математическое моделирование их структуры, целью которого является выбор адекватной морфологии пористого материала и разработка ее математического описания, наиболее полно учитывающего структурные характеристики.

Сложность при составлении математического описания в процессе фильтрации состоит в выборе такой модели, которая, в первую очередь, наиболее полно раскрывает физический смысл величины K (проницаемость) с учетом структурных характеристик изучаемого слоя.

Проанализировав основные существующие физические модели слоя сыпучего материала (СМ) с позиции вложенного в проницаемость K физического смысла, мы показали, что входящая в уравнения величина ε колеблется в интервале от 1 до 3 и принимает, в том числе дробные значения. Этот факт дает основание полагать о ее связи с фрактальной размерностью.

Пористые СМ имеют сложную нерегулярную структуру порового пространства, которую очень сложно описать методами евклидовой геометрии. В настоящее время для описания морфологии пористых материалов и протекающих в них процессов широко используется теория фракталов. Фрактал – это бесконечно самоподобная геометрическая фигура, каждый фрагмент которой повторяется при уменьшении масштаба [2].

* Работа выполнена под руководством д-ра техн. наук, профессора ФГБОУ ВПО «ТГТУ» Д. М. Мордасова.

Методы, основанные на использовании газа, являются наиболее перспективными за счет того, что газ легко проникает в поры размером до 0,2 нм, а выбор его природы и соответствующая подготовка не оказывают какого-либо негативного воздействия на образец.

За основу аэродинамического метода контроля пористости СМ взята модель губки Менгера (рис. 1, а), состоящая из трехмерных аналогов [ковра Серпинского](#).

Строится данная модель следующим образом:

1) выбирается куб со сторонами $l = L$;

2) каждая сторона куба делится на три части таким образом, что куб состоит из 27 меньших кубиков со сторонами $h_1 = \frac{L}{3}$;

3) из центральной части объема исходного куба удаляются 7 таких меньших кубиков;

4) в каждом из оставшихся 20 кубиков совершается процедура, аналогичная описанной выше.

Фрактальную размерность определяют по формуле

$$D = \frac{\ln 20}{\ln 3} = \frac{\ln(k^3 - 3kp^2 + 2p^3)}{\ln k} = 2,727. \quad (1)$$

В таблице 1 представлены результаты оценки фрактальной размерности D углеродных материалов [3, 4].

Воспользовавшись методикой моделирования, предложенной Менгером, выберем фрактальный объект, имеющий размерность, наиболее близко совпадающую со средним значением из табл. 1.

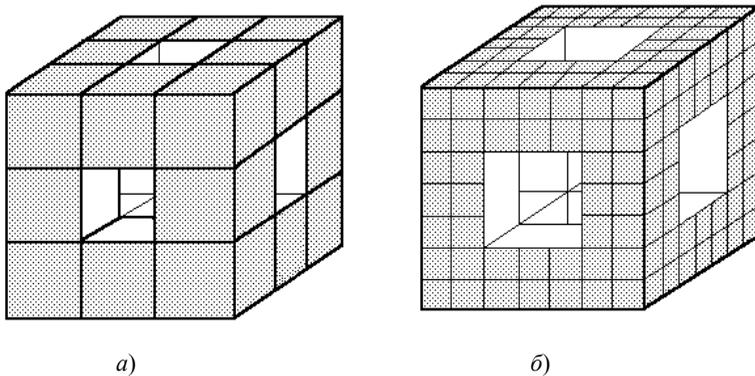


Рис. 1. Пористый СМ, смоделированный на основе:
 а – регулярной губки Менгера; б – обобщенной губки Менгера

1. Фрактальная размерность углеродных материалов

№	Материал	D
1	Адсорбент N115	2,69
2	Адсорбент N134	2,64
3	Адсорбент N220	2,62
4	Клубки из углеродного наноматериала «Таунит»	2,95
5	Углеродные нановолокна «Таунит»	2,95
6	Углеродные волокна	2,70
7	Углеродные нанотрубки	2,70
8	Углеродный депозит	2,89
9	Пористый углеродный материал C3	2,65
10	Пористый углеродный материал C4	2,80
11	Гранулы активированного угля из оболочек кокосовых орехов (Цуруми НС-8)	2,71
12	Гранулы активированного угля из оболочек кокосовых орехов (Фуджизава В-СГ)	2,80
13	Животный уголь	2,78
14	Пористый древесный уголь из оболочек кокосовых орехов (Стандарт Кемикэл Ко., Монреаль)	2,67
15	Бурый уголь	2,56
Среднее значение фрактальной размерности D		2,741

На рисунке 1, б представлена статистическая губка Менгера, механизм образования которой состоит в том, что каждая сторона ребра в исходном кубе делится на k частей, из центра удаляется p кубиков со сторонами ребра $\frac{L}{k}$ и подсчитывается доля оставшихся. Далее для каждого оставшегося кубика со сторонами $\frac{L}{k}$ процедура изъятия p кубиков осуществляется n раз.

В таблице 2 приведены результаты расчета фрактальной размерности по формуле (1) при различных значениях k и p .

2. Результаты расчета фрактальной размерности обобщенной губки Менгера при различных значениях k и p

k	3	4	5	6	7	8	9	9	10
p	2	1	2	3	3	4	4	5	5
D	1,771	2,877	2,730	2,613	2,743	2,667	2,754	2,602	2,699

Как видно из табл. 2, при $k = 7$ и $p = 3$ фрактальная размерность обобщенной губки Менгера $D = 2,743$ близка к среднему значению для пористых углеродных материалов.

Объемную плотность найдем из соотношения

$$\rho_v = \frac{\rho_n}{1 - \varepsilon_0} = \frac{\Delta P_2}{gh_0(1 - \varepsilon_0)}, \quad (2)$$

где ΔP_2 – перепад давления на псевдооживленном слое СМ, Па; h_0 – высота неподвижного слоя СМ, м; ρ_n – насыпная плотность СМ, кг/м³; ε_0 – порозность (концентрация газовой фазы)

$$\varepsilon_0 = \frac{3kp^2 - 2p^3}{k^3}. \quad (3)$$

Используя результаты измерения истинной ρ_n и объемной (2) плотности с учетом (3), пористость углеродных СМ определим в виде

$$\Pi = \left(1 - \frac{\rho_v}{\rho_n}\right) \cdot 100\% = \left(1 - \frac{\Delta P_2}{\rho_n gh} \frac{k^3}{3kp^2 - 2p^3}\right) \cdot 100\%. \quad (4)$$

Результаты расчета пористости по формуле (4) достаточно хорошо согласуются с данными нормативно-технической документации.

Поскольку данная модель имеет фрактальную размерность, наиболее близко совпадающую со средним значением для углеродных материалов, с целью более точного определения пористости актуальной остается задача непосредственного определения фрактальной размерности контролируемого СМ с подбором соответствующих коэффициентов k и p .

Список литературы

1. *Медведева, А. В.* Аэродинамическое измерение пористости веществ / А. В. Медведева, Д. М. Мордасов // Вопросы современной

науки и практики. Университет им. В. И. Вернадского. – 2012. – Вып. № 4(42). – С. 329 – 334.

2. *Кагдин, А. Н.* Фрактальное моделирование и нейронные электрические сети / А. Н. Кагдин, Д. А. Джапарова, К. И. Терехов // Вопросы современной науки и практики. Университет им. В. И. Вернадского. – 2014. – Спец. вып. (52). – С. 65 – 70.

3. *Федер, Е.* Фракталы / Е. Федер. – Москва : Мир, 1991. – 254 с.

4. *Мищенко, С. В.* Углеродные наноматериалы. Производство, свойства, применение / С. В. Мищенко, А. Г. Ткачев. – Москва : Машиностроение, 2008. – 320 с.

Кафедра «Материалы и технология» ФГБОУ ВПО «ТГТУ»