

А.И. Деревянко

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗРУШЕНИЯ КУСКОВ АГЛОМЕРАТА

*Аннотация. Thermodynamic and thermosystem basis of optimum conditions of melting and crystallization.*

*Ключевые слова: модель агломерации, распределение Больцмана, температура термического шока, золотое сечение.*

**Постановка проблемы.** Агломерация – традиционный метод подготовки металлургического сырья требует оценки прочности окомкованного материала для прогноза влияния внешних факторов на эффективность его использования. Особый интерес для металлургического производства представляет термическая прочность непосредственно при температурном воздействии.

**Целью работы** является разработка математической модели процесса разрушения кусков агломерата в результате термического воздействия и оценка оптимальных значений температуры внешней среды.

**Основная часть.** Равновесное распределение частиц по кинетическим энергиям (теплового) движения, т.е. вероятность  $P_i$  существования  $N_i$  частиц с энергией  $\epsilon_i$  было установлено Больцманом

$$P_i = N_i / N = \exp(-\epsilon_i / kT) / \sum_{i=1}^m \exp(-\epsilon_i / kT), \quad (1)$$

где  $N_i$  - число частиц с энергией  $\epsilon_i$ ;  $N$  - общее число частиц;  $k$  - константа Больцмана;  $m$  – общее количество уровней энергии частиц.

Из распределения (1) следует: во-первых, запрет на увеличение заселенности последующего уровня энергии в сравнении с предшествующим  $P_{i+1} < P_i$ ; во-вторых, повышение равномерности заселения уровней с увеличением температуры.

Распределение  $P_a$  доли частиц, имеющих энергию неменьшую, чем энергия барьера связности  $\epsilon$ , равна сумме распределений вероятностей  $P_i$  выше барьера  $\epsilon$ .

В тоже время вероятность того, что кинетическая энергия частицы  $\epsilon$  определяется распределением Максвелла

$$\omega(\epsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\epsilon}}{(kT)^{3/2}} \exp(-\epsilon/kT) \quad (2)$$

При переходе от дискретного распределения энергии к непрерывному распределение  $P_a$  будет иметь вид:

$$P_a = \frac{\int_a^{\infty} \exp(-\epsilon/kT) d\epsilon}{\int_0^{\infty} \exp(-\epsilon/kT) d\epsilon} \quad (3)$$

Из (3) следует, что при повышении температуры доля сверхбарьерных частиц увеличивается.

Числитель и знаменатель в выражении (3), соответственно, имеют вид:

$$\int_a^{\infty} \exp(-\epsilon/kT) d\epsilon = kT \exp(-a/kT) \quad (4)$$

$$\int_0^{\infty} \exp(-\epsilon/kT) d\epsilon = kT \quad (5)$$

В итоге выражение (3) преобразуется к виду

$$P_a = \exp(-a/kT) \quad (6)$$

Следует отметить, что распределение Больцмана было получено применительно к идеальному газу, т.е. к кинетической энергии движения частиц, создающих за счет столкновений тепловую энергию системы. Однако возможности теории и уравнения Больцмана гораздо шире.

Обоснования применимости распределения Больцмана для моделирования процессов в твердых телах были получены в работе, где было показано, что распределение частиц по кинетическим энергиям в твердом теле подчиняется распределению Больцмана, характеризующему тепловое колебание частиц в узлах кристаллической решетки прежде всего по квантовым условиям применимости статистики Больцмана [2].

$$\frac{N}{V} \left( \frac{h^2}{m_a kT} \right)^{3/2} \ll 1, \quad (7)$$

где  $N/V$  - концентрация;  $m_a$  - масса частицы;  $h$  - постоянная Планка. Так, при комнатной температуре для лития (в твердом состоянии) численное значение этого критерия равно  $4,095 \cdot 10^{-2}$ , а для америдия -  $8,630 \cdot 10^{-5}$ .

Таким образом, формального запрета на применение статистики Больцмана для элементов в твердом состоянии при температурах выше комнатной нет. Как следует из неравенства (7), повышение температуры, будет ослаблять действие условия (7), тем более в области плавления.

Доля надбарьерных частиц в точке плавления ( $T_m$  – температура плавления), т.е. на границе области структурной устойчивости кристалла, когда он является одновременно и твердым и жидким телом, практически совпадает с долей бесструктурной составляющей в пропорции золотого сечения:

$$P_a = \exp(-T_m/T_m) \cong 0,37 \quad (8)$$

и определяет подавляющую долю структурной составляющей, равной 0,62.

Таким образом, в случае разрушения кристалла при плавлении не требуется разрывать все связи, а необходимо лишь обеспечить нарушение дальнего порядка с сохранением ближнего. В точке плавления, когда нарушается целостность кристаллической решетки, дальний порядок устраняется лишь частично, достигая критического значения на уровне пропорции золотого сечения по соотношению долей свободных и связанных частиц с сохранением в жидкости кристаллитов и короткоживущих зародышей твердой фазы [3].

При температуре ниже точки плавления в кристалле статистически рассеянно возникают сверхбарьерные относительно энергии плавления частицы, нарушающие дальний порядок и обеспечивающие пластичность твердого тела [3].

Термическая прочность, помимо прочностных характеристик, должна определять и температуру шока конгломератов, т.е. резкого падения прочности в процессе нагревания до температуры размягчения.

С помощью математических моделей термического воздействия на конгломераты можно осуществить прогноз значения температуры шока.

Как было показано в [3], оптимальное значение показателя пластичности соответствует максимальному приращению доли сверхбарьерных частиц с повышением температуры, т. е. наибольшему значению первой производной  $P_a$  по  $T$  в

$$P_a = \exp(-RT_m / RT) = \exp(-T_m / T) \quad (9)$$

Из равенства нулю второй производной выражения (9) следует  $T_{\text{опт}}=0,5T_m$ .

Для определения температуры наибольшего прироста разрушения кусков агломерата, которую в термическом приближении можно отнести к температуре шока  $T_{\text{ш}}$ , преобразуем температурную зависимость термической прочности, в термическую разрушаемость, которая является противоположной случайной величиной

$$P_{\tau,p} = 1 - P_{\tau} = \exp(-T_s / T), \quad (10)$$

где  $T_s$  - температура солидуса. При комнатной температуре запас тепловой энергии, ослабляющий прочность связей, равен  $298^{\circ}\text{K}$ . Следовательно, для определения термического фактора следует исключить влияние комнатной температуры

$$P_{\tau,p} = \exp\left(\frac{298 - T_s}{T - 298}\right) \quad (11)$$

Вторая производная, приравненная к нулю:

$$\frac{d^2 P_{\tau,p}}{dT^2} = \frac{298 - T_s}{(T - 298)^3} \left(2 - \frac{T_s - 298}{T - 298}\right) \exp\left(\frac{298 - T_s}{T - 298}\right) = 0 \quad (12)$$

содержит три сомножителя.

Сомножитель  $(298 - T_s)/(T - 298)^3$  стремится к нулю при  $T \rightarrow 298$ .

Сомножитель  $\exp\left(\frac{298 - T_s}{T - 298}\right)$  при  $T \rightarrow 298$  стремится к значению 0, и служит началом температурной шкалы в (11).

Приравнивание нулю значения среднего сомножителя определяет значение максимума первой производной для (11)

$$T_{\text{max}} = \frac{T_s + 298}{2}, \quad (13)$$

которое является теоретической температурой термического шока  $T_{\text{ш,т}}$ .

Таким образом, такая температура термического шока, представляет собой среднее арифметическое между температурами солидуса и комнатной, что соответствует реальной области проявления "шокового" процесса для конгломерата.

Подстановка  $T_{\text{max}} = T_{\text{ш,т}}$  в (11) дает универсальное значение степени разрушения кусков конгломерата при термическом шоке

$$P_{\tau,p,\text{ш}} = e^{-2} \cong 0,135, \quad (14)$$

что соответствует выходу разрушенных кусков конгломерата к моменту шока на уровне 13,5% и близко к реальным показателям.

В процессе диффузии, вызванной эффектом фазовой синхронизации элементов распределенной хаотической колебательной системы, синергетические переходные процессы приводят к образованию устойчивых пространственных структур, которые растут, оставаясь самоподобными. Такая модель формирования, например структуры кусков агломерации, создает предпосылки для использования фрактально-кластерного анализа структуры, основным свойством которых является пространственная (пространственно-временная) масштабная инвариантность.

В реализованной имитационной модели диссипативного процесса “слипания” частиц, их количество определяется до начала эксперимента. Для динамического фрактального кластера, при сохранении условий роста, фрактальная размерность остается неизменной во времени.

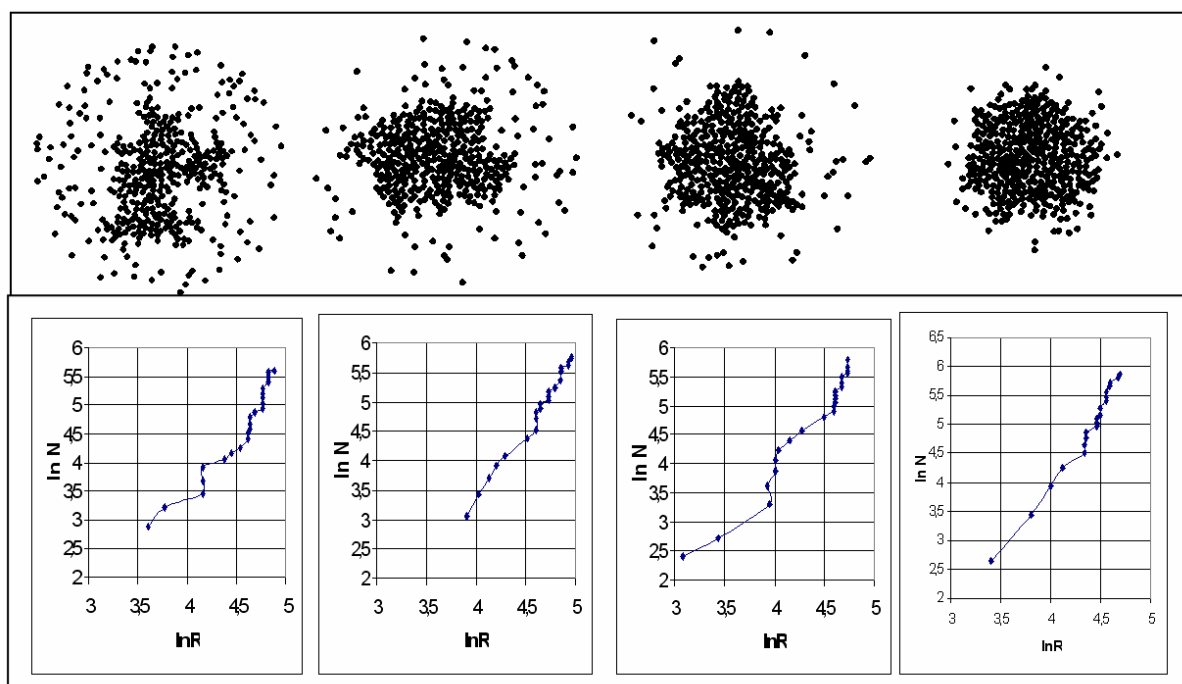


Рисунок 1 – Влияние коэффициента диффузии  $\chi$  на фрактальную размерность  $D$  кластера

- а)  $\chi=10$ ,  $D=1.7299$ ;    б)  $\chi=40$ ,  $D=2.3101$ ;    в)  $\chi=50$ ,  $D=2.1794$ ;  
 г)  $\chi=100$ ,  $D=2.6062$

Для вычисления фрактальной размерности в разработанной программе имитационной модели использовался метод «Triangular prism surface area», предназначенный для обработки растрового изображения в градациях серого.

#### **Выводы**

Проведенные исследования дали возможность:

- во-первых, оценить значение степени разрушения кусков конгломерата при термическом шоке;

- во-вторых, получить на основе разработанной компьютерной модели роста кластеров в среде хаотически движущихся частиц ряд эффектов, недоступных для наблюдения в случае использования модели ограниченной диффузной агрегации.

#### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Ангельм А.И. Основы статистической физики и термодинамики. – М. «Наука». 1973, 424с.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. –М. «Наука». 1964, 567с.
3. Малышев В.П., Бектурганов И.С., Турдукожаева А.М. Вязкость, текучесть и пластичность вещества как мера их хаотизации. –М. «Научный мир». 2012, 285с.