

Научная статья

УДК 536.245, 536.42

doi: 10.17223/19988621/88/11

О математической модели взаимодействия высокотемпературного потока плазмы с поверхностью древесины

Владимир Алексеевич Черемных¹, Геннадий Георгиевич Волокитин²,
Виктор Данилович Гольдин³, Сергей Александрович Басалаев⁴,
Анатолий Анатольевич Клопотов⁵, Николай Александрович Цветков⁶

^{1, 2, 5, 6} Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск, Россия

^{3, 4} Томский государственный университет, Томск, Россия

¹ vacheremnykh@gmail.com

² vgg-tomsk@mail.ru

³ vdg@math.tsu.ru

⁴ tarm@niipmm.tsu.ru

⁵ klopotovaa@tsuab.ru

⁶ nac.tsuab@yandex.ru

Аннотация. Рассматриваются процессы термического разложения древесины при ее обработке струей плазмы. Проведен термический анализ процесса нагрева древесины, с помощью которого определены кинетические параметры четырех стадий разложения. Полученные результаты могут быть использованы для математического моделирования теплового состояния и структурных изменений древесины при ее нагреве в струе плазмы.

Ключевые слова: физико-химическая механика, термическая обработка древесины, пиролиз, кинетика термического разложения, математическое моделирование

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FEMN-2023-0003).

Для цитирования: Черемных В.А., Волокитин Г.Г., Гольдин В.Д., Басалаев С.А., Клопотов А.А., Цветков Н.А. О математической модели взаимодействия высокотемпературного потока плазмы с поверхностью древесины // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2024. № 88. С. 138–148. doi: 10.17223/19988621/88/11

On a mathematical model of the interaction of a high-temperature plasma flow with a wood surface

Vladimir A. Cheremnykh¹, Gennadiy G. Volokitin², Viktor D. Goldin³, Sergey A. Basalaev⁴, Anatoliy A. Klopotov⁵, Nikolay A. Tsvetkov⁶

^{1,2,5,6} Tomsk State University of Architecture and Building, Tomsk, Russian Federation

^{3,4} Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation

¹ vacheremnykh@gmail.com

² vgg-tomsk@mail.ru

³ vdg@math.tsu.ru

⁴ tarm@niipmm.tsu.ru

⁵ klopotova@tsuab.ru

⁶ nac.tsuab@yandex.ru

Abstract. In this study, the processes of thermal decomposition of wood during its treatment with a plasma flow are considered. To develop a mathematical model of these processes, a differential thermogravimetric analysis of the heating of larch samples in an argon atmosphere at a rate of 10–20 degrees/min is carried out. Based on the results obtained, a mathematical model of thermal decomposition is proposed, including four stages. The wood during heating is represented by a mixture of six components. At each stage, the kinetic parameters of the reactions are determined by processing measurements at a heating rate of 20 degrees/min. The equations of chemical kinetics describing changes in the mass of wood components are numerically solved using the finite-difference implicit Euler method and the obtained reaction parameters. The numerical solution to the equations of chemical kinetics with these parameters shows satisfactory agreement with the data from the corresponding experiment. The calculation performed at a heating rate of 10 degrees/min with the same kinetic parameters also shows satisfactory agreement with the measurements. Thus, the obtained reaction parameters do not depend on the heating rate in the considered range. The proposed model can be used in the mathematical description of changes in the structure and thermal state of wood samples exposed to high-temperature plasma flow treatment.

Keywords: physical and chemical mechanics, heat treatment of wood, pyrolysis, kinetics of thermal decomposition, mathematical modeling

Acknowledgments: This work was carried out within the framework of the state assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (No. FEMN-2023-0003).

For citation: Cheremnykh, V.A., Volokitin, G.G., Goldin, V.D., Basalaev, S.A., Klopotov, A.A., Tsvetkov, N.A. (2024) On a mathematical model of the interaction of a high-temperature plasma flow with a wood surface. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 88. pp. 138–148. doi: 10.17223/19988621/88/11

Введение

Древесина относится к классу материалов, давно и широко используемых человечеством. Существует большое количество самых разнообразных методов ее обработки. Одним из способов является термическая обработка поверхности изде-

лий, которая способствует снижению ее водопроницаемости, уничтожению грибковых заболеваний древесины и плесени, повышает стойкость к истиранию [1–3]. Использование для этой цели струи плазмы имеет ряд преимуществ [1].

Древесина относится к сложным по строению пористым материалам, ее физико-механические и декоративные свойства существенно изменяются при термических воздействиях (рис. 1, 2).

На представленных микрофотографиях поперечных срезов (см. рис. 2) заметно изменение рельефа поверхности древесины (см. рис. 2, *b*): в результате плазменной обработки в местах расположения ранних трахеид образовались впадины. Также воздействие потоком плазмы привело к изменению цветовой гаммы поверхности древесины (см. рис. 1).



Рис. 1. Фотография поверхности изделия из древесины сосны после обработки потоком плазмы

Fig. 1. A photo of the surface of a pine wood product after plasma flow treatment

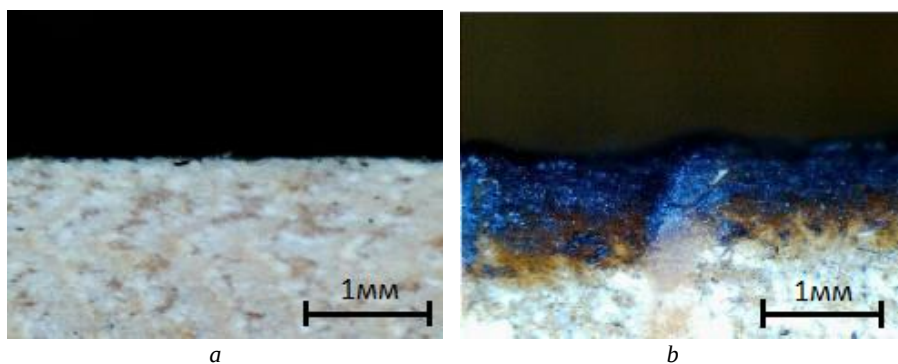


Рис. 2. Микрофотографии поперечного среза образцов лиственницы: *a* – исходный необработанный образец; *b* – после обработки потоком плазмы

Fig. 2. Micrographs of a cross-section of larch samples:
(*a*) original raw sample and (*b*) after plasma flow treatment

Породы древесины имеют отличия в физических и механических свойствах. Также на физические свойства древесины оказывают влияние влажность изделий и условия произрастания дерева [4]. Для исследования влияния высокотемпературного потока плазмы на поверхность различных сортов древесины при различных параметрах нагрева необходимо использовать математическую модель данного

процесса. Установление зависимостей механических свойств тел, в частности строительных и конструкционных материалов, от температуры и их физико-химического взаимодействия с окружающей средой относится к физико-химической механике [5. С. 313].

Цель работы – проведение дифференциального термогравиметрического анализа процесса пиролиза древесины при высоких темпах нагрева (10–20 град/мин) и создание математической модели ее термического разложения при обработке поверхности потоком плазмы.

Модель термического разложения древесины

Нагрев тел, состоящих из дерева, сопровождается такими физико-химическими процессами, как испарение летучих компонентов, прежде всего влаги, пиролиз – многостадийный процесс термического разложения твердых компонентов древесины с выделением газов, жидких продуктов пиролиза и образованием коксика – твердого компонента, основу которого составляет углерод (древесный уголь), разложение коксика с образованием летучих продуктов и неорганической золы [6–8].

Все образующиеся на разных стадиях газы фильтруются из глубины тела к его поверхности и выводятся в окружающую среду. Эти процессы сопровождаются поглощением и выделением тепла, в результате чего уменьшается плотность материала, изменяются его теплофизические свойства. Поскольку внутри древесины не присутствует свободный кислород, то горение происходит только на ее поверхности.

Для правильного математического моделирования теплового режима тел из дерева при их нагреве необходимо учитывать все эти процессы. Обычно они описываются дифференциальными уравнениями, аналогичными уравнениям химической кинетики. Параметры реакций в этих уравнениях определяются путем сопоставления экспериментальных данных с расчетными. В настоящее время существуют работы, посвященные этому вопросу. Обзор некоторых из них можно найти в [7]. Результаты этих работ показывают, что кинетика реакций термического разложения зависит от многих параметров – размеров исследуемых образцов, способов нагрева, его темпа, скорости фильтрации газообразных продуктов и т.п. Многие исследования связаны с технологическими процессами в лесохимии либо с пожарной безопасностью, где тепловые потоки и температуры не очень высоки, а процесс нагрева достаточно медленный. При обработке поверхности древесины струей плазмы тепловые потоки достигают величин 10^6 Вт/м², а нагрев участков поверхности осуществляется за время порядка 1 с. В связи с этим представляет интерес дополнительно исследовать процесс термодеструкции древесины с большим темпом нагрева.

Одним из способов исследования процессов термического разложения материалов является дифференциальный термогравиметрический анализ – нагрев в дериватографе с фиксированным темпом и одновременным измерением массы твердого остатка в зависимости от времени. При этом испытываемый образец должен иметь достаточно малые размеры, чтобы в любой момент времени температурное поле в нем было однородным.

На рис. 3, 4 представлены результаты исследования образцов лиственницы первоначальной массы $\approx 10^{-4}$ кг на дериватографе (Derivatograph Q1500, Венгрия) при нагреве в атмосфере аргона.

На основе анализа кривых потери массы предлагается использовать следующую модель термодеструкции:

1. В начальный момент времени материал состоит из летучих компонентов (свободная вода, легкоиспаряющиеся компоненты) и материала основного каркаса.

2. В произвольный момент времени материал представляет собой шестикомпонентную смесь:

- летучие компоненты в исходном состоянии (компонент A_1);
- материал основного каркаса (компонент A_2);
- продукт первой стадии пиролиза (компонент A_3);
- коксик (компонент A_4);
- кокс (зола, инертный компонент A_5);
- газообразные продукты пиролиза (компонент A_6), конкретный состав этих продуктов не учитывается.

3. При нагреве в материале идут четыре реакции, соответствующие четырем стадиям:

- стадия 1 (участок 1–2 на рис. 3): испарение летучих компонентов;
- стадия 2 (участок 3–4): первая стадия пиролиза материала каркаса с выделением газа и образованием промежуточного продукта;
- стадия 3 (участок 4–5): вторая стадия пиролиза с образованием коксика;
- стадия 4 (участок 5–6): медленное разложение коксика ($t > t_3$) с почти постоянной скоростью.

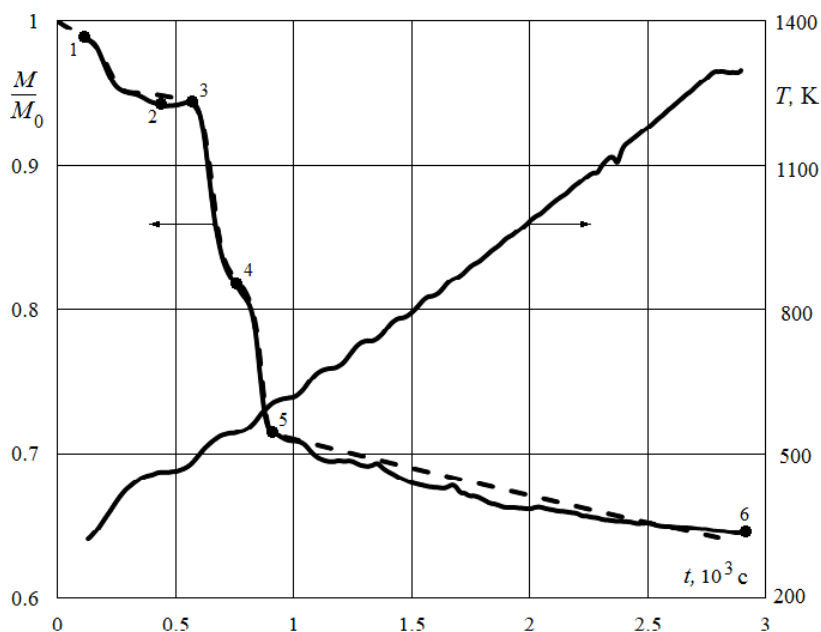


Рис. 3. Измеренные значения температуры и относительной потери массы образца лиственницы при темпе нагрева 20 град/мин. Штриховая линия – результат решения уравнений (2)–(6)

Fig. 3. Measured temperature and relative weight loss of a larch sample at a heating rate of 20 degrees/min. The dashed line is the result of solving equations (2)–(6)

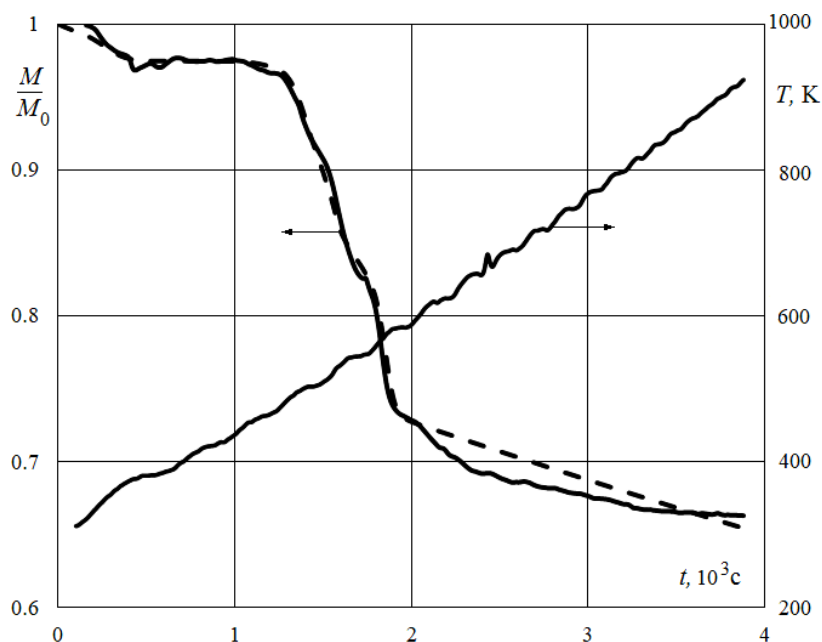
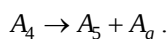
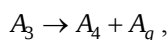
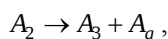
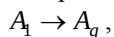


Рис. 4. Измеренные значения температуры и относительной потери массы образца лиственницы при темпе нагрева 10 град/мин. Штриховая линия – результат решения уравнений (1)–(5)

Fig. 4. Measured temperature and relative weight loss of a larch sample at a heating rate of 20 degrees/min. The dashed line is the result of solving equations (1)–(5)

4. Рассматривается следующая схема реакций:



5. Скорость каждой из реакций описывается законом Аррениуса.

Следует отметить, что в реальности каждая из рассматриваемых реакций может включать сложные многостадийные химические преобразования. В данной модели эта детализация не учитывается.

Масса компонентов описывается следующими дифференциальными уравнениями:

$$\frac{dM_1}{dt} = -w_1; \quad (1)$$

$$\frac{dM_2}{dt} = -w_2; \quad (2)$$

$$\frac{dM_3}{dt} = v_2 w_2 - w_3; \quad (3)$$

$$\frac{dM_4}{dt} = v_3 w_3 - w_4, \quad (4)$$

$$\frac{dM_5}{dt} = v_4 w_4. \quad (5)$$

Здесь M_i – масса i -го компонента, кг, $i = 1-4$; v_i – массовая доля твердого продукта, образующегося в i -й реакции, $i = 2-4$; w_i – скорость i -й реакции, кг/с:

$$w_i = M_i k_i \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right);$$

k_i – предэкспонент i -й реакции, с^{-1} ; E_i – энергия активации i -й реакции, Дж/кмоль; T – температура образца, К; R – универсальная газовая постоянная, Дж/(кмоль·К), t – время, с.

В начальный момент времени масса образца $M = M_0 = M_1 + M_2$, причем $M_1 = M_{1,0}$, $M_2 = M_0 - M_1 = M(t_1)$, $M_3 = M_4 = M_5 = M_g = 0$, где $M_{1,0}$ – начальное значение массы легко летучих компонентов. Суммарная масса твердого остатка в любой момент времени $M(t) = M_1 + M_2 + M_3 + M_4 + M_5$.

Параметры реакций термического разложения определяются путем сопоставления численного решения системы уравнений (1)–(5) с измеренными значениями $M(t)$. Для получения предварительных значений параметров используется следующий алгоритм.

Как видно из рис. 3, 4, каждая из реакций идет в своем температурном и временном интервале. При $t < t_1$ идет главным образом реакция (1); здесь меняется только M_1 , M_2 остается постоянным, остальные компоненты еще не образовались. Из уравнения (1) следует

$$\ln\left(\frac{1}{M_1} \frac{dM_1}{dt}\right) = \ln\left(\frac{1}{M - M_2} \frac{dM}{dt}\right) = \ln(k_1) - \frac{E_1}{RT}.$$

Измеренные значения массы подставлялись в левую часть равенства, полученная кривая аппроксимировалась с помощью метода наименьших квадратов в виде линейной зависимости от величины $1/T$ – производилось «спрямление» данных. Значения k_1 , E_1 определялись по параметрам этого спрямления.

На второй стадии разложения, при $t_1 < t < t_2$, идет в основном реакция (2), $w_3 \approx 0$ и $M(t) = M_2 + M_3$. Из уравнений (2)–(3) следует $v_2 M_2 + M_3 = \text{const} = v_2 M(t_1) = M(t_2)$, так как в начале стадии компонента A_3 еще нет, а в конце нет компонента A_2 . Отсюда $v_2 = M(t_2)/M(t_1)$ и

$$M_3 = M(t_2) - v_2 M_2, \quad M(t) = (1 - v_2) M_2 + M(t_2), \quad \frac{1}{M_2} \frac{dM_2}{dt} = \frac{1}{M - M(t_2)} \frac{dM}{dt}.$$

При этом уравнение (2) приводится к виду:

$$\ln\left[\frac{1}{M - M(t_2)} \frac{dM}{dt}\right] = \ln(k_2) - \frac{E_2}{RT}. \quad (6)$$

Параметры k_2 , E_2 определялись путем спрямления вычисленной по экспериментальным данным функции

$$f = \ln\left[\frac{1}{M - M(t_2)} \frac{dM}{dt}\right]$$

в зависимости от $1/T$ (рис. 5).

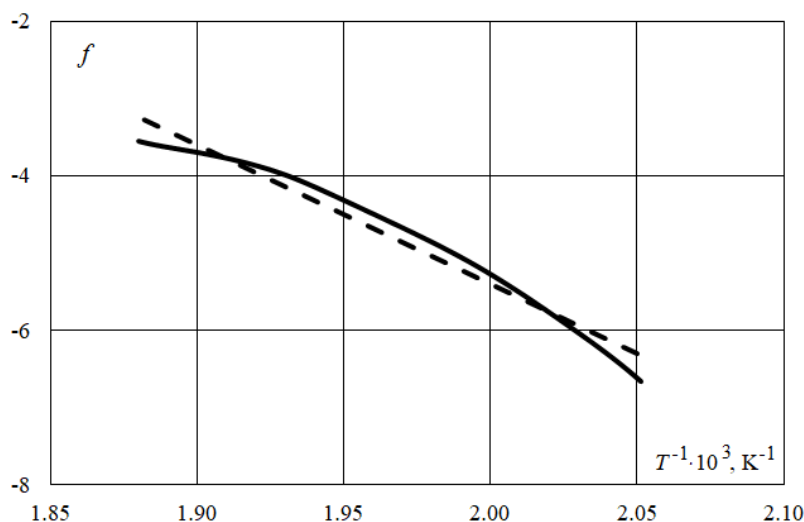


Рис. 5. Аппроксимация левой части уравнения (6), соответствующего потере массы на второй стадии термического разложения. Сплошная линия – экспериментальные значения, штриховая – линейная аппроксимация

Fig. 5. Approximation of the left side of equation (6) corresponding to the mass loss at the second stage of thermal decomposition. The solid line indicates experimental values, the dashed line, the linear approximation

Аналогичный алгоритм применялся для третьей и четвертой стадий разложения. При этом $v_i = M(t_i)/M(t_{i-1})$, а параметры k_i , E_i определялись на основе равенства, полученного из уравнений (3)–(4):

$$\ln \left[\frac{1}{M - M(t_i)} \frac{dM}{dt} \right] = \ln(k_i) - \frac{E_i}{RT}, \quad i = 3, 4.$$

Здесь $M(t_4)$ – масса неорганического коксового остатка после завершения процессов термического разложения.

В таблице приведены кинетические параметры реакций, полученные при обработке экспериментальных данных при темпе нагрева 20 град/мин. Эти параметры подставлялись в систему уравнений (1)–(5), которая решалась численно с использованием конечно-разностного неявного метода Эйлера. В начальный момент времени доля летучих компонентов бралась $M_{1,0}/M_0 = 0.05$. Нулевое значение энергии активации на 4-й стадии разложения означает, что здесь скорость реакции не зависит от температуры.

Параметры реакций термического разложения образцов лиственницы

Номер реакции	k , 1/с	E , Дж/кмоль	v
1	$8.1 \cdot 10^2$	$3.3 \cdot 10^7$	–
2	$1.9 \cdot 10^{13}$	$1.5 \cdot 10^8$	0.88
3	$4.7 \cdot 10^{17}$	$2.1 \cdot 10^8$	0.86
4	$6.0 \cdot 10^{-5}$	0	0.06

Значения безразмерной массы твердого остатка, полученные в результате численного решения, показаны на рис. 3 штриховой линией. С учетом достаточно

грубой модели пиролиза согласование теории и эксперимента можно считать удовлетворительным, особенно на наиболее важных второй и третьей стадиях термического разложения.

Расчеты при той же кинетике для меньшего темпа нагрева (10 град/мин) также хорошо согласуются с соответствующим экспериментом, если принять начальную долю летучих компонентов $M_{1,0}/M_0 = 0.026$ (см. рис. 4). Таким образом, в предложенной модели кинетические параметры пиролиза практически не зависят от темпа нагрева в указанном диапазоне.

Некоторые отличия между экспериментом и расчетом наблюдаются на 1-й и 4-й стадиях. Эти отличия могут объясняться недостаточной детализацией химических процессов на этих стадиях. Поскольку первая стадия связана с испарением летучих компонентов, доля которых в древесине мала, то ее влияние на общий процесс теплопереноса также представляется малым, и уточнения математической модели здесь не требуется. Четвертая стадия разложения идет с малой скоростью, и при малом времени теплового воздействия глубина превращения при пиролизе вряд ли будет глубокой. Кроме того, на этой стадии большую значимость должно иметь горение в воздушной среде, которого не было при испытаниях в инертном газе (аргоне).

Заключение

Таким образом, на основе термогравиметрического анализа предложена модель термического разложения древесины, подвергающейся воздействию высокотемпературного потока плазмы. При этом сложные физико-химические преобразования материала сводятся к четырем стадиям, на каждой из которых скорость реакции разложения описывается законом Аррениуса. В результате термогравиметрического анализа кинетические параметры каждой стадии определены на основе измерений динамики массы твердого остатка в процессе нагрева в инертной среде. Показано, что полученные параметры не зависят от скорости нагрева в диапазоне 10–20 град/мин. Предложенная модель является необходимой частью общей математической модели, описывающей изменения структуры и теплового состояния образцов древесины, подвергающихся обработке высокотемпературной струей плазмы.

Список источников

1. Волокитин Г.Г., Скрипникова Н.К., Сеницын В.А. и др. Плазменная обработка древесины // Теплофизика и аэромеханика. 2016. Т. 23, № 1 (97). С. 125–130.
2. Янкина А.С. Особенности браширования древесины // Ростовский научный журнал. 2019. № 2. С. 287–294.
3. Дук Д.В., Мартыновская С.Н. Перспективы применения обжига древесины при создании малых архитектурных форм // Технологии и оборудование садово-паркового и ландшафтного строительства : сб. ст. X Всерос. науч.-практ. конф. с междунар. участием, Красноярск, 24 ноября 2022 г. Красноярск : Сиб. гос. ун-т науки и технологий им. академика М.Ф. Решетнева, 2023. С. 351–355.
4. Уголев Б.Н. Древесиноведение и лесное товароведение. М. : МГУЛ, 2007. 351 с.
5. Физический энциклопедический словарь / гл. ред. Б.А. Введенский, Б.М. Вул. М. : Сов. энцикл., 1966. Т. 5. 576 с.
6. Kansa E.J., Perlee H.E., Chaiken R.F. Mathematical model of wood pyrolysis including internal forced convection // Combustion and Flame. 1977. V. 29. P. 311–324.

7. Гришин А.М. Математическое моделирование лесных пожаров и новые способы борьбы с ними. Новосибирск : Наука, Сиб. отд-ние, 1992. 408 с.
8. Гришин А.М. Общая физико-математическая модель зажигания и горения древесины // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2010. № 2. С. 60–70.

References

1. Volokitin G.G., Skripnikova N.K., Volokitin O.G., Shekhovtsov V.V., Sinityn V.A., Vashchenko S.P., Kuz'min V.I. (2016) Plasma treatment of wood. *Thermophysics and Aeromechanics*. 23(1). pp. 119–124. doi: 10.1134/S0869864316010121
2. Yankina A.S. (2019) Osobennosti brashirovaniya drevesiny [Features of wood brushing]. *Rostovskiy nauchnyy zhurnal*. 2. pp. 287–294.
3. Duk D.V., Martynovskaya S.N. (2023) Perspektivy primeneniya obzhiga drevesiny pri sozdani malykh arkhitekturnykh form [Prospects for the use of wood firing in producing of small architectural forms]. *Tekhnologii i oborudovanie sadovo-parkovogo i landshaftnogo stroitel'stva: Sbornik statey X Vserossiyskoy nauchno-prakticheskoy konferentsii s mezhdunarodnym uchastiem, Krasnoyarsk. Krasnoyarsk: FGBOU VSH "Sibirskiy gosudarstvennyy universitet nauki i tekhnologii imeni akademika M.F. Reshetnyova"*. pp. 351–355.
4. Ugolev B.N. (2007) *Drevesinovedenie i lesnoe tovarovedenie* [Wood science and forest commodity science]. Moscow: Moscow State Forest University.
5. *Fizicheskiy entsiklopedicheskiy slovar'* (1966) [Physical encyclopedic dictionary]. Volume 5. Ed. by B.A. Vvedenskiy and B.M. Vul. Moscow: Sovetskaya Entsiklopediya.
6. Kansa E.J., Perlee H.E., Chaiken R.F. (1977) Mathematical model of wood pyrolysis including internal forced convection. *Combustion and Flame*. 29. pp. 311–324. doi: 10.1016/0010-2180(77)90121-3
7. Grishin A.M. (1992) *Matematicheskoe modelirovanie lesnykh pozharov i novye sposoby bor'by s nimi* [Mathematical modeling of forest fires and new ways of suppression]. Novosibirsk: Nauka, Sibirskoe otdelenie.
8. Grishin A.M. (2010) *Obshchaya fiziko-matematicheskaya model' zazhiganiya i goreniya drevesiny* [General physical and mathematical model of the ignition and burning of wood]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 10(2). pp. 60–70.

Сведения об авторах:

Черемных Владимир Алексеевич – аспирант Томского государственного архитектурно-строительного университета, Томск, Россия. E-mail: vacheremnykh@gmail.com

Волокитин Геннадий Георгиевич – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной механики и материаловедения Томского государственного архитектурно-строительного университета, Томск, Россия. E-mail: vgg-tomsk@mail.ru.

Гольдин Виктор Данилович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Научно-исследовательского института прикладной математики и механики Томского государственного университета, Томск, Россия. E-mail: vdg@math.tsu.ru.

Басалаев Сергей Александрович – кандидат физико-математических наук, инженер-исследователь Научно-исследовательского института прикладной математики и механики Томского государственного университета, Томск, Россия. E-mail: tarm@niipmm.tsu.ru

Клопотов Анатолий Анатольевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры прикладной механики и материаловедения Томского государственного архитектурно-строительного университета, Томск, Россия. E-mail: klopotovaa@tsuab.ru

Цветков Николай Александрович – доктор технических наук, заведующий кафедрой теплоснабжения и инженерных систем в строительстве Томского государственного архитектурно-строительного университета, Томск, Россия. E-mail: nac.tsuab@yandex.ru

Information about the authors:

Cheremnykh Vladimir A. (Tomsk State University of Architecture and Building, Tomsk, Russian Federation). E-mail: vacheremnykh@gmail.com

Volokitin Gennadiy G. (Doctor of Technical Sciences, Tomsk State University of Architecture and Building, Tomsk, Russian Federation). E-mail: vgg-tomsk@mail.com

Goldin Viktor D. (Candidate of Physics and Mathematics, Research Institute of Applied Mathematics and Mechanics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: vdg@math.tsu.ru

Basalaev Sergey A. (Candidate of Physics and Mathematics, Research Institute of Applied Mathematics and Mechanics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: tarm@niipmm.tsu.ru

Klopotov Anatoliy A. (Doctor of Physics and Mathematics, Tomsk State University of Architecture and Building, Tomsk, Russian Federation). E-mail: klopotovaa@tsuab.ru

Tsvetkov Nikolay A. (Doctor of Technical Sciences, Tomsk State University of Architecture and Building, Tomsk, Russian Federation). E-mail: nac.tsuab@yandex.ru

Статья поступила в редакцию 17.11.2023; принята к публикации 10.04.2024

The article was submitted 17.11.2023; accepted for publication 10.04.2024