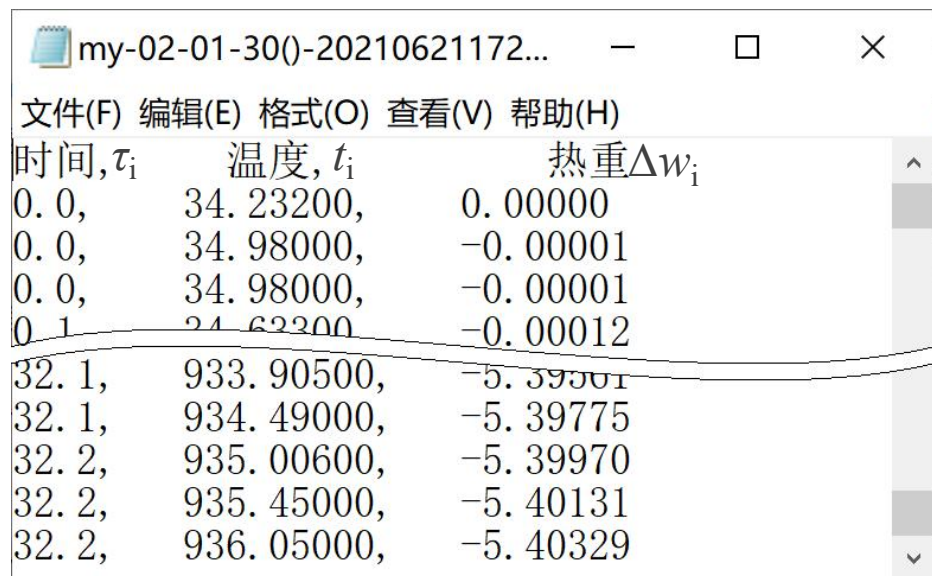


3.2 数据处理



导出原始数据文件为 (.txt)，共三列： $\tau(\text{min})$, $t(^{\circ}\text{C})$, 重量变化 $\Delta w_i = w_i - w_0(\text{mg})$, $\Delta\tau = 1\text{s}$



时间, τ_i	温度, t_i	热重 Δw_i
0.0,	34.23200,	0.00000
0.0,	34.98000,	-0.00001
0.0,	34.98000,	-0.00001
0.1,	34.62200,	-0.00012
32.1,	933.90500,	-5.39501
32.1,	934.49000,	-5.39775
32.2,	935.00600,	-5.39970
32.2,	935.45000,	-5.40131
32.2,	936.05000,	-5.40329

每秒采集一组数据。

$t_0 = 25^{\circ}\text{C}$, $t_{\text{end}} = 800^{\circ}\text{C}$, $5^{\circ}\text{C}/\text{min}$,
共采集 $(800-25)/5*60+1=9301$ 组数据。

数据处理采用 **EXCEL/ Origin/ 自编程**

(1) 处理**热重数据** → 绘制**TG曲线及DTG曲线** $\xrightarrow[\text{对TG数字滤波去除干扰}]{\text{(DTG不光滑)}}$ 读**特征点温度**

(2) 选取**动力反应区间** → 绘制**线段** → 回归线性方程得到 k 、 b → **关联**阿累尼乌斯定律
→ 计算动力反应区间的 k_0 和 E

3.2 数据处理 绘制热重曲线 (TG) 和微商热重曲线 (DTG)



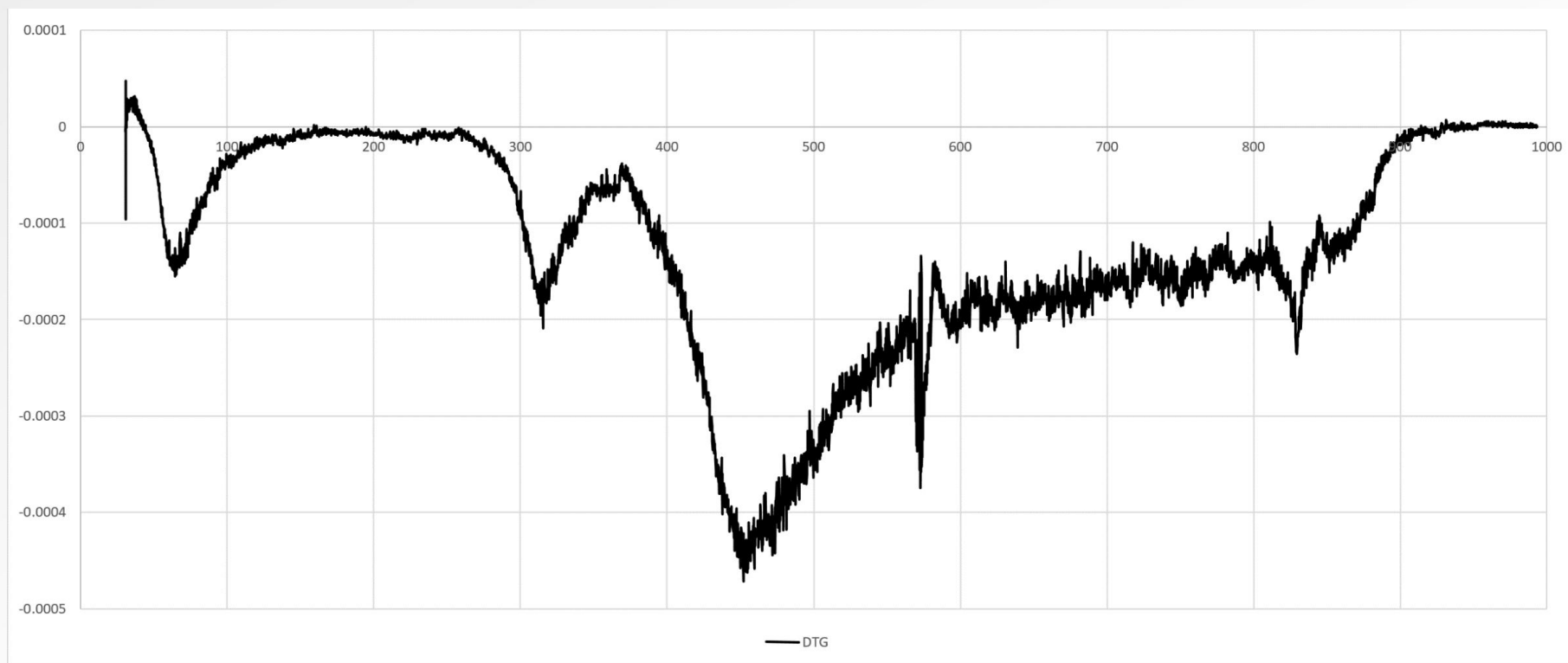
西安交通大学
XI'AN JIAOTONG UNIVERSITY

TG曲线 X坐标: 温度 $t(^{\circ}\text{C})$;

Y坐标: 重量偏差 $w_i - w_0$

DTG曲线 X坐标: 温度 $t(^{\circ}\text{C})$;

Y坐标: 重量变化率 $(w_i - w_{i-1})/\Delta\tau/w_0$



微商热重曲线 (DTG)

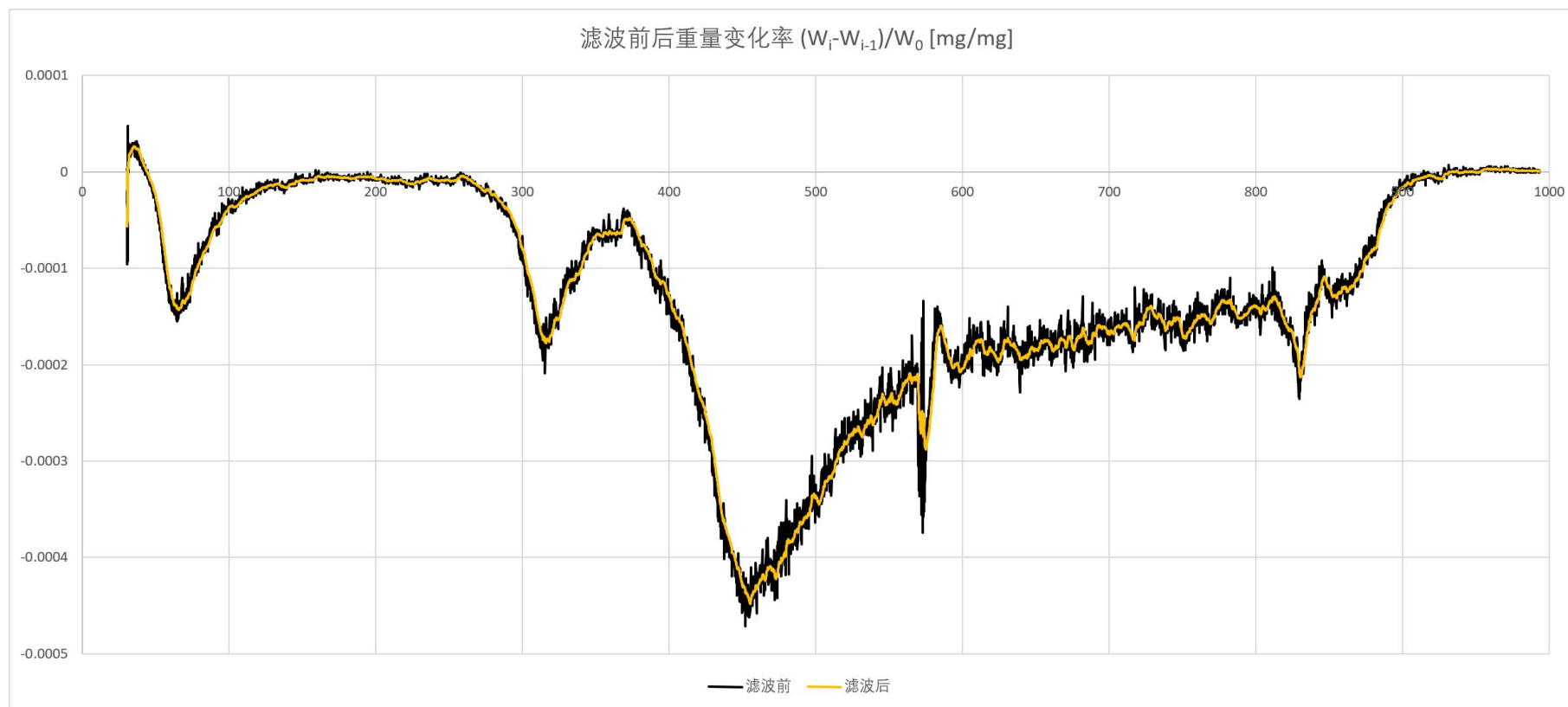
3.2 数据处理 数字滤波：除去高频干扰



惯性滤波（一阶滞后滤波）： X_{1-n} 待滤波序列， Y_{1-n} 滤波后序列。

$i=1, Y_1=X_1; i=2\dots, Y_i=a*X_i + (1-a)*Y_{i-1}$ ， a 为滤波系数（0~1）。调试2-3次选取合适 a 。

- a 过大，截止频率过高，不能有效滤除高频干扰；
- a 过小，截止频率过低，信号变动也被滤除，滤波后曲线不能有效地反映信号变化。

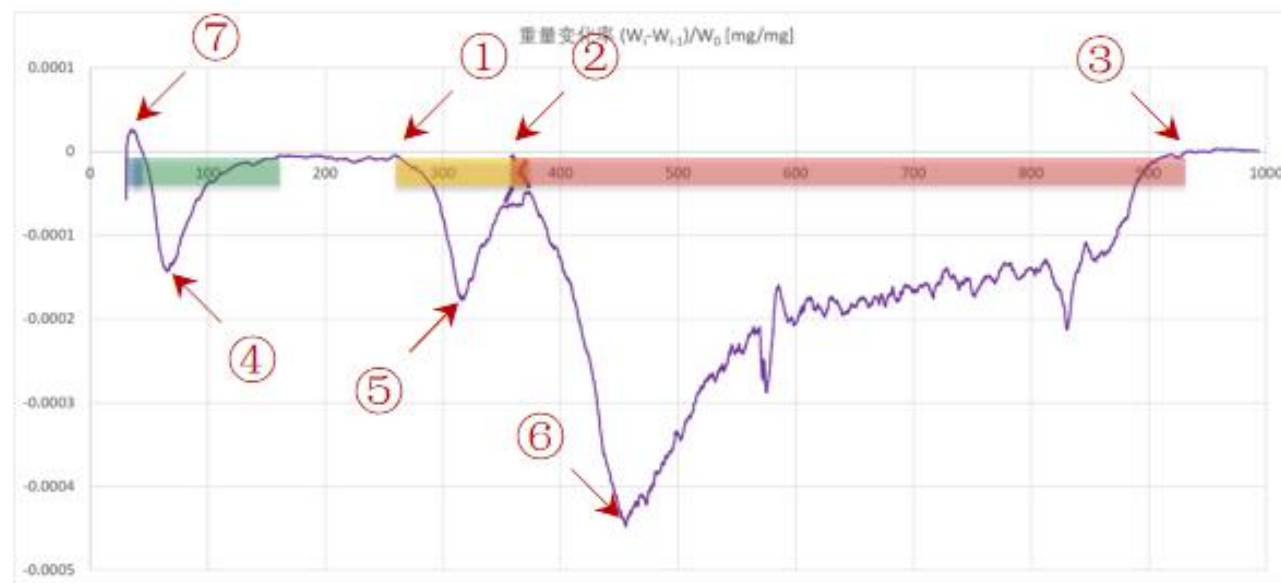


3.2 数据处理 读取特征数据



25—40°C：试样“增重”峰7 空气温度升高→密度降低→浮力降低；

40—100°C：水分失重峰4； 270—390°C：煤热解失重峰5； 360—630°C：碳燃烧失重峰6



挥发分开始析出①； 固定碳开始燃烧②； 试样/固定碳燃烧结束③；

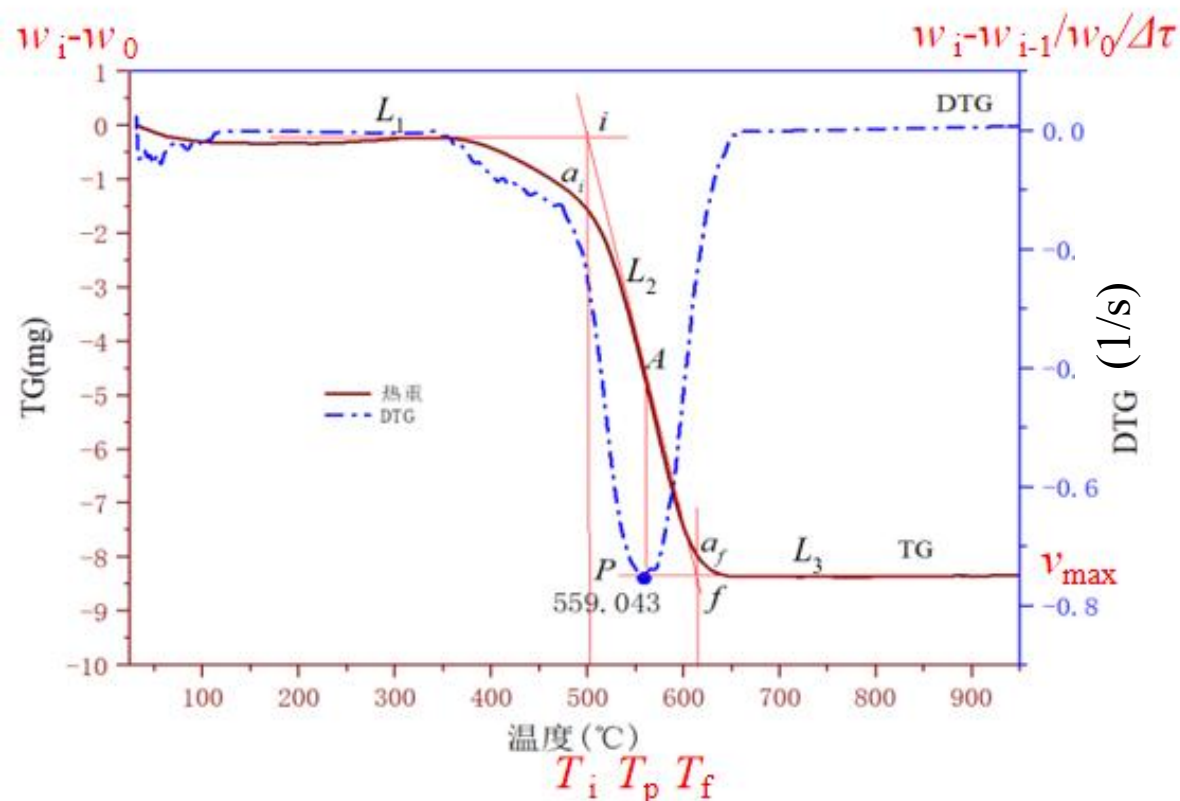
水析出最大失重率点④； 煤热解最大失重率点⑤； 碳燃烧最大失重率点⑥；

试样最大“增重率”点⑦。



3.2 数据处理 读取特征数据

着火 T_i ，燃尽 T_f 、最大燃烧 v_p 、 T_p 和平均燃烧 \bar{v} ：



TG-DTG曲线及特征参数

- ◆ T_i ：通过DTG 峰值点 P 作垂线与 TG 交于 A 点，过 A 点作 TG 切线 L_2 ， L_2 与 TG 上挥发分开始失重时水平线 L_1 的交点 i ， i 横坐标；
- ◆ T_f ：切线 L_2 与TG曲线重量损失结束时水平线 L_3 的交点 f ， f 横坐标；
- ◆ v_p ：DTG上P点纵坐标为最大燃烧速率 v_p 或 $(dw/dt)_{max}$ ；
- ◆ T_p ：DTG上P点横坐标；
- ◆ \bar{v} ：
$$\bar{v} = \beta \times \frac{a_i - a_f}{T_f - T_i}$$

\bar{v} —%/min； β —升温速率， $^{\circ}\text{C}/\text{min}$ ； a_i 、 a_f —着火、燃尽温度点对应剩余样品百分数，%

3.2 数据处理 选取动力反应区间



对于大多数反应而言，**反应速率**取决于**反应物浓度**和**反应物温度**。

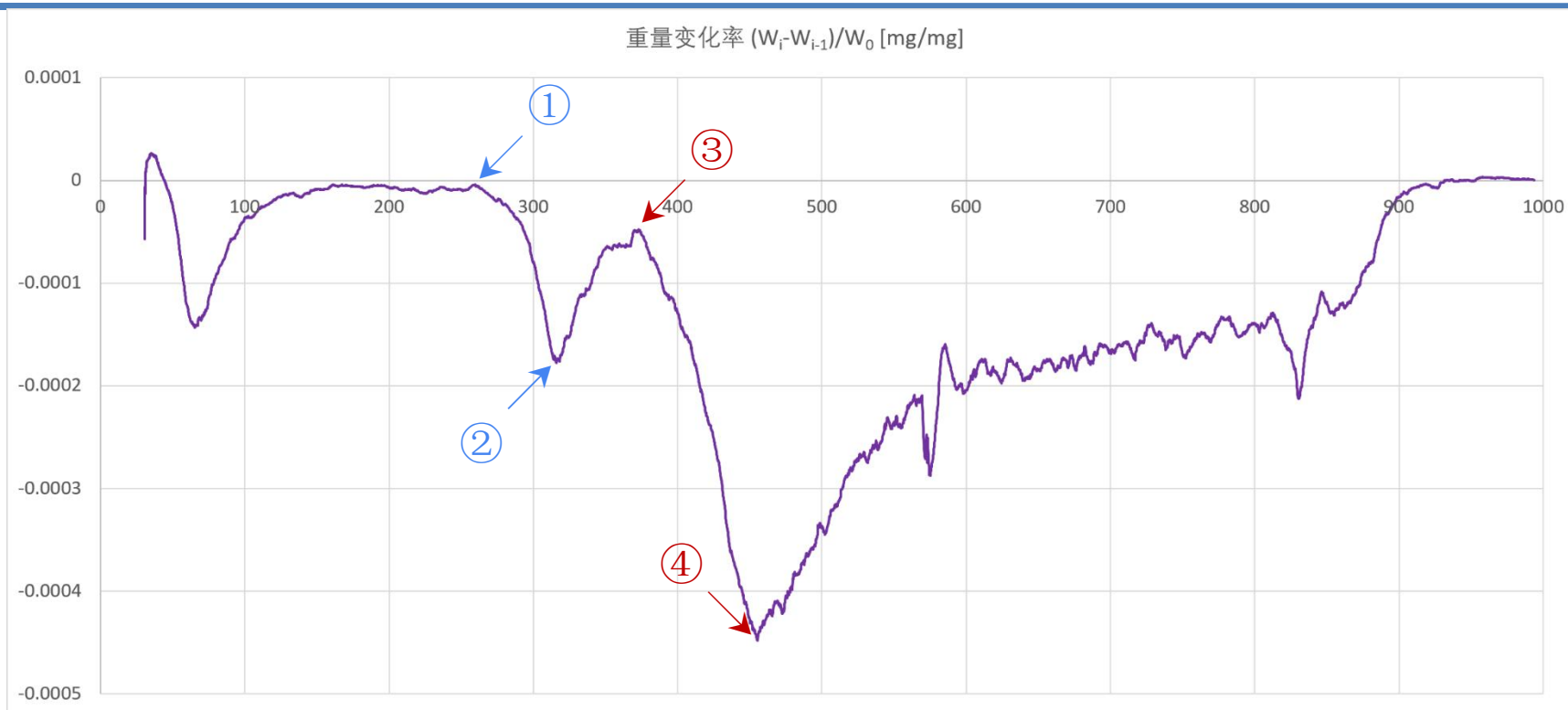
例，碳燃烧过程：（1）T升高，V增加。（2）随着V增加，灰壳形成，O₂渗入量减少，V从增加过渡到降低。（3）反应进一步进行，C含量越来越低，V继续降低，直至碳燃尽，V降为零。

（1）当反应物充足、且混合均匀时，反应速率主要取决于**反应物温度**；**动力燃烧阶段**，由**阿累尼乌斯定律**描述。 $k=k_0*\exp(-E/RT)$

（2）随着反应速率的增加、反应物浓度的降低，反应速率逐渐受制于反应物浓度；**扩散燃烧阶段**，由**质量作用定律** $w=kC_A^{va}C_B^{vb}$ 与**扩散（传质）方程**来描述。

（3）当反应物浓度低到一定程度时，反应速率逐渐降低，直至反应结束。**燃烬阶段**，由**质量作用定律** 与**扩散（传质）方程**描述。

3.2 数据处理 选取动力反应区间



注：每个峰都包含**动力反应段**、扩散反应段和收尾段，**单调递增线性部分**是**动力燃烧阶段**。

绘制动力反应区间 $\left[\frac{1}{T} - (w_i - w_{i-1})/w_0 / \Delta \tau \right]$ 曲线：包括煤热解、碳燃烧部分；

煤热解数据区间：点①到点②段中尽量长的近似于直线的线段（290°C - 313°C）；

碳燃烧数据区间：点③到点④段中尽量长的近似于直线的线段（374°C - 455°C）。

3.2 数据处理



选取合适的温度区间、关联阿累尼乌斯定律，可获得指前因子 k_0 、表观活化能 E 。

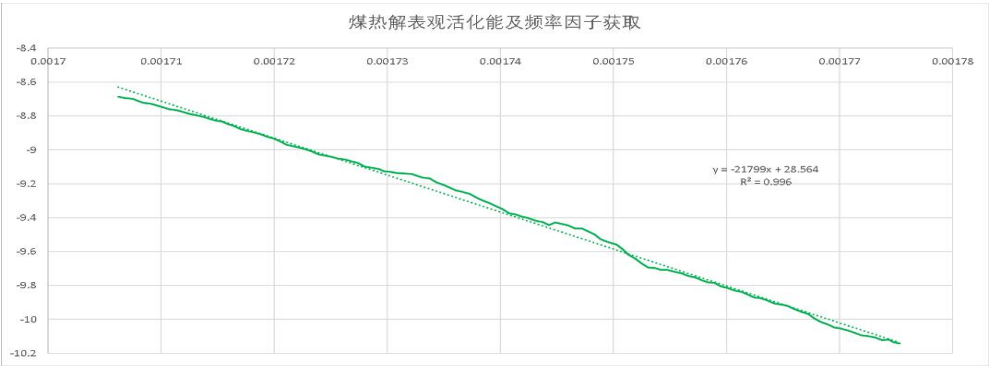
$k = k_0 \cdot \exp(-E/RT)$

$\ln k = - (E/R) / T + \ln k_0$

$y = -Ax + B$, 其中 $y = \ln k$; $x = 1/T$;

斜率 $A = E/R$; 截距 $B = \ln k_0$

τ, T, w_i ;
 $1/T, \ln k$, 其中 $k = -(w_i - w_{i-1})/w_0/\Delta\tau$;
绘制 $y = -Ax + B$ 如下:



阿累尼乌斯定律中参数				热天平测试数据	
k	= 反应速率	= 反应产物生成率	= 反应物消耗率	= 试样相对失重率	= $-(w_i - w_{i-1})/w_0/\Delta\tau$



特征温度: 精确到1(°C); 表观活化能: 1(kJ/mol); 指前因子: 科学计数法, 3位有效数字。