



národní
úložiště
šedé
literatury

**Simulace transportu hmoty v replikách pórovitých látek pro účely odhadu jejich
efektivních transportních vlastností**

Čapek, P.
2011

Dostupný z <http://www.nusl.cz/ntk/nusl-71613>

Dílo je chráněno podle autorského zákona č. 121/2000 Sb.

Tento dokument byl stažen z Národního úložiště šedé literatury (NUŠL).

Datum stažení: 16.08.2024

Další dokumenty můžete najít prostřednictvím vyhledávacího rozhraní nusl.cz .

Simulace transportu hmoty v replikách pórovitých látek pro účely odhadu jejich efektivních transportních vlastností

P. Capek, M. Veselý, J. Kolafa, ¹V. Hejtmánek, ²L. Brabec

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, E-mail:

pavel.capek@vscht.cz; ¹ Ústav chemických procesů, v.v.i., AV ČR, Rozvojová 135, 165 02 Praha

6; ² Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, v.v.i., AV ČR, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8

Mezi zajímavé a účinné metody statistického modelování mikrostruktury patří třírozměrná (3D) stochastická rekonstrukce. Ta je založena na pořízení velkého množství snímků náhodně orientovaných řezů pórovitou látkou. Digitální snímky jsou zpracovány tak, aby bylo dosaženo jednoznačného přiřazení bodů dvourozměrného digitálního obrazu (též obrazový bod či pixel) jednotlivým fázím. Výsledné fázové funkce jsou statisticky zhodnoceny a získaná statistická informace (tzv. mikrostrukturní deskriptory) je použita pro 3D stochastickou rekonstrukci, která poskytuje matematický model (obraz) mikrostruktury. Kvalita obrazu (repliky) je posuzována buď přímým porovnáním s jinak získaným obrazem mikrostruktury (například pomocí rentgenového mikrotomografu) nebo určením jeho efektivních vlastností a porovnáním s odpovídajícími experimentálními hodnotami.

Účelem této práce bylo vypočítat efektivní transportní vlastnosti replik pórovitých látek a výsledek porovnat s experimentálními hodnotami.

Mikrostruktura osmi pórovitých látek byla rekonstruována modifikovanou metodou stochastické rekonstrukce s užitím simulovaného ochlazování. Na rozdíl od předcházejících studií byla rekonstrukce založena na využití bohatší statistické informace o dvourozměrné mikrostruktuře. Tato zahrnovala dvoubodovou pravděpodobnostní funkci pro fázi pórů, funkci lineární dráhy pro fázi pórů a funkci lineární dráhy pro pevnou fázi. Kombinace dvoubodové pravděpodobnostní funkce pro fázi pórů a funkce lineární dráhy pro pevnou fázi se ukázala být jako klíčová pro reprodukci prostoru pórů dobré propojenosti. Kromě toho byla také nepřímo využita dvoubodová shluková funkce. Postup spočíval v tom, že nejdříve byla reprodukována dvourozměrná mikrostruktura tak, aby bylo dosaženo dobrého souhlasu mezi experimentální dvoubodovou shlukovou funkcí a jejím protějškem spočteným pro reprodukovanou mikrostrukturu. Tím byly určeny parametry rekonstrukčního algoritmu, které byly použity pro 3D rekonstrukci.

V replikách pórovitých látek pak byl simulován viskózní tok nestlačitelné tekutiny, obyčejná (objemová) difúze v plynných směsích a tok volných molekul (Knudsenův tok ve zředěných plynech). Ve všech případech šlo o ustálený transport inertních tekutin. Výsledkem simulací byly efektivní transportní parametry příslušející zvolenému mechanismu transportu. Pro řešení Stokesových rovnic v prostorové doméně vymezené stěnami pórů byla užitá metoda založená na konečných diferencích ve spojení s algoritmem umělé stlačitelnosti. Difúzní transport byl v obou případech řešen metodou Monte-Carlo. Vypočtené efektivní transportní parametry byly porovnány s jejich experimentálními protějšky, které byly získány ve Wicke-Kallenbachově cele a permeační cele. Ve všech případech byla shledána dobrá shoda, která potvrdila úspěch rekonstrukce mikrostruktury všech osmi látek.