

ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΗΣ ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑΣ ΨΗΦΙΑΚΗΣ ΑΝΑΚΑΤΑΣΚΕΥΗΣ ΠΟΡΩΔΩΝ ΔΟΜΩΝ ΣΕ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΕΣ ΚΑΙ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

Σ. Καλαϊτζόπουλος¹, Μ. Πολίτης², Ε. Κικκινίδης¹,

¹Τμήμα Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

²Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας, Κοζάνη, Ελλάδα

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η παρούσα εργασία συνεισφέρει στην εφαρμογή της μεθοδολογίας ψηφιακής ανακατασκευής πορωδών μέσων σε ενεργειακές και περιβαλλοντικές εφαρμογές. Συγκεκριμένα μελετήθηκε η υβριδική μέθοδος ανακατασκευής πορωδών δομών^[1,2] για τον καλύτερο χαρακτηρισμό τους ως προς τη συσχέτιση πορώδους δομής και ιδιοτήτων μεταφοράς σε ταμιευτήρες πετρελαίου και σε κυψέλες καυσίμου.

Η υβριδική μέθοδος ανακατασκευής πορωδών υλικών συνδυάζει την στοχαστική ανακατασκευή με εξομοιούμενη απόπτωση (Simulated Annealing) με μεθόδους σύνθεσης τυχαίας συνάθροισης σφαιρών (random sphere packing). Τα δεδομένα εισόδου των στοχαστικών μεθόδων αποτελούν συνήθως στατιστικές ιδιότητες συσχέτισης 1^{ης} και 2^{ης} τάξης (πορώδες και συνάρτηση συσχέτισης 2 σημείων) οι οποίες υπολογίζονται σε δισδιάστατες ψηφιοποιημένες απεικονίσεις των υλικών από μικροσκοπία σάρωσης κατάλληλα επεξεργασμένων δοκιμίων. Οι δομές εκκίνησης της υβριδικής διαδικασίας ανακατασκευής προκύπτουν από μεθόδους ανασύνθεσης τυχαίας συνάθροισης σφαιρών ώστε με προσεκτική επιλογή της αρχικής δομής να είναι δυνατή η επιπλέον ανάκτηση συσχετίσεων ανώτερης τάξης, εστιάζοντας με αυτόν τον τρόπο την λύση σε δομές που αναπαριστούν ακριβέστερα την πραγματική δομή του υλικού.

Η προτεινόμενη μέθοδος εφαρμόστηκε αρχικά σε μια σειρά πετρωμάτων/ ταμιευτήρων που χρησιμοποιούνται στη βελτιωμένη εξόρυξη πετρελαίου και μελετήθηκαν πρόσφατα με ψηφιακές μεθόδους από τους Saxena et al.^[3]. Ακολούθως έγινε σύγκριση αποτελεσμάτων διαπερατότητας Darcy όπως υπολογίζεται από την αριθμητική επίλυση της έρπουσας ροής (Stokes) στις ψηφιακά ανακατασκευασμένες δομές που πρόεκυψαν από την υβριδική μέθοδο σε σχέση με τα αποτελέσματα που δημοσιεύονται από τους Saxena et al. στην βιβλιογραφική πρότυπη βιβλιοθήκη αποτελεσμάτων, η οποία είναι διαθέσιμη μαζί με τα πρωτογενή δεδομένα και ψηφιακά υλικά^[3].

Στη συνέχεια η προτεινόμενη μεθοδολογία εφαρμόστηκε στην ψηφιακή ανακατασκευή της μικροδομής ανόδου κυψέλης καυσίμου στερεού ηλεκτρολύτη, όπου έγινε χαρακτηρισμός της δομής με τον υπολογισμό συναρτήσεων συσχέτισης και υπολογισμός της διαπερατότητας Darcy και της ηλεκτρικής αγωγιμότητας με σκοπό την συσχέτιση των μακροσκοπικών ιδιοτήτων με την μικροδομή του υλικού.

Η καλύτερη κατανόηση της συσχέτισης δομής-ιδιοτήτων μεταφοράς μέσω της ψηφιακής αναπαράστασης των πορωδών δομών οδηγεί στον καλύτερο σχεδιασμό σχετικών ενεργειακών και περιβαλλοντικών διεργασιών, όπως η βελτιωμένη εξόρυξη πετρελαίου, η αποθήκευση του CO₂, ο σχεδιασμός κυψελών καυσίμου, κ.α.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Politis, M. G., Kikkinides, E. S., Kainourgiakis, M. E., & Stubos, A. K. (2008). Microporous and Mesoporous Materials, 110(1), 92-99.
- [2] Kikkinides, E. S., & Politis, M. G. (2014). Adsorption, 20(1), 5-20.
- [3] Saxena, N., Hofmann, R., Alpak, F. O., Berg, S., Dietderich, J., Agarwal, U., Wilson, O. B. (2017).. Advances in Water Resources, 109, 211-235.