

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

**Σ.Καλαϊτζόπουλος<sup>1</sup>, Μ.Πολίτης<sup>2</sup>, Ε.Κικκινίδης<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Τμήμα Χημικών Μηχανικών, ΑΠΘ, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

<sup>2</sup>Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας, Κοζάνη, Ελλάδα

### ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η παρούσα εργασία συνεισφέρει στην εφαρμογή της μεθοδολογίας ψηφιακού χαρακτηρισμού πορώδων μέσων σε ενεργειακές και περιβαλλοντικές εφαρμογές. Συγκεκριμένα εφαρμόζεται αρχικά η υβριδική μέθοδος εξομοιούμενης ανόπτωσης<sup>[1,2]</sup> για την στοχαστική ανακατασκευή τρισδιάστατων ψηφιακών πορώδων δομών πετρωμάτων<sup>[3]</sup> και στη συνέχεια υπολογίζεται η διαπερατότητα με υπολογιστική επίλυση του πεδίου ροής στις δομές αυτές. Τα αποτελέσματα αποδεικνύουν την πολύ καλή σύγκλιση της υβριδικής μεθοδολογίας τόσο με τις τιμές διαπερατότητας που προκύπτουν από επίλυση του πεδίου ροής σε ψηφιοποιημένες δομές από σειριακή μικρο-τομογραφία όσο και με τα πειραματικά δεδομένα<sup>[3]</sup>.

### ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η υβριδική μέθοδος ανακατασκευής πορώδων υλικών (Hybrid Simulated Annealing, HSA) συνδυάζει την στοχαστική ανακατασκευή με εξομοιούμενη ανόπτωση με δομές που προκύπτουν από μεθόδους ανασύνθεσης διεργασίας<sup>[1]</sup>, ώστε με προσεκτική επιλογή της αρχικής δομής να εστιάζονται οι λύσεις σε δομές που αναπαριστούν ακριβέστερα την πραγματική δομή του υλικού. Τα δεδομένα εισόδου των στοχαστικών μεθόδων είναι συνήθως δισδιάστατες ψηφιοποιημένες απεικονίσεις των υλικών από μικροσκοπία σάρωσης κατάλληλα επεξεργασμένων δοκιμίων. Τα δεδομένα εισόδου των στοχαστικών μεθόδων αποτελούν στατιστικές ιδιότητες συσχέτισης 1ης και 2ης τάξης (πορώδες και συνάρτηση συσχέτισης 2 σημείων) οι οποίες υπολογίζονται σε δισδιάστατες ψηφιοποιημένες απεικονίσεις του υλικού από μικροσκοπία σάρωσης κατάλληλα επεξεργασμένου δοκιμίου.

Η ετερογενής δομή του πορώδους μέσου σε μικροσκοπικό επίπεδο περιγράφεται από τη συνάρτηση φάσης,  $Z(\mathbf{x})$ . Αν  $\mathbf{x}$  είναι το διάνυσμα θέσης ενός σημείου  $M$  του υλικού σε αυθαίρετο σύστημα συντεταγμένων, η συνάρτηση φάσης ορίζεται ως<sup>[1-5]</sup>:

$$Z(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{αν το } M \text{ ανήκει σε κενό χώρο (πορώδης φάση)} \\ 0, & \text{αν το } M \text{ δεν ανήκει σε κενό χώρο (στερεή φάση)} \end{cases} \quad (1)$$

Η  $Z(\mathbf{x})$  χαρακτηρίζεται από βασικές στατιστικές ιδιότητες, όπως είναι η μέση τιμή της και η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης δυο σημείων. Η μέση τιμή της  $Z(\mathbf{x})$  αντιστοιχεί στο πορώδες  $\varepsilon$ :

$$\varepsilon = \langle Z(\mathbf{x}) \rangle \quad (2)$$

όπου ο συμβολισμός  $\langle \cdot \rangle$  υποδηλώνει μέση τιμή. Το πορώδες εκφράζει την πιθανότητα το σημείο  $M$  του υλικού να ανήκει στην πορώδη φάση και λαμβάνει τιμές στο διάστημα  $[0, 1]$ .

Η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης  $R_z(\mathbf{u})$  ορίζεται από τη σχέση:

$$R_z(\mathbf{u}) = \frac{\langle (Z(\mathbf{x}) - \varepsilon) \cdot (Z(\mathbf{x} + \mathbf{u}) - \varepsilon) \rangle}{\varepsilon - \varepsilon^2} \quad (3)$$

Η ψηφιακή ανακατασκευή πορώδους υλικού έχει σαν βάση κατάλληλα πειραματικά δεδομένα πορώδους και συνάρτησης αυτοσυσχέτισης από δισδιάστατες εικόνες ώστε να προκύψουν τρισδιάστατες, ψηφιοποιημένες δομές, που διατηρούν τις παραπάνω ιδιότητες. Έτσι, αφού εξαχθούν οι συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης και το πορώδες για την προκειμένη δομή, δημιουργείται με την υβριδική μέθοδο εξομοιούμενης ανοπτησης, HSA<sup>[1],[5]</sup>, η στοχαστικά ανακατασκευασμένη τριδιάστατη δομή η οποία διατηρεί τις βασικές στατιστικές ιδιότητες της συνάρτησης φάσης θεωρώντας ιστροπικότητα στις τρεις διαστάσεις. Στη συνέχεια είναι δυνατός ο ακριβής υπολογισμός ιδιοτήτων μεταφοράς, όπως είναι η διαπερατότητα, στις δομές αυτές.

Η *διαπερατότητα*,  $k$ , εκφράζει την υδραυλική αγωγιμότητα ενός πορώδους υλικού στη ροή ενός νευτωνικού ρευστού και δίνει ένα μέτρο της αντίστασης που προβάλλει το πορώδες υλικό στη ροή ενός ιξώδους- ασυμπίεστου ρευστού μέσα από τους πόρους. Ο υπολογισμός της διαπερατότητας,  $k$ , ωστόσο απαιτεί τον υπολογισμό του πεδίου ροής στη μικροκλίμακα για την έρπουσα ροή ενός νευτωνικού ρευστού και περιγράφεται από το νόμο του Stokes και την εξίσωση συνέχειας

$$\eta \nabla^2 \mathbf{u} = \nabla p \quad (8)$$

$$\nabla \mathbf{u} = 0 \quad (9)$$

όπου  $\mathbf{u}$  και  $p$  είναι το άνυσμα της τοπικής ταχύτητας του ρευστού και η πίεση αντίστοιχα. Έτσι προκύπτει η παρακάτω σχέση:

$$k = - \frac{\mu \cdot Q}{A \cdot \nabla p} \quad (10)$$

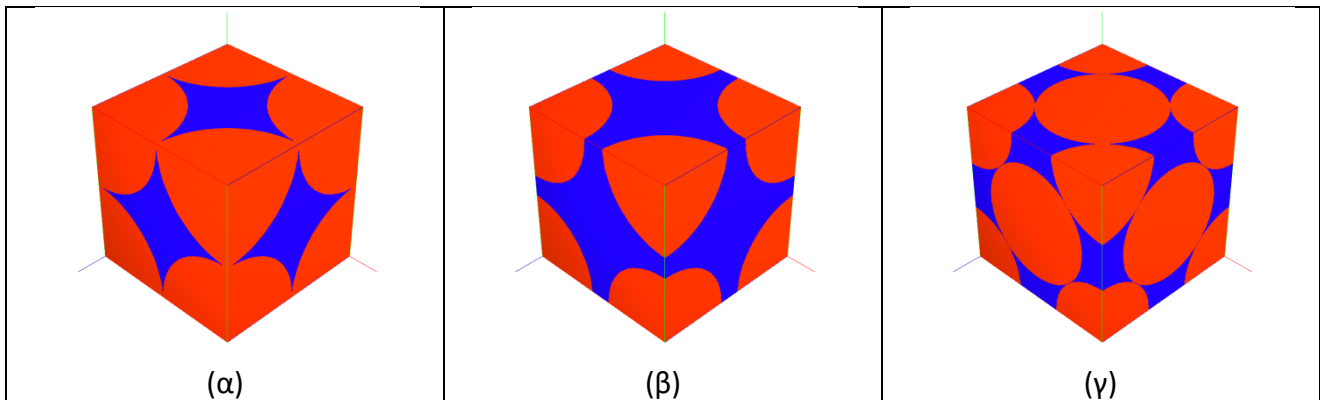
όπου  $\mu$  το δυναμικό ιξώδες του ρευστού,  $Q$  η ογκομετρική ροή αυτού,  $A$  το εμβαδόν διατομής του μέσου.

Για την επίλυση του προβλήματος της ροής Stokes στην ψηφιακά ανακατασκευασμένη δομή, χρησιμοποιείται η μέθοδος του ημι-μετατοπισμένου πλέγματος (staggered marker-and-cell, MAC)<sup>[6]</sup>. Σύμφωνα με αυτήν τη μέθοδο, η οποία επιλύει τις εξισώσεις Stokes με χρήση κεντρικών πεπερασμένων διαφορών (ακρίβεια  $2^{ns}$  τάξης), η πίεση ορίζεται στον κέντρο του κάθε κελιού, ενώ οι συνιστώσες της ταχύτητας ορίζονται κατά μήκος της διεπιφάνειας μεταξύ δύο γειτονικών κελιών. Ωστόσο για την επίλυση των εξισώσεων Stokes και συνεχείας, πρέπει να ορισθούν οι κατάλληλες συνοριακές συνθήκες οι οποίες είναι οι εξής<sup>[6]</sup>: 1) Η ροή υπολογίζεται μόνο στο εσωτερικό των πόρων, 2) Οι πιέσεις είναι σταθερές στην είσοδο και έξοδο του πόρου ώστε να δημιουργείται θετική βαθμίδα της πίεσης ως προς την κατεύθυνση της διαπερατότητας, 3) Στην διεπιφάνεια στερεού-πόρου ισχύει η συνθήκη μη ολίσθησης.

Για την αριθμητική επίλυση χρησιμοποιήθηκε η εφαρμογή FDMSS<sup>[7]</sup> που προσφέρει λεπτομερή αντιμετώπιση όλων των πιθανών συνοριακών συνθηκών προκειμένου να διατηρείται η ακρίβεια δεύτερης τάξης κατά τη διακριτοποίηση των εξισώσεων. Η συγκεκριμένη εφαρμογή υλοποιεί τη μεθοδολογία διακριτοποίησης που περιγράφεται παραπάνω και αποτελεί εξέλιξη του ανοιχτού λογισμικού που αναπτύχθηκε στο NIST από τους Martys και Bentz<sup>[6]</sup>, με επιπλέον χρήση παράλληλης επεξεργασίας και εφαρμογή σε πορώδεις δομές μεγέθους  $>300^3$  ψηφίδων, τα οποία αποτελούν τους βασικούς περιορισμούς του λογισμικού του NIST.

## ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Αρχικά έγινε αξιολόγηση της εφαρμογής FDMSS επιλύοντας το πεδίο ροής και υπολογίζοντας στη συνέχεια τη διαπερατότητα σε πρότυπες πορώδεις δομές που προκύπτουν από κρυσταλλικά πλέγματα σφαιρών (απλό κυβικό, SC, χωροκεντρωμένο, BCC, και εδροκεντρωμένο, FCC) όπως φαίνεται στο Σχήμα 1. Για τις δομές αυτές υπάρχουν ακριβείς λύσεις στη βιβλιογραφία<sup>[9,10]</sup>.



**Σχήμα 1.** Πορώδεις δομές που προκύπτουν από κρυσταλλικά πλέγματα (α) SC, (β) BCC και (γ), FCC, σε συνθήκες μέγιστης πλήρωσης (ελάχιστη δυνατή τιμή του πορώδους).

Τα αποτελέσματα διαπερατότητας (σε μορφή αδιάστατης αντίστασης<sup>[9,10]</sup> η οποία είναι αντιστρόφως ανάλογη της διαπερατότητας) που προκύπτουν από τις προσομοιώσεις για τις τρεις δομές και για διαφορετικούς βαθμούς ψηφιακής ανάλυσης παρατίθενται στους Πινάκες 1, 2, 3 για τις δομές, SC, BCC, FCC, αντίστοιχα, όπου συγκρίνονται και με βιβλιογραφικές τιμές.

**Πίνακας 1.** Αποτελέσματα διαπερατότητας σε δομές SC σε συνθήκες μέγιστης πλήρωσης

Μέγεθος δομής (pixels)	Πορώδες δομής (ε)	Αδιάστατη αντίσταση (βιβλιογραφία <sup>[9,10]</sup> )	Αδιάστατη αντίσταση (παρούσα εργασία)	Σχετικό Σφάλμα, %
100	0.4760	42.1	42.0	0.3
200	0.4764	42.1	42.1	0.0
300	0.4764	42.1	42.2	0.2

**Πίνακας 2.** Αποτελέσματα διαπερατότητας σε δομές BCC σε συνθήκες μέγιστης πλήρωσης

Μέγεθος δομής (pixels)	Πορώδες δομής (ε)	Αδιάστατη αντίσταση (βιβλιογραφία <sup>[9,10]</sup> )	Αδιάστατη αντίσταση (παρούσα εργασία)	Σχετικό Σφάλμα, %
100	0.3193	162.8	172.9	6.2
200	0.3199	162.8	167.7	3
300	0.3197	162.8	166.4	2.2

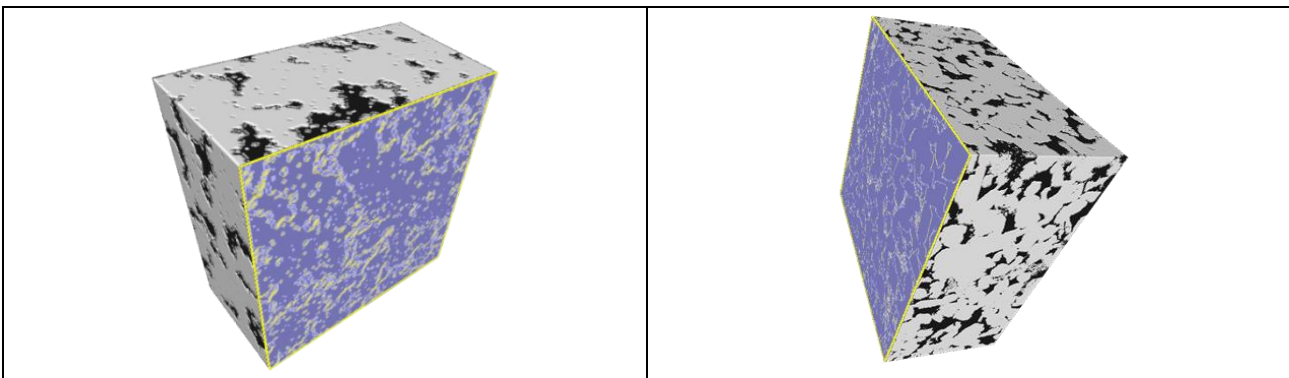
**Πίνακας 3.** Αποτελέσματα διαπερατότητας σε δομές FCC σε συνθήκες μέγιστης πλήρωσης

Μέγεθος δομής (pixels)	Πορώδες δομής (ε)	Αδιάστατη αντίσταση (βιβλιογραφία <sup>[9,10]</sup> )	Αδιάστατη αντίσταση (παρούσα εργασία)	Σχετικό Σφάλμα, %
100	0.2600	435	509.5	17.1
200	0.2597	435	468.1	7.6
300	0.2596	435	456.5	4.9

Σε όλες τις περιπτώσεις η διαπερατότητα που υπολογίζεται από την εφαρμογή FDMSS είναι σε εξαιρετική συμφωνία με τα αποτελέσματα της βιβλιογραφίας με το σφάλμα να μειώνεται όσο αυξάνει η ανάλυση για την ίδια δομή.

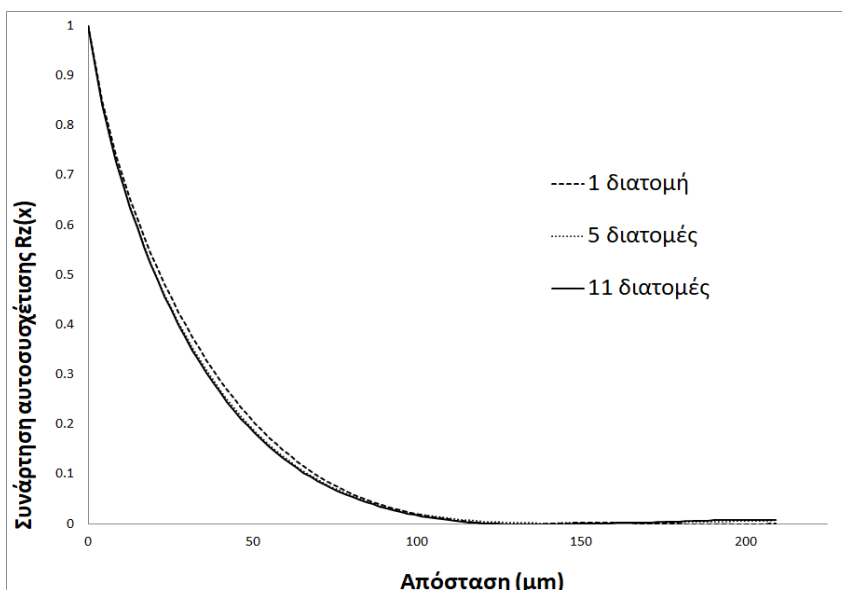
Στη συνέχεια η εφαρμογή FDMSS χρησιμοποιήθηκε στον υπολογισμό διαπερατότητας μιας πραγματικής δομής πορώδους μέσου. Η δομή που μελετάται προέρχεται από πυριτικό πέτρωμα ταμειυτήρα πετρελαίου με μέσο μέγεθος κόκκων 350  $\mu\text{m}$ . Μετά από περίθλαση ακτινών-Χ προκύπτει ότι το υλικό αποτελείται κατά κύριο λόγο από χαλαζία, ενώ περιέχει επίσης δολομίτη και αργιλώδη ορυκτά<sup>[3]</sup>.

Η τρισδιάστατη απεικόνιση του πορώδους υλικού, όπως προέκυψε από την διαδικασία της υβριδικής προσομοιωμένης ανόπτησης και η τρισδιάστατη αναπαράσταση του πυριτικού πετρώματος που εξήχθη με την τεχνική της μικροτομογραφίας σάρωσης παρουσιάζονται στο Σχήμα 2α και 2β αντίστοιχα. Το μέγεθος του προσομοιωμένου πεδίου είναι  $212^3$  ψηφίδες.



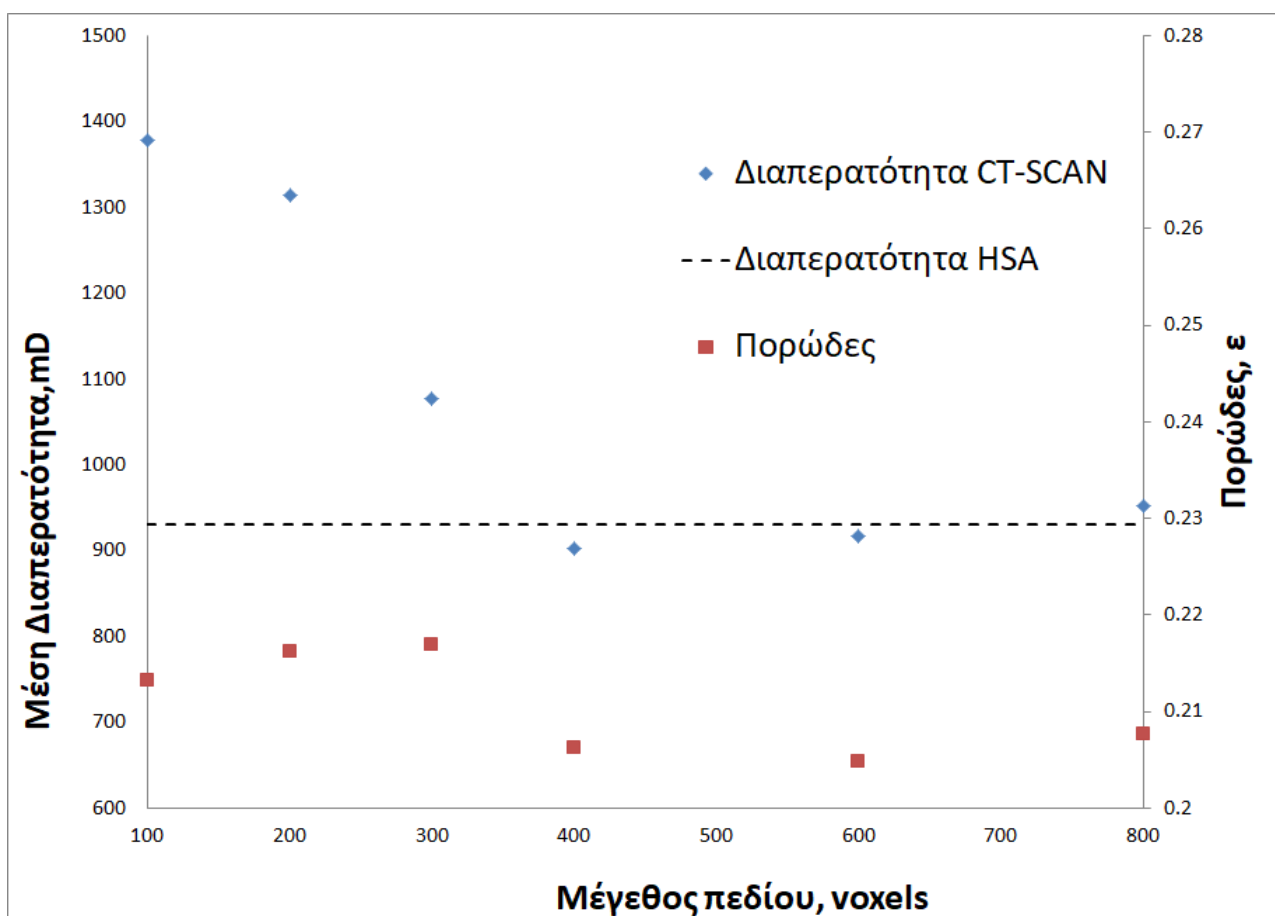
**Σχήμα 2.** (α) Τρισδιάστατη δομή του πορώδους ανακατασκευασμένου υλικού. (β) Η αντίστοιχη τρισδιάστατη δομή του πραγματικού πορώδους υλικού.

Στο Σχήμα 3 παρουσιάζεται το διάγραμμα της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης με την απόσταση. Η συνάρτηση υπολογίζεται για μία επαρκή απόσταση όπου πρακτικά η τιμή της μηδενίζεται. Η κλίμακα ψηφίδων απόστασης είναι 2.114  $\mu\text{m}$ . Στην συνέχεια εάν η συνάρτηση αφορά περισσότερες από μία δισδιάστατες διατομές λαμβάνεται η αριθμητική μέση τιμή των εκάστοτε τομών για κάθε θέση ώστε η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης μετά από κάποιο αριθμό διατομών να μένει ίδια.. Επίσης, από το Σχήμα 3, εξάγεται και η τιμή του μήκους συσχέτισης  $\sim 130 \mu\text{m}$ , το οποίο υποδικνύει μέχρι ποια απόσταση από το εξεταζόμενο σημείο υπάρχει αλληλεπίδραση.



**Σχήμα 3.** Εξάρτηση συνάρτησης αυτοσυσχέτισης δυο σημείων με την απόσταση

Στο Σχήμα 4 που ακολουθεί παρατίθενται συγκριτικά τα αποτελέσματα από την προσομοίωση διαπερατότητας για κλιμακούμενα υπολογιστικά πεδία ψηφίδων όγκου (voxels) μεγέθους 100, 200, 300, 400, 600 και 800. Γίνεται εμφανές, ότι για μικρές τιμές υπολογιστικών πεδίων, περίπου από 100 έως 300 ψηφίδες υπάρχει μεγάλη απόκλιση της μέσης διαπερατότητας από την αντίστοιχη της προσομοιωμένης ανόπτησης. Ωστόσο αυξάνοντας το μέγεθος των πεδίων υπάρχει ικανοποιητική σύγκλιση με την τιμή της διαπερατότητας από την υβριδική προσομοιωμένη ανόπτηση. Η πειραματική τιμή που δίνεται από τους Saxena et.al.<sup>[3]</sup>, 500mD, αποκλίνει κατά ~46,3% από την υπολογιστική τιμή, απόκλιση η οποία όμως θεωρείται αποδεκτή σε εφαρμογές όπως ο υπολογισμός διαπερατότητας σε ταμειυτήρων υδρογονανθράκων. Η παρατηρούμενη απόκλιση μπορεί να αποδοθεί στη παρουσία ανομοιογένειας ανάμεσα στην κλίμακα του πεδίου της ψηφιακής αναπαράστασης (~2.27 mm<sup>3</sup>) και του δοκιμίου της πειραματικής διάταξης συνήθως τάξης μεγέθους μεγαλύτερη. Επίσης, εμφανίζεται και το πορώδες των διαφόρων πεδίων, το οποίο βρίσκεται σε συμφωνία με το πορώδες του υπολογιστικού πεδίου και κατ'επέκταση του πραγματικού δοκιμίου, το οποίο είναι 21%.



Σχήμα 4. Διερεύνηση μεγέθους υπολογιστικού πεδίου

## ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Με την παρούσα εργασία, πραγματοποιείται επιβεβαίωση των αποτελεσμάτων της διαπερατότητας για το πυριτικό πέτρωμα αναφοράς<sup>[3]</sup>. Επιπλέον πραγματοποιήθηκε υπολογισμός διαπερατότητας σε πρότυπες πορώδεις δομές και παραμετρική διερεύνηση για το πρακτικό μέγεθος του υπολογιστικού πεδίου που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την λήψη ικανοποιητικής συμφωνίας πειράματος-προσομοίωσης. Επόμενη διερεύνηση αφορά την μελέτη επιπλέον πετρωμάτων αλλά και διαφορετικών πορωδών δομών, όπως η άνοδος ηλεκτροδίων κυψελών καυσίμου στερεού ηλεκτρολύτη, με την χρήση μεγαλύτερου ψηφιακά ανακατασκευασμένου πεδίου.

**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.
- [4] Roberts A.P., Knackstedt M.A. (1996). *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics*, 54:2313-2328.
- [5] Torquato, S. (2002). *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties* (1 ed.). New York: Springer.
- [6] Bentz, D. P., Martys, N.S. (2007). A Stokes permeability solver for three-dimensional porous media. NIST Interagency/Internal Report (NISTIR) 7416.
- [7] Gerke, K. M., Vasilyev, R. V., Khirevich, S., Collins, D., T. O., Mallants, D. (2018). *Computers and Geosciences*, 114, 41-58.
- [8] Čapek, P. (2018). *Transport in Porous Media*, 125(1), 59-80.
- [9] Zick, A.A., Homsy, G.M. (1982). *J. Fluid Mech.*, 115, 13-26.
- [10] Sangani, A.S., Acrivos, A. (1982). *Int. J. Multiphase Flow*, 8(4), 343-360.