



Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije
Sveučilište u Zagrebu

3D modeliranje prijenosa tvari u cementnim (poroznim) materijalima

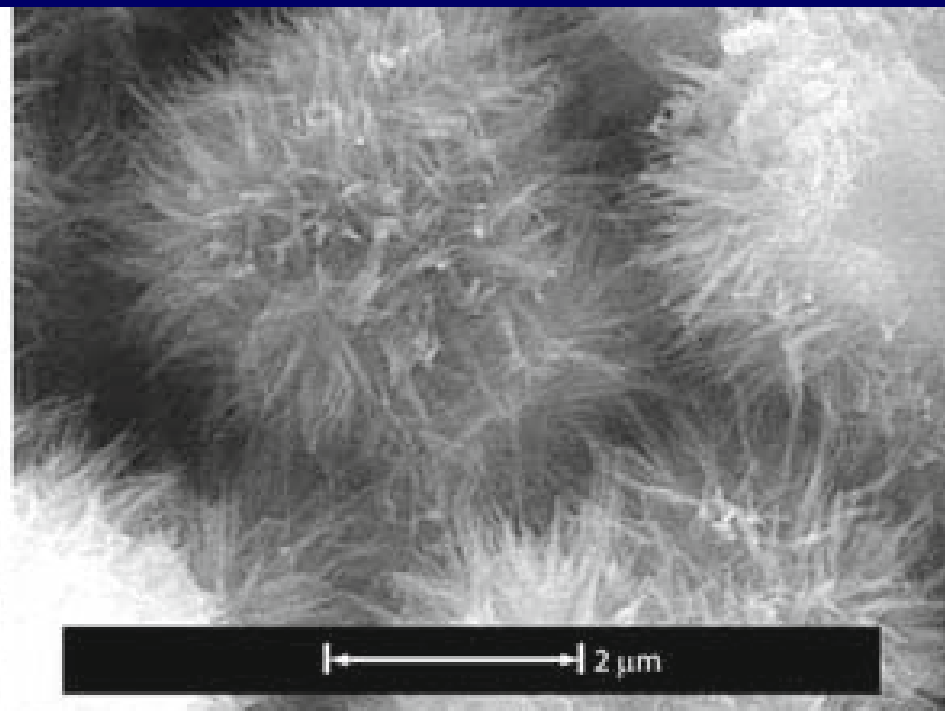
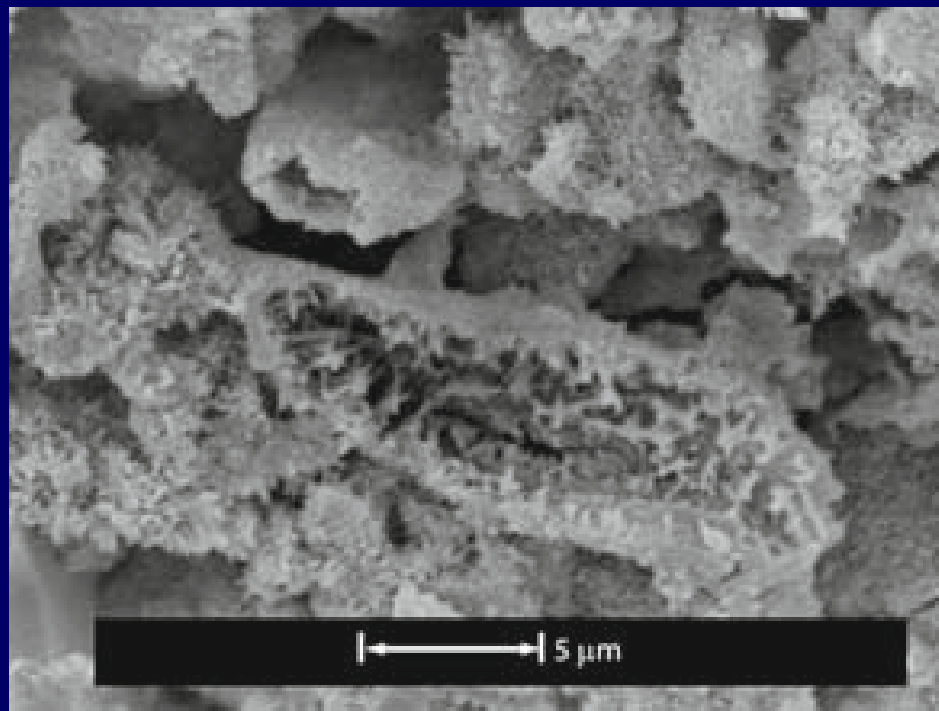
Neven Ukrainczyk

Modeliranje u kemijskom inženjerstvu
Radionica: 4.-5. studeni 2010.

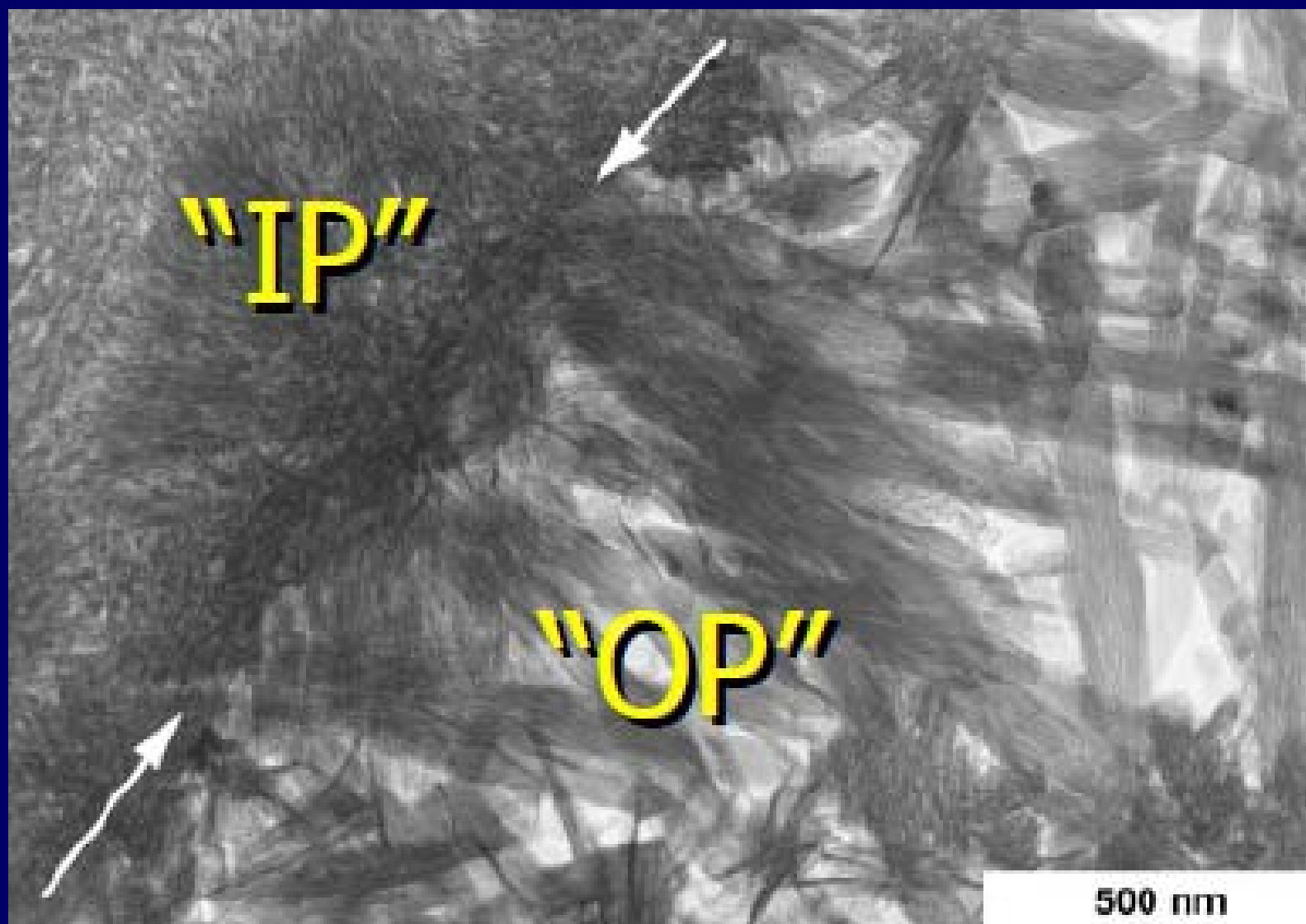
Sadržaj

1. Izazovi modeliranja mikro-strukture cem. mat.
2. Dobivanje reprezentativne 3D strukture
 - Eksperimentalno
 - Modelima hidratacije
 - Digitalizacija slike
 - Kontinuum modeli rasta sfera
3. Analiza virtualne 3D strukture
 - Direktni pristup (3D digitalizacija)
 - Indirektni pristup (ekvivalentna mreža pora)

1. Izazovi modeliranja: struktura

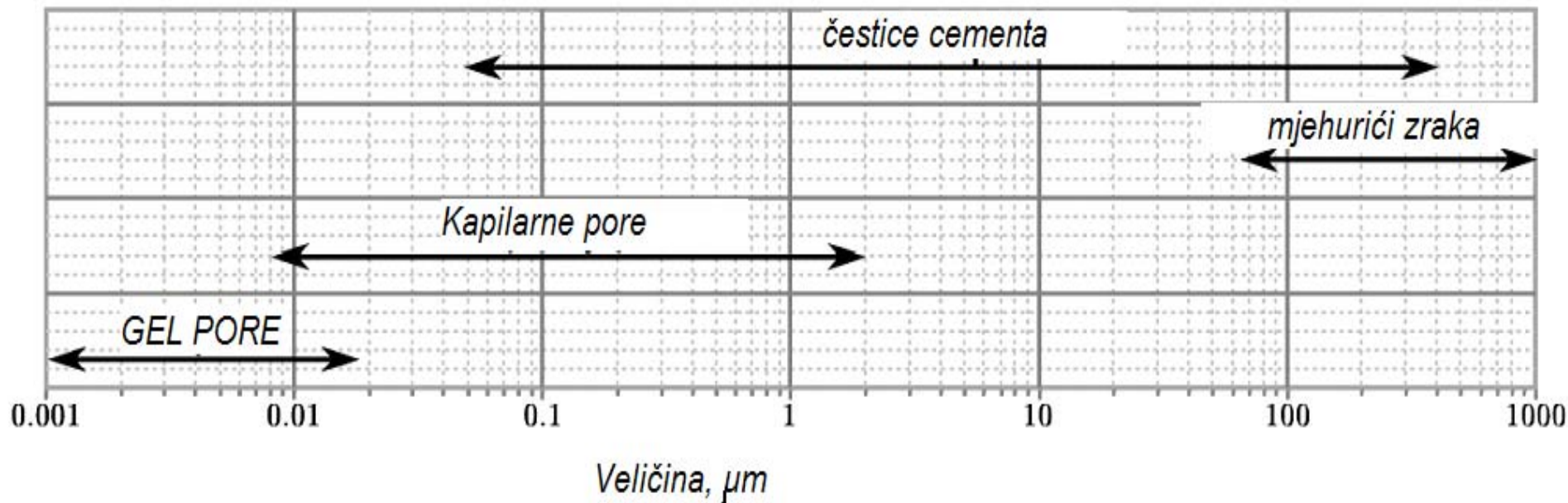


1. Izazovi modeliranja: struktura



1. Izazovi modeliranja: struktura

Više-veličinska analiza!
6 reda veličine: nm - mm



2. Dobivanje reprezentativne 3D strukture

2.1. Eksperimentalno

- - Micro(nano) x-ray CT
- 2D SEM/BSE

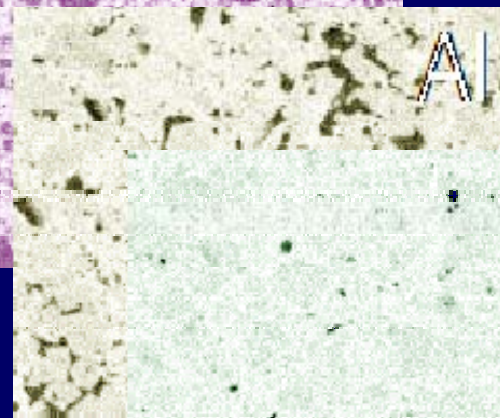
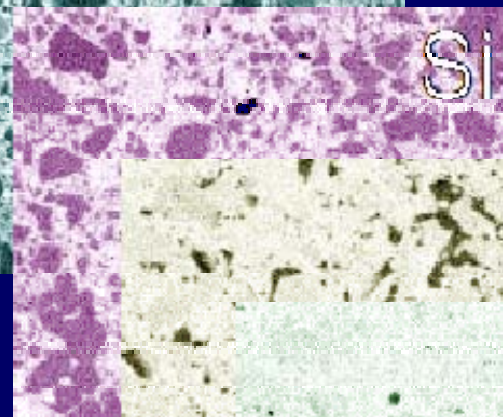
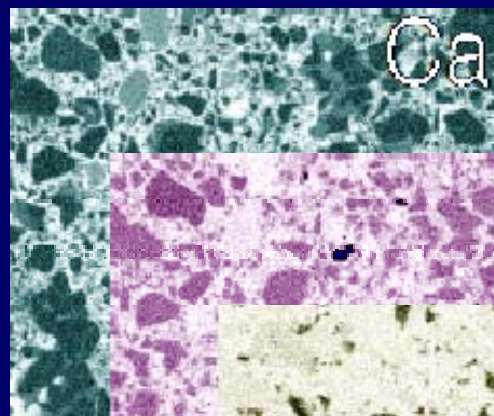
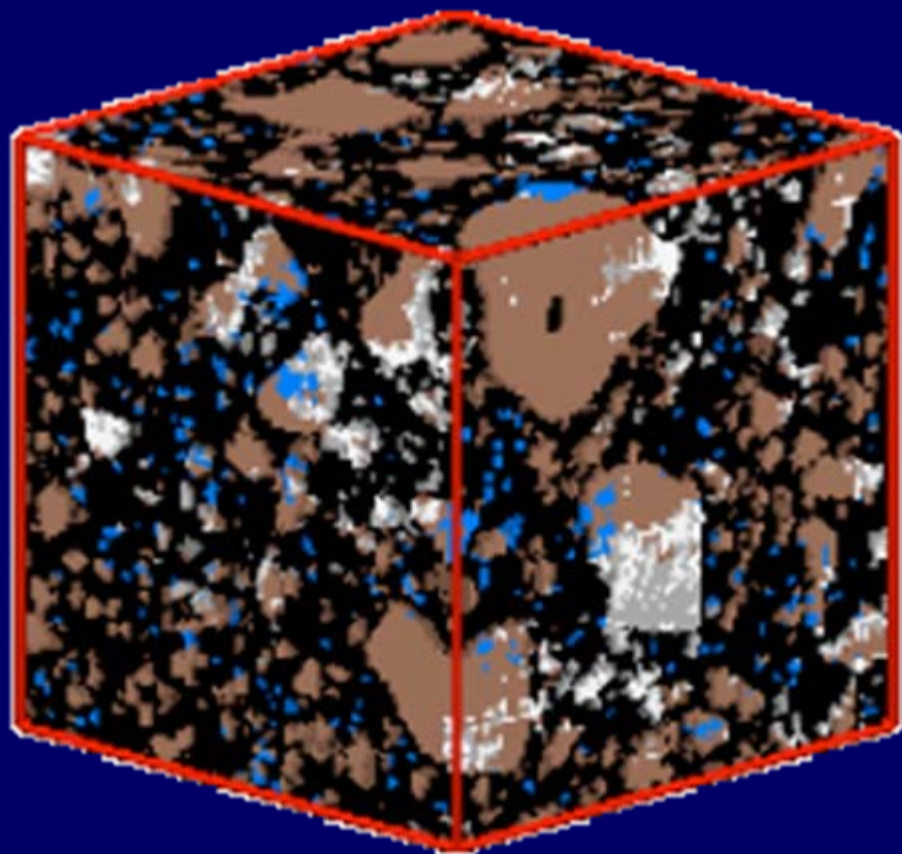
2.2. Simulacije modelima hidratacije i razvoja mikrostrukture

- digitalizacija realne slike
- kontinuum modeli rasta sfera

CEMHYD3D (NIST)

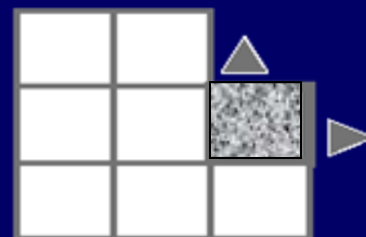
- 3D digitalizacija 2D mikroskopskih slika
 - SEM/BSE
- Reprezentativna (heterogena) struktura cem.
- Rezolucija 1 μm (nedostatak!)
- reakcije i difuzija: **celular-automat algoritmi**
- Gotovo bez kinetičkih ulaznih podataka

HydratiCA - novi mehanistički model kinetike



celular-automat algoritmi

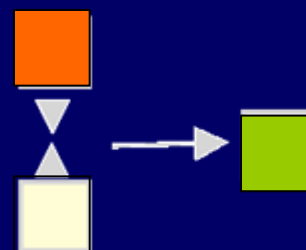
- Pojedini 3D volumni elementi (*voxel*)
 - otapanje



- difuzija (*random walk*)



- reakcija

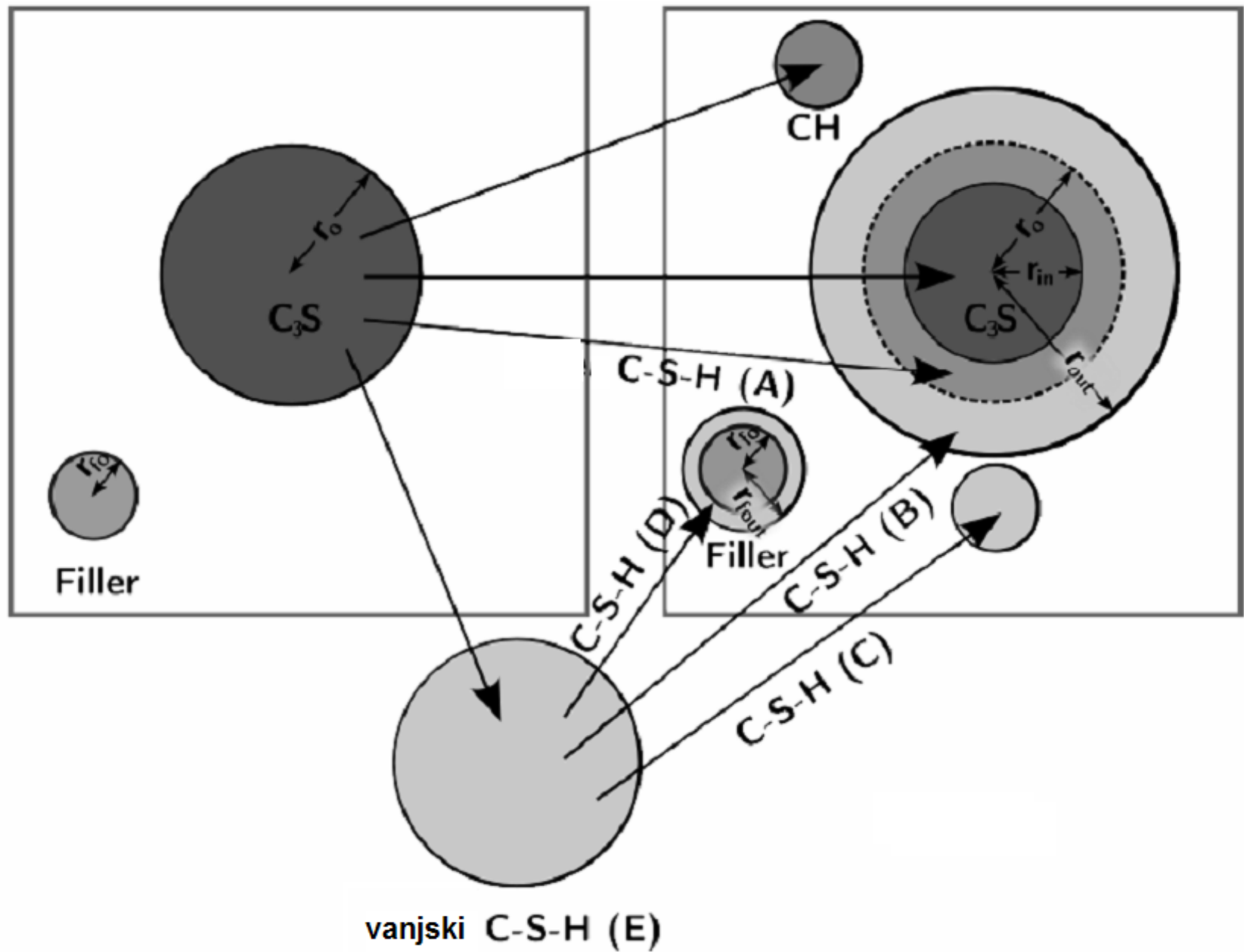


HYMOSTRUC3D (TU Delft), μ ic (EPFL)

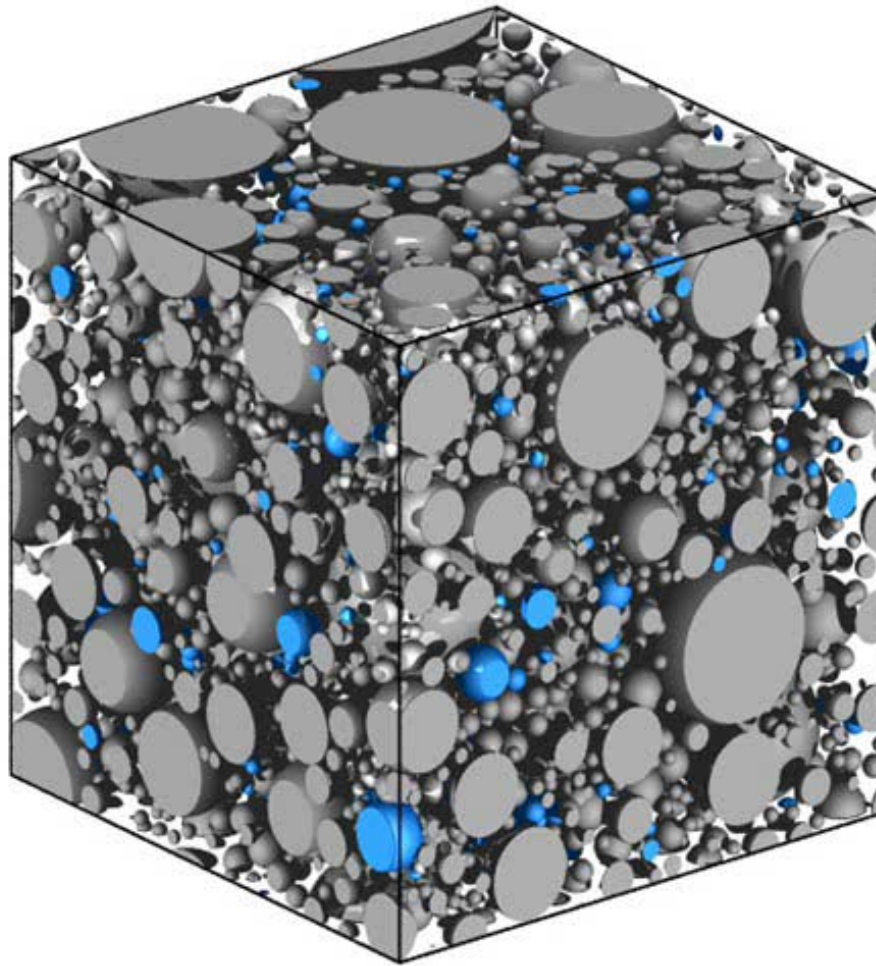
- Kontinuum pristup
- Kemijski homogene sferične čestice
- Hidratacija - rast sfera (+interakcije)
- Fenomenološki kinetički modeli (Avrami)
- μ ic: - milijuni čestica (2,5 mil), realna RVČ
 - brzo računanje (objektno programiranje, Java)
 - freeware

prije reakcije

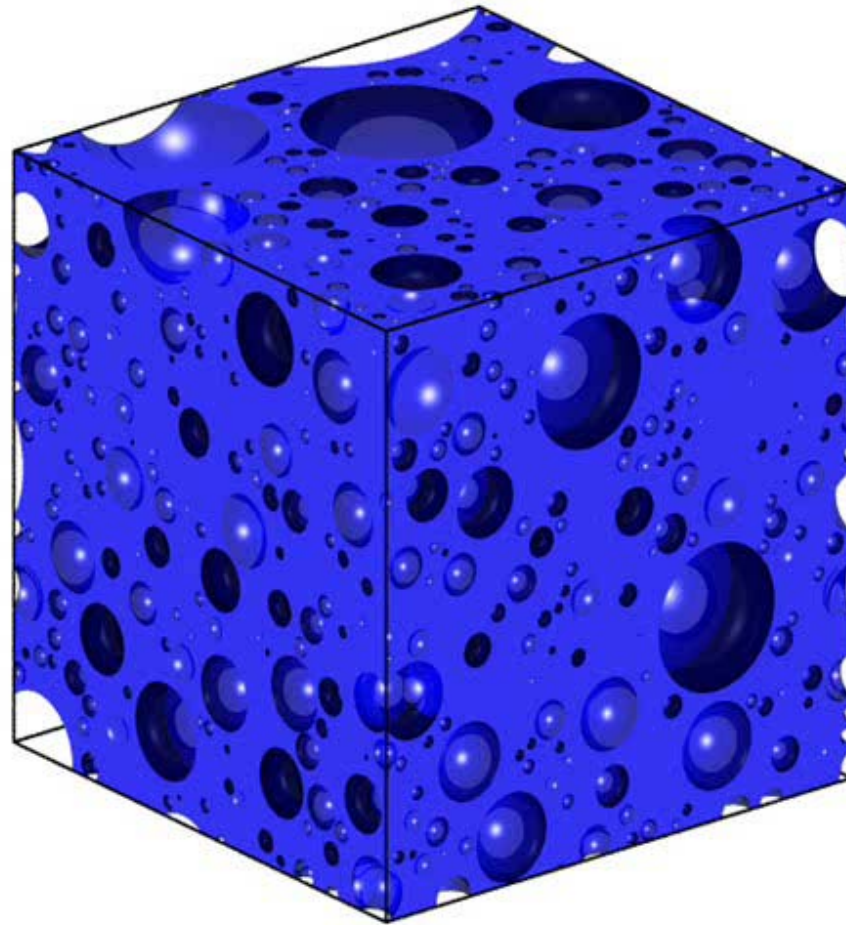
hidratizirane čestice



Razvoj krute faze tijekom



Razvoj strukture pora tijekom



Analiza mikrostrukture

- a) raspodjela veličina pora, morfologija (zakrivljenost, ograničenost pora)
- b) efektivni prijenos tvari

- **Direktni pristup** (digitalizacija)

- mreža 3D elemenata

- 100^3 - 1000^3 elemenata (voxel/)
 - Linux mreže
 - (NIST-NASA) FEM 200 mil. tri-linear cubic elements

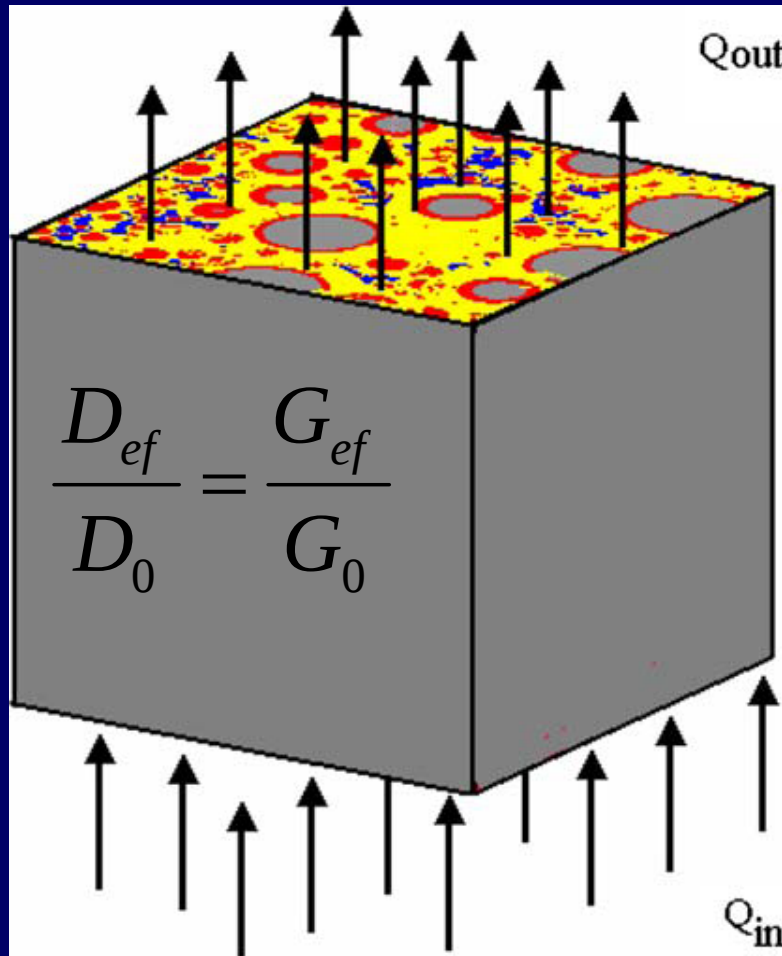
- **Indirektni pristup**

- ekvivalentna mreža većih j. elemenata pora (npr. cilindričnih) → znatno manji broj el.!

- 1) kontinuum pristup (Samo do 200,000 čestica!)
 - 2) digitalizacija

Analiza prijenosa tvari (efektivni koef.)

Ustaljeno stanje



Analogija zakona:

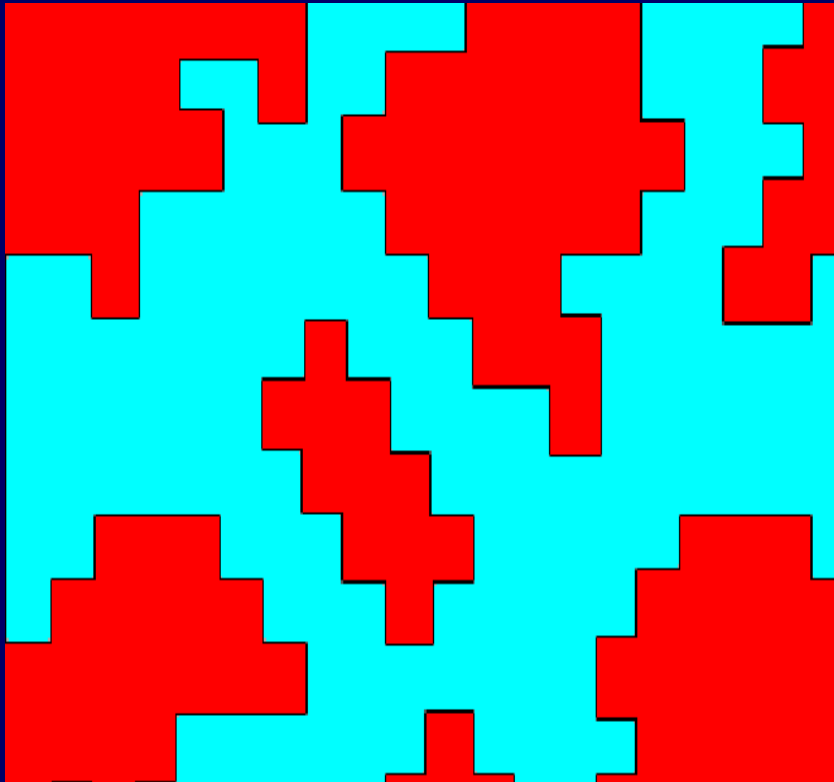
Ohm: $I = G \Delta U$

Fick: $J = -D \Delta c / \Delta x$

Darcy: $V = k \Delta p / \eta$

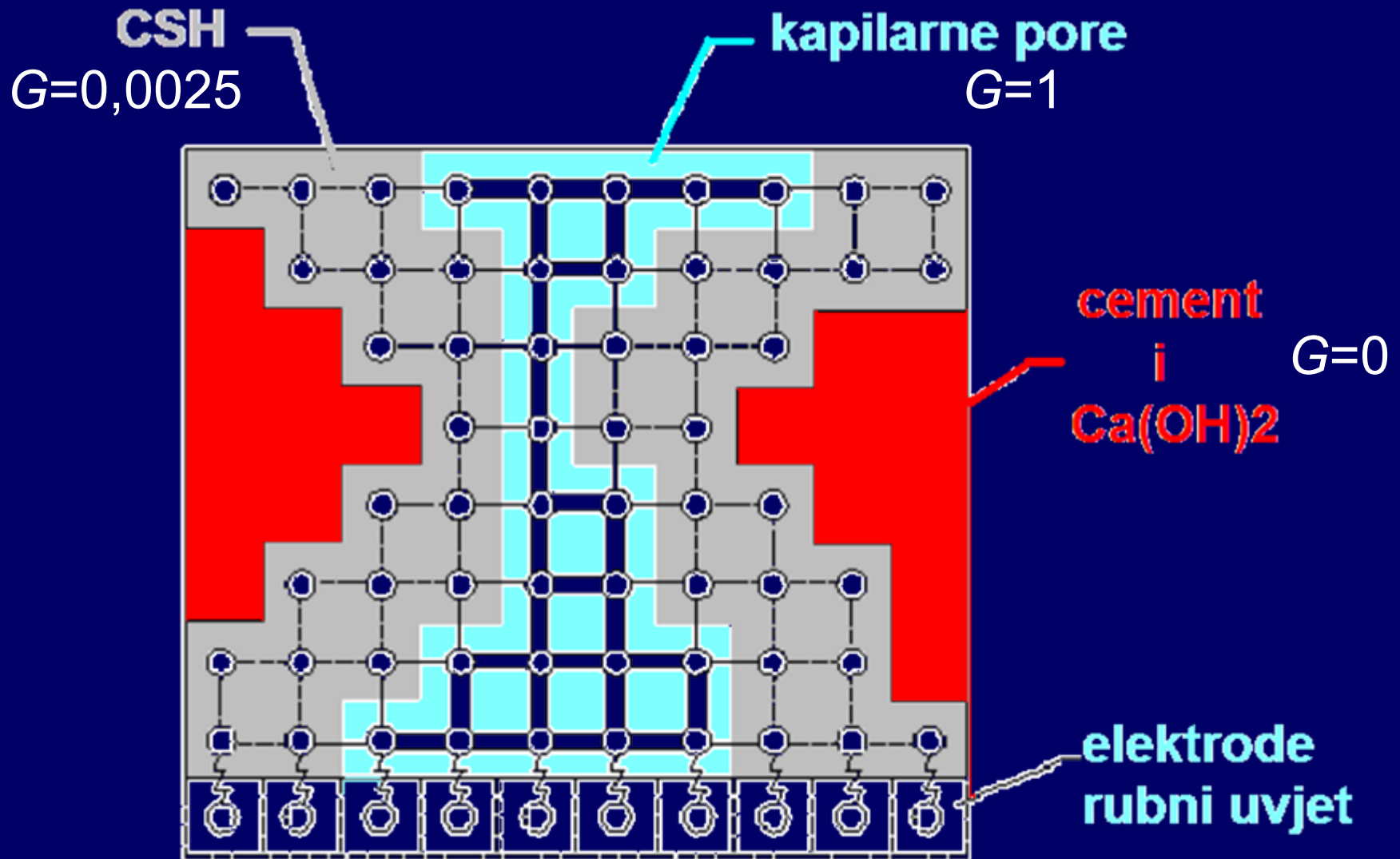
Analiza mikrostrukture

Direktni pristup

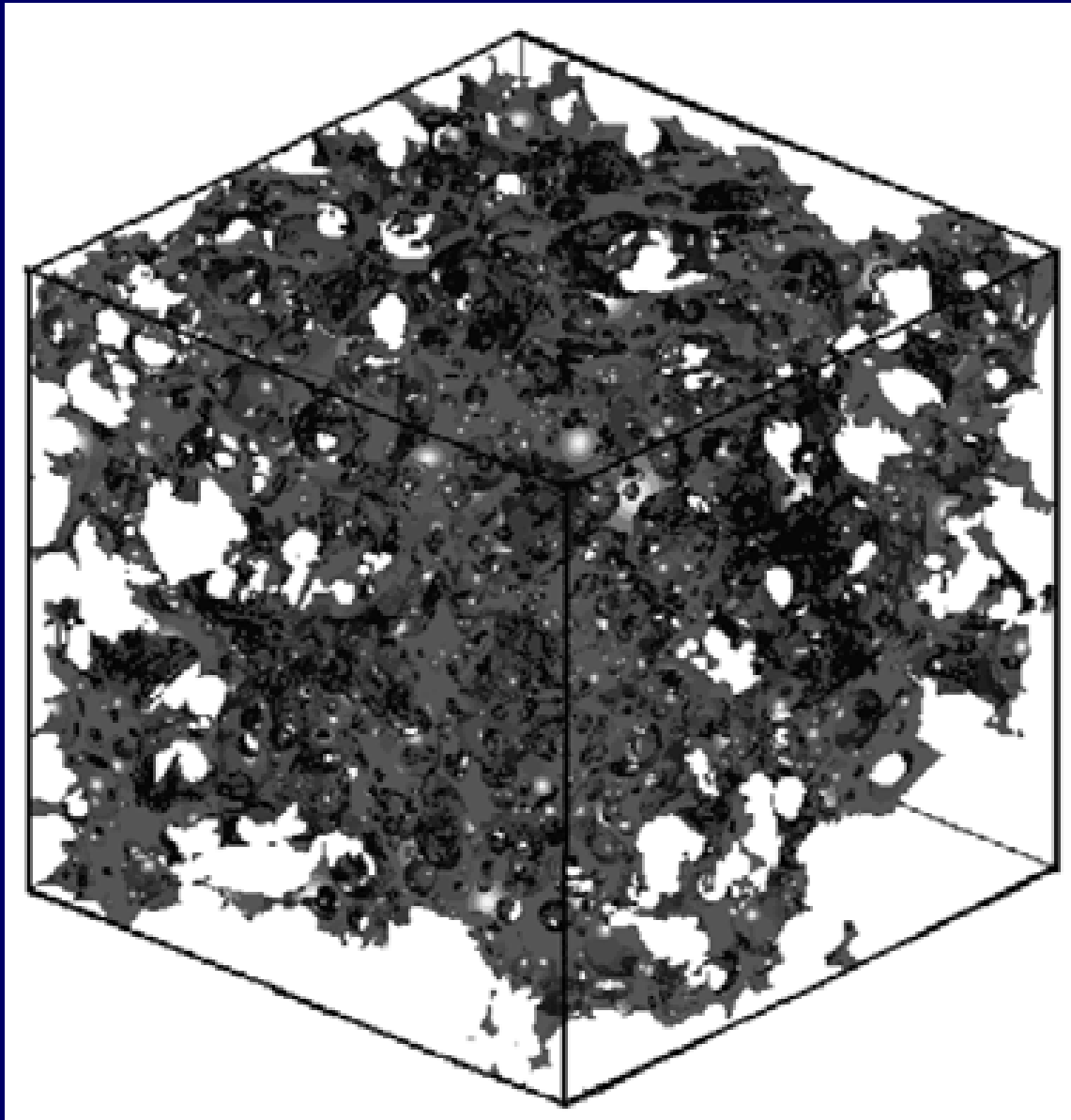


- **FD, FE, FVM**
- Random walkers
- Lattice-Boltzman:
dinamika fluida
(ravnoteža na
geom. složenoj
granici s-/)

Direktni pristup: FD ili FEM



Indirektni pristup



Indirektni pristup: 1.) kostur pora

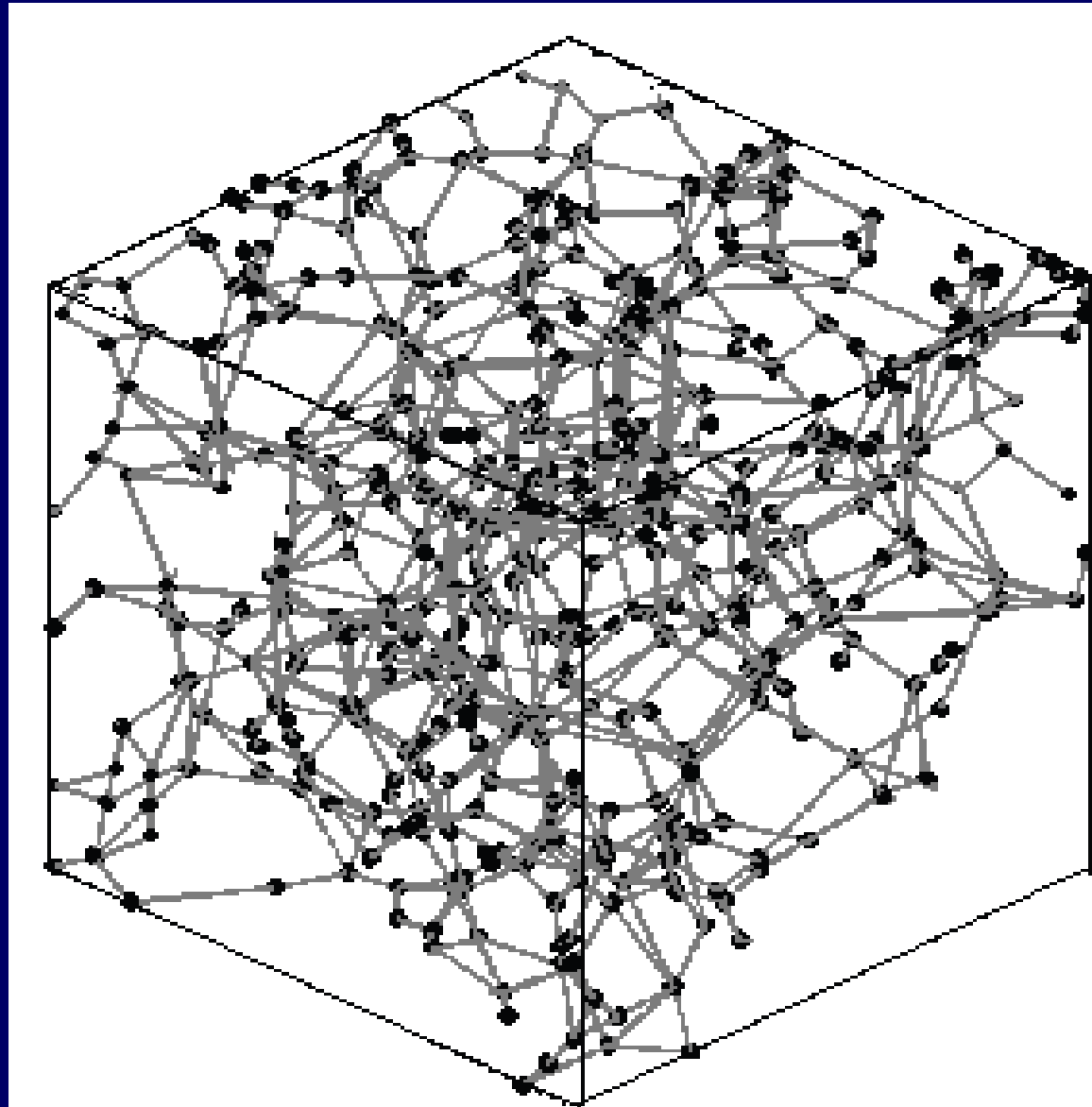
Algoritmi:

- Stanjivanja
(*Thinning*)
- Eroziije
(*erosion*)
- Upisanih sfera
(Maximal ball)
- Transf. udaljenosti
(distance transf.)
- Skupljanja (shrink)
-



Matlab

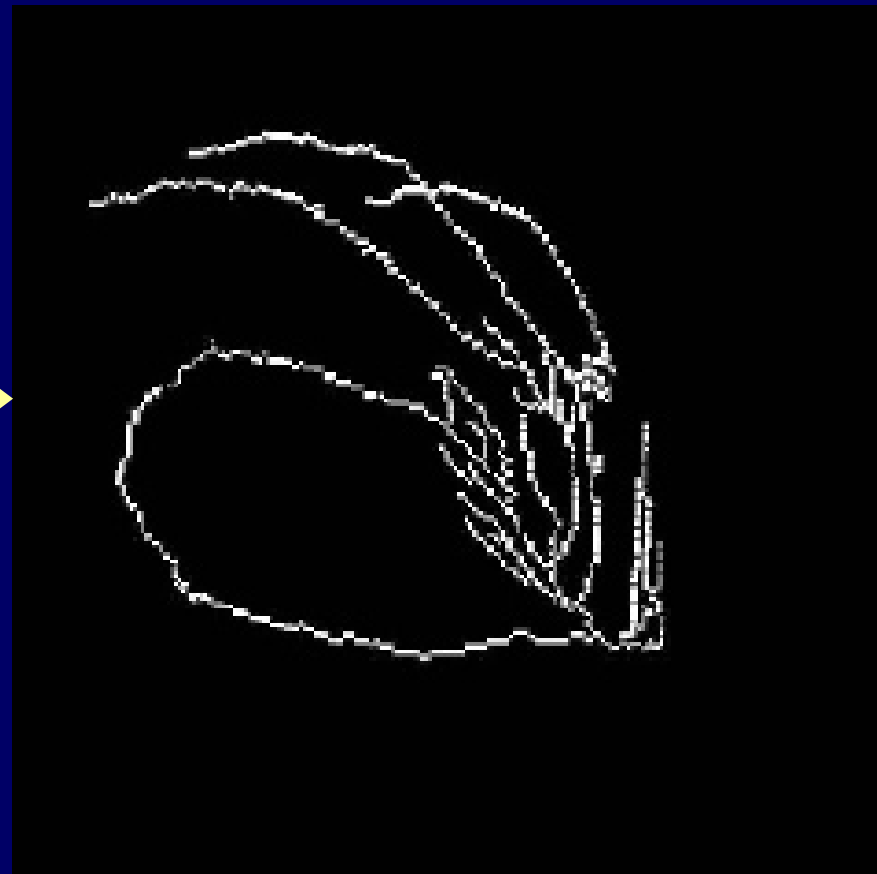
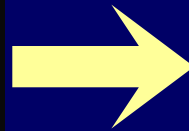
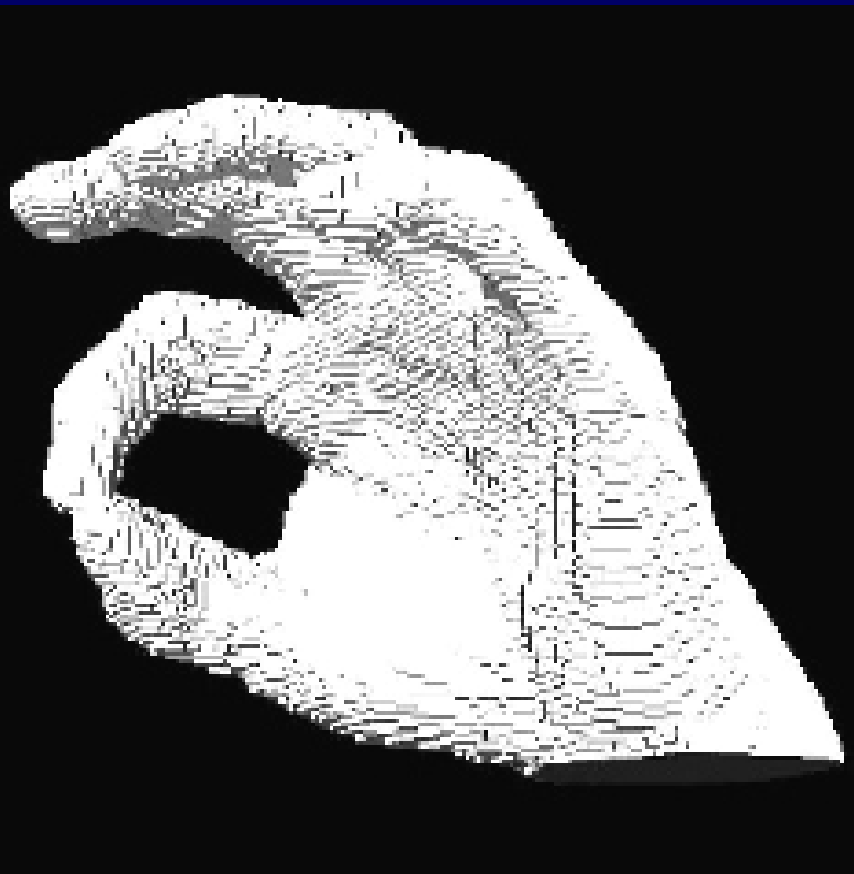
Image processing
toolbox !!



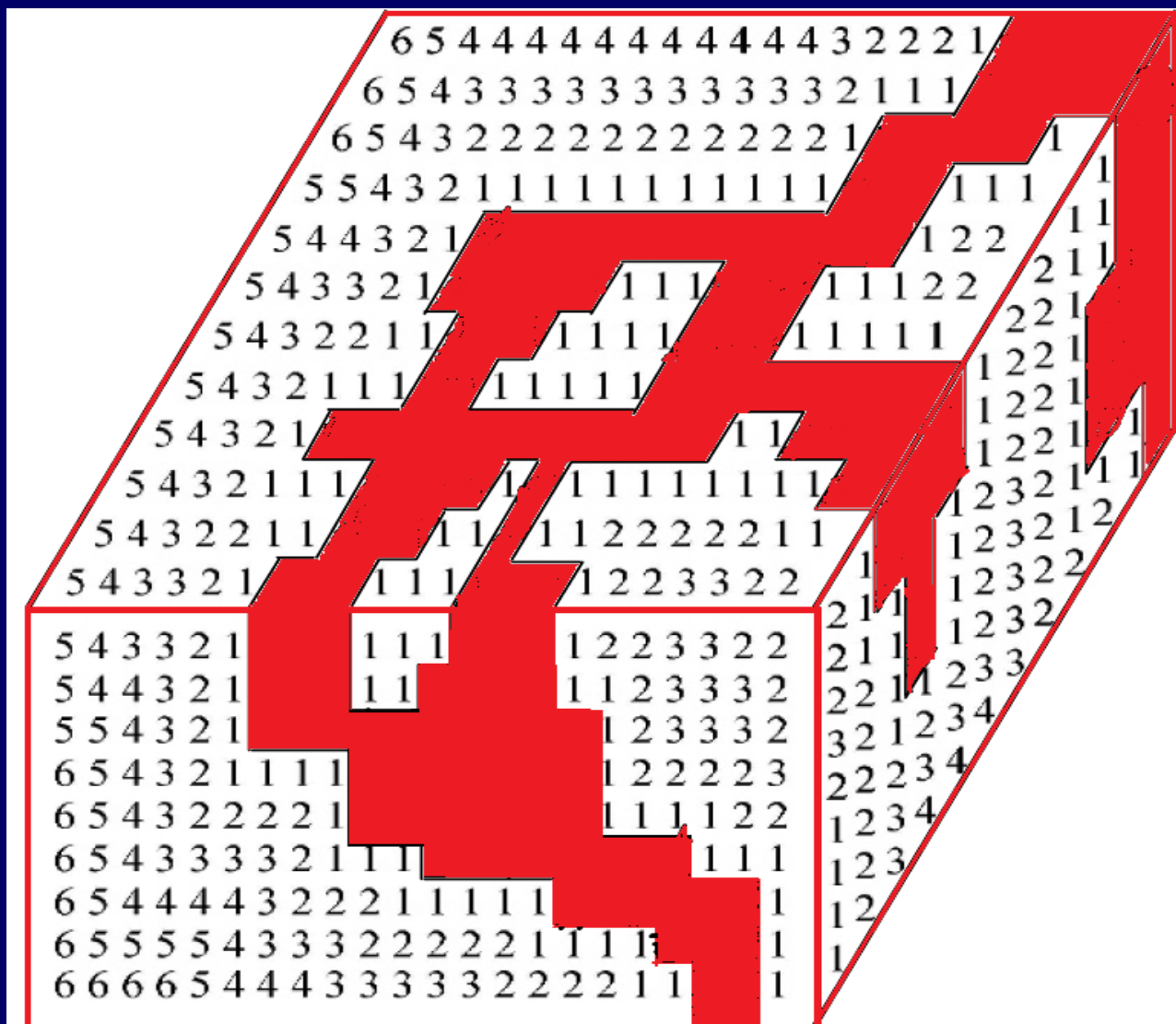
Kostur pora: Stanjivanje (*Thinning*)

- linija koja **povezuje** središnje osi pora

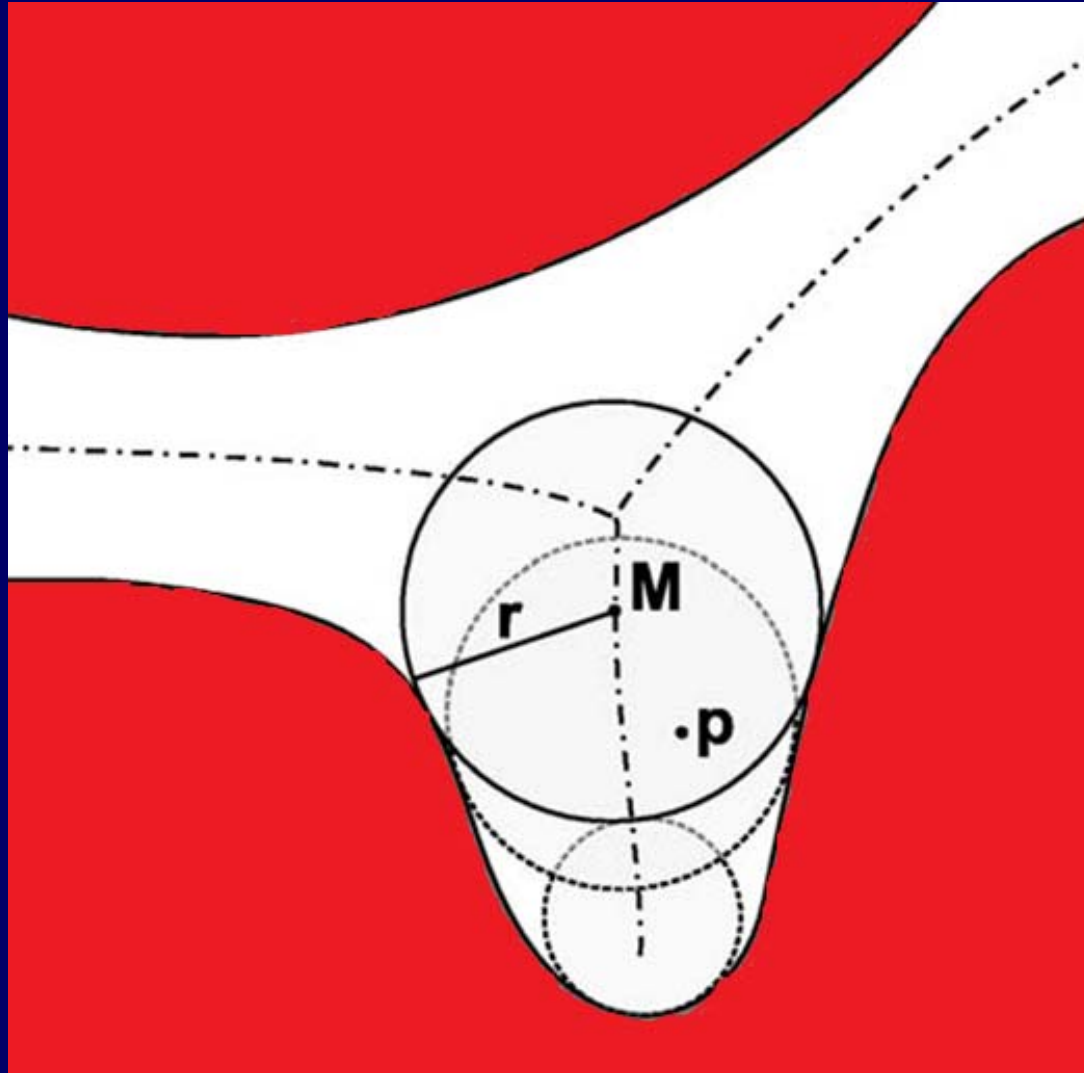
Zadržati polaznu topologiju 3D strukture!



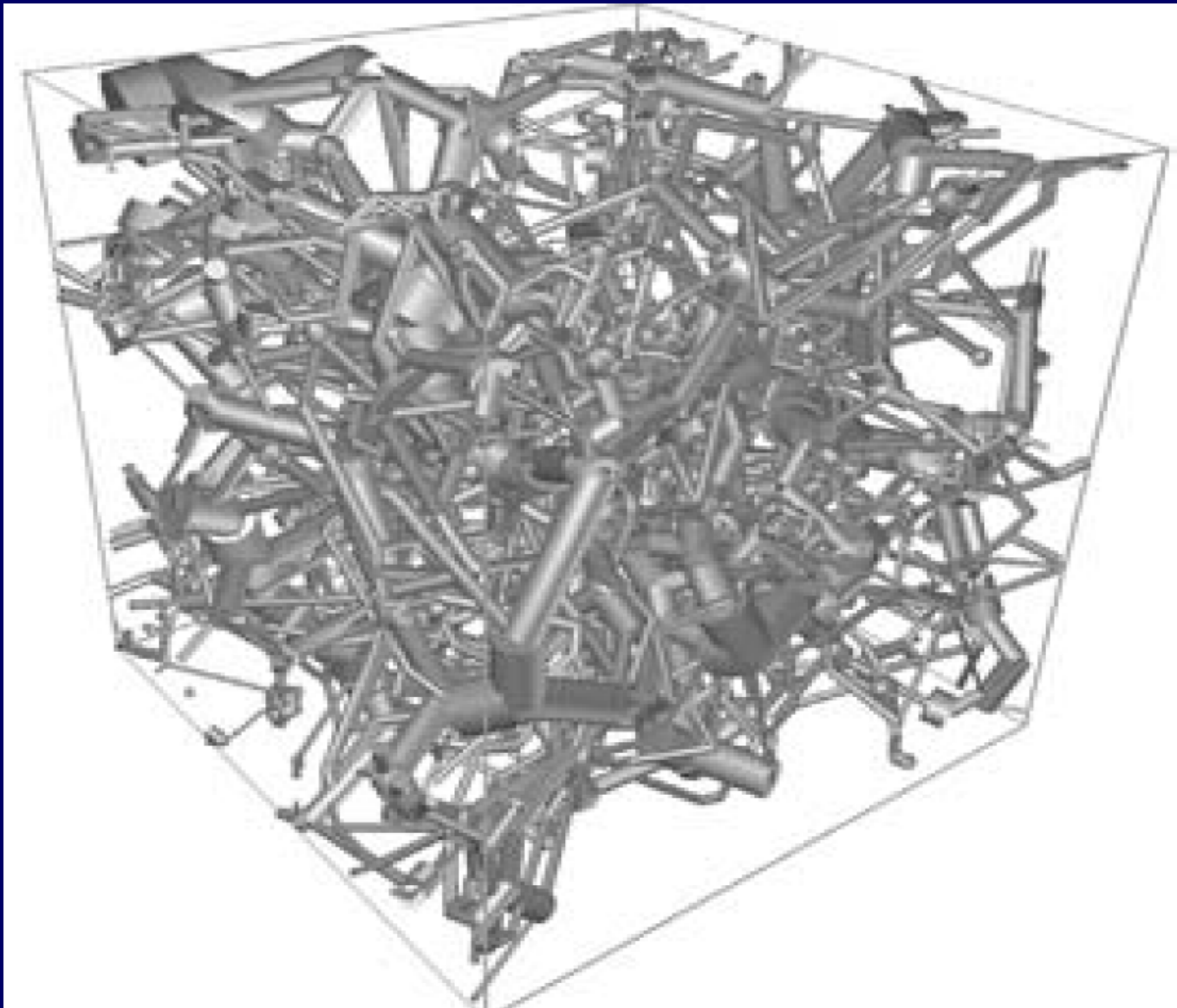
Udaljenosti od krutine (*Distance transformation*)

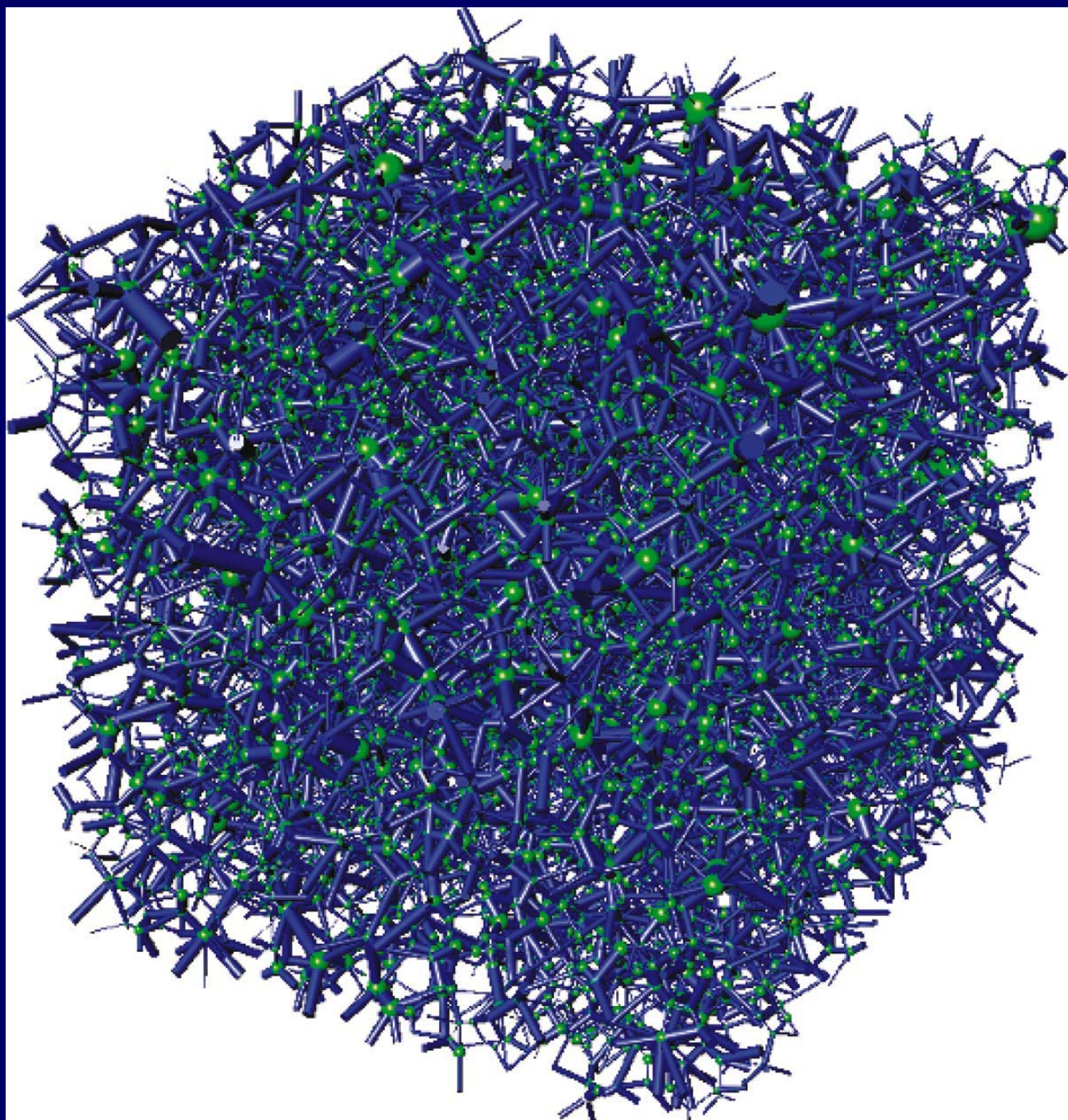


Upisane sfere (*Maximal ball alg.*)

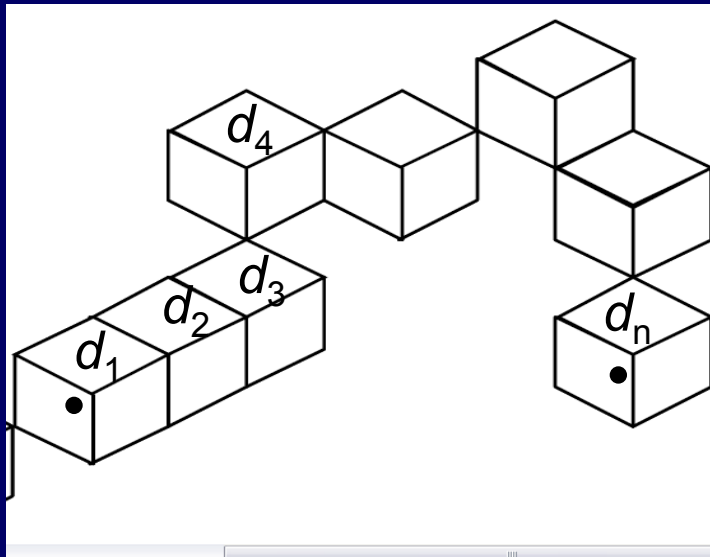


Indirektni pristup:
2.) mreža *cilindričnih* pora

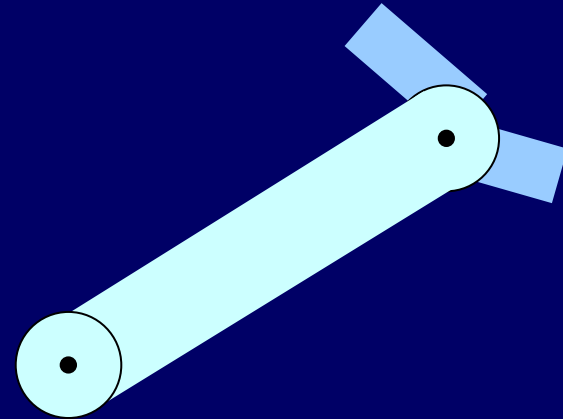
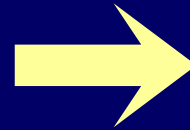




Transformacija 3D kostura pora u mrežu 1D elemenata (cijevi)



3D kostur
serija n voxela
svaki promjera d_n



1D element:

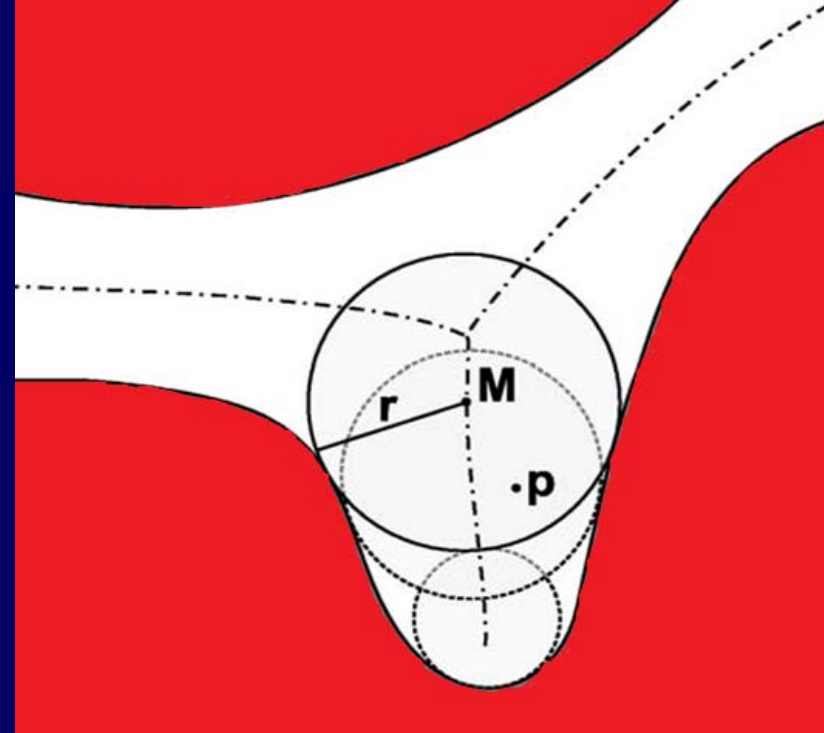
L_{ij} (udaljenost čvorova i i j)

d_{ij} efektívni promjer cijevi ->

$D_{3D} \longleftrightarrow D_{1D}$

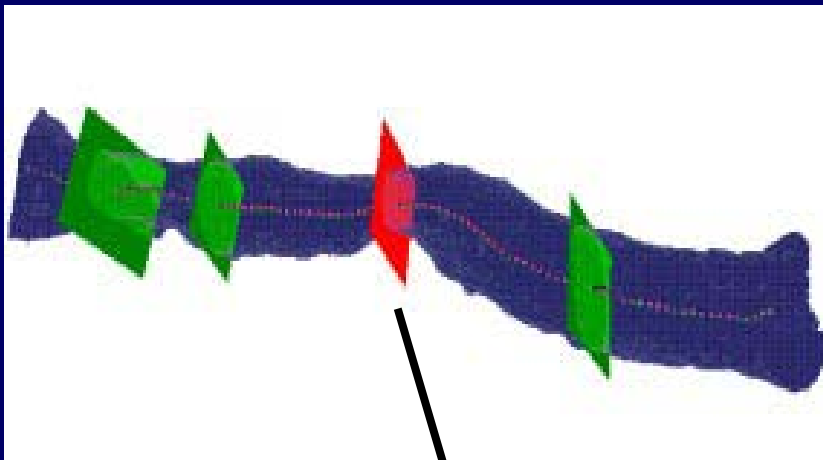
$$d_{ij} = \sqrt{\frac{L_{ij}}{\sum_n \frac{L_n}{d_n^2}}}$$

$d = 2r$ upisane
sfere



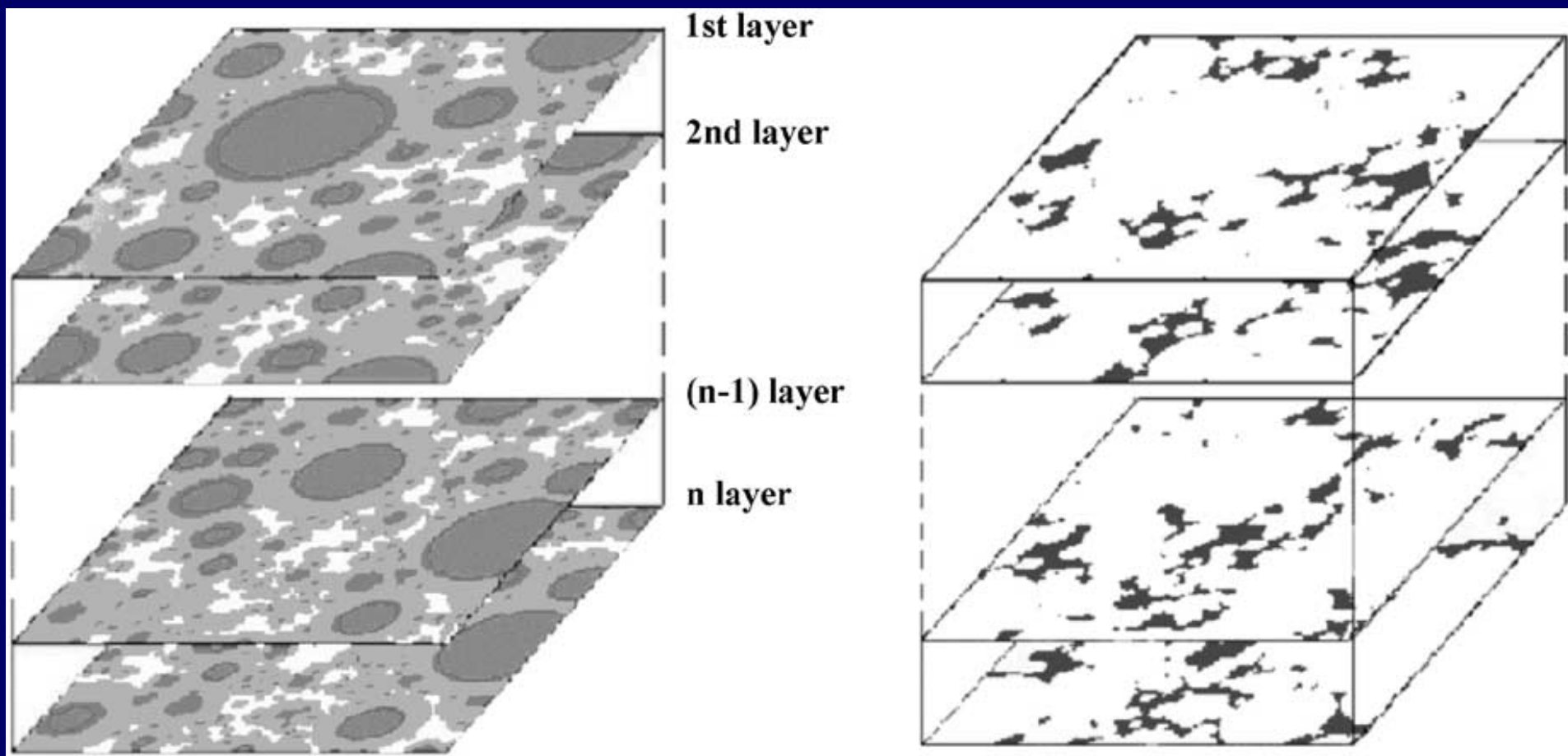
ili

$$d_{\text{hidraulčki}} = 4 A/P$$

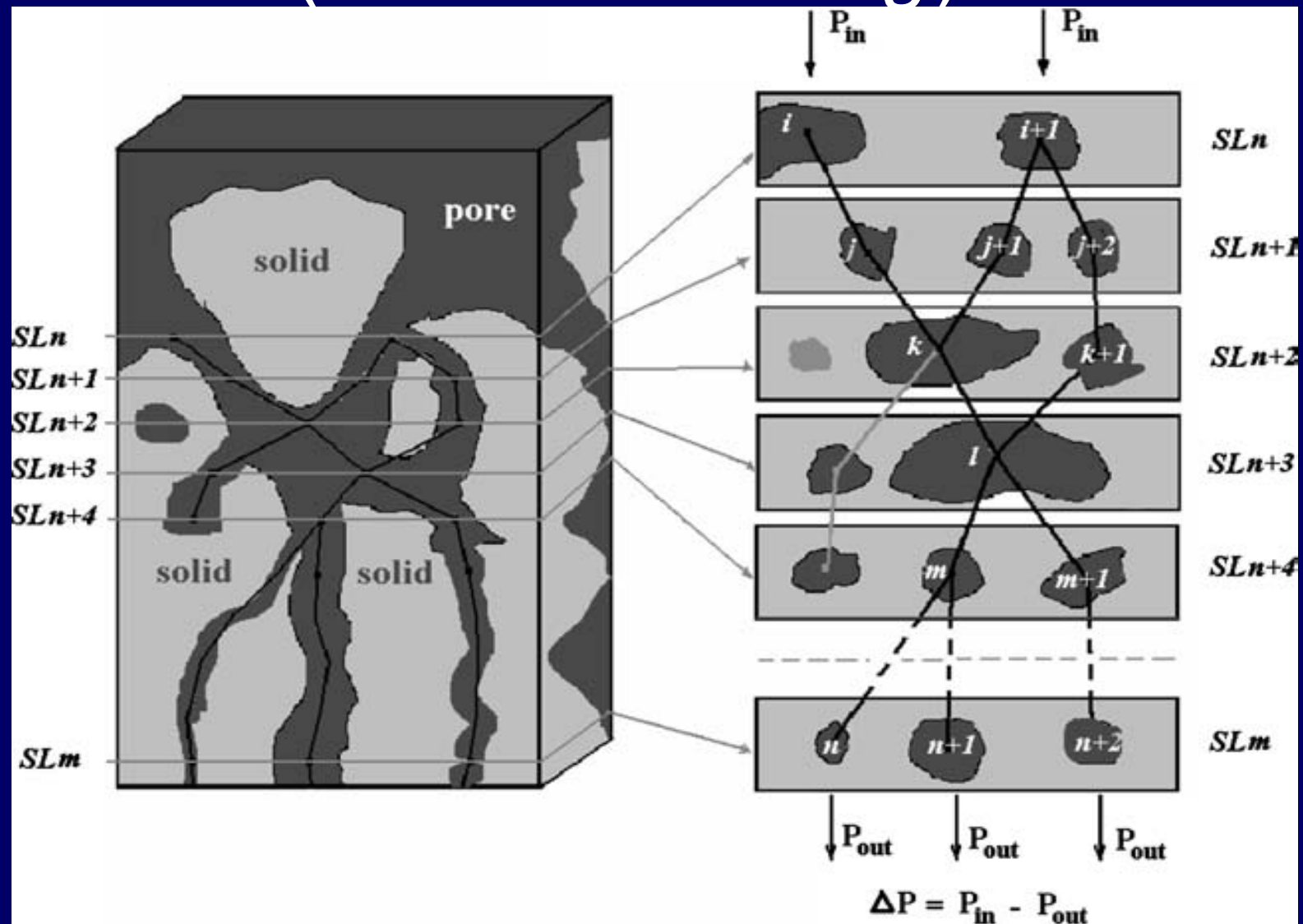


A - pov. okomita na kostur pore

Serijsko spajanje 2D slojeva + kriterij preklapanja (*serial sectioning with an overlap criteria*)



Serijsko spajanje 2D slojeva (*serial sectoning*)



Zaključak

1. Izazovi modeliranja razvoja strukture cem.
 - Više-veličinska analiza!
3 reda veličine: nm – mm
2. Dobivanje reprezentativne 3D strukture
 - Eksperimentalno (Micro(nano) x-ray CT)
 - Modelima hidratacije
 - Digitalizacija slike (rezolucija!, RVČ, brzina)
 - Kontinuum modeli rasta sfera

Zaključak

3. Analiza virtualne 3D strukture

- Direktni pristup
- Indirektni pristup

Zaključak

- Direktni pristup
 - Problem diskretizacije REV (100^3 um, rez. $1\mu\text{m}$)
 - Pore znatno manje od $1\mu\text{m}$ ($0.1\mu\text{m}$)
 - Zahtjevna računanja s velikim brojem elemenata!

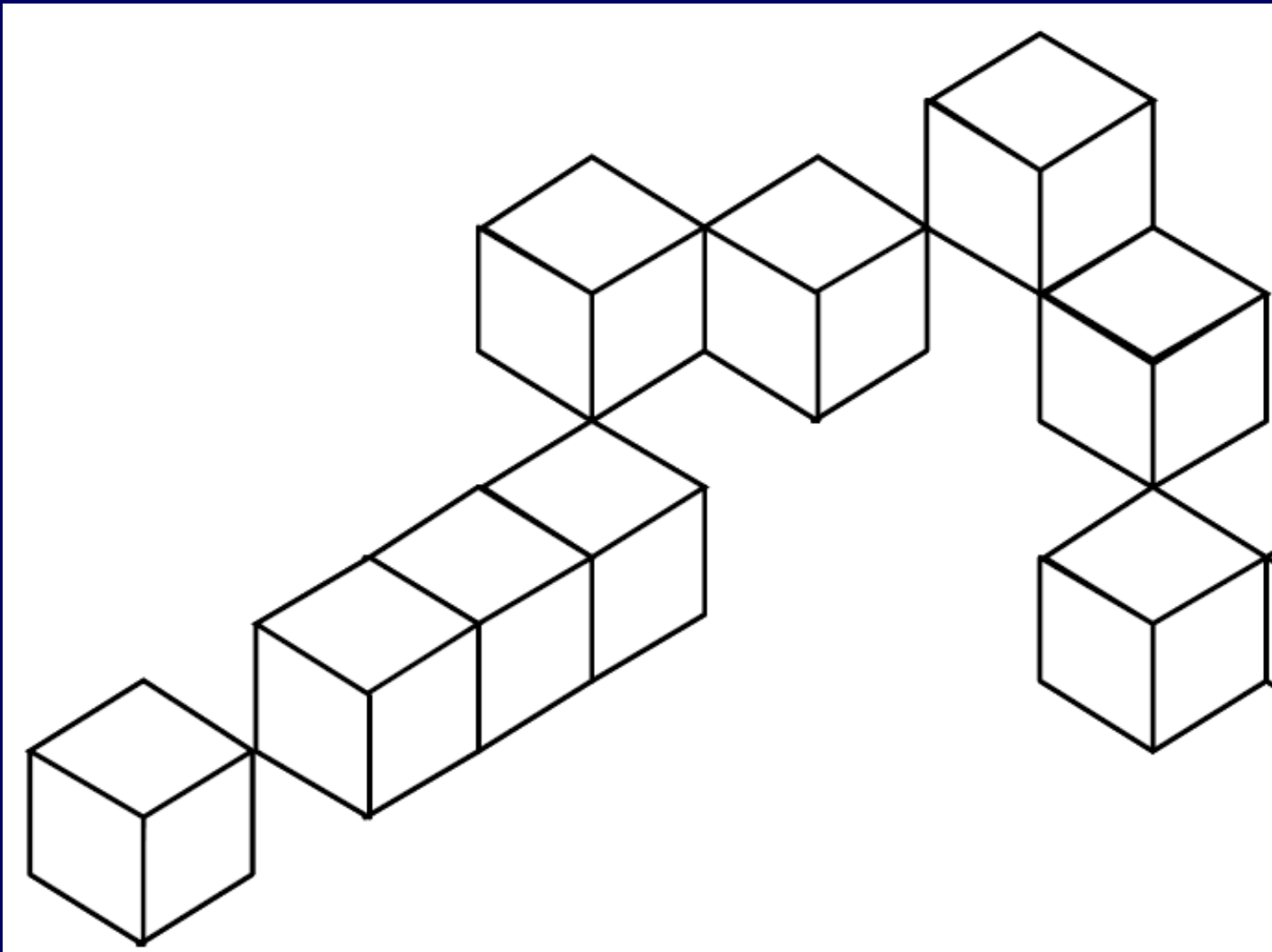
Zaključak

- Indirektni pristup
 - Pojednostavljuje složeni sustav pora
 - Ekvivalentna mreža cilindričnih pora
 - Zadržava polazna svojstva
 - Topologije (povezanost pora)
 - RVP
 - (3D elementi -> 1D elementi)
 - znatno manji broj elemenata mreže



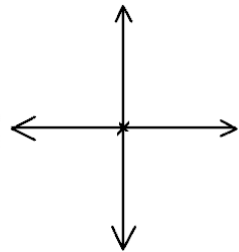
Hvala na pozornosti!

Povezanost s susjednim elementima (*voxelima*)

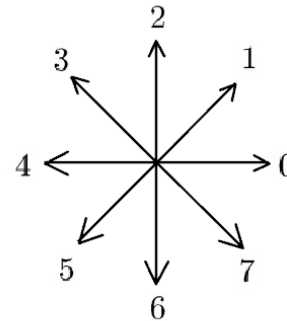


Povezanost s susjednim elementima (*voxelima*)

2D :

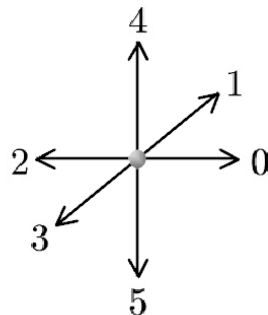


povezanost u 4 smjera
po bridovima

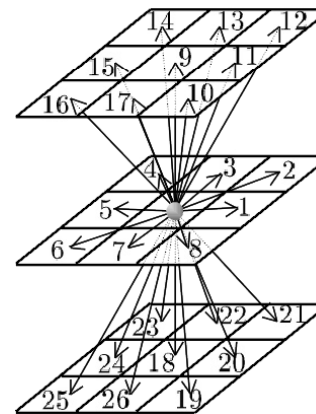


povezanost u 8 smjerova, bridovi i
kutevi

3D :



povezanost u 6 smjerova
po plohama



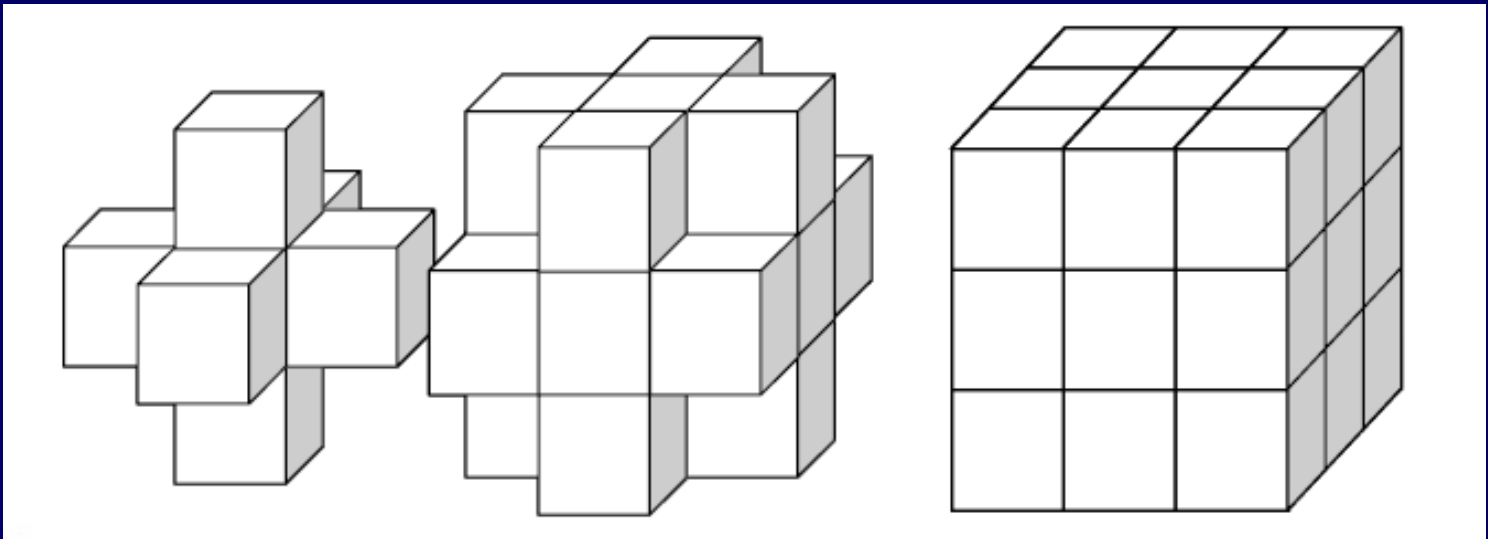
povezanost u 26 smjerova
po plohama, bridovima i kutevima

Povezanost s susjednim elementima (*voxelima*)

6

18

26



Izvještaj s radionice - Modeliranje i numeričke metode u kemijskom inženjerstvu

4. i 5. studenog 2010. u Vijećnici Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije, Marulićev trg 19 u Zagrebu, održana je *radionica* pod nazivom *Modeliranje i numeričke metode u kemijskom inženjerstvu*. Organizacijski odbor su činili prof. Zoran Gomzi (voditelj), prof. Želimir Kurtanjek, Gordana Matijašić, doc., Nenad Bolf, doc., Vanja Kosar, doc.

Korištenjem računala i uvođenjem mnogobrojnih numeričkih metoda modeliranje u kemijskom inženjerstvu postaje nezabolični dio svakog promišljanja znanstvenog i stručnog rada. Budući da se u gotovo svakom području kemijskog inženjerstva procesi mogu modelirati i simulirati, bilo je interesantno vidjeti kako tko od sudionika diše po tom pitanju te kojim znanjima i idejama raspolaže. Motivacija i cilj radionice bili su okupiti na jednom mjestu znanstvenike FKIT-a koji se bave ili se žele baviti modeliranjem i simuliranjem kemijskih procesa te da se uz predavanja i aktivnu raspravu sudionika prošire vidici u cilju sinergije znanja, savjetovanja kao i možebitne buduće interne suradnje. Na radionici je pored prof. Ž. Kurtanjeka sa Prehrambeno biotehnološkog fakulteta prisustvovalo još nekoliko zaposlenika s spomenutog fakulteta koji su nesebično predstavili svoj rad i iskustva u domeni modeliranja.

S obzirom da je po prvi put na FKITu održana radionica s ovakvom tematikom, interes i odaziv je bio zadovoljavajući. Sudionici su pokazali veliko zanimanje tijekom izlaganja te su pitanjima i primjerima iz svojeg iskustva uvelike doprinijeli uspjehu radionice.



Slika 1 – Iskusi dvojac u trenutku dijeljenja savjeta, profesori Ž. Kurtanjek i Z. Gomzi

Na prvom danu radionice održana su slijedeća predavanja iskusnih predavača iz područja modeliranja kemijskih procesa:

1. Uloga i važnost matematičkog modeliranja u kemijskom inženjerstvu, *Zoran Gomzi*
2. Procjena i identifikacija parametara u modelima, *Želimir Kurtanjek, Zoran Gomzi*
3. Numeričke metode, *Želimir Kurtanjek, Zoran Gomzi*
4. Primjena modela za vođenje procesa, *Nenad Bolf*

Predavanja su bila više preglednog i savjetodavnog tipa, uz pojašnjavanje mnogobrojnih suvremenih numeričkih metoda potkrijepljeno odgovarajućim primjerima iz kemijskog inženjerstva. Sudionici su aktivno raspravljali o važnosti i primjeni modeliranja, prednostima i manama određene metode modeliranja, kao i terminologiji iz područja modeliranja. Aktivno se raspravljalo o suvremenim programskim paketima, njihovoj dostupnosti i mogućnostima.

Drugi dan radionice bio je posvećen konkretnim primjerima modeliranja iz kemijskog inženjerstva.

Održana su slijedeća predavanja:

1. *Željka Ujević Andrijić*: "Primjer modeliranja nestacionarnog prijenosa topline i procjena parametara"
2. *Tomislav Bolanča*: "Modeliranje gradijentne elucije u ionskoj kromatografiji"
3. *Sanja Martinez*: "Računalno modeliranje u korozijskom inženjerstvu"
4. *Anita Šalić i Ana Tušek*: "Modeliranje biotransformacija u mikoreaktorima"
5. *Neven Ukrainczyk*: "3D modeliranje prijenosa tvari u cementnim (poroznim) materijalima"
6. *Gordana Matijašić*: "Populacijske bilance – alat u kemijskom inženjerstvu"
7. *Ante Agić*: "Numeričko modeliranje na višestrukoj skali"
8. *Igor Dejanović*: "Modeliranje kemijskih procesa uz pomoć procesnih simulatora"



Slika 2 – N. Ukrainczyk predstavlja 3D modeliranje prijenosa tvari u cementnim materijalima

Bilo je zanimljivo i nadasve korisno čuti različite pristupe modeliranju u ovisnosti o specifičnosti problema s kojima se kemijski inženjer može suočiti. Predstavljeno je korištenje različitih sofisticiranih i robusnih programskih paketa za razvoj modela i simuliranje specifičnih pojava i procesa, kao i velike mogućnosti sudionicima već poznatih programskih paketa i procesnih simulatora. Predstavljeni su kako fundamentalni načini razvoja modela tako i razvoji modela procesa metodama umjetne inteligencije.

Na završnoj raspravi na osnovi raznolikog spektra primjene modeliranja zaključeno je kako je modeliranje u kemijskom inženjerstvu, zbog same prirode kemijskih procesa, neizbježno i da mu se kako u nastavi tako i na stručnim/znanstvenim okupljanjima treba pridavati velika važnost. Razmotrena je i mogućnost održavanja radionice s edukacijskim karakterom, tj. da se interaktivno putem računala sudionicima predstavi rad u određenom softverskom paketu. Ono što je sigurno je da se modeliranje i simuliranje procesa dosta koristi na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije i da je okupljanje ovakvog tipa jedan od jednostavnih načina i pokazatelja kako se uz kreativnu razmjenu mišljenja i savjete mogu otkloniti nepoznanice i poboljšati trenutna znanja. Radionica je u cijelosti ocjenjena vrlo korisnom i nedvojbeno je da se radujemo slijedećem susretu.



Slika 3 – T. Bolanča predstavlja modeliranje gradijentne elucije u ionskoj kromatografiji

U ime organizacijskog odbora:

Željka Ujević Andrijić