

УДК 539.3

Ю.Ф. САБИРОВА, студент, гр. ЭОСм-1-23 (КГЭУ)

МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ

Аннотация. В настоящее время пористые среды представляют большой интерес для изучения. Особенно малоизученной областью является моделирование пористого материала. В данной статье представлены способы моделирования пористых сред, с помощью проникновения несмачивающей жидкости в серию трехмерных волокнистых микроструктур. Также рассматривается алгоритм создания виртуальной трехмерной слоистой волокнистой среды.

Ключевые слова: поры, волокна, моделирование, материал, пористая среда.

Пористый материал играет важную роль во многих инновационных процессах энергетики и энергосбережения. К ним относятся системы сохранения тепловой энергии, системы испарения, катализ, молекулярное разделение, а также пористый материал нашел широкое применение в новых технологиях для энергетики и здравоохранения [1]. Пористая среда представляет собой твердую матрицу со связанными между собой пустотами. Примерами природных пористых сред являются пляжный песок, ржаной хлеб, дерево и легкие человека. К искусственным пористым средам относятся керамика, композитные материалы и высокопористые пенопласты [2].

Существует множество различных пористых материалов, таких как металл: медь, никель и алюминий, или углерод: графит и расширенный графит. Ячеистой структуре характерны такие общие свойства, как жесткость, прочность, общий вес и тепловые характеристики, также они обладают огнестойкостью и химической стойкостью [3]. В принципе, можно создать практически любую функцию в пористом материале, сочетая контроль структуры и состава на атомарном уровне с адекватным пониманием взаимосвязей структура-свойство. Но ни один класс пористых материалов не является идеальным для всех целей. Ввиду этого на практике возникают серьезные проблемы, как при достижении структурного контроля в твердотельных материалах, так и при прогнозировании функционирования на основе структуры, даже для материалов, структура которых хорошо зарекомендовала себя.

Чтобы оказывать влияние на реальные области применения, пористые материалы должны быть масштабируемыми и удовлетворять множеству функциональных критериев, таких как долговременная

стабильность, селективность, кинетика адсорбции и технологичность, и все это при разумных затратах. Это представляет собой сложную задачу проектирования, и это требует от нас умения управлять структурой и понимать многочисленные взаимосвязи между структурой и свойствами на детальном уровне [1].

В работе [4] исследование направлено на изучение характеристики распределения пор по размерам и моделировании жидкостной порометрии в трехмерной микроструктуре волокнистых материалов, полученных с помощью метода визуализации срезов. Благодаря недавнему прогрессу в области методов визуализации теперь стало возможным получать трехмерные изображения микроструктуры пористого материала с относительно хорошим разрешением. Такие изображения могут быть использованы для характеристики размера пор и связанных с ними свойств пористых материалов.

В этой технике материал, погруженный в полимерную смолу, многократно разрезается на части и наносится изображение. Эти двумерные изображения поперечного сечения затем объединяются для создания трехмерного изображения. В отличие от обычных трудоемких методов последовательного секционирования, последовательное секционирование в цифровом объемном изображении полностью автоматизировано. Разрешение изображений, полученных с помощью цифрового объемного изображения, колеблется от 0,48 до 4,48 мкм/пиксель, а поле зрения составляет от 0,45 до 4,4 мм.

Для демонстрации возможностей разработанных методик используются два различных гидропереплетенных нетканого материала, изготовленных из нейлоновых и полиэфирных волокон со средним диаметром волокон 14,3 и 12,8 мкм соответственно. Исследуемые материалы изготовлены по двум различным рецептурам. Волокна, использованные для изготовления этих тканей, имели длину 3 см, а их полотно было приготовлено с помощью процесса чесания. Основным механизмом гидропутывания является реакция рыхлых волокон на неоднородное пространственное поле давления, создаваемое последовательными рядами плотно расположенных высокоскоростных струй воды. Гидропереплетенные нетканые материалы, использованные в этом исследовании, имели объемные доли твердого вещества 11% (нейлон) и 15% (полиэстер).

Результаты исследования показали, что функция плотности вероятности геометрического диаметра пор может быть аппроксимирована гамма-распределением. Масштабный параметр k гамма-распределения, зависящий от производственных параметров материала, был рассчитан для нетканых материалов с высокой степенью запутанности, рассмотренных в

данном исследовании. Поровое пространство связность изучалась с использованием графиков функций доступа. Для волокнистого материала количественно показано, что объем пор, доступный для проникающей жидкости, при любом заданном давлении ниже фактически доступного объема пор из-за так называемого эффекта чернильной бутылки.

Используя график функции доступа, показано, что увеличение толщины волокнистого материала при сохранении постоянной плотности и диаметра волокна усиливает эффект бутылочки с чернилами. Также используя график функций доступа для слоистых волокнистых материалов, впервые продемонстрировали, что графики функций доступа можно использовать для определения местоположения более плотного слоя внутри толщины материала.

В исследовании [5] предлагается геометрическая модель для моделирования трехмерных слоистых нетканых волокнистых полотен. Волокна в полотне моделируются прямыми цилиндрами, соединенными между собой «узлами». Для создания трехмерного волокнистого полотна горизонтальные волокна последовательно укладываются на плоскую формующую поверхность. Другими словами, когда генерируется новое горизонтальное волокно, и полотно, и новое волокно проецируются на формующую поверхность (плоскость при $z=0$). Из спроецированных волокон создается подмножество полотна, которое пересекает проекцию нового волокна. Это подмножество будет использоваться вместо полной сети, чтобы ускорить вычисления. Если под новым слоем нет волокон, он будет помещен непосредственно на формующую поверхность, и процедура повторится. Однако, если новое волокно, скорее всего, соприкоснется с другими волокнами полотна, следующим шагом будет опускание нового волокна на полотно. Первый шаг при этом требует определения наименьшего вертикального перемещения, при котором новое волокно соприкоснется с полотном.

Результаты показали, что при заданном базовом весе и расчетной коробке уменьшение длины волокна приводит к увеличению объемной доли твердого вещества материала. Это связано с тем, что короткие волокна могут более эффективно упаковываться в коробку заданного размера. Воздухопроницаемость этих сред моделируется численно и сравнивается с хорошо известными экспериментальными и аналитическими исследованиями в литературе. Было показано, что проницаемость снижается при увеличении объемной доли твердого вещества материала, когда диаметр волокна поддерживается постоянным.

Также полученные расчеты проницаемости показали полное соответствие с предсказаниями эмпирического уравнения Дэвиса и аналитической модели Шпильмана и Горена. Это указывает на то, что

рассмотренная в этой работе длина волокна не оказывает существенного влияния на проницаемость материалов до тех пор, пока объемная доля твердого вещества поддерживается постоянной.

Учитывая вышеизложенные методы, можно сделать вывод, что при выборе подходящего пористого материала для различных применений необходимо изучить основные параметры пористого волокнистого материала (объемная доля твердого вещества, толщина и диаметр волокна) в их эксплуатационных характеристиках.

Моделирование пористых сред также сталкивается с некоторыми проблемами, такими как точность представления реальных условий и вычислительная сложность. Однако, с развитием вычислительных технологий, исследователи стремятся улучшить эти методы.

В заключение, моделирование пористых сред играет ключевую роль в понимании и оптимизации материалов. Современные методы позволяют глубже проникнуть в структуру материи, что открывает новые горизонты для науки и технологии.

Список литературы:

1. Slater A. G., Cooper A. I. Function-led design of new porous materials //Science. – 2015. – Т. 348. – №. 6238. – С. ааа8075.
2. Ali H. M. et al. A critical review on heat transfer augmentation of phase change materials embedded with porous materials/foams //International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2019. – Т. 135. – С. 649-673.
3. Kavšek M. et al. Melamine-formaldehyde rigid foams–Manufacturing and their thermal insulation properties //Journal of Cellular Plastics. – 2022. – Т. 58. – №. 1. – С. 175-193.
4. Jaganathan S., Tafreshi H. V., Pourdeyhimi B. Modeling liquid porosimetry in modeled and imaged 3-D fibrous microstructures //Journal of colloid and interface science. – 2008. – Т. 326. – №. 1. – С. 166-175.
5. Wang Q. et al. Simulating through-plane permeability of fibrous materials with different fiber lengths //Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2007. – Т. 15. – №. 8. – С. 855.

Информация об авторах:

Сабирова Юлия Фанисовна, студент гр. ЭОСм-1-23, КГЭУ, 420000, г. Казань, ул. Яруллина, д. 6, julia.sabirova01@list.ru