

Антонов И.В., аспирант; Солодовских М.А., студент;
Кадушников Р.М., зав. лаб., канд. физ.-мат. наук;
Гроховский В.И., доц., канд. техн. наук

ОЦЕНКА ПРОНИЦАЕМОСТИ ГРАНУЛЯРНЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ ДИСКРЕТНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Проницаемость и емкость объема различных пористых сред часто являются важнейшими характеристиками, определяющими их свойства (мембраны, абсорбенты, почвы, горные и осадочные породы).

Проницаемость материалов определяется, главным образом, структурой их порового пространства. В качестве определяющих геометрических характеристик поровой структуры можно выделить величину пористости, распределение пор по размерам, топологию (характер связности) поровой структуры и длину поровых каналов.

Исследование свойств пористых материалов может проводиться как с целью получения характеристик реального объекта, так и для предсказания свойств новых материалов в процессе их проектирования. Проведение натуральных экспериментов для определения взаимосвязи свойств объектов с параметрами пористости является достаточно затратным, особенно при создании новых материалов.

В комплексном подходе к решению задачи определения свойств порового пространства сред (в частности, проницаемости для жидкости или газа) самыми большими возможностями обладают компьютерные методы моделирования и трехмерной реконструкции структуры изучаемого объекта.

Существующие подходы к моделированию структуры обладают различными возможностями и могут использоваться на разных масштабных уровнях. Один из подходов – это представление структуры в виде воксельных моделей (фактически, трехмерных цифровых изображений), например, при трехмерной реконструкции с помощью методов томографии. В таком случае могут эффективно применяться методы анализа проницаемости поровой структуры с использованием теории динамики жидкости и газов. Подобный подход к моделированию дает хорошие результаты в микромасштабе, но его использование затруднено на мезо- и макроуровне в силу больших требований к ресурсам памяти и компьютерных мощностей для обработки трехмерных изображений. Моделирование свойств сред методом “конечных элементов” позволяет проводить анализ на макроуровне, но в то же время в таком подходе теряется информация о микроструктуре объекта анализа.

Хорошей альтернативой двум описанным методам является метод дискретных элементов, в котором структура материала представляется набором отдельных элементов (модельных единиц), например, шаров. Данный метод позволяет строить модели внутренней структуры материалов на мезоуровне, т.е. он занимает положение между микро- и макромасштабным описанием свойств объекта. Метод дискретных элементов может характеризовать структуру со степенью точности, достаточной для представления процессов на микроуровне

и в то же время моделируемый объем может быть достаточным для предсказания макросвойств объекта.

Авторами предлагается подход описания перколяционных свойств среды на мезоуровне. В данной работе дается простой метод оценки проницаемости модельной структуры на основе модели уравнения Кармана-Козени для коэффициента проницаемости:

$$k = \frac{\phi^3}{2\tau(1-\phi)^2 a_v^2},$$

где ϕ - относительная пористость среды; τ - извилистость поровых каналов; a_v - удельная внутренняя поверхность, равная отношению смоченной внутренней поверхности к объему твердой фазы.

Микроструктура материала моделируется с помощью плотной упаковки шаров разных размеров, причем кристаллические материалы или спеченные керамики могут представляться системой перекрывающихся шаров.

В случае свободных насыпок пористая структура представляет собой сплошную сеть взаимосвязанных пор – фактически одну пору со сложной топологией, поэтому сложно судить о том, что представляет собой поровый канал в такой ситуации. В данном случае под поровым каналом мы понимали путь, по которому проходят малые тестовые частицы, бросаемые сверху, сквозь упаковку шаров до ее основания. Далее, рассчитывая длину траектории частиц, можно определить извилистость каналов как квадрат отношения этой длины к длине прямого участка в направлении действия силы (в нашем случае это фактически высота модельной структуры). Производилось бросание 500 таких частиц в случайные точки и определялась средняя величина извилистости. Измеряя геометрические параметры упаковки, определялись остальные коэффициенты уравнения и непосредственно коэффициент проницаемости.

Эксперименты по определению коэффициента k проводились на упаковках из 2-3 млн. шаров с размерами фракций 1, 10 и 100. Рассчитанные для структур значения коэффициента проницаемости сравнивались с результатами, полученными для горных пород с использованием уравнения Кармана-Козени, и выявилось их хорошее согласование.

Преимущество предложенной модели заключается в том, что структура рассматривается не в виде набора шаров одного размера, как обычно, а строятся упаковки частиц с заданными параметрами распределения размеров, что приближает модель структуры к реальным образованиям. Соответственно расширяется возможность использования модели Кармана-Козени при исследовании свойств проницаемости реальных структур.

Работа выполнена при поддержке программы НОЦ «Перспективные материалы»