

**ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ
ΣΕ ΠΟΛΥΠΛΟΚΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ**

Ι.Π.Τ.Α
Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. Δημόκριτος

9 Μαρτίου 2009

Τομείς ενδιαφέροντος της ομάδας
Υπολογιστικές μέθοδοι - λογισμικό

Χαρακτηρισμός δομής σύνθετων υλικών

Ψηφιακή ανακατασκευή πολύπλοκων συστημάτων

Μελέτη διεργασιών ισορροπίας (κυρίως θερμοδυναμική διεπιφανειών)

Density Functional Theory (DFT)

Simulated Annealing (SA)

Monte Carlo στο Μεγάλο Κανονικό Στατιστικό Σύνολο (GCMC)

Μελέτη δυναμικών διεργασιών (μεταφορά μάζας και ορμής, αγωγιμότητα)

Αριθμητική επίλυση των διαφορικών εξισώσεων

Τυχαίος περίπατος

Μοριακή δυναμική (MD)

Μέθοδος Lattice-Boltzmann (LBM)

Τομείς ενδιαφέροντος της ομάδας
Υπολογιστικές μέθοδοι - λογισμικό

Χαρακτηρισμός δομής σύνθετων υλικών

Ψηφιακή ανακατασκευή πολύπλοκων συστημάτων

Μελέτη διεργασιών ισορροπίας (κυρίως θερμοδυναμική διεπιφανειών)

Density Functional Theory (DFT)

Simulated Annealing (SA)

Monte Carlo στο Μεγάλο Κανονικό Στατιστικό Σύνολο (GCMC)

Μελέτη δυναμικών διεργασιών (μεταφορά μάζας και ορμής, αγωγιμότητα)

Αριθμητική επίλυση των διαφορικών εξισώσεων

Τυχαίος περίπατος

Μοριακή δυναμική (MD)

Μέθοδος Lattice-Boltzmann (LBM)

Ψηφιακή ανακατασκευή πολύπλοκων συστημάτων

- *Στοχαστική ανακατασκευή*
- *Ανακατασκευή με προσομοίωση της δημιουργίας του σύνθετου συστήματος*
- *Ανακατασκευή σε ατομική – μοριακή κλίμακα*

Ψηφιακή ανακατασκευή πολύπλοκων συστημάτων

- *Στοχαστική ανακατασκευή*
- *Ανακατασκευή με προσομοίωση της δημιουργίας του σύνθετου συστήματος*
- *Ανακατασκευή σε ατομική – μοριακή κλίμακα*

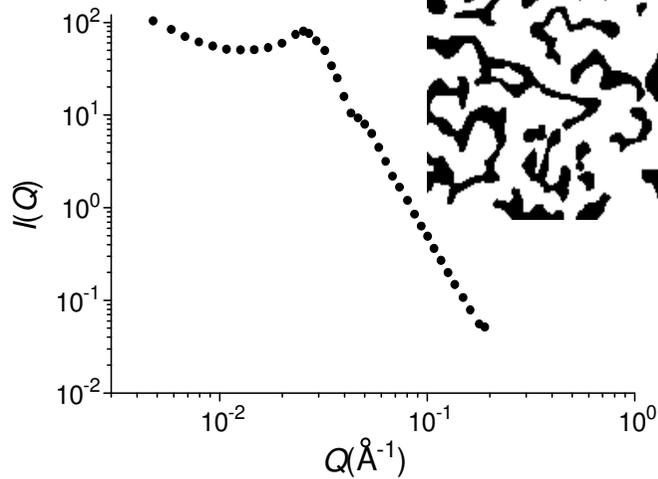
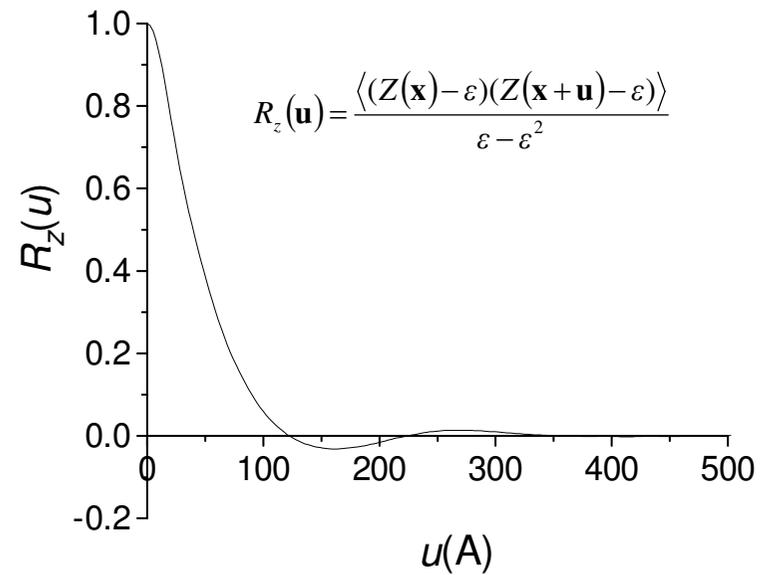
Στοχαστική ανακατασκευή Προσδιορισμός των στατιστικών ιδιοτήτων

Νετρόνια
ή
Ακτίνες-Χ

Μικροσκοπία

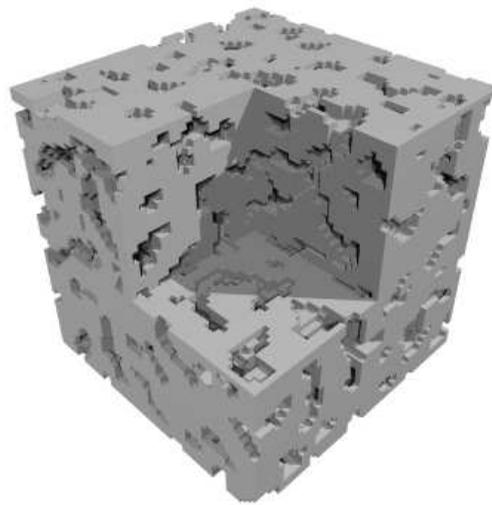
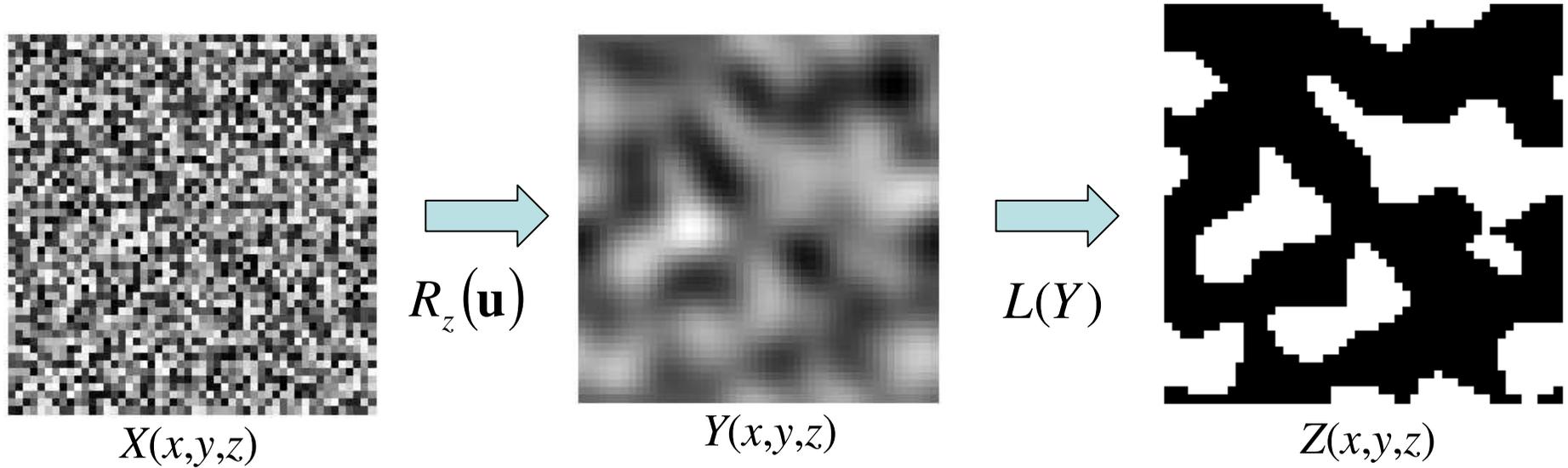


$Z(\mathbf{x})$

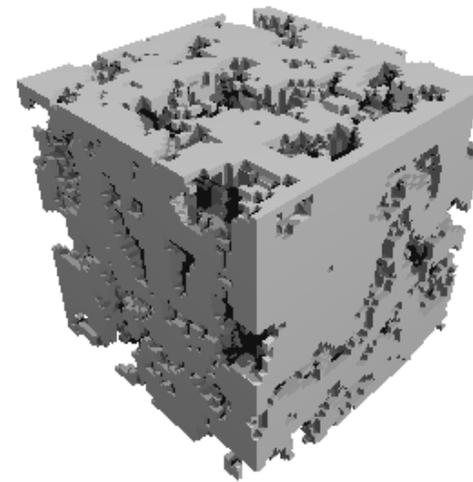


$$R_z(u) = \frac{1}{2\pi^2 V} \int_0^{+\infty} Q^2 I(Q) \frac{\sin Qu}{Qu} dQ$$

Στοχαστική ανακατασκευή



Vycor

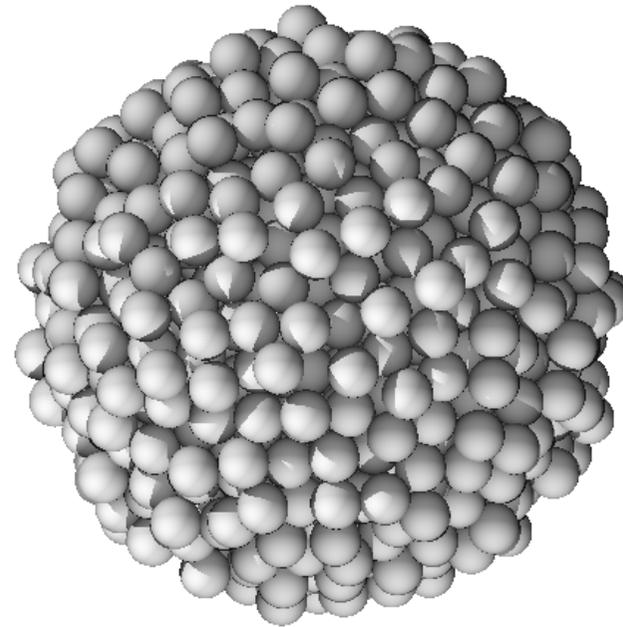


Κιρωλία (CaCO₃)

Ψηφιακή ανακατασκευή πολύπλοκων συστημάτων

- *Στοχαστική ανακατασκευή*
- *Ανακατασκευή με προσομοίωση της δημιουργίας του σύνθετου συστήματος*
- *Ανακατασκευή σε ατομική – μοριακή κλίμακα*

**Ανακατασκευή με
προσομοίωση διεργασίας δημιουργίας**

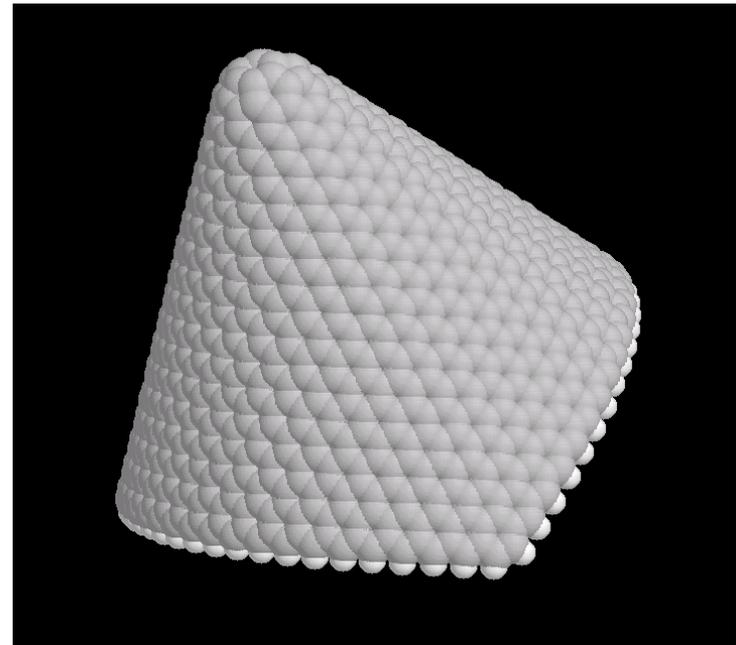
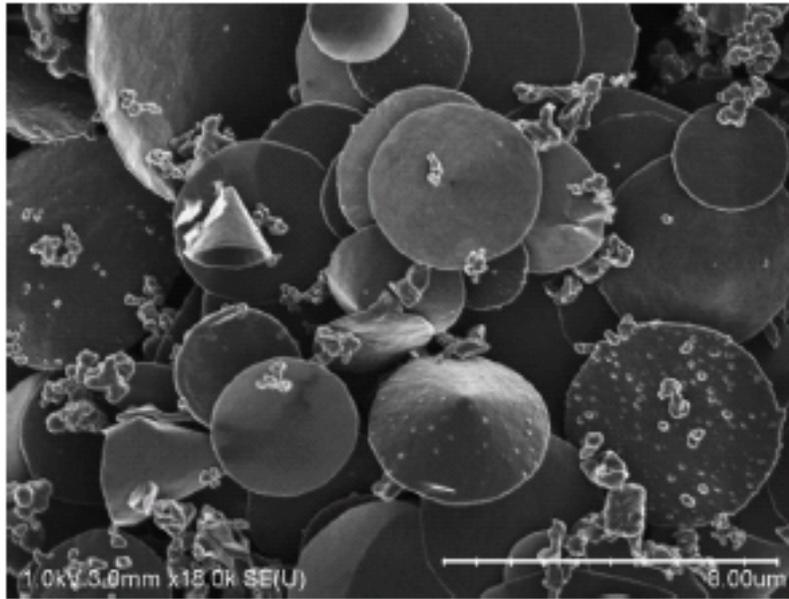


Πυριτία (SiO₂)

Ψηφιακή ανακατασκευή πολύπλοκων συστημάτων

- *Στοχαστική ανακατασκευή*
- *Ανακατασκευή με προσομοίωση της δημιουργίας του σύνθετου συστήματος*
- *Ανακατασκευή σε ατομική – μοριακή κλίμακα*

Ανακατασκευή σε ατομική – μοριακή κλίμακα



Τομείς ενδιαφέροντος της ομάδας
Υπολογιστικές μέθοδοι - λογισμικό

Χαρακτηρισμός δομής σύνθετων υλικών

Ψηφιακή ανακατασκευή πολύπλοκων συστημάτων

Μελέτη διεργασιών ισορροπίας (κυρίως θερμοδυναμική διεπιφανειών)

Density Functional Theory (DFT)

Simulated Annealing (SA)

Monte Carlo στο Μεγάλο Κανονικό Στατιστικό Σύνολο (GCMC)

Μελέτη δυναμικών διεργασιών (μεταφορά μάζας και ορμής, αγωγιμότητα)

Αριθμητική επίλυση των διαφορικών εξισώσεων

Τυχαίος περίπατος

Μοριακή δυναμική (MD)

Μέθοδος Lattice-Boltzmann (LBM)

Τομείς ενδιαφέροντος της ομάδας
Υπολογιστικές μέθοδοι - λογισμικό

Χαρακτηρισμός δομής σύνθετων υλικών

Ψηφιακή ανακατασκευή πολύπλοκων συστημάτων

Μελέτη διεργασιών ισορροπίας (κυρίως θερμοδυναμική διεπιφανειών)

Density Functional Theory (DFT)

Simulated Annealing (SA)

Monte Carlo στο Μεγάλο Κανονικό Στατιστικό Σύνολο (GCMC)

Μελέτη δυναμικών διεργασιών (μεταφορά μάζας και ορμής, αγωγιμότητα)

Αριθμητική επίλυση των διαφορικών εξισώσεων

Τυχαίος περίπατος

Μοριακή δυναμική (MD)

Μέθοδος Lattice-Boltzmann (LBM)

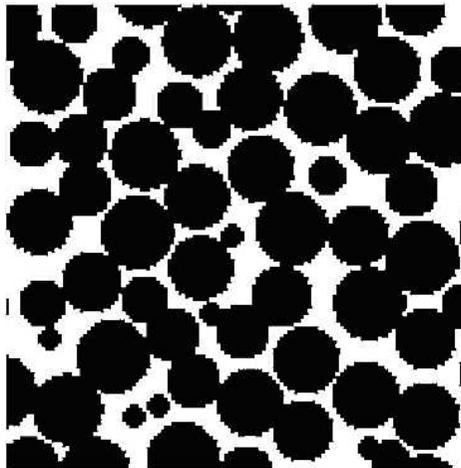
Προσομοίωση προσρόφησης (DFT)

Ελεύθερη ενέργεια συναρτήσει της πυκνότητας $F(\{\rho_i\})$

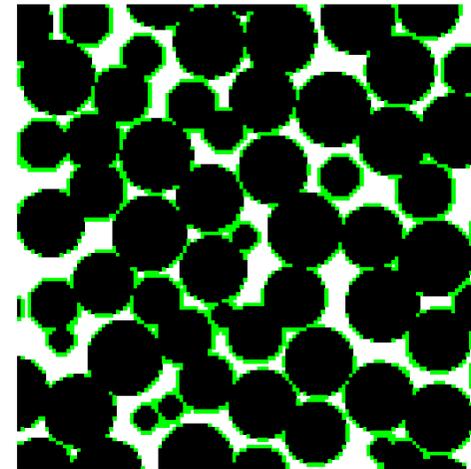
$$F(\{\rho_i\}) = \frac{1}{kT} \sum_i [\rho_i \ln \rho_i + (\eta_i - \rho_i) \ln(\eta_i - \rho_i)] - w_{ff} \sum_{\langle ij \rangle} \rho_i \rho_j - w_{mf} \sum_{\langle ij \rangle} [\rho_i(1 - \eta_j) + \rho_j(1 - \eta_i)]$$

Μεγάλο δυναμικό

$$\Omega(\{\rho_i\}) = F(\{\rho_i\}) - \mu \sum_i \rho_i$$

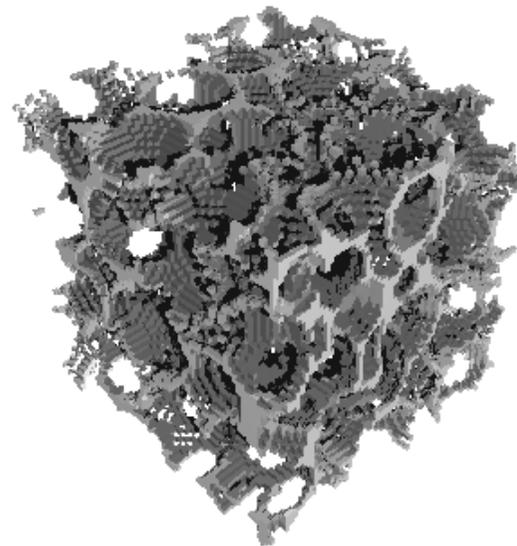
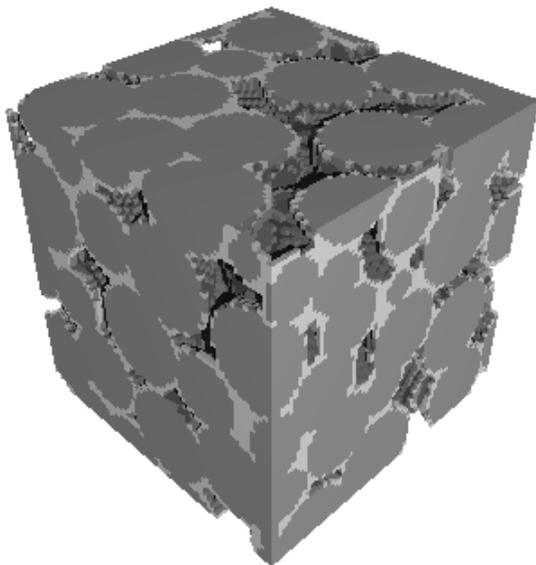


Ελαχιστοποίηση ως προς το ρ_i

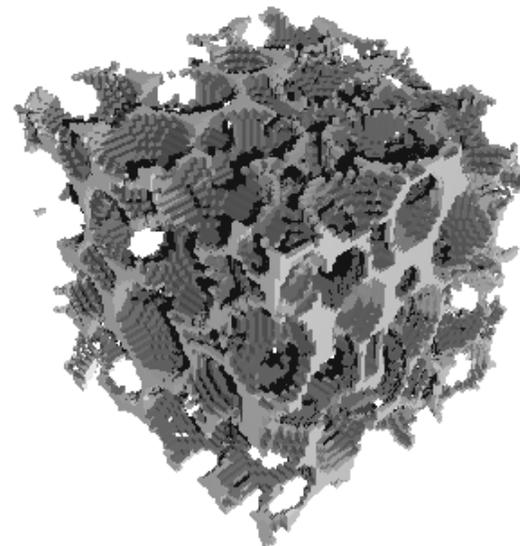
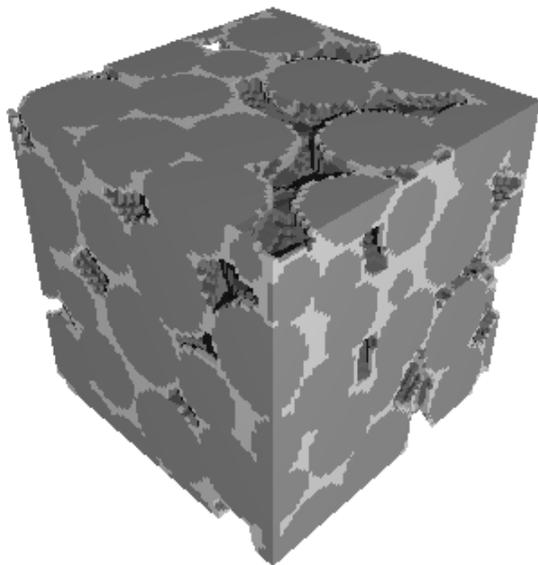


Προσρόφηση C_6H_6/C_6D_6 σε μεσοπορώδη SiO_2

$V_s=0.2$



$V_s=0.5$



Τομείς ενδιαφέροντος της ομάδας
Υπολογιστικές μέθοδοι - λογισμικό

Χαρακτηρισμός δομής σύνθετων υλικών

Ψηφιακή ανακατασκευή πολύπλοκων συστημάτων

Μελέτη διεργασιών ισορροπίας (κυρίως θερμοδυναμική διεπιφανειών)

Density Functional Theory (DFT)

Simulated Annealing (SA)

Monte Carlo στο Μεγάλο Κανονικό Στατιστικό Σύνολο (GCMC)

Μελέτη δυναμικών διεργασιών (μεταφορά μάζας και ορμής, αγωγιμότητα)

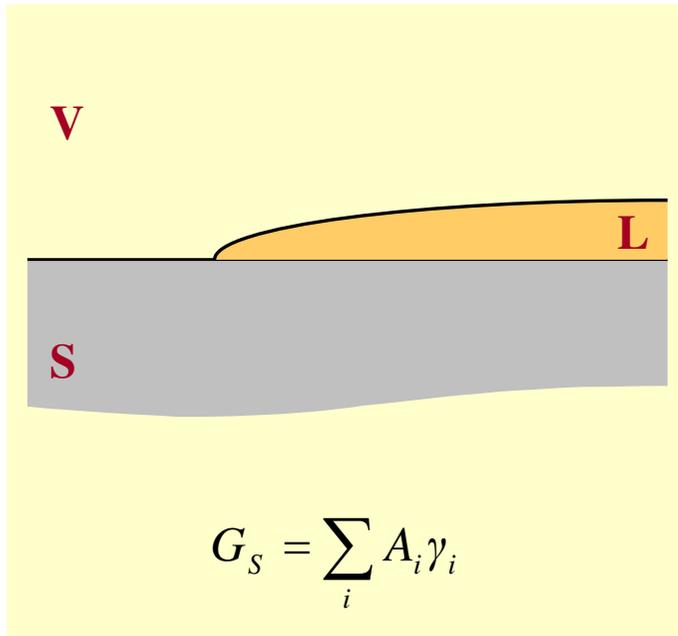
Αριθμητική επίλυση των διαφορικών εξισώσεων

Τυχαίος περίπατος

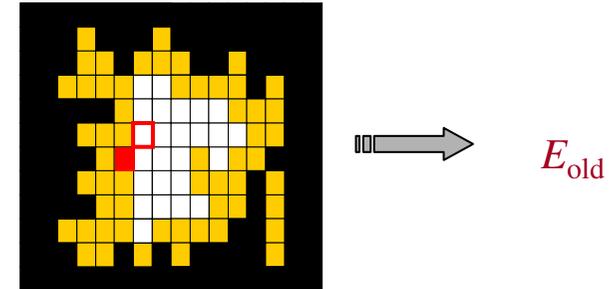
Μοριακή δυναμική (MD)

Μέθοδος Lattice-Boltzmann (LBM)

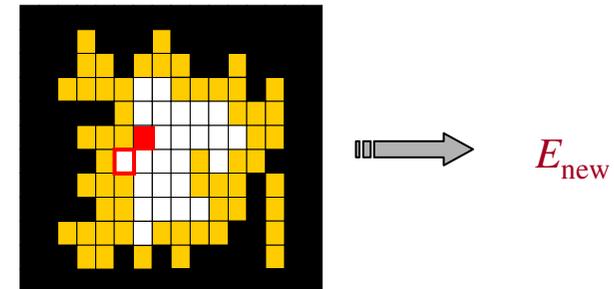
Κατανομή διαφορετικών φάσεων στην πορώδη δομή Ελαχιστοποίηση της διεπιφανειακής ελεύθερης ενέργειας



- Επιλογή αρχικής κατάστασης



- Αλλαγή φάσης δύο τυχαίων θέσεων

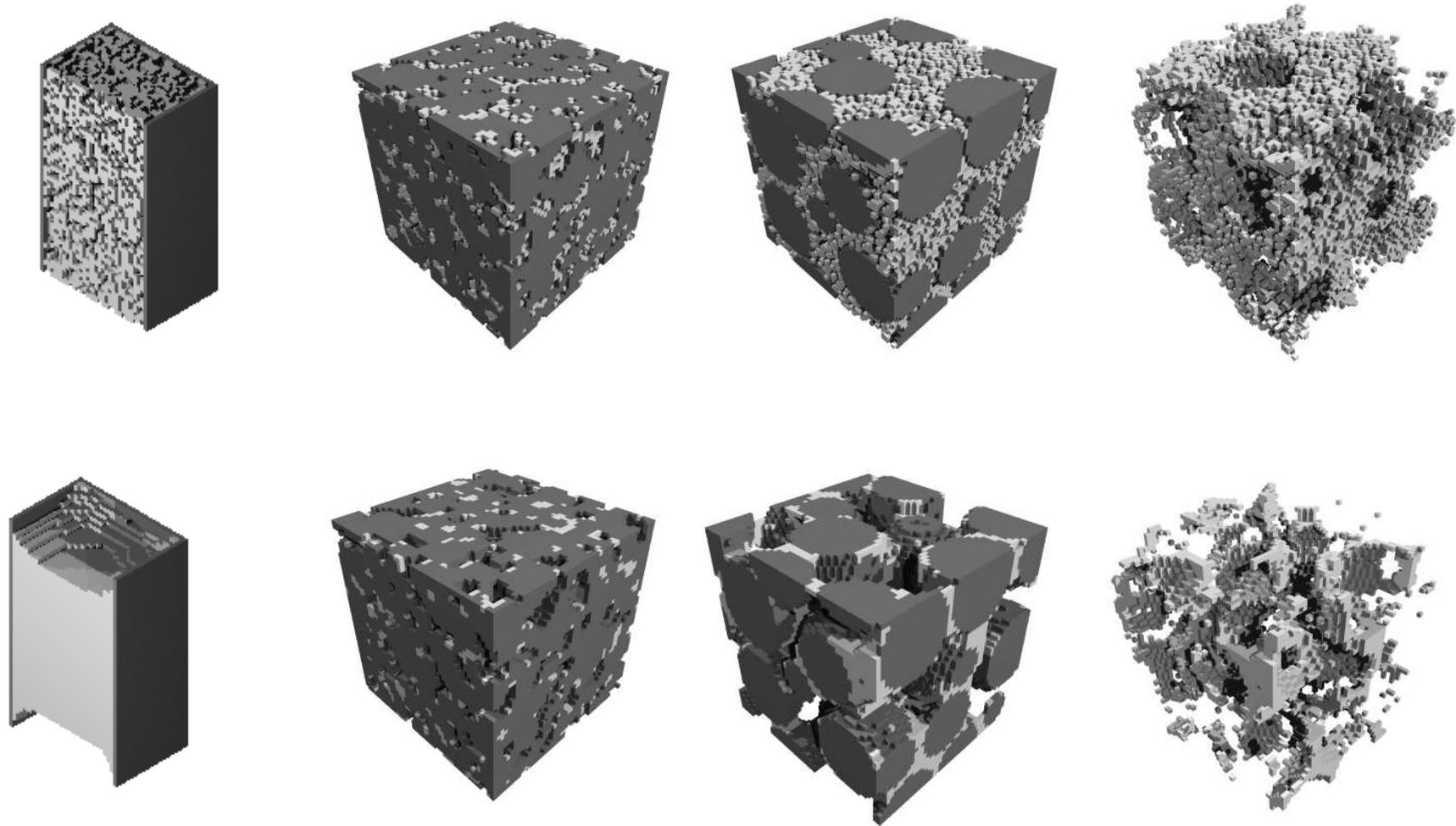


- αν $\Delta E \leq 0$, η νέα διαμόρφωση είναι αποδεκτή

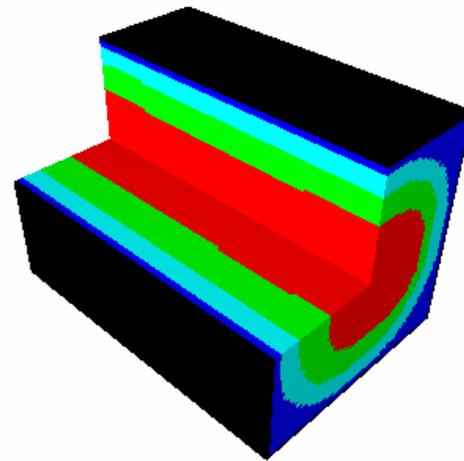
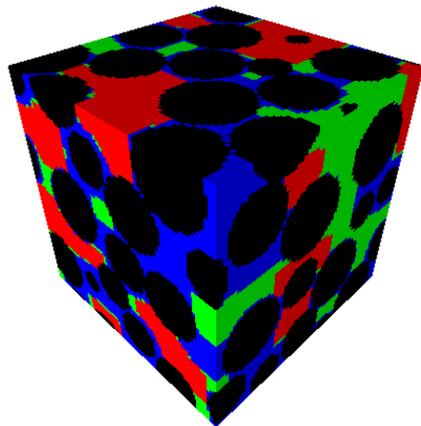
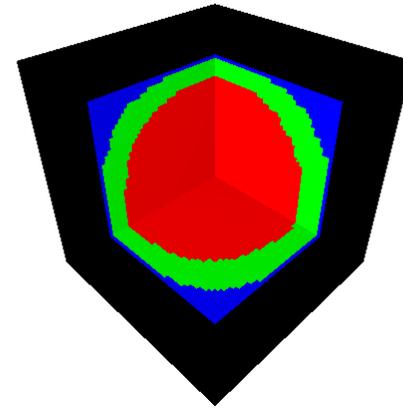
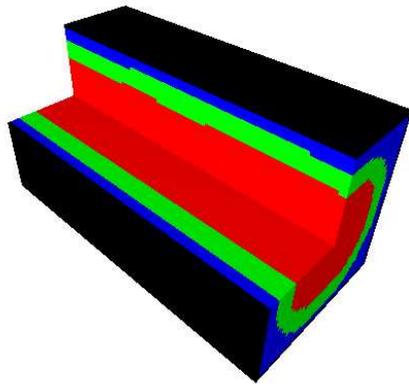
- αν $\Delta E > 0$, η νέα διαμόρφωση είναι αποδεκτή με πιθανότητα

$$P(\Delta E) = \exp\left(-\frac{\Delta E}{E_{ref}}\right)$$

Τρισδιάστατες εικόνες κατά τον προσδιορισμό της χωρικής κατανομής συμπυκνώματος – ατμού με SA



Χωρική κατανομή 3 φάσεων



Τομείς ενδιαφέροντος της ομάδας
Υπολογιστικές μέθοδοι - λογισμικό

Χαρακτηρισμός δομής σύνθετων υλικών

Ψηφιακή ανακατασκευή πολύπλοκων συστημάτων

Μελέτη διεργασιών ισορροπίας (κυρίως θερμοδυναμική διεπιφανειών)

Density Functional Theory (DFT)

Simulated Annealing (SA)

Monte Carlo στο Μεγάλο Κανονικό Στατιστικό Σύνολο (GCMC)

Μελέτη δυναμικών διεργασιών (μεταφορά μάζας και ορμής, αγωγιμότητα)

Αριθμητική επίλυση των διαφορικών εξισώσεων

Τυχαίος περίπατος

Μοριακή δυναμική (MD)

Μέθοδος Lattice-Boltzmann (LBM)

Προσομοίωση GCMC

Δημιουργία

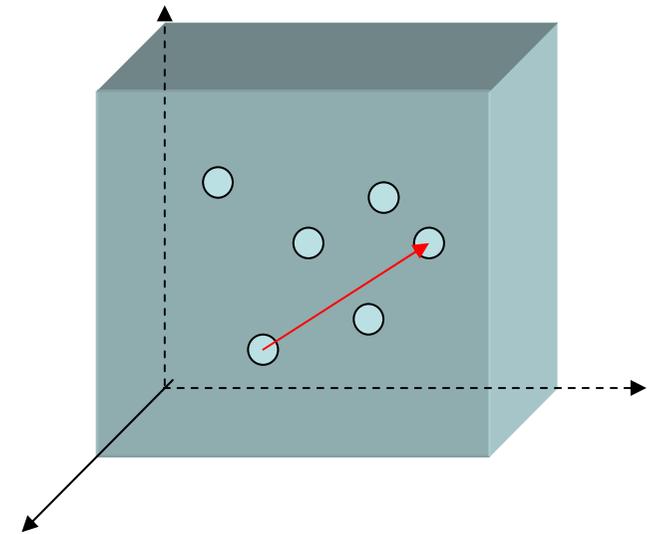
$$\rho_{m \rightarrow n} = \min\{1, \exp(-\Delta E_{m \rightarrow n} / kT + \ln(zV / N + 1))\}$$

Καταστροφή

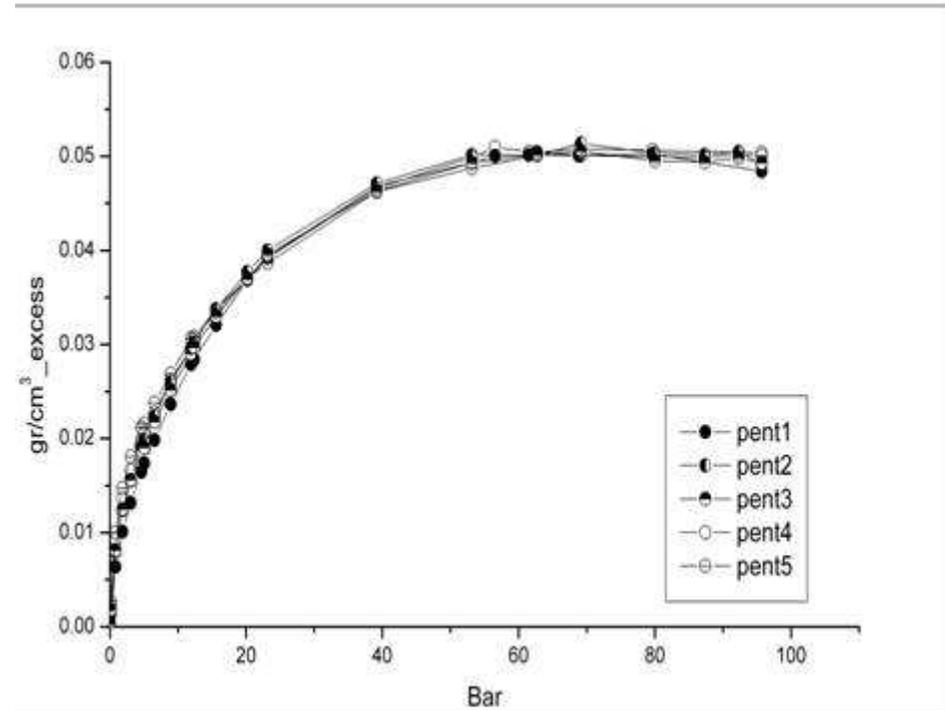
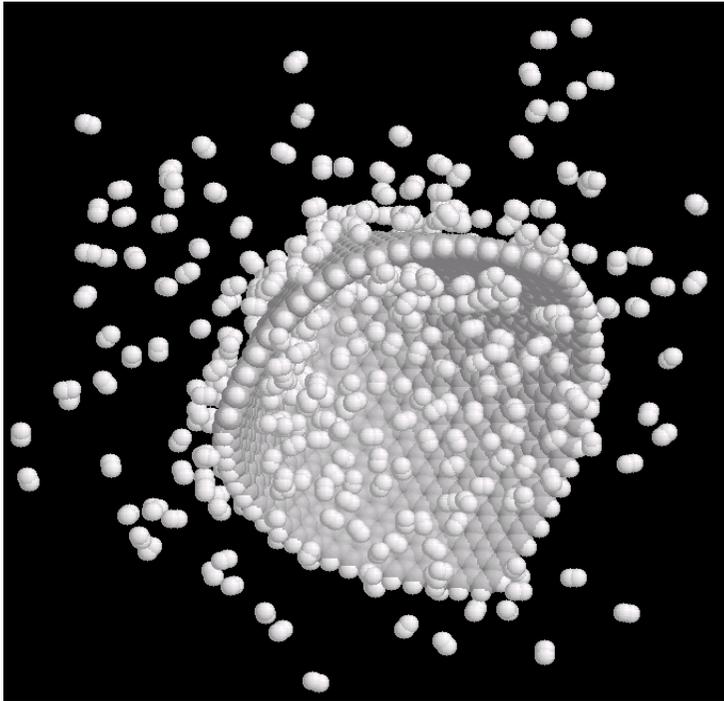
$$\rho_{m \rightarrow n} = \min\{1, \exp(-\Delta E_{m \rightarrow n} / kT + \ln(N / zV))\}$$

Μετακίνηση

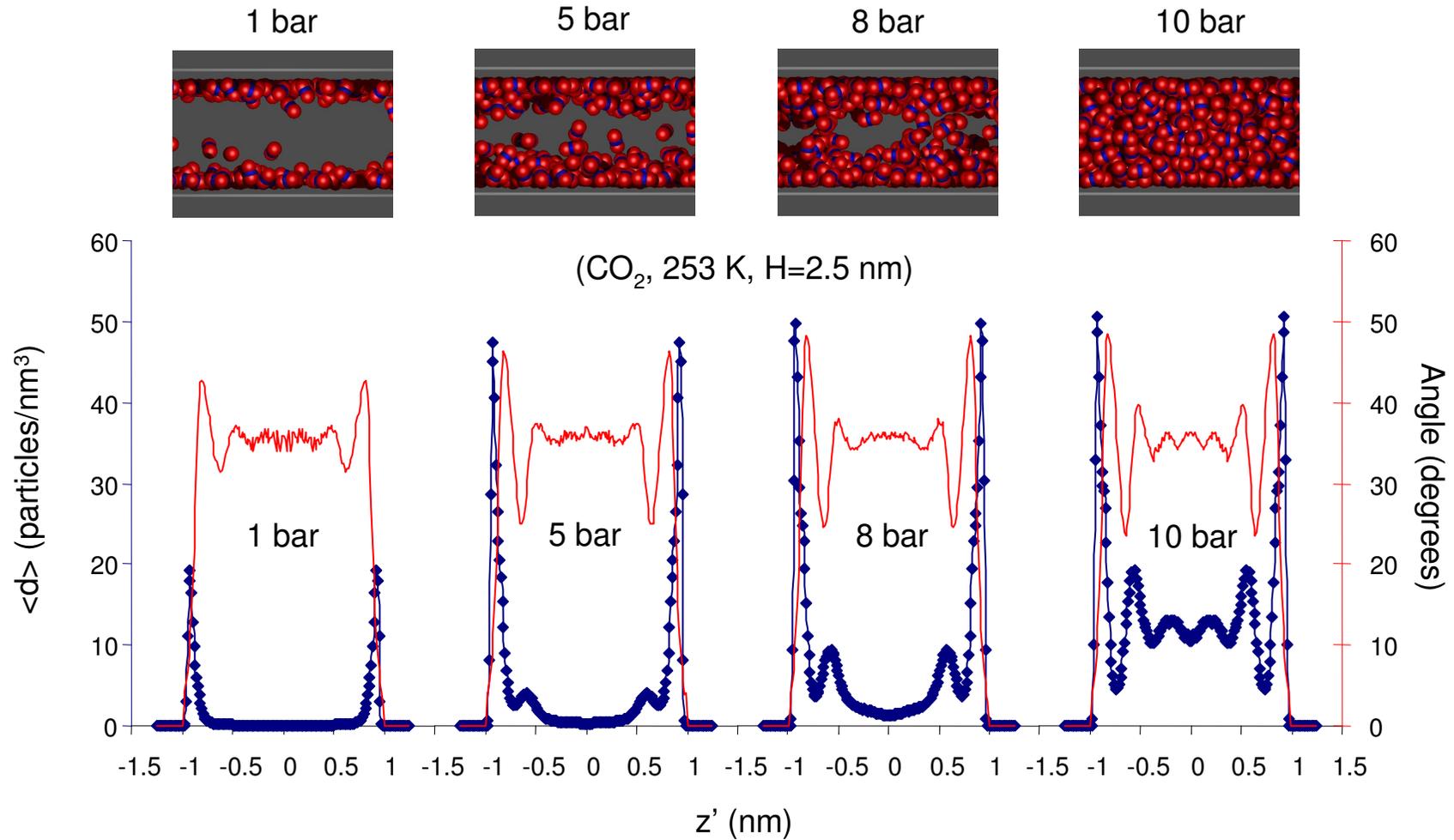
$$\rho_{m \rightarrow n} = \min\{1, \exp(-\Delta E_{m \rightarrow n} / kT)\}$$



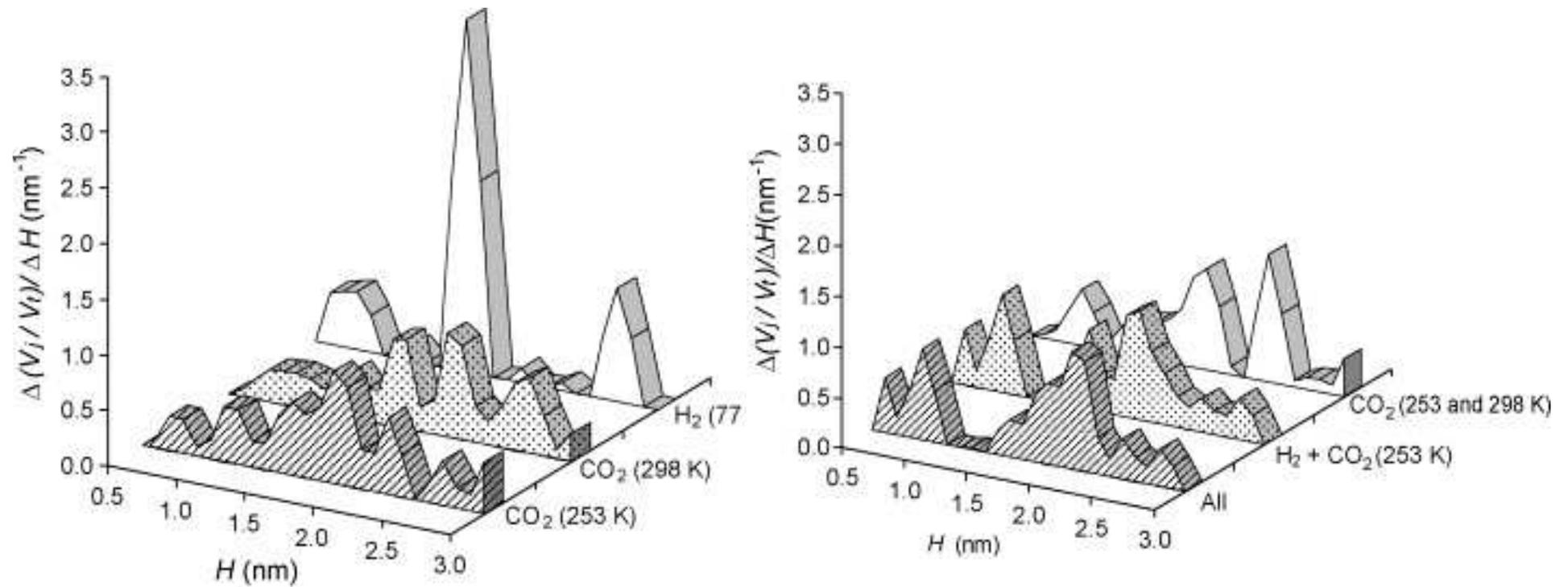
Προσομοίωση της ρόφησης GCMC



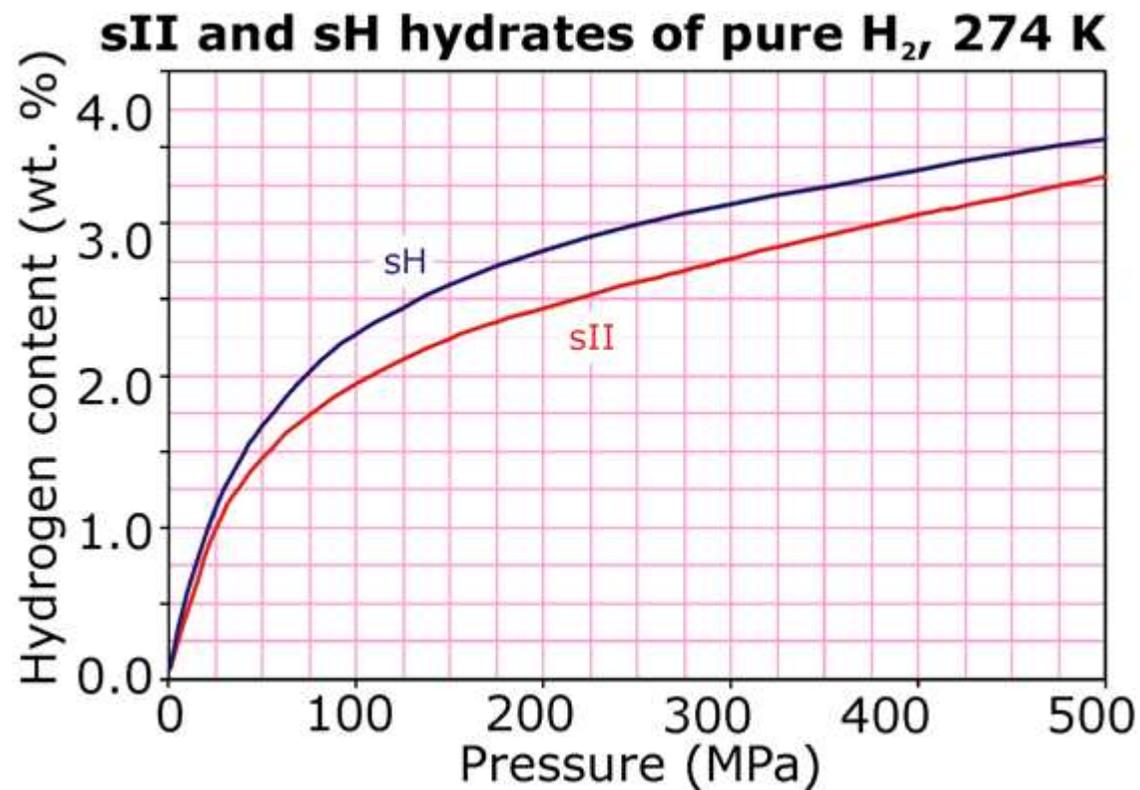
Προσομοίωση της ρόφησης GCMC (Νανοπορώδεις άνθρακες)



Προσομοίωση της ρόφησης GCMC (Νανοπορώδεις άνθρακες)



Προσομοίωση της ρόφησης GCMC (clathrates)



Τομείς ενδιαφέροντος της ομάδας
Υπολογιστικές μέθοδοι - λογισμικό

Χαρακτηρισμός δομής σύνθετων υλικών

Ψηφιακή ανακατασκευή πολύπλοκων συστημάτων

Μελέτη διεργασιών ισορροπίας (κυρίως θερμοδυναμική διεπιφανειών)

Density Functional Theory (DFT)

Simulated Annealing (SA)

Monte Carlo στο Μεγάλο Κανονικό Στατιστικό Σύνολο (GCMC)

Μελέτη δυναμικών διεργασιών (μεταφορά μάζας και ορμής, αγωγιμότητα)

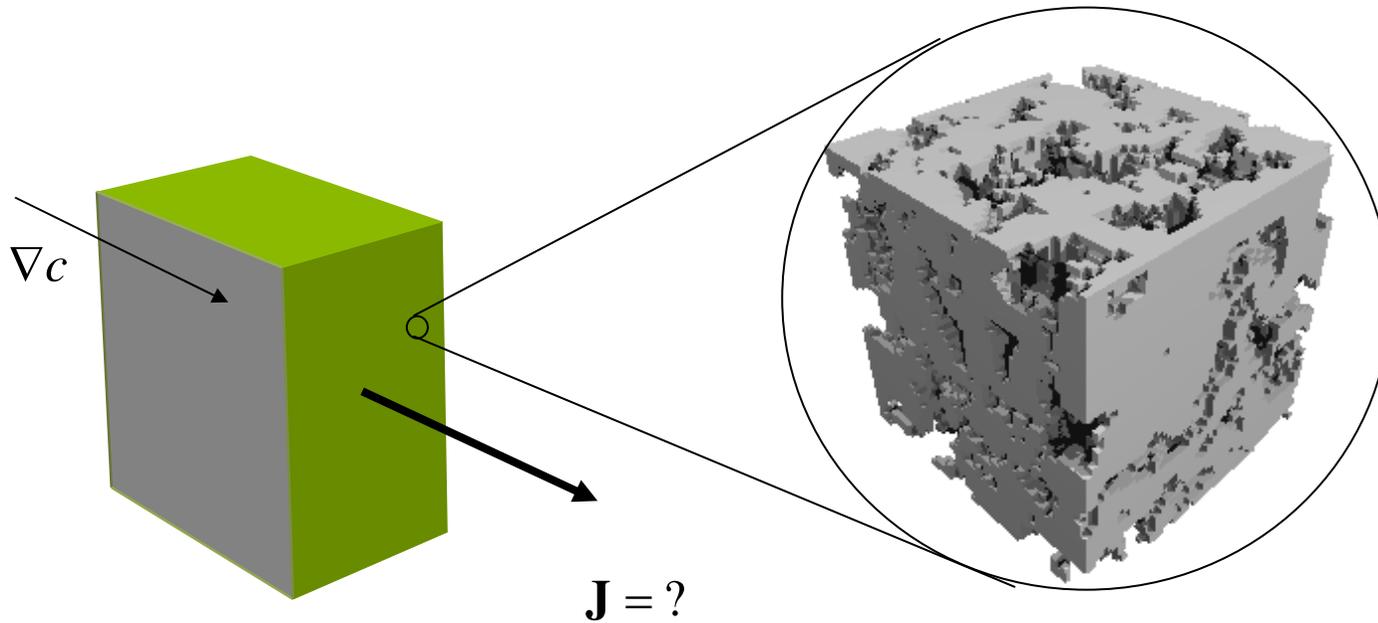
Αριθμητική επίλυση των διαφορικών εξισώσεων

Τυχαίος περίπατος

Μοριακή δυναμική (MD)

Μέθοδος Lattice-Boltzmann (LBM)

Ιδιότητες μεταφοράς (Συντελεστής διάχυσης και συντελεστής αγωγιμότητας)



Διαχυτότητα

$$\mathbf{J} = -\mathbf{D} \nabla c$$

Ηλεκτρική αγωγιμότητα

$$\mathbf{J} = -\mathbf{G} \nabla U$$

Διαπερατότητα

$$\mathbf{J} = -k \frac{1}{\mu} \nabla P$$

Τομείς ενδιαφέροντος της ομάδας
Υπολογιστικές μέθοδοι - λογισμικό

Χαρακτηρισμός δομής σύνθετων υλικών

Επεξεργασία πειραματικών αποτελεσμάτων
Ψηφιακή ανακατασκευή πολύπλοκων συστημάτων
Οπτικοποίηση αποτελεσμάτων

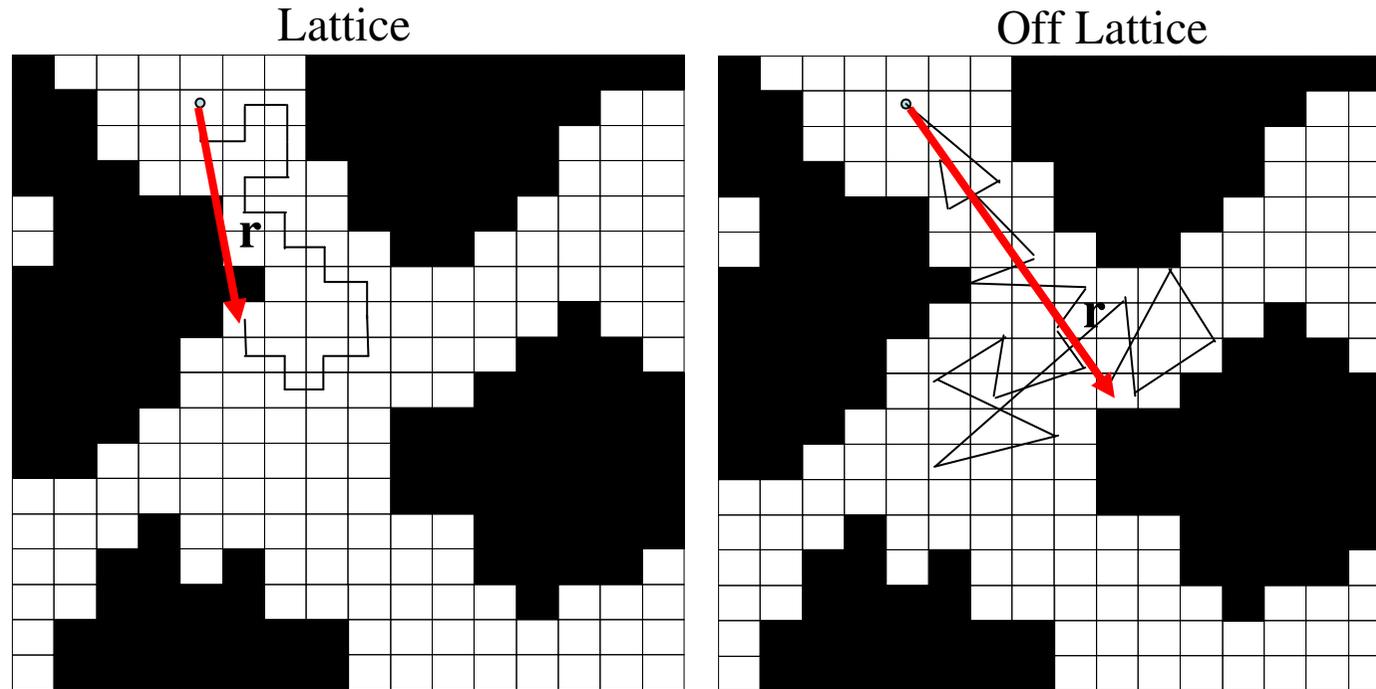
Μελέτη διεργασιών ισορροπίας (κυρίως θερμοδυναμική διεπιφανειών)

Density Functional Theory (DFT)
Simulated Annealing (SA)
Monte Carlo στο Μεγάλο Κανονικό Στατιστικό Σύνολο (GCMC)

Μελέτη δυναμικών διεργασιών (μεταφορά μάζας και ορμής, αγωγιμότητα)

Αριθμητική επίλυση των διαφορικών εξισώσεων
Τυχαίος περίπατος
Μοριακή δυναμική (MD)
Μέθοδος Lattice-Boltzmann (LBM)

Προσδιορισμός συντελεστή διάχυσης (τυχαίος περίπατος)



$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle \mathbf{r}^2(t) \rangle}{6t}$$

	$D_e(\text{μοριακή})/D_b$	
	Προσομοίωση	Πείραμα
Συσσώρευση σφαιρών ($\varepsilon=0.41$)	0.25	0.25
Vycor ($\varepsilon=0.28$)	0.062	0.06
Κιμωλία Βόρειας Θάλασσας ($\varepsilon=0.383$)	0.11	0.12

Τομείς ενδιαφέροντος της ομάδας
Υπολογιστικές μέθοδοι - λογισμικό

Χαρακτηρισμός δομής σύνθετων υλικών

Ψηφιακή ανακατασκευή πολύπλοκων συστημάτων

Μελέτη διεργασιών ισορροπίας (κυρίως θερμοδυναμική διεπιφανειών)

Density Functional Theory (DFT)

Simulated Annealing (SA)

Monte Carlo στο Μεγάλο Κανονικό Στατιστικό Σύνολο (GCMC)

Μελέτη δυναμικών διεργασιών (μεταφορά μάζας και ορμής, αγωγιμότητα)

Αριθμητική επίλυση των διαφορικών εξισώσεων

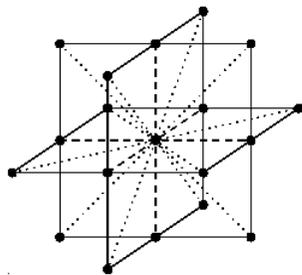
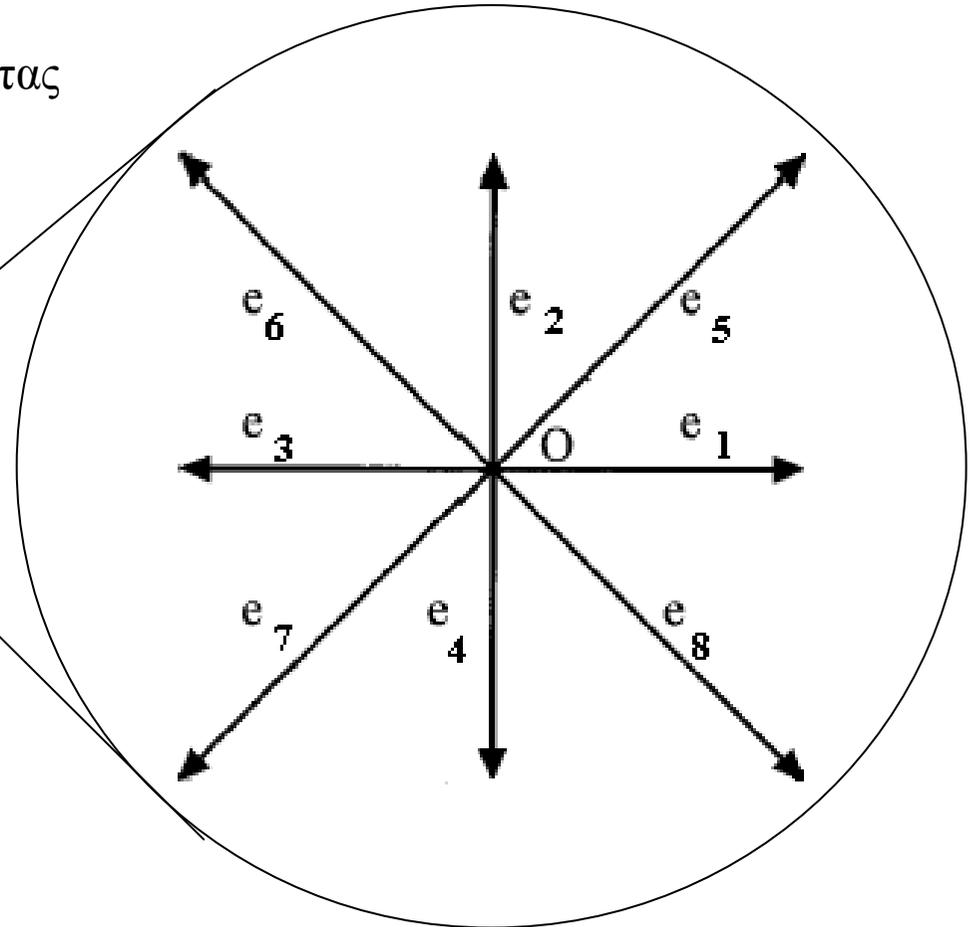
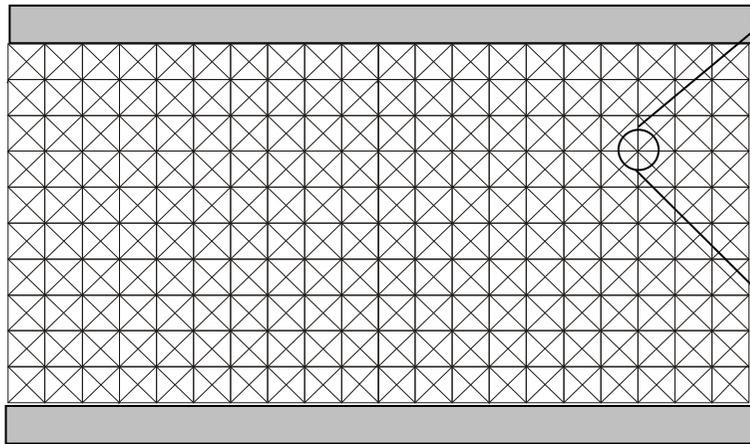
Τυχαίος περίπατος

Μοριακή δυναμική (MD)

Μέθοδος Lattice-Boltzmann (LBM)

Ιδιότητες μεταφοράς (διαπερατότητα) Η μέθοδος Lattice Boltzmann

Διακριτοποίηση του χώρου και της ταχύτητας



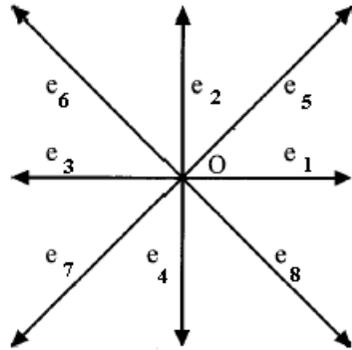
D3Q19

D2Q9

Ιδιότητες μεταφοράς

Η μέθοδος Lattice Boltzmann

D2Q9

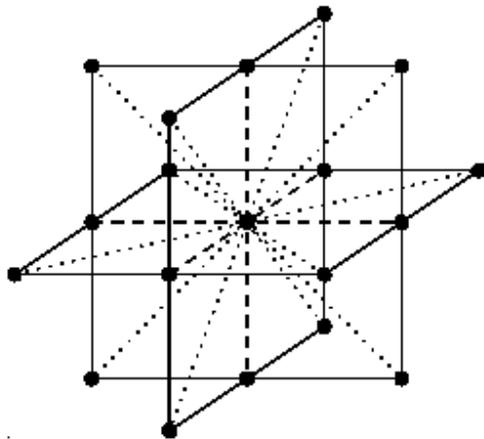


$f_i(\mathbf{x}, t)$ = Κλάσμα μορίων του ρευστού στη θέση \mathbf{x}
που κινούνται στην κατεύθυνση \mathbf{e}_i

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t+1) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + F_i$$

$$f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_i \rho(\mathbf{x}, t) \left[1 + 3\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u} + \frac{9}{2} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2} \mathbf{u}^2 \right]$$

D3Q19



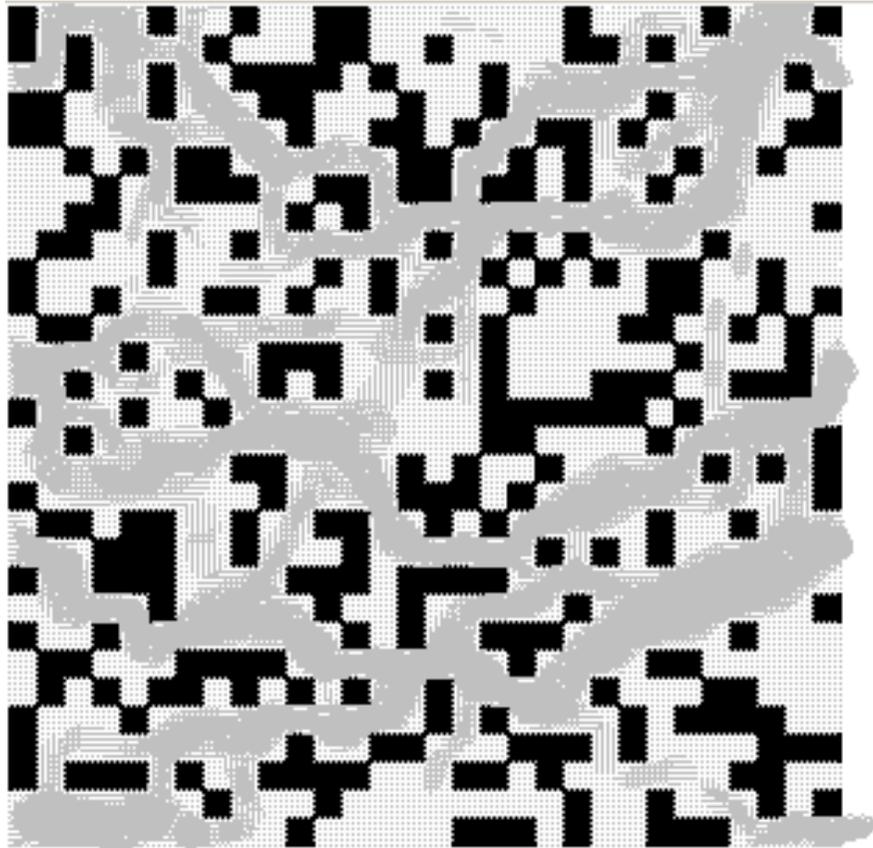
Μακροσκοπικές ιδιότητες

$$v = \frac{1}{3}(\tau - 0.5) \quad \text{ιξώδες}$$

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^q f_i(\mathbf{x}, t) \quad \text{πυκνότητα}$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \sum_{i=0}^q \mathbf{e}_i f_i(\mathbf{x}, t) \quad \text{ταχύτητα}$$

Προσδιορισμός της διαπερατότητας Darcy



$$\langle \mathbf{v} \rangle = -\frac{k}{\mu} \cdot \nabla p$$



Διαπερατότητα Darcy

	Πορώδες	k (m ²) υπολογισμός	Βιβλιογραφία
Συσσώρευση σφαιρών	0.41	4.3×10^{-19}	$4-5 \times 10^{-19}$ (Blake – Kozeny)
Ύαλος Vycor	0.28	7.8×10^{-20}	$4-10 \times 10^{-20}$
Κιμωλία	0.383	4×10^{-15}	4×10^{-15}

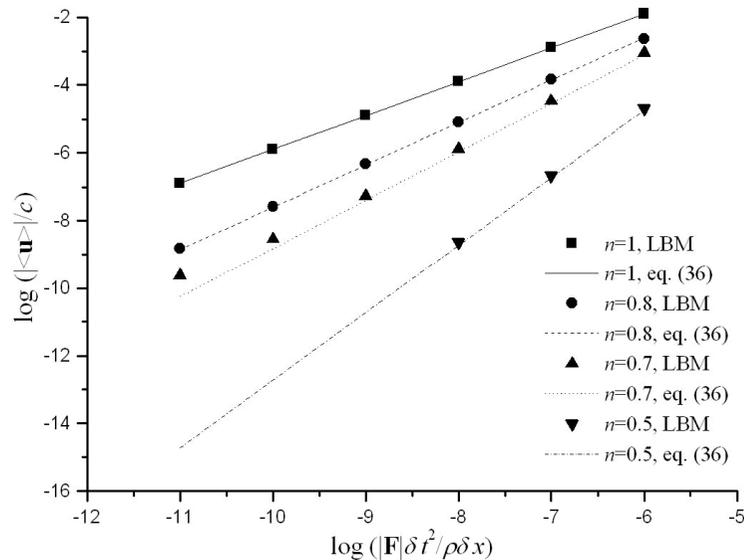
Μη νευτωνικά ρευστά νόμου δύναμης

$$\mu(I_2) = \mu^* \left(\sqrt{\frac{1}{2} I_2} \right)^{n-1}$$

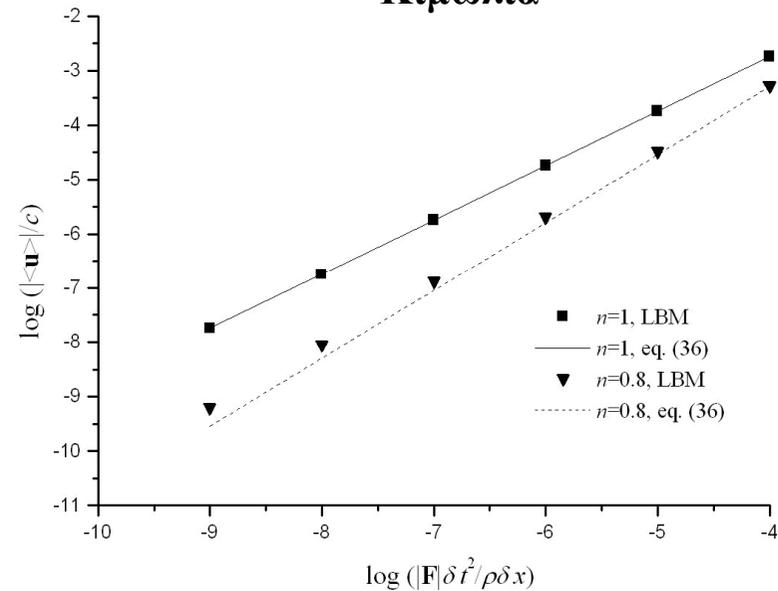
$$\tau(I_2) = \left(\tau_0 - \frac{1}{2} \right) \left(\delta t \sqrt{\frac{1}{2} I_2} \right)^{n-1} + \frac{1}{2}$$

$$\nu = \frac{1}{3} (\tau - 0.5)$$

Συσσωμάτωση σφαιρών



Κιμωλία



Διφασική ροή

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + F_i$$

$$\mathbf{F} = -[\nabla(P_0 - \rho RT)] + [\kappa\rho\nabla\nabla^2\rho] + \mathbf{G}$$

Δυναμική γαγγλίων

Αστάθεια Rayleigh - Taylor

Θερμοδυναμική μελέτη της ισορροπίας φάσεων στην μέθοδο LB

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t+1) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + F_i$$



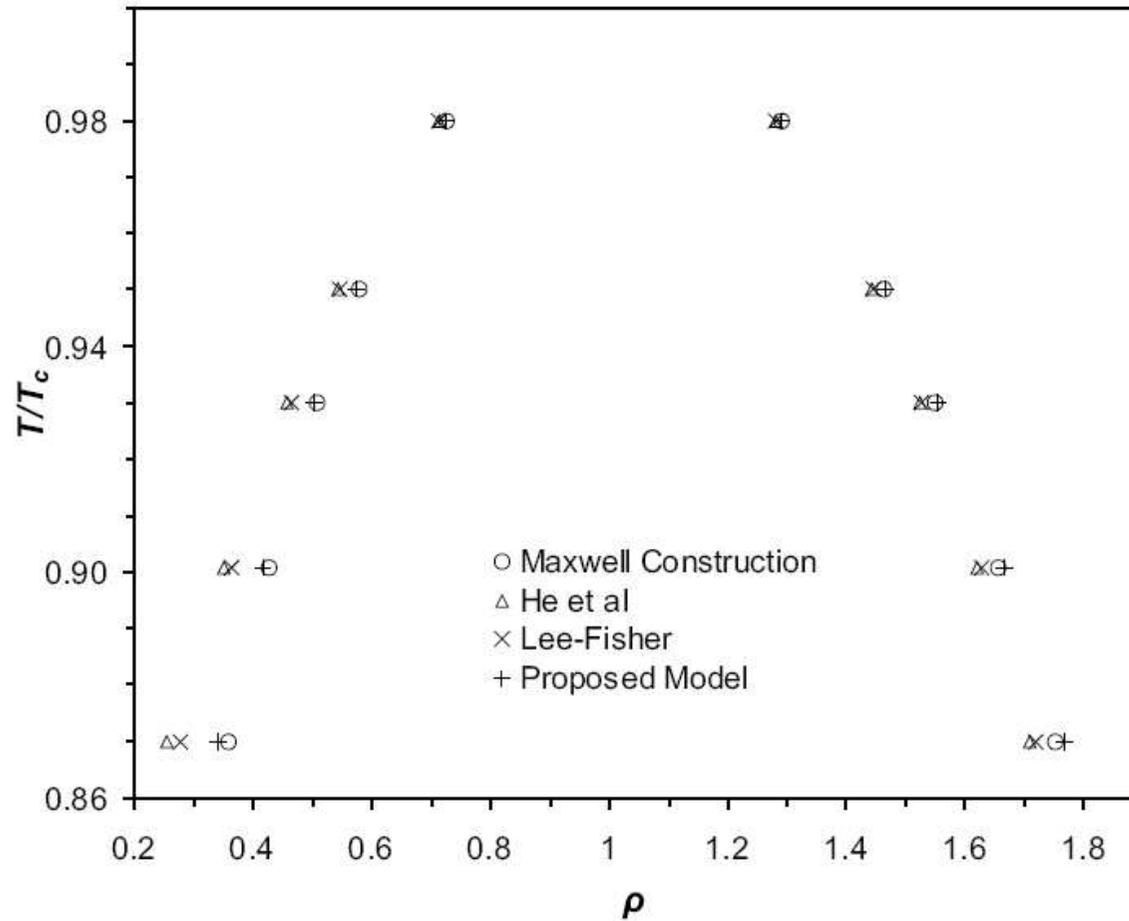
$$\mathbf{F} = \nabla \rho RT - \rho \nabla (\mu_0 - \kappa \nabla^2 \rho) = \nabla \rho RT - \rho \nabla \mu$$

$$\mu = \frac{RT \ln \rho}{1 - b\rho} + \frac{RT}{1 - b\rho} - 2a\rho - \kappa \nabla^2 \rho$$

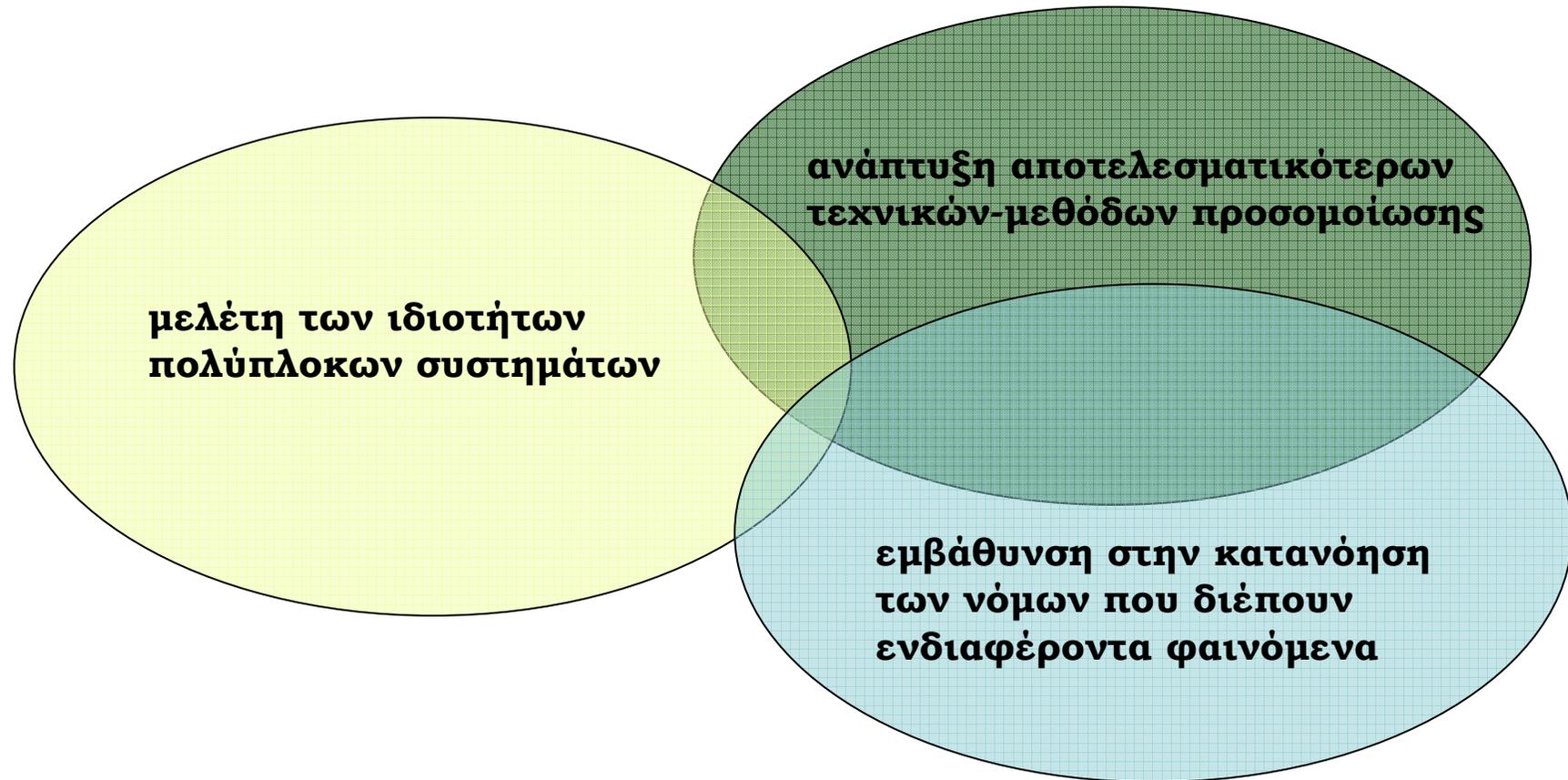
$$\kappa = -\frac{1}{6} \int_{r>\sigma} r^2 u_{attr}(r) dr$$

$$a = -\frac{1}{2} \int_{r>\sigma} u_{attr}(r) dr$$

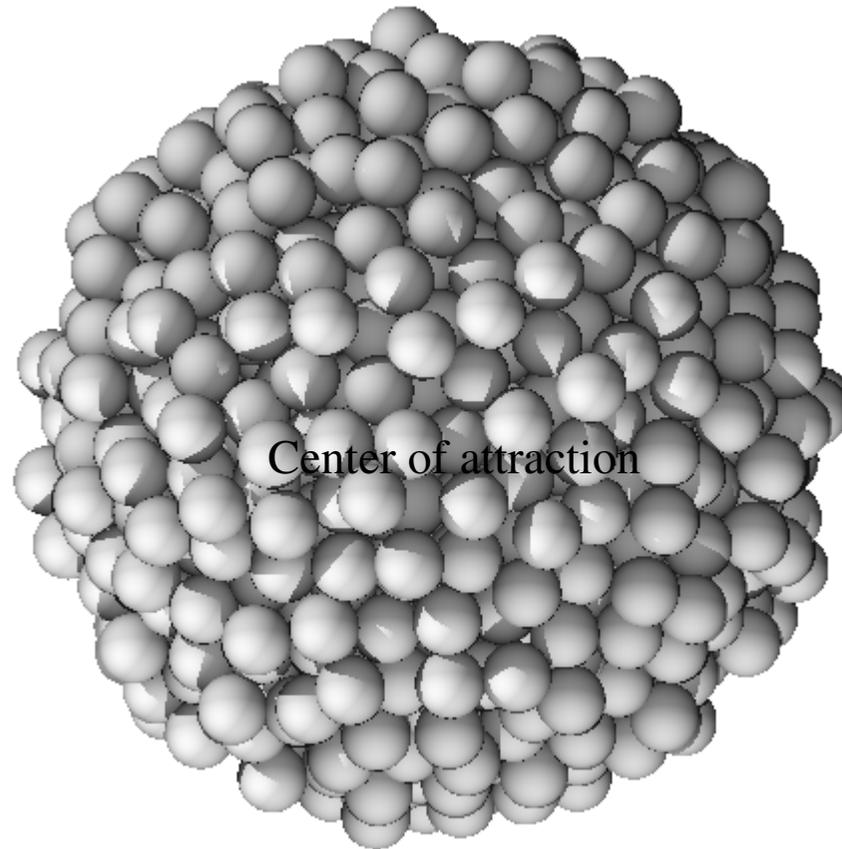
Θερμοδυναμική μελέτη της ισορροπίας φάσεων στη μέθοδο LB

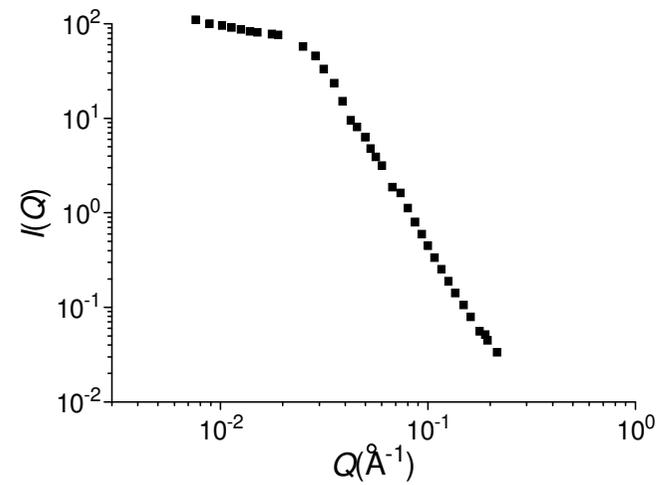
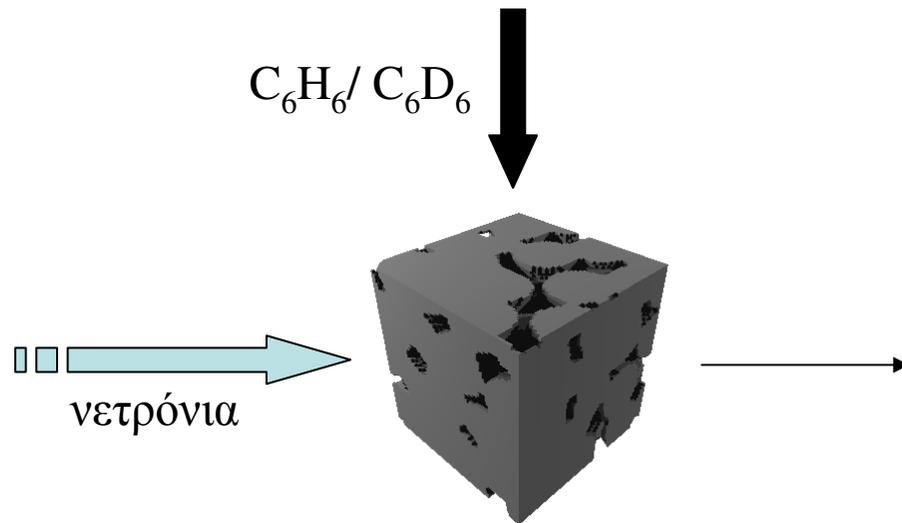
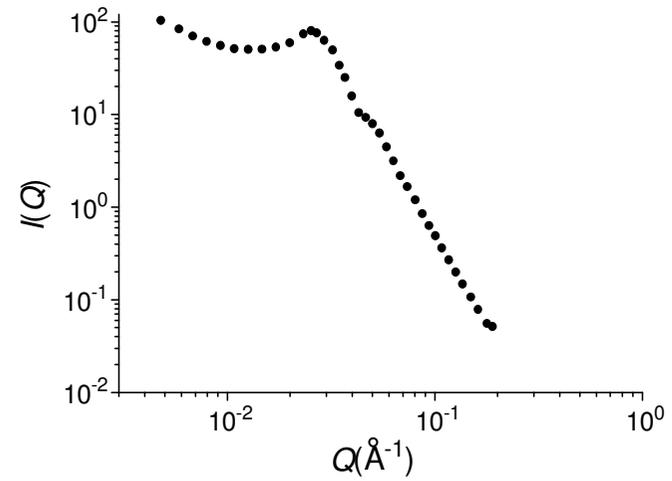
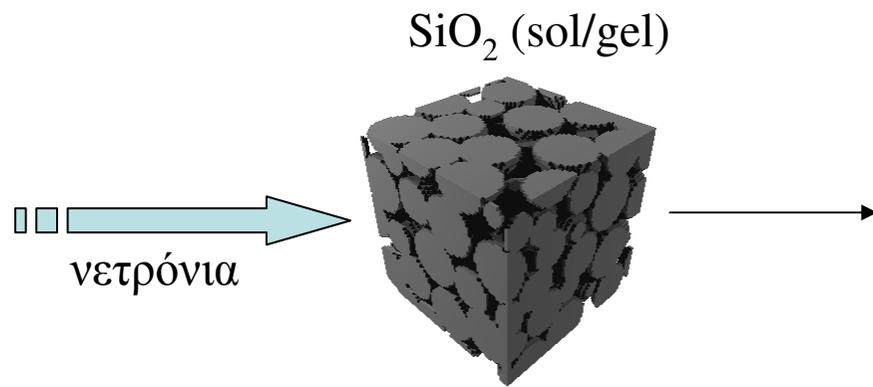


Οι στόχοι της ομάδας προσομοίωσης



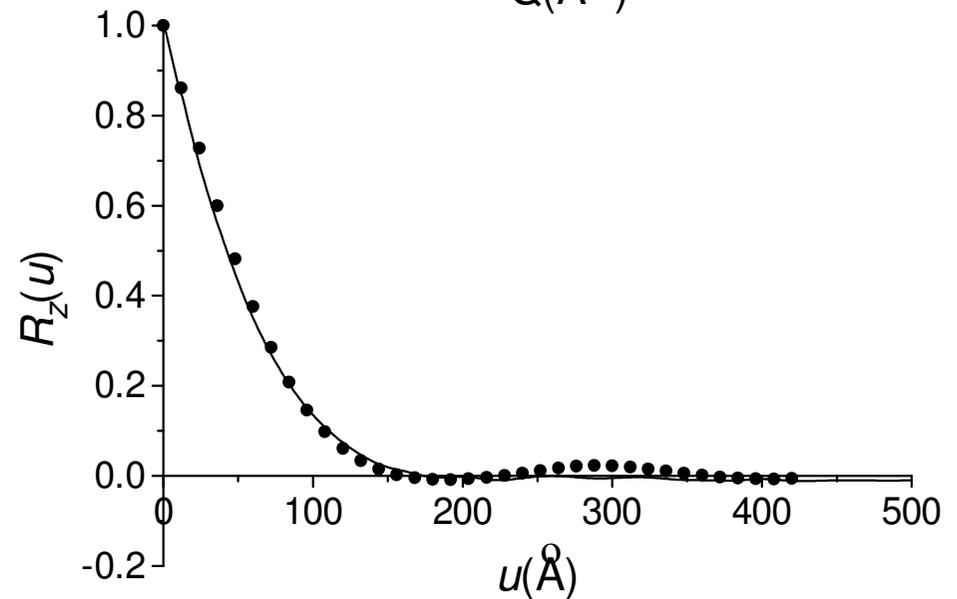
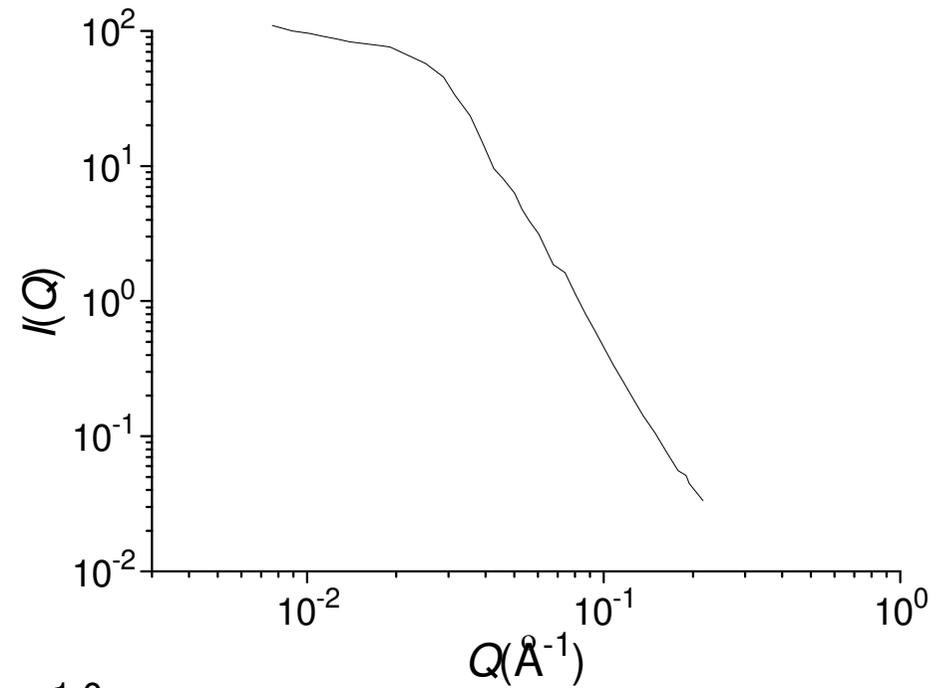
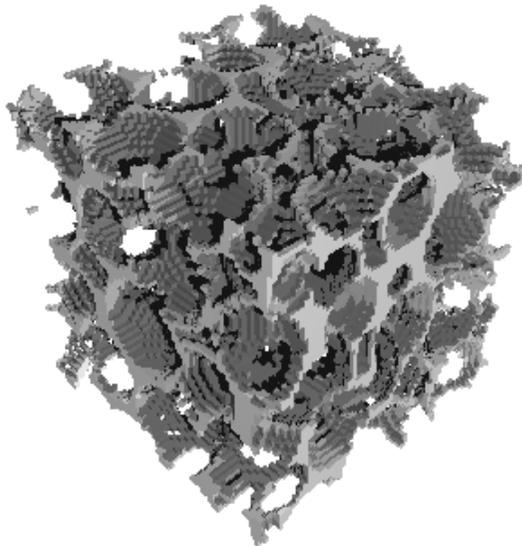
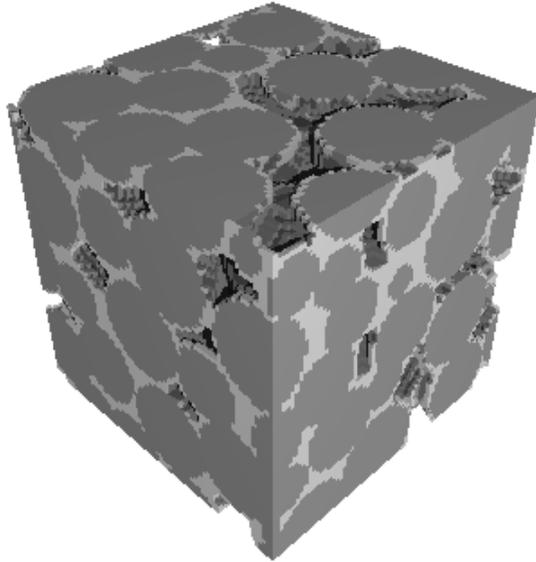
**Ανακατασκευή με
προσομοίωση διεργασίας δημιουργίας
(Πορώδες SiO₂)**





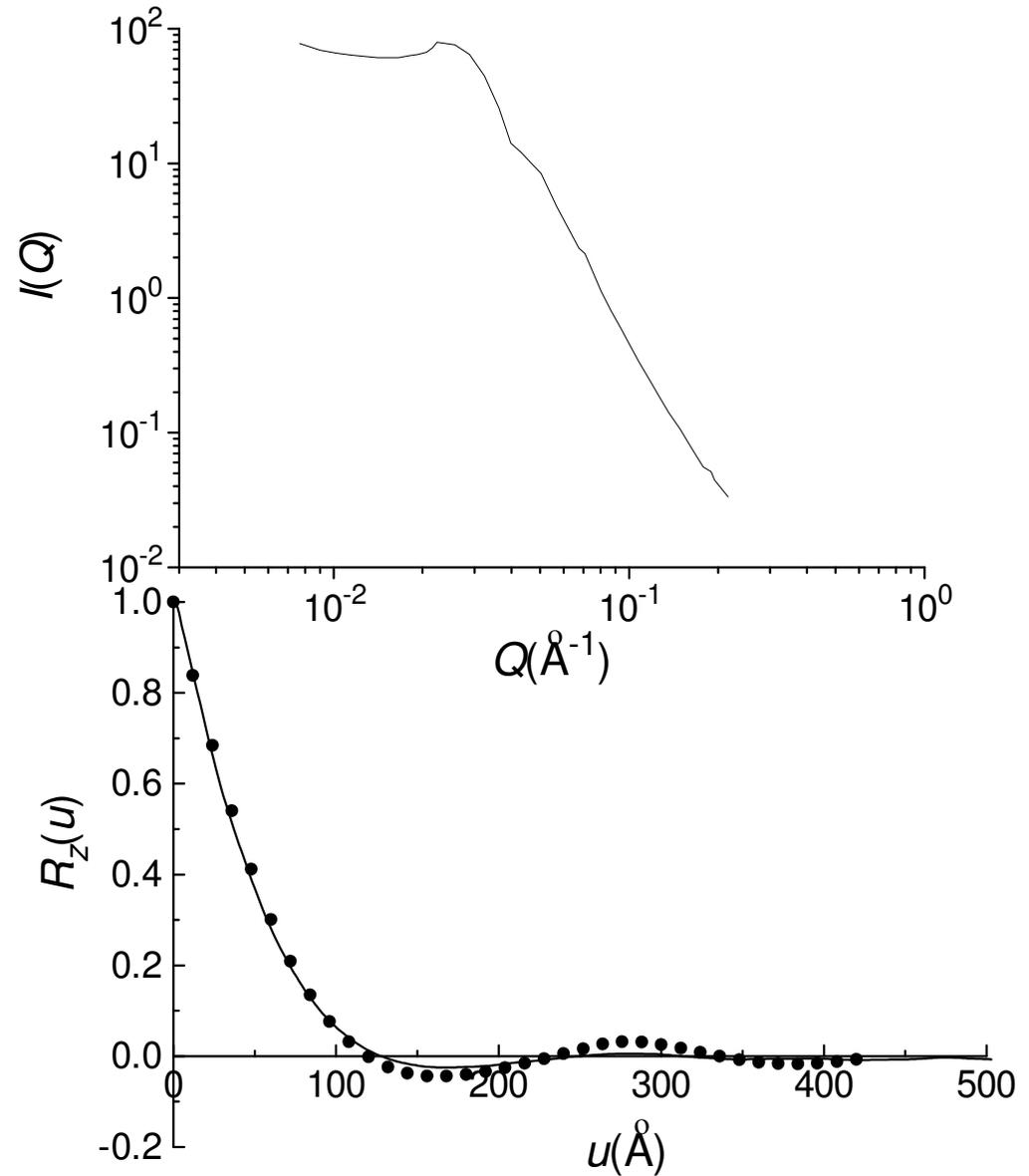
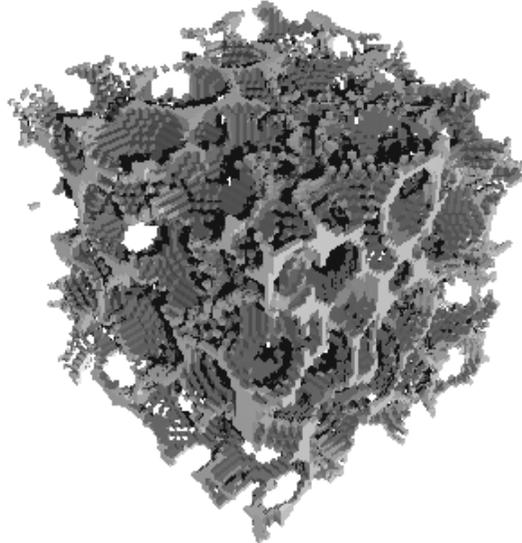
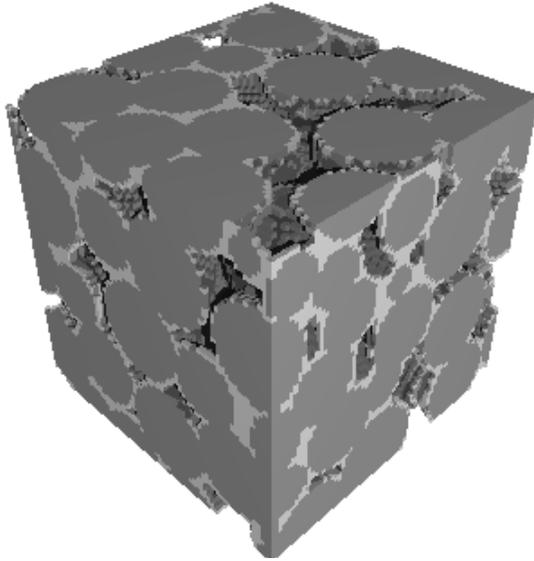
Προσρόφηση C_6H_6/C_6D_6 σε μεσοπορώδη SiO_2

$V_s=0.5$



Προσρόφηση C_6H_6/C_6D_6 σε μεσοπορώδη SiO_2

$V_s=0.2$





Στοχαστική ψηφιακή ανακατασκευή

Συνέλιξη με τον κατάλληλο πυρήνα ο οποίος προκύπτει από την πειραματικά προσδιορισμένη $R_Z(u)$

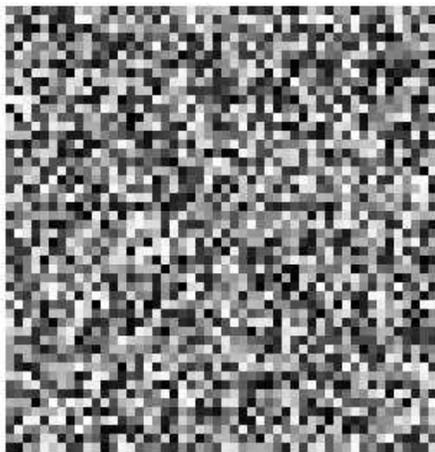
(A)

$$Y(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K(x-x', y-y', z-z') X(x', y', z') dx' dy' dz'$$

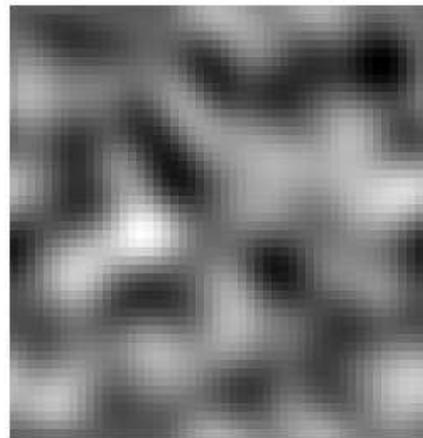
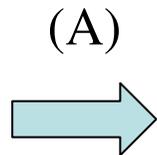
Φιλτράρισμα ώστε το διακριτό πεδίο που θα προκύψει να έχει κλάσμα της φάσης 1 ίσο με το πορώδες

(B)

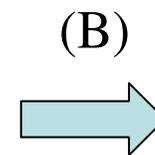
$$Z(x, y, z) = \begin{cases} 1 & \text{if } (2\pi)^{1/2} \int_{-\infty}^y e^{-t^2/2} dt \leq \varepsilon \\ 0 & \text{if } (2\pi)^{1/2} \int_{-\infty}^y e^{-t^2/2} dt > \varepsilon \end{cases}$$



$X(x,y,z)$



$Y(x,y,z)$



$Z(x,y,z)$

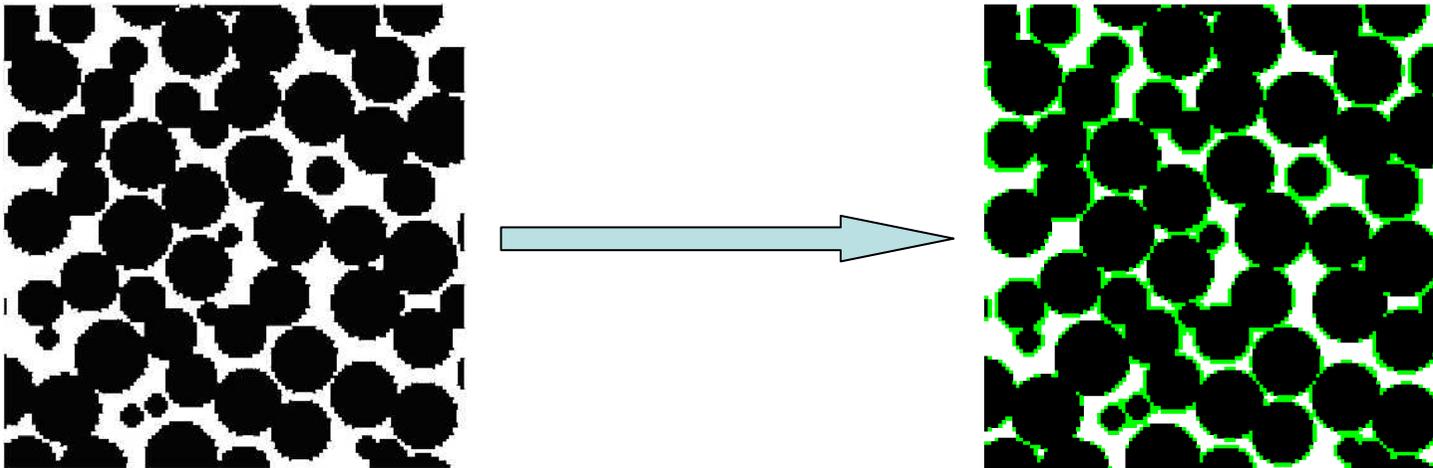
Προσομοίωση προσρόφησης (DFT)

Ελεύθερη ενέργεια συναρτήσει της πυκνότητας

$$F(\{\rho_i\}) = \frac{1}{kT} \sum_i [\rho_i \ln \rho_i + (\eta_i - \rho_i) \ln(\eta_i - \rho_i)] - w_{ff} \sum_{\langle ij \rangle} \rho_i \rho_j - w_{mf} \sum_{\langle ij \rangle} [\rho_i (1 - \eta_j) + \rho_j (1 - \eta_i)]$$

$$\Omega(\{\rho_i\}) = F(\{\rho_i\}) - \mu \sum_i \rho_i \quad \longrightarrow \quad \rho_i = \frac{\eta_i}{1 + \exp\left\{-\frac{1}{kT} \left[\mu + \sum_{j \neq i} (w_{ff} \rho_j + w_{mf} (1 - \eta_j)) \right] \right\}}$$

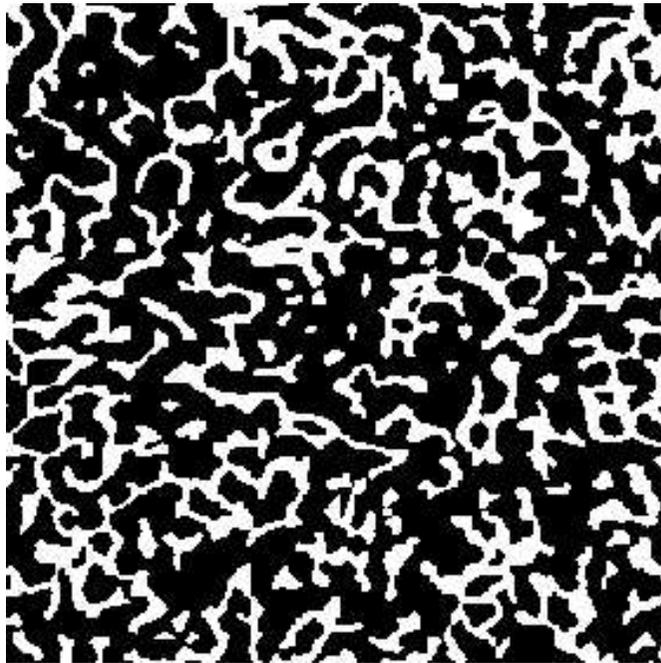
Μεγάλο δυναμικό Ελαχιστοποίηση ως προς το ρ_i



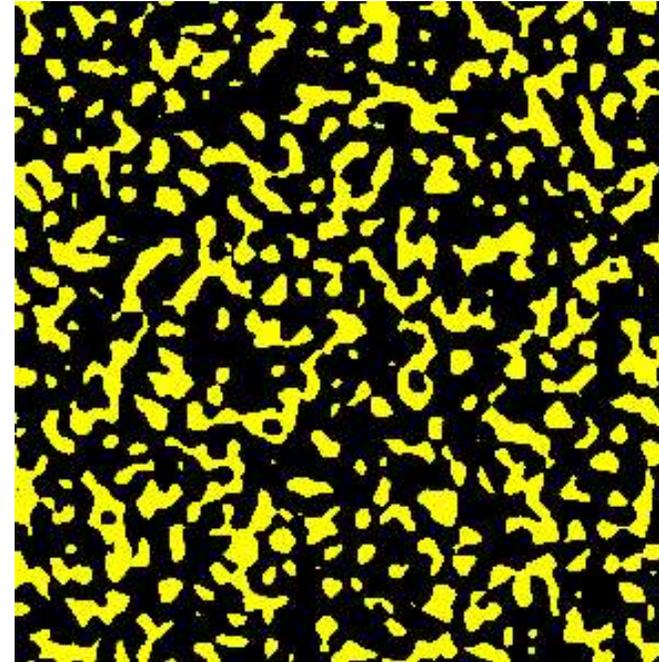


Δισδιάστατες τομές υάλου Vycor

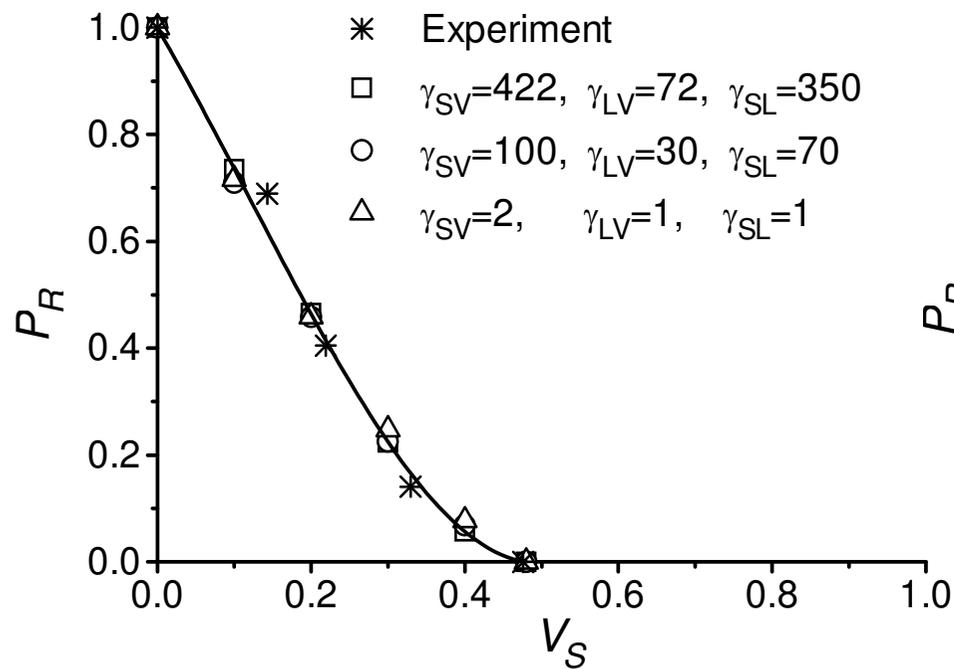
Εικόνα TEM



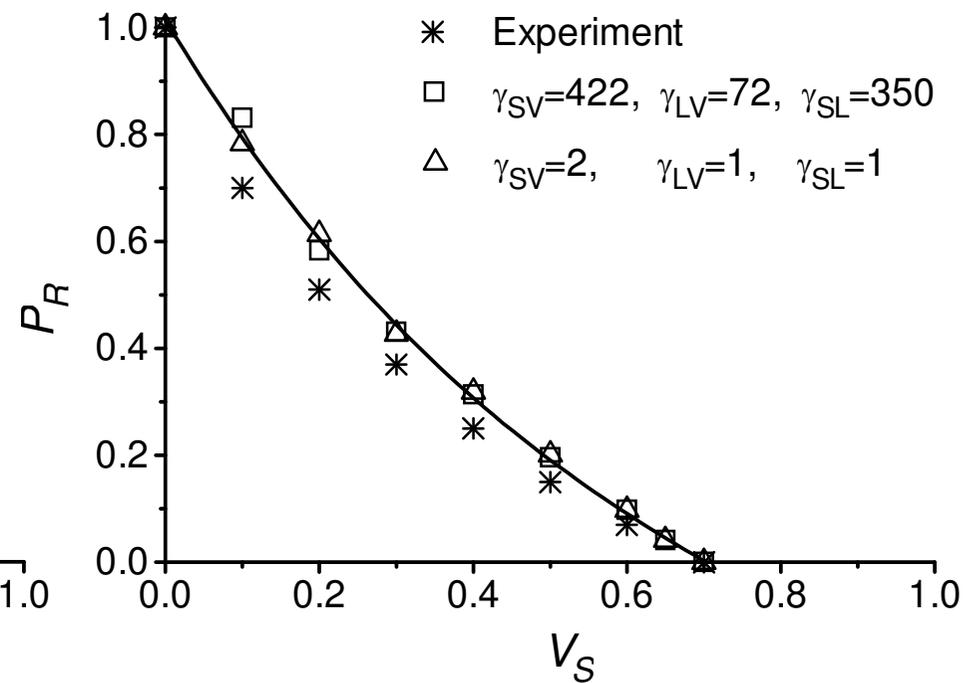
Δισδιάστατη τομή
της ανακατασκευασμένης δομής



Σχετική διαπερατότητα He



Ύαλος Vycor



Κεραμική μεμβράνη αργιλίας

Διεργασίες ισορροπίας

Density Functional Theory (DFT)

Simulated Annealing (SA)

Monte Carlo στο Μεγάλο Κανονικό Στατιστικό Σύνολο (GCMC)