

УДК 004.94

## КЛАСИФІКАЦІЯ ПОРИСТИХ МАТЕРІАЛІВ ЗА ЇХ ПРОНИКНІСТЮ, ВИЗНАЧЕНОЮ ЗА ДОПОМОГОЮ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

Калюжний О.Б., к.т.н., доц., Колеснік С. С., магістр, Сухін І. С., магістр

*Державний біотехнологічний університет*

*Структуру пористих матеріалів та їх проникність вивчали за допомогою комп'ютерного моделювання в діапазоні пористості від 0 до 99%. Різке збільшення проникності спостерігається в інтервалі пористості від 55 до 65%. Показано, що проникність є ізотропною, тобто не залежить від напрямку заповнення пористої структури в усьому діапазоні пористості. Запропоновано класифікацію пористих матеріалів згідно з їх проникністю: матеріали з низькою пористістю (0-5% проникність), матеріали з помірною пористістю (5-50% проникність), матеріали з високою пористістю (50-95% проникність) та сверхпористі матеріали (95-100% проникність).*

Розвиток сільського господарства в Україні передбачає широке використання матеріалів, стійких до агресивного середовища, зокрема пористих полімерних матеріалів. Ведучою тенденцією у галузі полімерного матеріалознавства є розробка та вивчення пористих матеріалів на основі фторопласта-4 (PTFE). Високопористі матеріали виготовляються шляхом попередньої підготовки суміші диспергованих пороутворювачів і порошку полімера з подальшим таблетуванням, термообробкою та вишаруванням пороутворювача. Властивості пористого матеріалу формуються його пористою структурою, яка визначається розмірами та формою використовуваних частинок пороутворювача, а також величиною та якістю міжчастинкових контактів матеріалу-основи, які, в свою чергу, залежать від величини пористості матеріалу (П) [1].

Для виготовлення пористого матеріалу необхідно враховувати, що отриманий матеріал повинен мати високу проникність (Р) та бути достатньо міцним. Проникність матеріалу збільшується зі збільшенням його пористості, а збільшення пористості знижує прочності властивості матеріалу. Отже, при створенні пористого матеріалу необхідно вибирати оптимальну пористість у комплексі з дисперсністю пороутворювача, яка відповідає цим вимогам.

При вивченні структури пористих матеріалів використовують як експериментальний підхід [1], так і методи комп'ютерного моделювання [2]. Однак для отримання даних про структуру таких матеріалів в максимально широкому діапазоні значень пористості перспективним та найінформативнішим є метод графічного комп'ютерного моделювання з відтворенням всіх особливостей структурного стану пористого матеріалу та його порової структури.

На рис. 1 наведено програму графічного комп'ютерного моделювання порових структур, сформованих з використанням пороутворювача. Моделювання пористого матеріалу виконується за наступним алгоритмом.

Пороутворювач моделюється частинками, форма яких може бути квадратною або круглою, при цьому квадратні частинки можуть бути орієнтовані в просторі випадковим чином. Програма з заданого розподілу частинок пороутворювача за розмірами виділяє групу частинок найбільшого розміру. Потім кожній конкретній частинці з даної групи за допомогою генератора випадкових чисел встановлюються координати її центру. Далі навколо цього центру розташовується частинка зазначеної форми. Якщо форма частинки квадратна, то генератор випадкових чисел задає кут обертання частинки на площині. Отримані координати частинки на полі моделювання вводяться в пам'ять ПК.

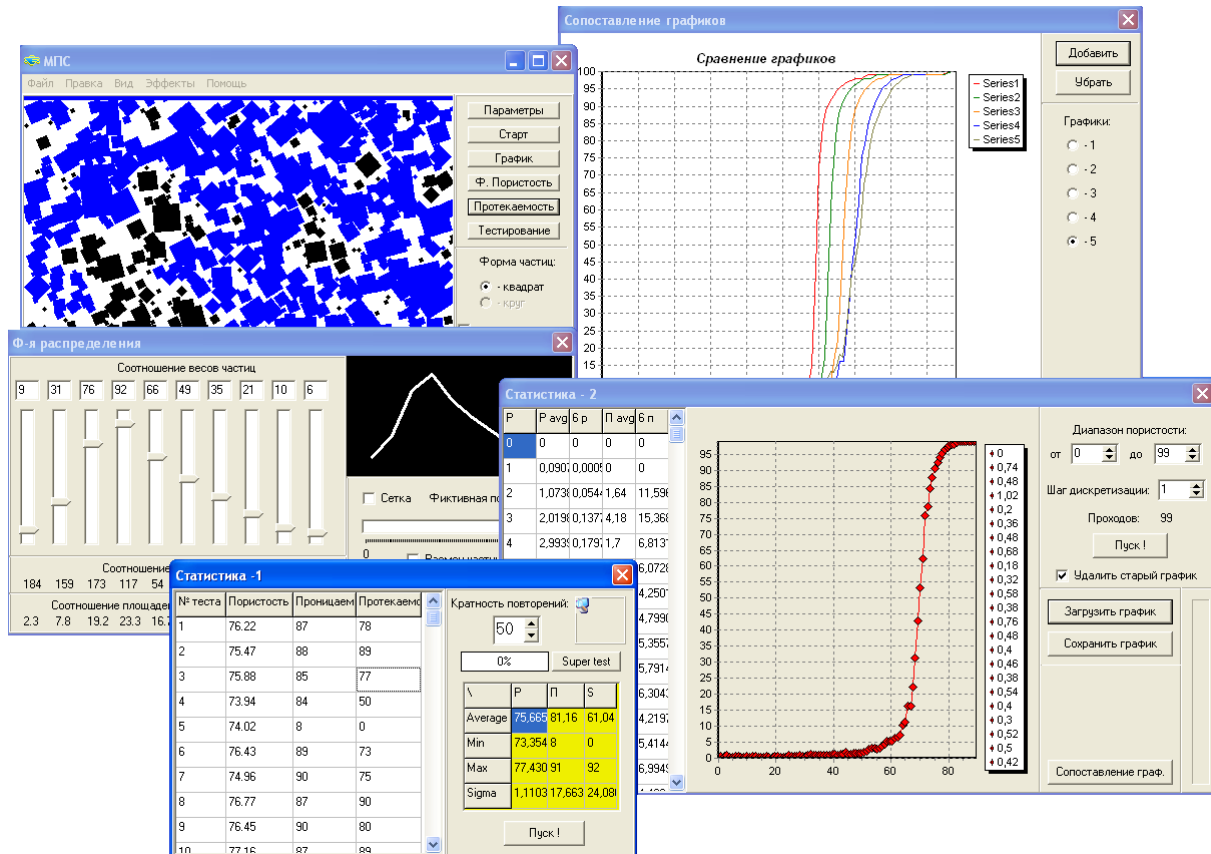


Рис. 1. Програма графічного комп'ютерного моделювання порової структури

Потім програма переходить до аналогічного розміщення наступної частинки того самого розміру. Отримавши координати її центру, аналізується, чи не потрапили вони на площу, яку вже займає раніше розміщена частинка. У разі такого потрапляння програма за допомогою генератора випадкових чисел задає нові координати центру цієї частинки. Зі збільшенням щільності раніше розміщених частинок зростає ймовірність неодноразового потрапляння центру нової частинки на ці частинки, і програма моделювання повторює спроби випадковим чином розмістити частинку до тих пір, поки координати її центра не потраплять в область поля моделювання, яку не зайнято раніше розміщеними частинками. Встановивши координати центру цієї частинки, програма розміщує саму частинку та встановлює її координати. Якщо центр нової частинки виявився розміщеним недалеко від раніше розміщеної частинки, то її координати можуть

виявитися такими, що площі цих частинок частково перекриватимуться. Якби програма не допускала такого перекриття, то поровий канал утворювався би або при соприкосновенні частинок гранями, або при дотику вершини частинки до грані іншої частинки, і у випадку частинок круглої форми - лише в точках дотику. Проте це не відображало б реальну порову структуру пористих матеріалів, сформованих за допомогою пороутворювача, і, отже, певне перекриття частинок є необхідною умовою моделювання.

Повторюючи такі операції, програма розміщує всі частинки даного розміру. Після цього програма починає розміщення наступної групи частинок з найближчим меншим розміром, причому розміщення частинок проводиться аналогічно розміщенню частинок попередньої групи. Так послідовно розміщуються всі групи частинок із заданого розподілу. Після завершення розміщення частинок усією групи утворена порова структура виводиться в поле моделювання.

Для отримання усереднених даних щодо модельної структури та її параметрів, а також максимальних і середньоквадратичних відхилень цих параметрів при фіксованій пористості програма передбачає режим набору статистичних даних за допомогою багаторазового повторення машинного експерименту та його обробки при визначеній пористості (діалогове вікно "статистика-1"). Програма надає можливість отримання цих даних не лише для одного значення пористості, але й для багатьох значень у наперед заданому інтервалі її змін (діалогове вікно "статистика-2"). При визначеному значенні кратності повторення програма в автоматичному режимі створює зображення моделювання структури, аналізує їх, отримує вказаний набір параметрів структури у вигляді табличних даних і, в кінцевому підсумку, наводить графік залежності проникності від пористості  $P=f(\Pi)$ . Опція "перегляд графіків" діалогового вікна "статистика-2" дозволяє в окремому вікні "порівняння графіків" одночасний виклик з пам'яті ПК від 2 до 5 раніше збережених графіків залежності проникності від пористості для подальшого аналізу. Виходячи з характеру залежності  $P=f(\Pi)$ , можна ввести класифікацію пористих матеріалів [3]:

**Низькопористі матеріали.** Це матеріали з поверхневою проникністю, в якості якої прийняти інтервал значень проникності 0-5%. Така проникність має місце в інтервалі значень пористості від 0 до приблизно 55%.

**Середньопористі матеріали.** Це матеріали з глибокою проникністю, в якості якої прийняти інтервал значень проникності від 5 до 50%. Діапазон пористості, що відповідає таким значенням проникності, складає від приблизно 55 до приблизно 59%. У цьому діапазоні пористості протіканість (прохідна проникність) практично завжди рівна 0;

**Високопористі матеріали.** Це матеріали з проникністю від 50-95%. При таких значеннях проникності у пористих матеріалів проникність стає прохідною, тобто вони стають протікаючими. Діапазон пористості, що відповідає таким значенням проникності, складає від приблизно 59 до приблизно 65%;

**Сверхпористі матеріали.** Це матеріали з проникністю близькою до 100%. Такі значення проникності реалізуються в діапазоні пористості від 65 до 99%.

Досліджено вплив розміру часток пороутворювача на залежність  $P=f(\Pi)$ . Встановлено, що із збільшенням розміру часток пороутворювача залежність  $P=f(\Pi)$  зсувається в бік великих значень  $\Pi$ , причому вказане зсув є найбільш суттєвим в області великих значень проникності.

#### **Список літератури:**

1. Kaliuzhnyi OB, Platkov VY (2022) The structure and properties of porous poly(tetrafluoro ethylene). J Polym Res 29:32. <https://doi.org/10.1007/s10965-022-02887-w>
2. R. Baravalle, L. Scandolo, C. Delrieux, C. Garc'ia Bauza, and E. Eisemann, "Realistic modeling of porous materials," Computer Animation and Virtual Worlds, 2016.
3. Kalyuzhny A.B. Structure of porous materials and their permeability: determination by computer-aided simulation / A.B. Kalyuzhny, V.Ya. Platkov // Functional Materials. – 2001. – Vol. 8, №1. – P. 90-93.