



COBIK

Center odličnosti za biosenzoriko,
instrumentacijo in procesno kontrolo



Naložba v vašo prihodnost

OPERACIJO DELNO FINANCIRA EVROPSKA UNIJA
Evropski sklad za regionalni razvoj

Numerical Support to Production of Carbon Nanomaterials

Božidar Šarler

Igor Grešovnik

Katarina Mramor

Tadej Kodelja

Laboratory for Advanced Materials and Systems

Head of Laboratory: Prof. dr. Božidar Šarler

Deputy head: Radovan Grapulin

Modeling and optimization of fullerene production in plasma arc reactors

Long term commitment is to provide our partners with the tools they need

- To get deeper insight in the process
- To provide designers with virtual prototyping environment
- To improve physical models by inverse techniques
- To predict effects of modifications
- To boost productivity by optimization of process parameters

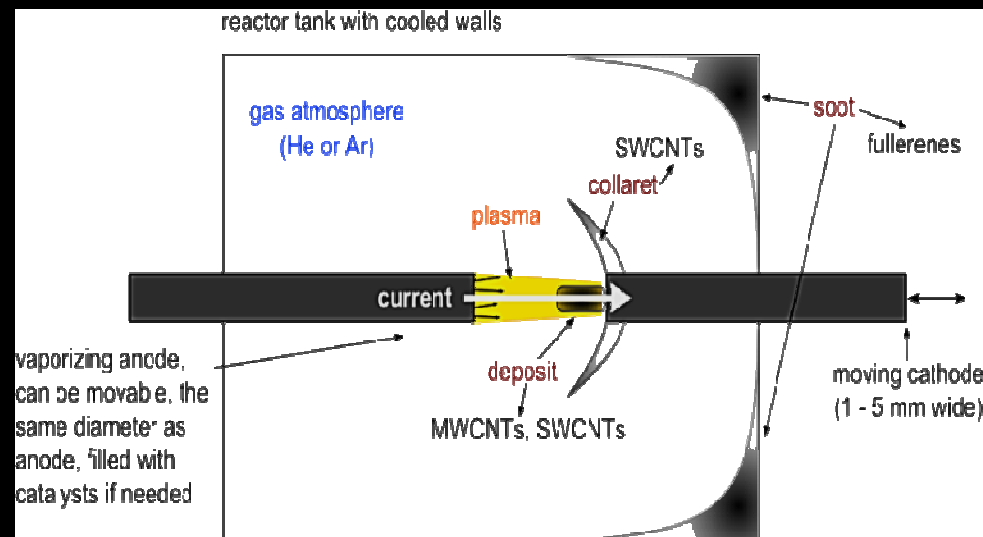
Physical Model of the Reactor

Continuity equation
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = S_m$$

Momentum equation
$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\vec{\nabla} P + \mu \vec{\nabla}^2 \vec{u} + \rho \vec{g} + \vec{j} \times \vec{B}$$

Energy eq.
$$\frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} c_p T) = \vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} T) + \frac{j_z^2}{\sigma} + \frac{5}{2} \frac{k_B}{e} c_p \vec{j} \cdot \vec{\nabla} T - (k - \rho D_c c_p) \vec{\nabla} (T_c - T_g) \cdot \vec{\nabla} Y_c - Q_{rad} + S_h$$

Species conservation eq.
$$\frac{\partial(\rho Y_c)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} Y_c) = \vec{\nabla} \cdot (\rho D_c \vec{\nabla} Y_c) + S_{in}$$



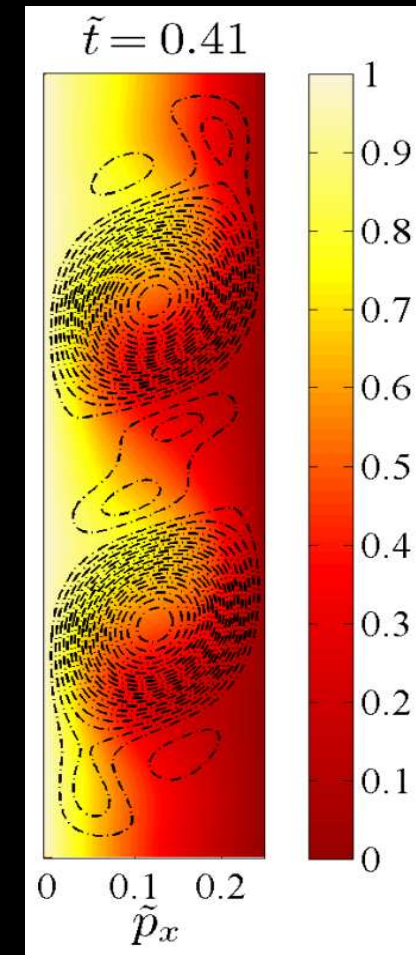
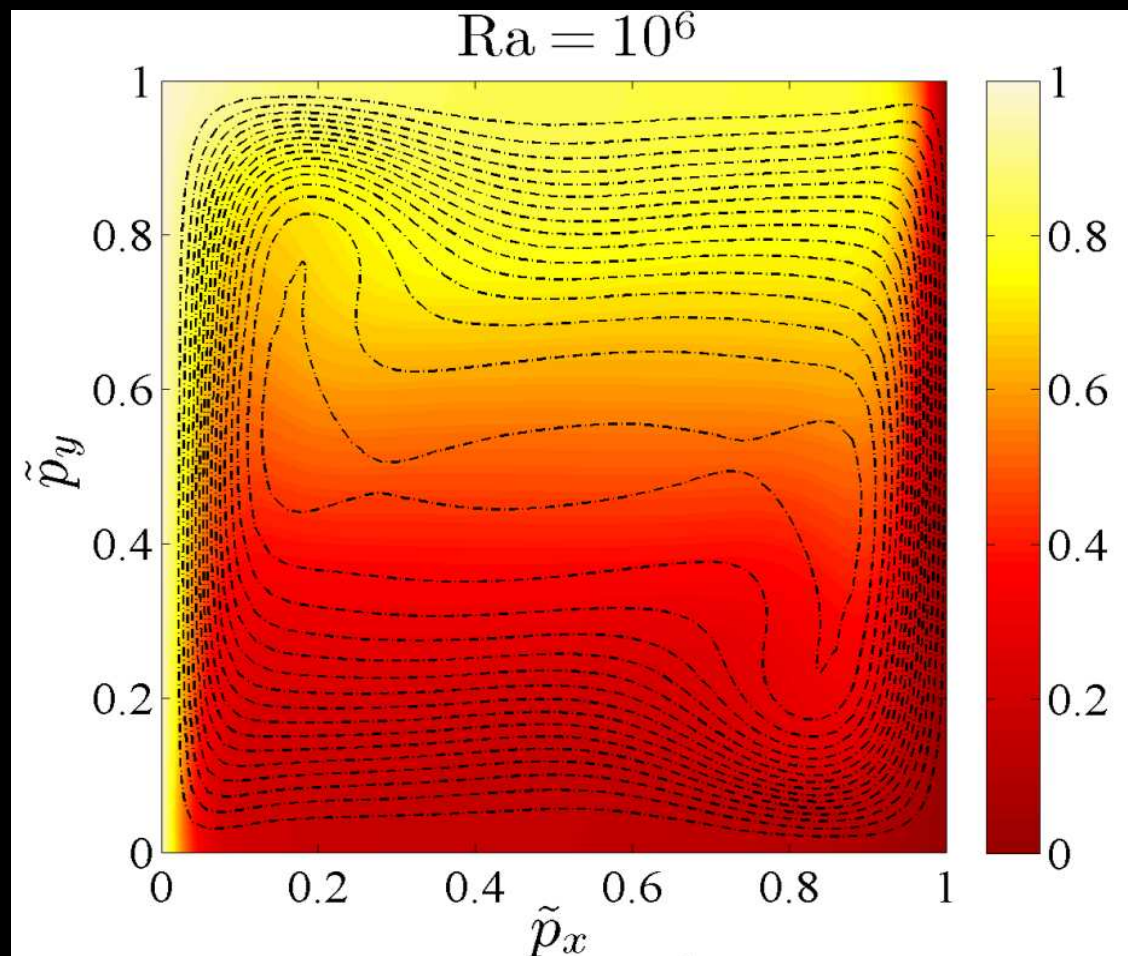
Slide 3

a.d.2

Naredili smo dovršen fizikalni model reaktorja za proizvodnjo fulerenov, ki je osnova za numerične simulacije. Fizikalni model z enačbami opiše fizikalne pojave, ki so udeleženi v procesu proizvodnje fulerenov in nanocevk, in je bistven za razumevanje tega, kaj se v procesu dogaja. Spodaj na sliki je shema reaktorske celice za proizvodnjo fulerenov s plazemskim lokom.

Admin; 22.9.2011

Development and Validation towards Accurate Numerical Computation



Slide 4

a.d.4

Na podlagi fizikalnega modela razvijamo numerične postopke, s katerimi rešujemo fizikalne enačbe ter lahko z njim izračunamo in napovemo, kaj se v procesu dogaja.

Takšni izračuni so zelo kompleksni in je potrebno veliko razvoja, da zmoremo dovolj natančno rešiti enačbe. Dobro razumevanje fizikalnih pojavov je šele prvi korak, težji del je navadno izdelati postopke, ki lahko pravilno simulirajo določene pojave.

Na sliki so prikazani rezultati (in sicer tokovnice in temperaturno polje) za tok tekočine v zaprti kotanji (ang. "cavity"), kjer upoštevamo gibanje zaradi naravne konvekcije, na robovih pa podamo temperature.

S takšnimi standardiziranimi primeri, za katere v literaturi obstajajo dovolj natančne rešitve, testiramo, kako natančni so naši izračuni, in lahko glede na rezultate popravimo postopke računanja.

Trenutno še nimamo narejenega celotnega numeričnega modela proizvodne celice, pač pa imamo razvitih nekaj posameznih delov in vsakega od teh skrbno stestiramo ter preverimo njegovo delovanje. Dobro lahko simuliramo npr. tokove plinov in tekočin ob hkratnem prevajanju toplote, kar je pomembno tudi pri simulaciji proizvodne celice, in primera takšnih simulacij sta prikazana na sliki.

Admin; 22.9.2011

Development and Validation towards Accurate Numerical Computation



Multiscale Modelling

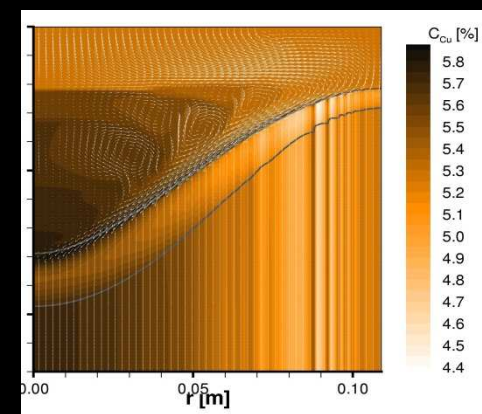
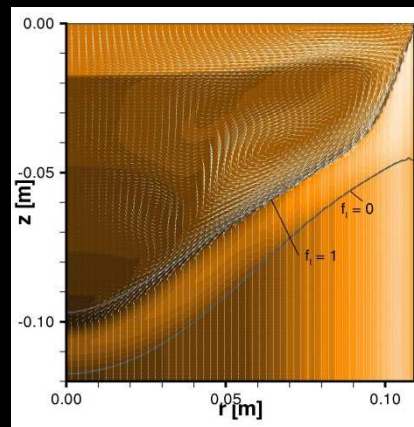
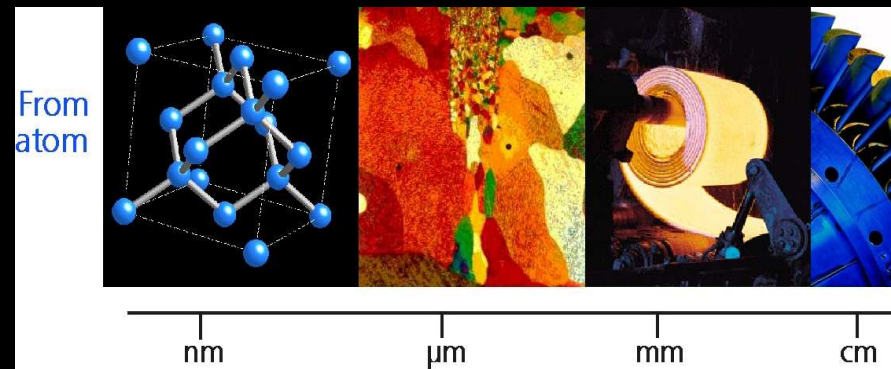
Slide 5

a.d.10

V Laboratoriju za večfazne procese obstajajo dolgoletne izkušnje z različnimi vrstami numeričnih simulaci. Spodaj je prikazana simulacija razvoja mikrostrukture pri jeklu.

Admin; 22.9.2011

Development and Validation towards Accurate Numerical Computation

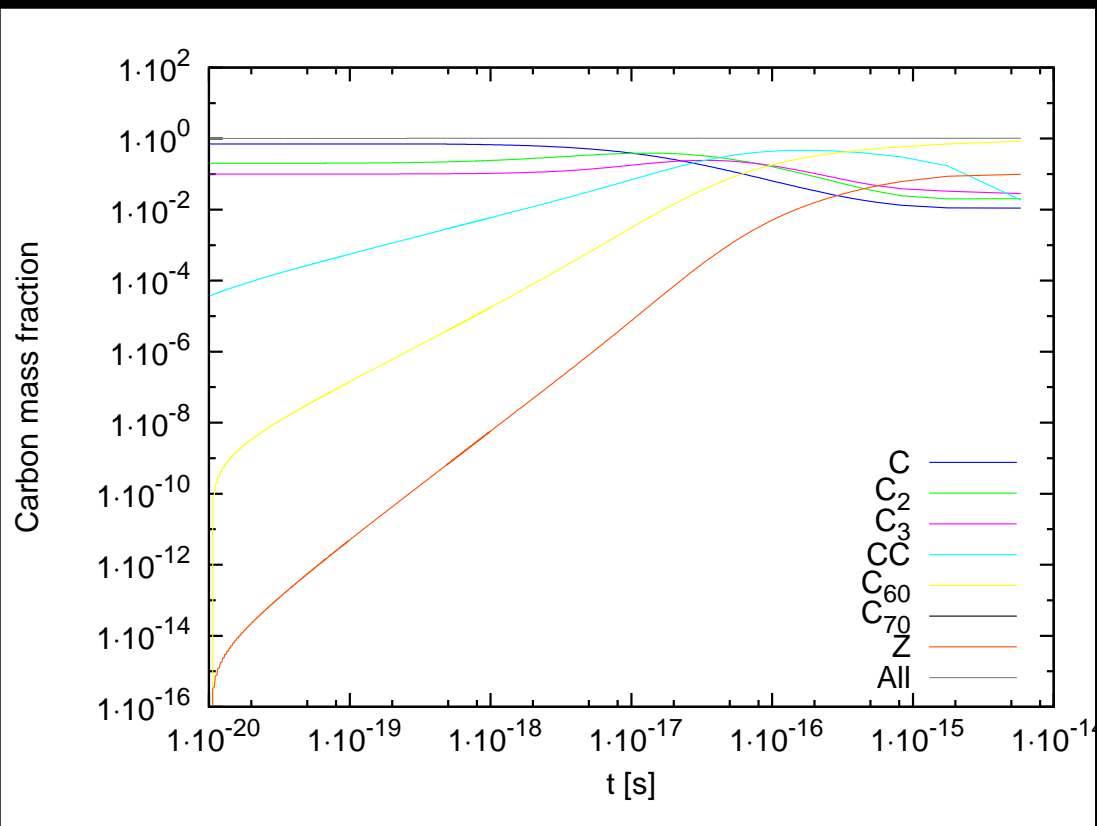


Slide 6

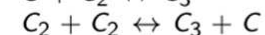
a.d.11

Spodnje slike prikazujejo različne simulacije na različnih skalah - od atomskih do makroskopskih. Spodaj je simulacija strjevanja jekla.
Admin; 22.9.2011

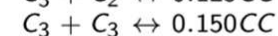
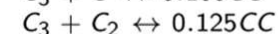
Coupling with Chemical Kinetics



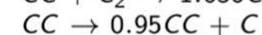
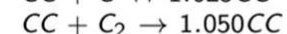
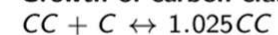
Chemistry of small clusters



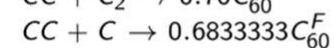
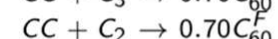
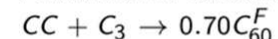
Formation of carbon clusters CC



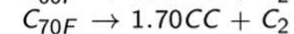
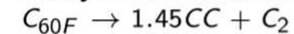
Growth of carbon clusters CC



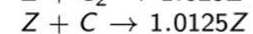
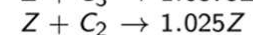
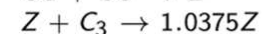
Formation of fullerene molecules C_{60}^F and C_{70}^F



Decay of fullerene molecules C_{60}^F and C_{70}^F



Formation of soot nuclei Z and growth of soot



Slide 7

a.d.5

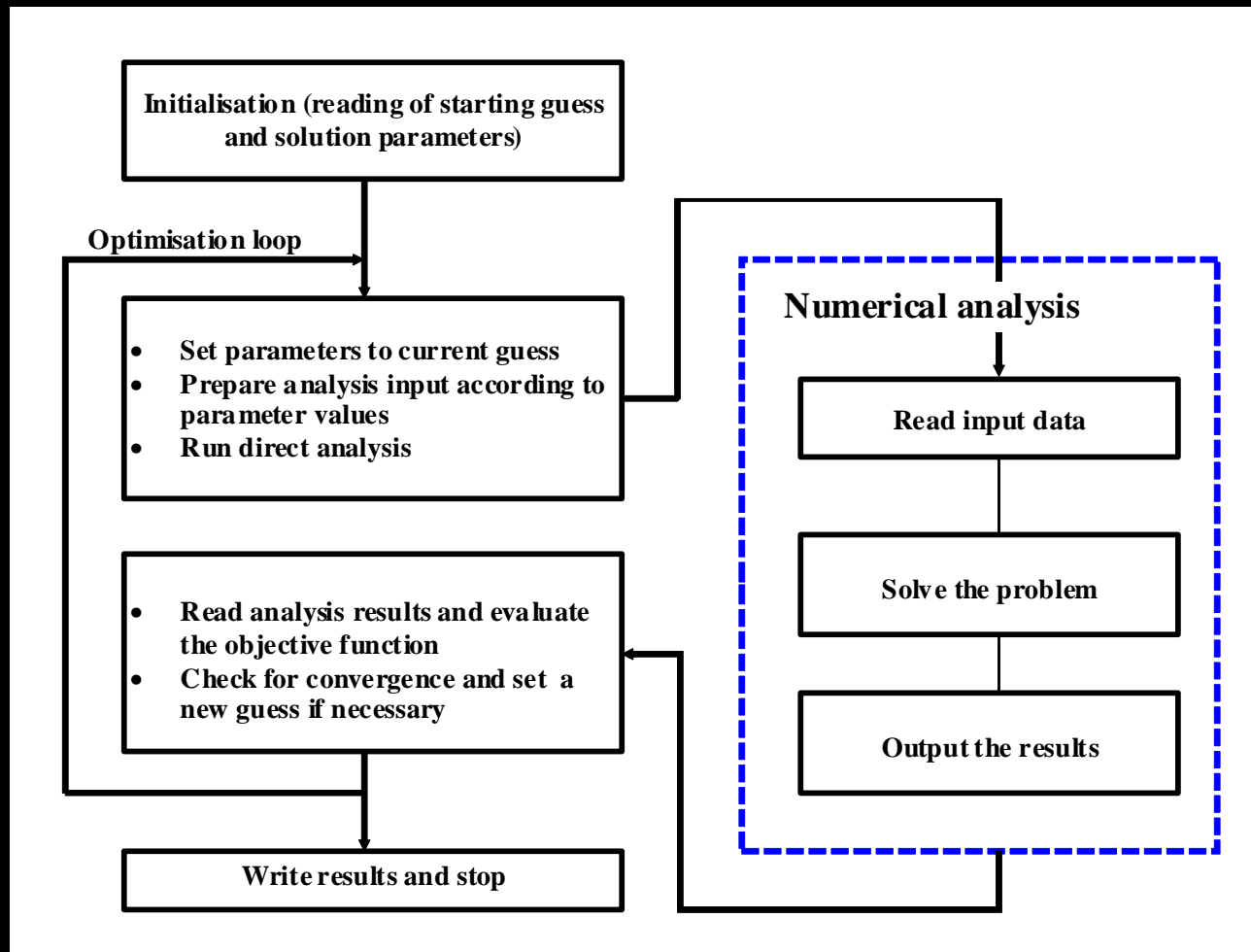
Pri proizvodnji fulerenov v plazemskem reaktorju so zelo pomembne kemijske reakcije, zato bo končni model moral upoštevati tudi to. Trenutno razvijamo model in softver za simulacijo kemijskih reakcij, kjer lahko pri danem časovnem poteku temperature izračunamo, kako se spreminjajo koncentracije snovi, ki med sabo reagirajo.

Leva slika prikazuje izračunan potek koncentracij zmesi, ki med sabo kemijsko reagirajo. Na desni so navedene vse možne reakcije med temi zmesmi, ki jih v modelu upoštevamo. Reakcije so tiste, ki nastopajo pri proizvodnji fulerenov.

V končnem simulacijskem softveru bo model za kemijske reakcije povezan z modelom, ki računa prevajanje toplote in tok tekočine (prejšnja prosojnica).

Admin; 22.9.2011

Optimization Environment – Solution Scheme



a.d.12

Včasih ni smiselno uporabiti natančnih numeričnih modelov za simulacije, ker je lahko to časovno preveč zahtevno ali pa je razvoj natančnih modelov predrag.

V takšnih primerih lahko uporabimo približni model procesa na podlagi nevronske mreže, ki lahko napove, kako se spremenijo rezultati (izid) procesa, ko spremenimo njegove parametre.

Za tak poenostavljen model, za katerega ne potrebujemo podrobnega fizikalnega modela procesa, zbiramo podatke o prejšnjih izvedbah procesa in s temi podatki treniramo (učimo) nevronske mreže, ki je kot orodje umetne inteligence zmožna napovedovanja.

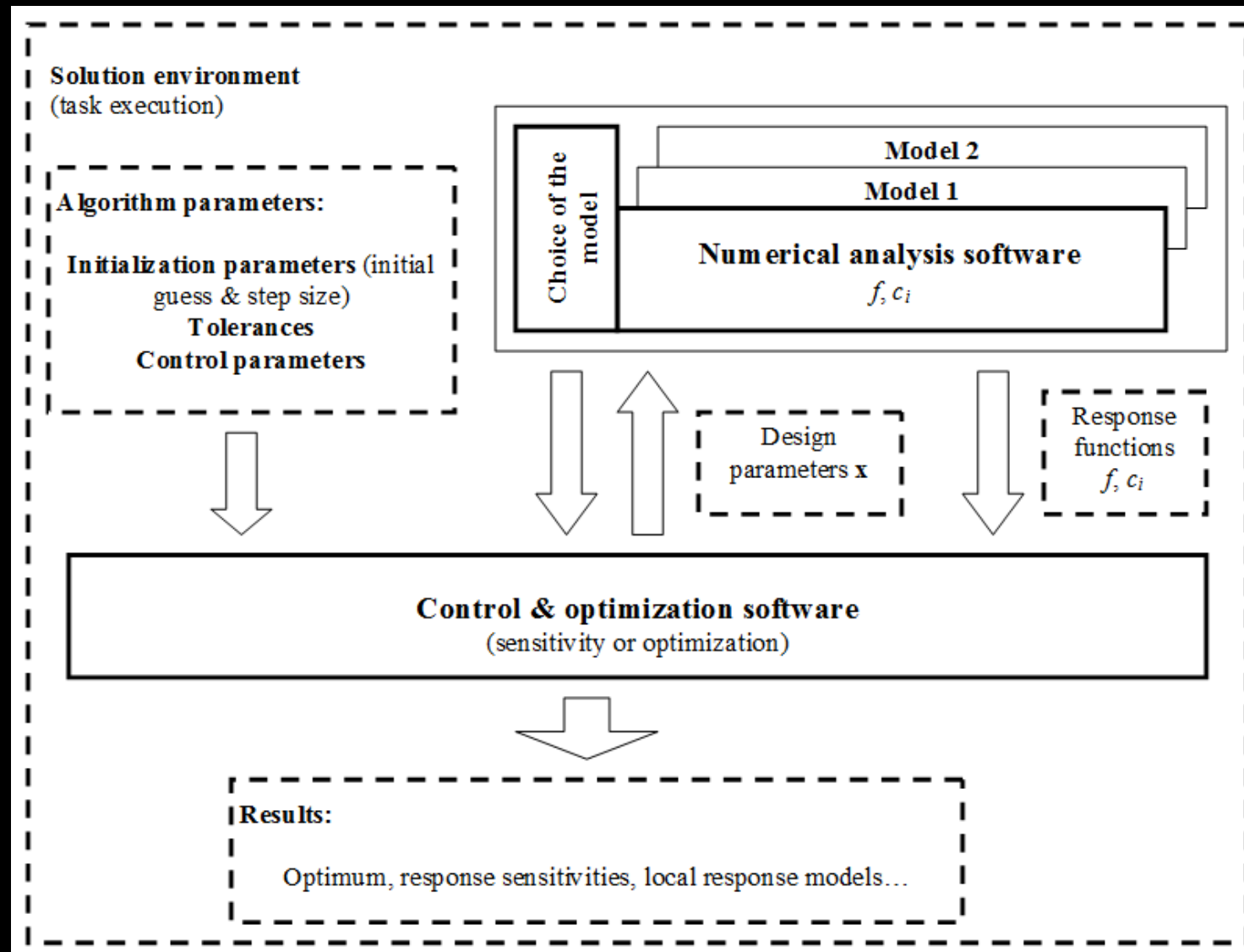
Takšen poenostavljen model lahko potem uporabimo namesto bolj kompliciranih (in dražjih) modelov pri napovedovanju rezultatov procesa, ko spremenimo dizajn, v končni fazi pa tudi pri optimiranju parametrov procesa.

Softver na podlagi nevronske mreže, ki ga lahko uporabi pri optimiranju procesov, prikazuje spodnja slika (takšen softver trenutno razvijamo in smo ga že uporabili pri reševanju enostavnejših primerov).

Na zgornjem delu sheme je naučena nevronska mreža, ki pri podanih parametrih procesa (levo) izračuna izhodne količine (rezultate), ki so posledica takšnega procesa oz. dizajna. Na spodnjem delu so dodatki, s katerimi tak softver pripravimo za uporabo pri iskanju optimalnih parametrov procesa. Na levi je modul, ki optimizacijske parametre (torej tiste parametre, ki jih želimo spremeniti v dizajnu procesa) pretvori v vhodne parametre za nevronske mreže. Na desni strani je modul, ki izračunane izhodne parametre nevronske mreže pretvori v vrednosti odzivnih funkcij, ki nastopajo v definiciji optimizacijskega problema (to so namenska funkcija f , ki določa, kaj želimo doseči pri optimizaciji, ter omejitvene funkcije c , ki določajo, v katerih mejah smemo spreminjati parametre optimiranega procesa).

Admin; 22.9.2011

Optimization environment - Integrated Platform



Slide 9

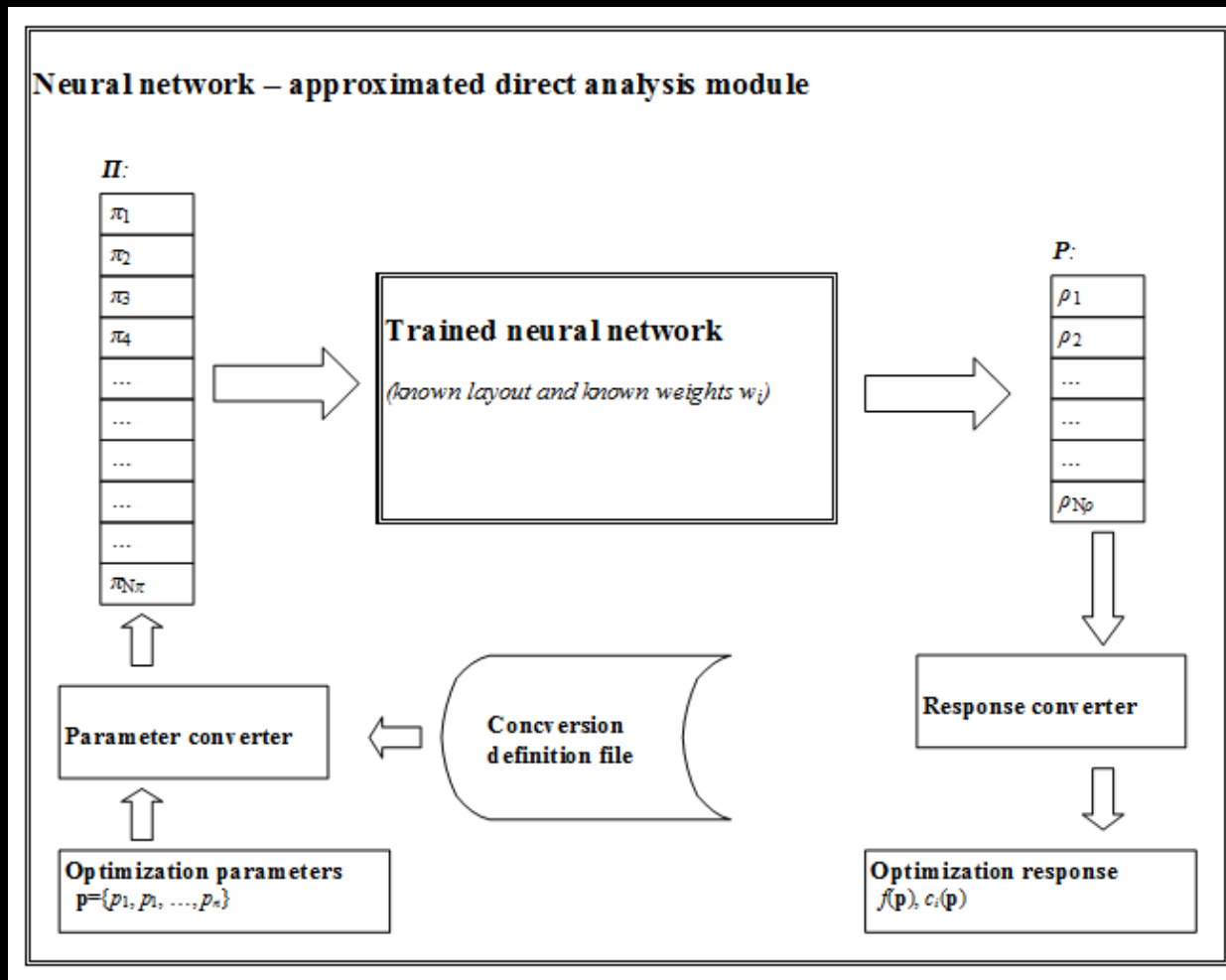
a.d.8

Končni cilj tega, kar počnemo, je avtomatično optimiranje procesnih parametrov (npr. z namenom, povečati količino proizvedenih fulerenov na časovno enoto in / ali zmanjšanja porabe energije).

V ta namen delamo na integriranem sistemu, v katerem bodo povezani numerični modeli (tudi nevronske mreže) in postopki za optimiranje. Na sliki je shema tega sistema.

Admin; 22.9.2011

Optimization Environment – Coupling with ANN Models



a.d.6

Včasih ni smiselno uporabiti natančnih numeričnih modelov za simulacije, ker je lahko to časovno preveč zahtevno ali pa je razvoj natančnih modelov predrag.

V takšnih primerih lahko uporabimo približni model procesa na podlagi nevronske mreže, ki lahko napove, kako se spremenijo rezultati (izid) procesa, ko spremenimo njegove parametre.

Za tak poenostavljen model, za katerega ne potrebujemo podrobnega fizikalnega modela procesa, zbiramo podatke o prejšnjih izvedbah procesa in s temi podatki treniramo (učimo) nevronske mreže, ki je kot orodje umetne inteligence zmožna napovedovanja.

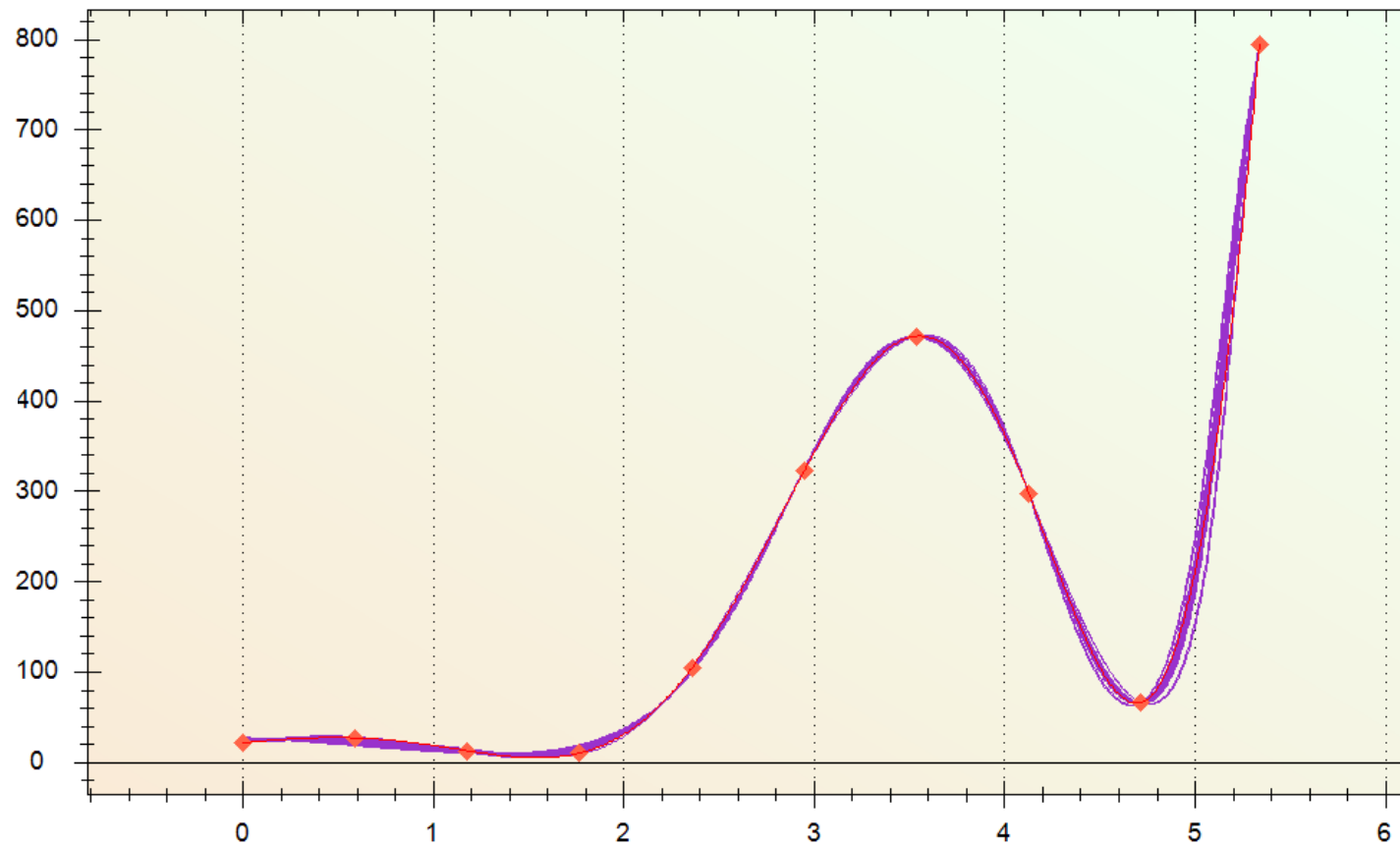
Takšen poenostavljen model lahko potem uporabimo namesto bolj kompliciranih (in dražjih) modelov pri napovedovanju rezultatov procesa, ko spremenimo dizajn, v končni fazi pa tudi pri optimiranju parametrov procesa.

Softver na podlagi nevronske mreže, ki ga lahko uporablja pri optimiranju procesov, prikazuje spodnja slika (takšen softver trenutno razvijamo in smo ga že uporabili pri reševanju enostavnejših primerov).

Na zgornjem delu sheme je naučena nevronska mreža, ki pri podanih parametrih procesa (levo) izračuna izhodne količine (rezultate), ki so posledica takšnega procesa oz. dizajna. Na spodnjem delu so dodatki, s katerimi tak softver pripravimo za uporabo pri iskanju optimalnih parametrov procesa. Na levi je modul, ki optimizacijske parametre (torej tiste parametre, ki jih želimo spremeniti v dizajnu procesa) pretvori v vhodne parametre za nevronske mreže. Na desni strani je modul, ki izračunane izhodne parametre nevronske mreže pretvori v vrednosti odzivnih funkcij, ki nastopajo v definiciji optimizacijskega problema (to so namenska funkcija f , ki določa, kaj želimo doseči pri optimizaciji, ter omejitvene funkcije c , ki določajo, v katerih mejah smemo spreminjati parametre optimiranega procesa).

Admin; 22.9.2011

Predictive Models



a.d.7

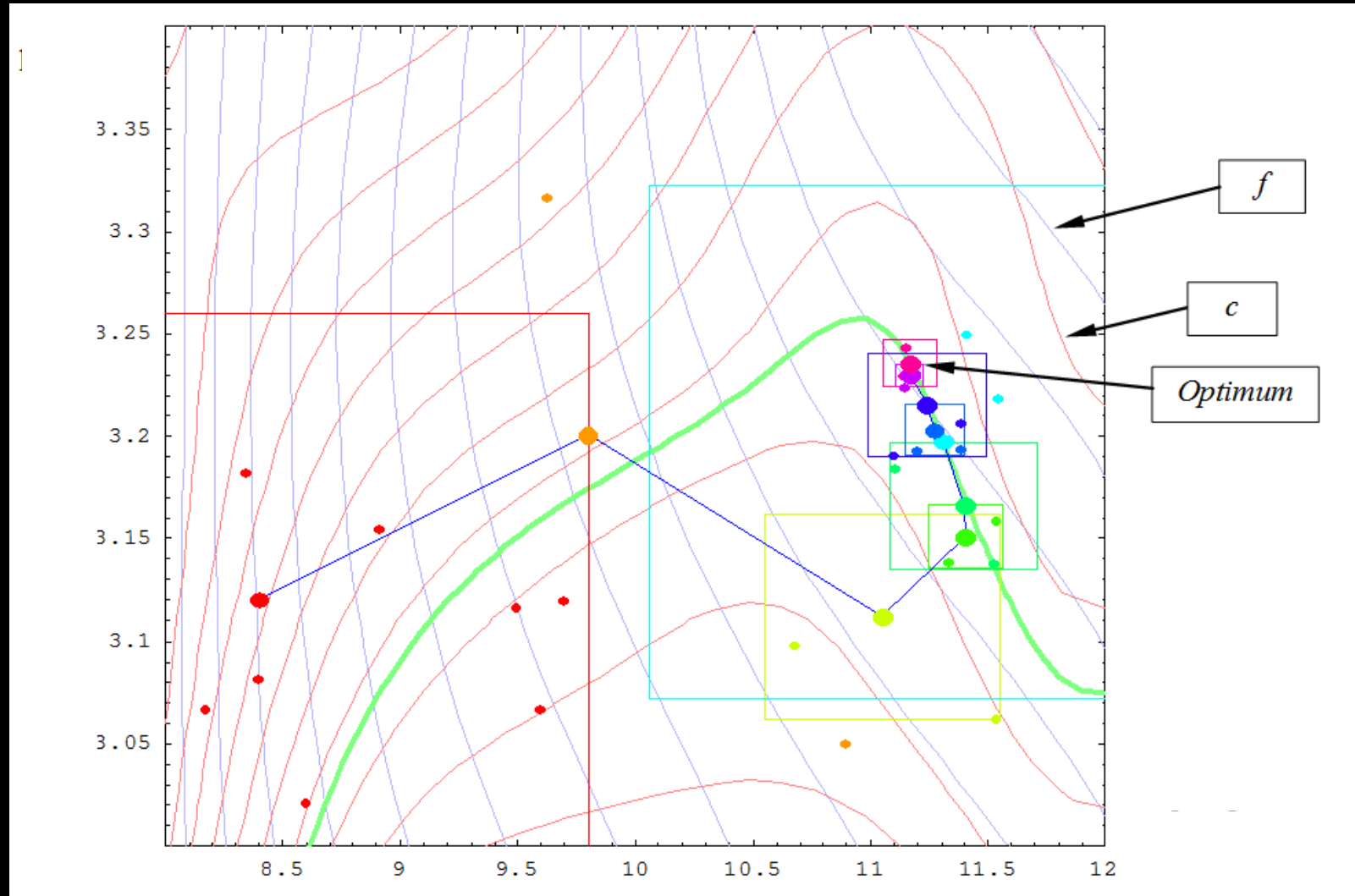
Obnašanje takšnih aproksimacij preizkušamo na množici testnih primerov, kot je recimo ta na sliki.

Z nevronske mreže poskusimo aproksimiramo vnaprej podano funkcijo (rdeča krivulja, ki se sicer malo slabše vidi), pri kateri poznamo samo nekaj vrednosti (rdeče točke). Te vrednosti uporabimo pri učenju nevronske mreže. Modre krivulje so približki funkcije, ki jih sobimo z nevronskimi mrežami, ki jih učimo z znanimi vrednostmi (rdeče točke). V tem primeru se vidi, da lahko z naučeno nevronske mreže kar dobro zadenemo dejansko funkcijo, ki smo jo aproksimirali.

Pri aproksimaciji procesov aproksimiramo več izhodnih količin procesa, ki so funkcija večjega števila vhodnih parametrov procesa. Zato so takšni modeli kompleksni, enostavne testne primere, kot je ta na sliki, pa uporabljamo za testiranje softvera in spoznavanje lastnosti aproksimacijskih modelov. Večinoma testiranje izvajamo na bolj kompliciranih matematičnih modelih z veliko parametri, vendar je to težko nazorno prikazati, zato je na sliki preprost model enodimenzionalen primer (to pomeni, da imamo samo en vhodni parameter).

Admin; 22.9.2011

System in Action



a.d.9

Prikazan je primer delovanja optimizacijskega postopka, kjer optimiramo dva procesna parametra.

Prikazane so konture namenske funkcije f (modro - to, kar minimiziramo) in konture omejitvene funkcije c (v tem primeru ene same - ki določa, v katerih mejah so dovoljeni parametri).

S postopkom iz debelejše rdeče točke na levi pridemo do označenega optimuma, ki ima najnižjo vrednost namenske funkcije v območju dovoljenih parametrov. Območje dovoljenih parametrov je omejeno z zeleno konturo, ki je črta, kjer je $c=0$ (dovoljeni parametri so tam, kjer je $c \leq 0$, nedovoljeni pa tam, kjer je $c > 0$).

Na sliki vsaka točka predstavlja vrednosti parametrov sistema, pri katerih so bile izračunane odzivne funkcije. Te izračunamo z numerično simulacijo, vssak tak izračun pa lahko traja tudi več dni, odvisno od kompleksnosti numeričnega modela.

Admin; 22.9.2011