



Kuriame
Lietuvos ateitį
2014–2020 metų
Europos Sąjungos
fondų investicijų
veiksmų programa

Projektas finansuojamas Europos regioninės plėtros fondo lėšomis (projekto Nr. 01.2.2-LMT-K-718-01-0071) pagal sutartį su Lietuvos mokslo taryba (LMTLT).

Programos „VK-KOKE PROCESŲ MODELIAVIMAS“ aprašas

Programa „VK-KOKE PROCESŲ MODELIAVIMAS“ skirta modeliuoti kuro elemento kietojo elektrolito ir elektrodų fizikinio nusodinimo iš garų fazės procesus bei kinetinių masės pernešimo ir katalizės procesus pagamintuose vienos kameros kietojo oksido kuro elementuose (VK-KOKE). Ši programa yra sudaryta iš trijų dalių, aprašančių deguonies difuziją, plonosios dangos augimo modeliavimą ir vidinių įtempių įtaką jonų pernašos procese. Norint paleisti programą, reikia pasirinkti dokumentą „OPEN program“, tada:

1. Norint apskaičiuoti deguonies jonų pasiskirstymą vienos kameros kietojo kūno kuro elemento elektrolite, kai vyksta cheminės reakcijos katodo ir anodo pusėse, vykstant deguonies jonų pernašai, reikia pasirinkti programos lango mygtuką „Fuel cell – Oxygen diffusion MODEL“.

Įvesties parametrai: naudojant dvi atskiras anodų ir katodų pasiskirstymo 2D matricas, kurias reikia laikyti ant pagrindinio kompiuterio ekrano, galima keisti duotąsias skaičiavimo sąlygas, kaip elektrolito mažiausio elemento dydžius dx , dy , dz , elektrolitą sudarančių elementų skaičių x , y , z kryptimis. Norint atlikti simuliaciją, reikia įvesti reakcijų greičių konstantas k_i , dujų sudėtį ir slėgį.

Programos išvestis: gaunami 3D elektrolito pjūviai ir matomas deguonies jonų koncentracijos pasiskirstymas. Taip pat, programa sumodeliuoja deguonies jonų srauto kitimą laiko atžvilgiu tiek katodo COKJ, tiek anodo COAJ pusėse bei nustato suminę deguonies jonų koncentraciją COT elektrolite, kintant laikui.

2. Norint modeliuoti plonųjų dangų, formuojamų fizikinio nusodinimo iš garų fazės metodais, augimo kinetiką, reikia pasirinkti programos lango mygtuką „Phase structure MODEL“.

Įvesties parametrai: plonosios dangos augimo laikas; modeliavimo eksperimento laiko žingsnis; skaičiavimo tinklelio dydžiai x , y , z kryptimis; prilipimo koeficientų k_{AA} , k_{AB} , k_{AS} , k_{BA} , k_{BB} , k_{BS} reikšmės; proporcingumo koeficientas p_A ; proporcingumo koeficientas p_B ; koeficientas („gradiento“ energijos) γ ; homogeninės sistemos laisvosios energijos daugianario funkcijos parametras; plokštumų, per kurias brėžiami skerspjūvio vaizdai, padėtys.

Programos išvestis: Paspaudus mygtuką „Calculate“, pradedamas plonosios dangos augimo modeliavimo eksperimentas (naudojant teksto laukeliuose esančias parametrų reikšmes). Baigus bet koki skaičiavimą, programa išsaugo programos kataloge visus galutinius skaičiavimo tinklelio duomenis dokumente „Results.txt“ ir nubrėžia skerspjūvio vaizdus per tuo metu nurodytas plokštumas. Paspaudus mygtuką „Draw cross-sectional images“, galima perbraižyti skerspjūvių vaizdus per bet kurias x , y , z ašims statmenas plokštumas.

3. Norint apskaičiuoti deguonies jonų koncentracijos kitimą vienos kameros kietojo kūno kuro elemento elektrolite įvertinus vidinius įtempius, atsirandančius dėl deguonies jonų difuzijos bei jų įtaką jonų pernašos procesui, reikia pasirinkti programos lango mygtuką „Stress and diffusion MODEL“.

Įvesties parametrai: difuzijos proceso trukmė; proceso temperatūra; santykinis deguonies jonų srautas; difuzijos koeficientas; difuzijos aktyvacijos energija; įtempius charakterizuojantis faktorius.

Programos išvestis: Paspaudus mygtuką „START“, pradedamas deguonies jonų pernašos proceso modeliavimo eksperimentas (naudojant teksto laukeliuose esančias parametrų reikšmes). Baigus bet kurį skaičiavimą, programos lange yra atvaizduojami deguonies jonų koncentracijos pasiskirstymo bei vidinių įtempių profiliai.