

Mikroreologické modelování – Particle Tracing Module

Jakub Koláček, Miroslav Orság, Miloslav Pekař

Fakulta chemická • VUT v Brně

Reologie: **nauka o deformaci (toku)**

Typický výstup: **viskozita**



~ odpor vůči toku

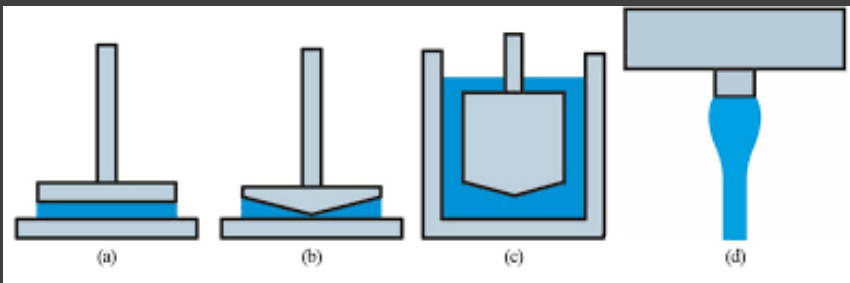


Měření reologických vlastností

**makro
(klasika)**

mikro

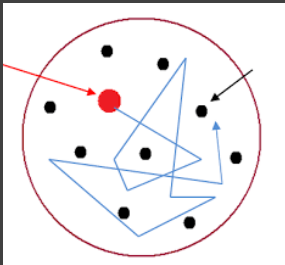
- pomocí malých částic



mikroreologie

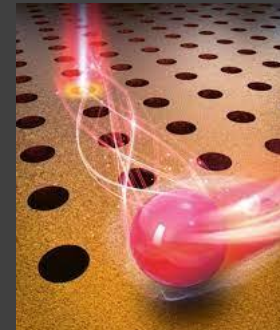
pasivní

- Brownův pohyb



aktivní

- pohyb vynucen (optická pinzeta)



mikroreologie

pasivní

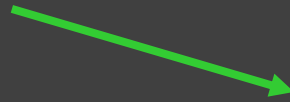
- **Brownův pohyb**



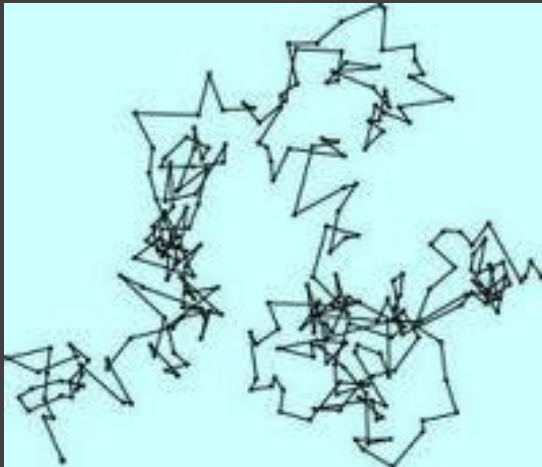
aktivní

- pohyb vynucen (optická pinzeta)

**dráha
částic(e)**



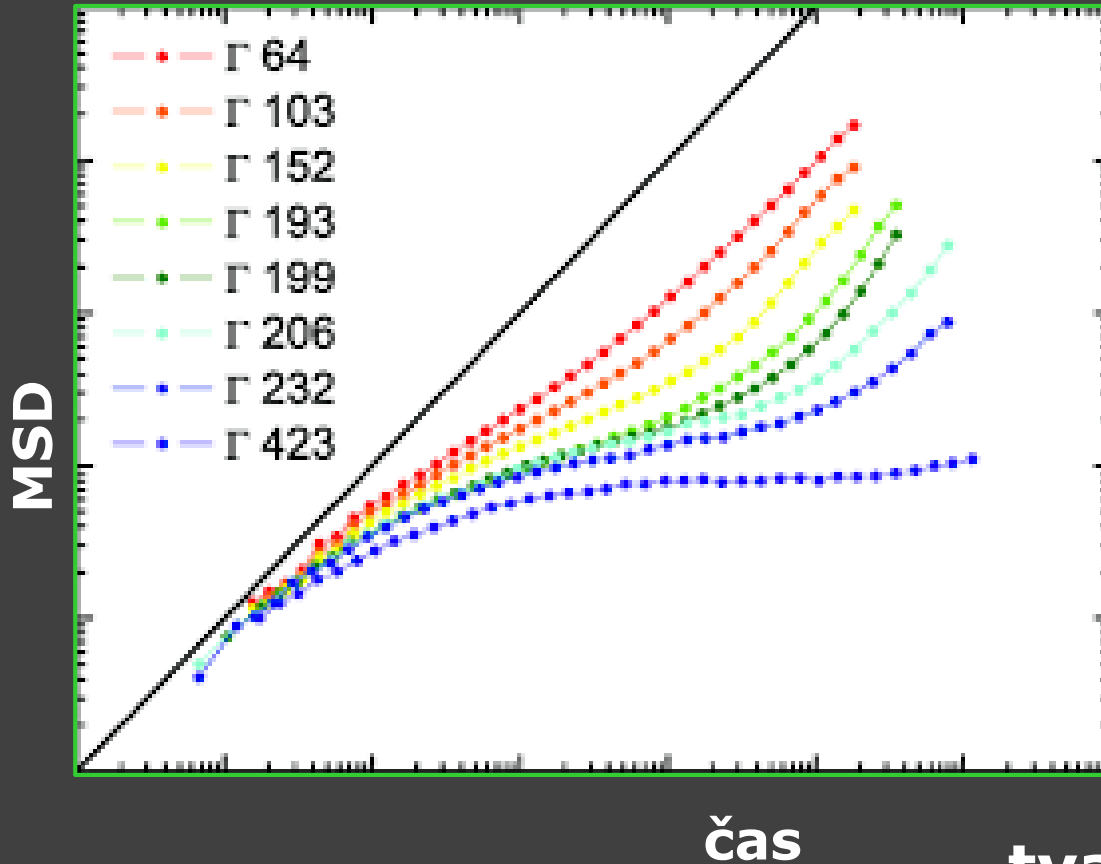
**střední čtverec
posunu**



MSD

**mean squared
displacement**

$$\langle \Delta x^2(\tau) \rangle = \langle |x(t + \tau) - x(t)|^2 \rangle_t$$



$$\langle \Delta x^2(\tau) \rangle = 2dD\tau$$

tvar, směrnice →
reologické parametry

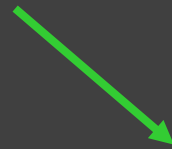
**modelovat pohyb částic
v různých prostředích**

počítačové experimenty

**vyhodnocovat
experimentální data**

modelování dráhy částic

- **různé techniky**
- **různé přístupy**
- **různé rovnice**



**particle-based
approach**

Newtonův zákon

$$\frac{d}{dt}(m_p \mathbf{v}) = \mathbf{F}$$

$$\mathbf{F}_D = \frac{1}{\tau_p} m_p (\mathbf{u} - \mathbf{v})$$

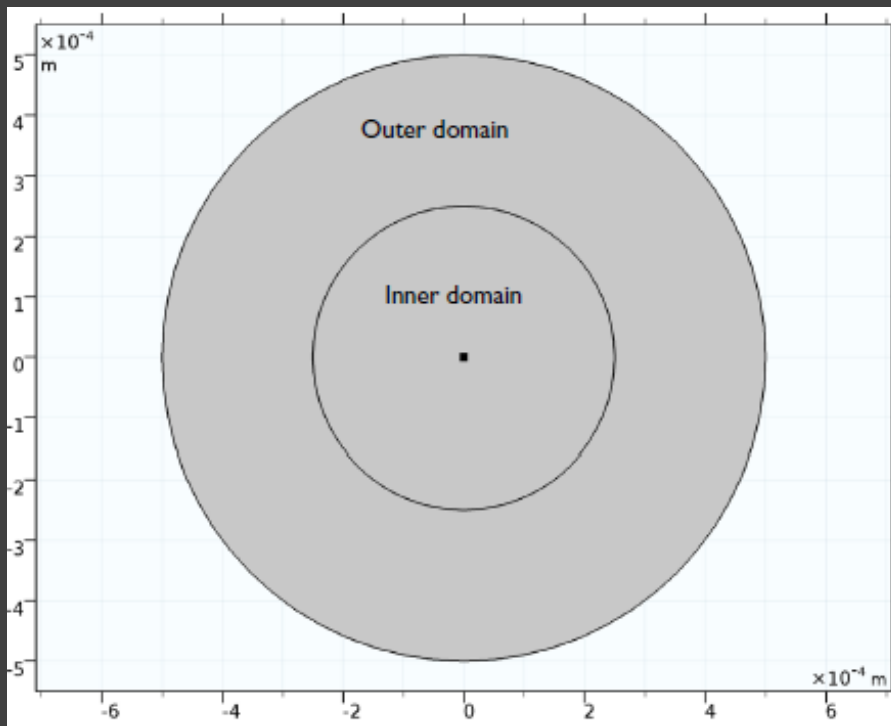
+

$$\mathbf{F}_b = \zeta \sqrt{\frac{12\pi k_B \mu T r_p}{\Delta t}}$$

unášecí

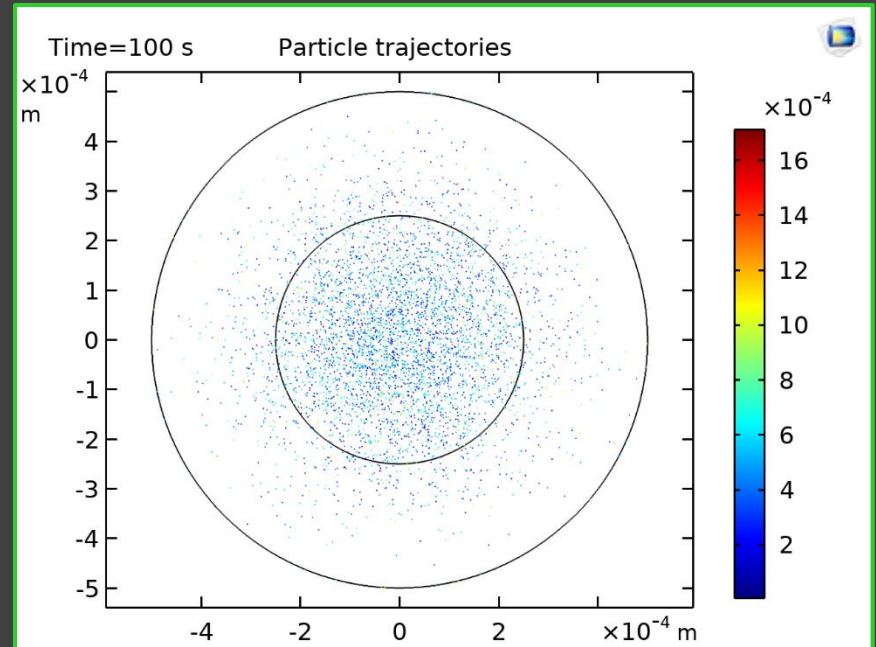
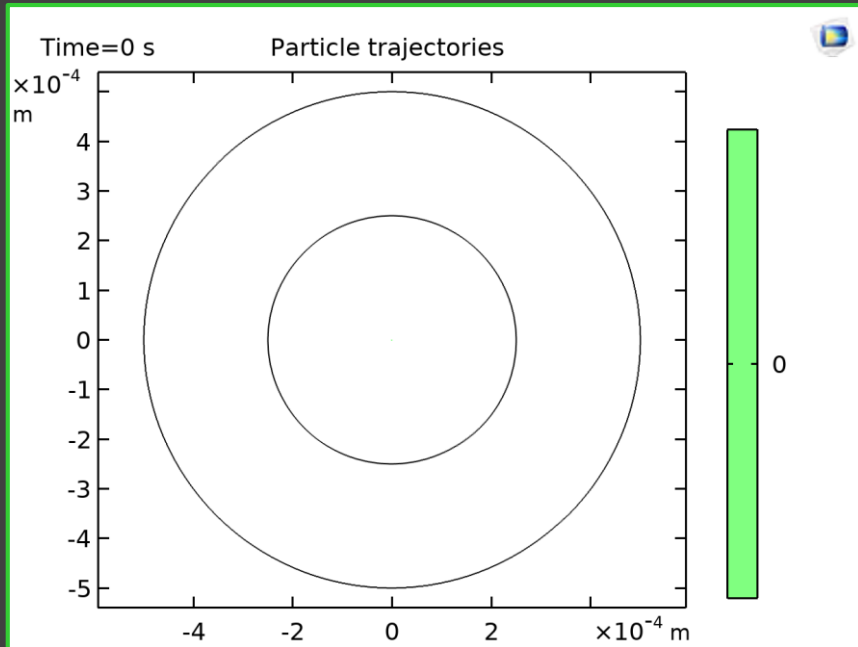
Brownova

vzorový příklad z databáze

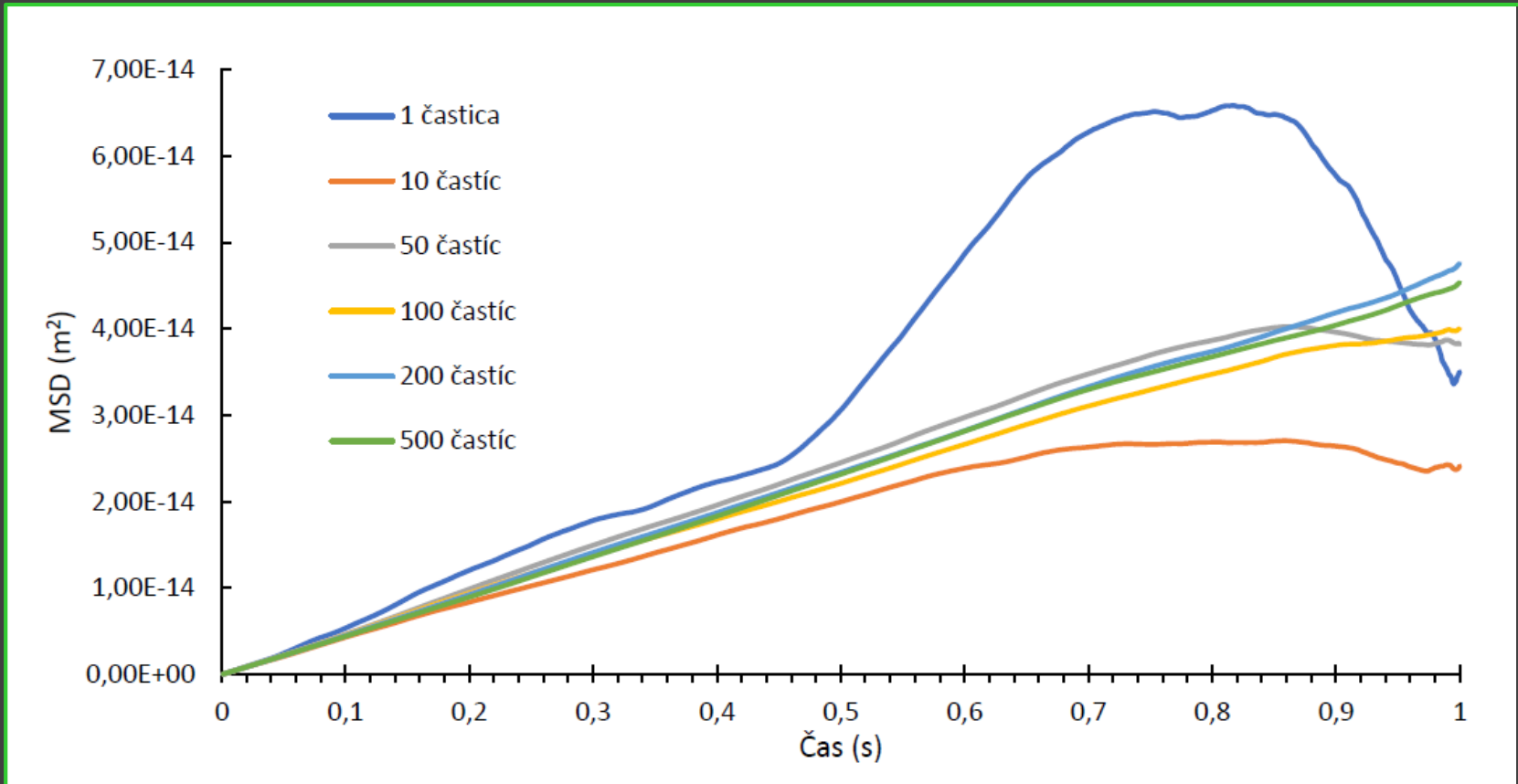


kruhová geometrie
vypouštění částic ze středu
„zamrznutí“ na stěně

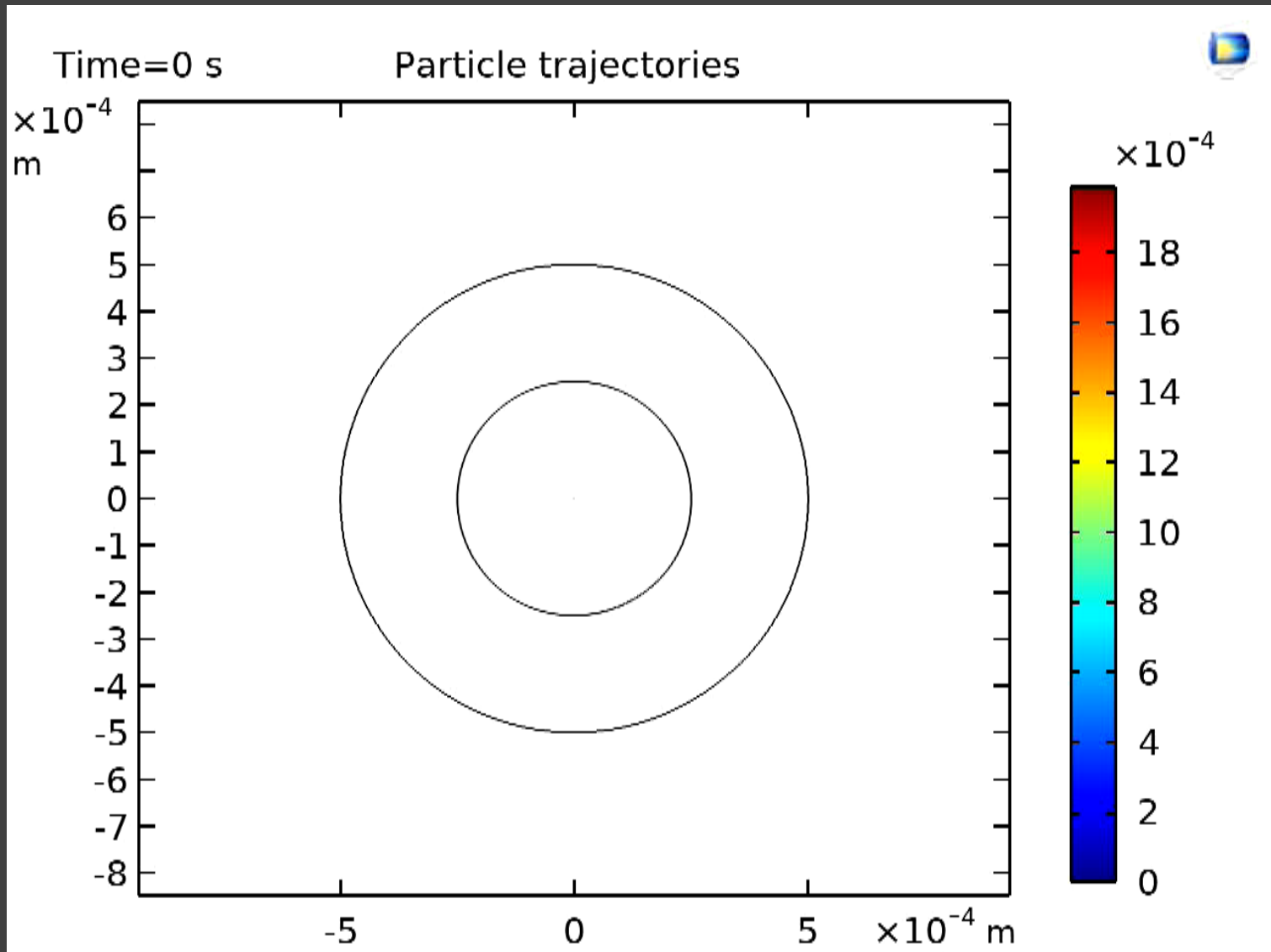
jednoduchá ukázka



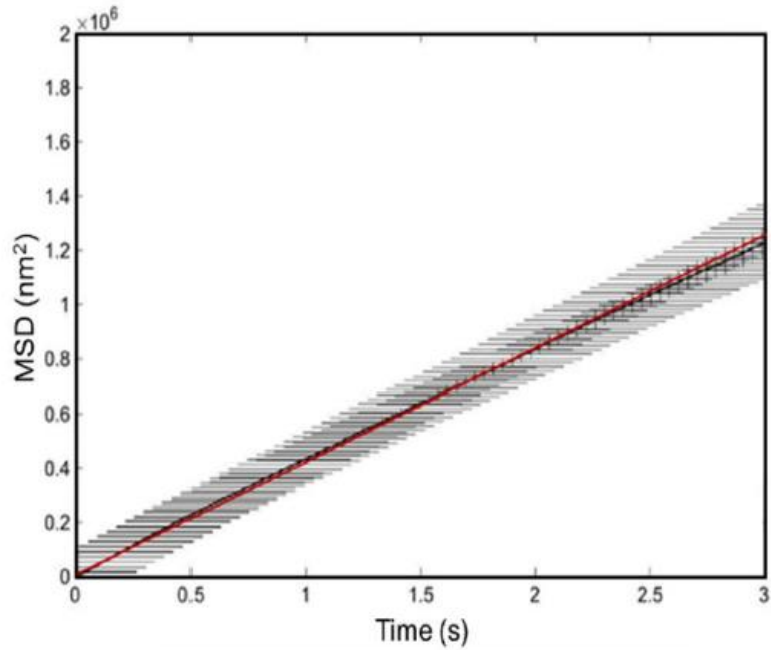
vliv počtu částic



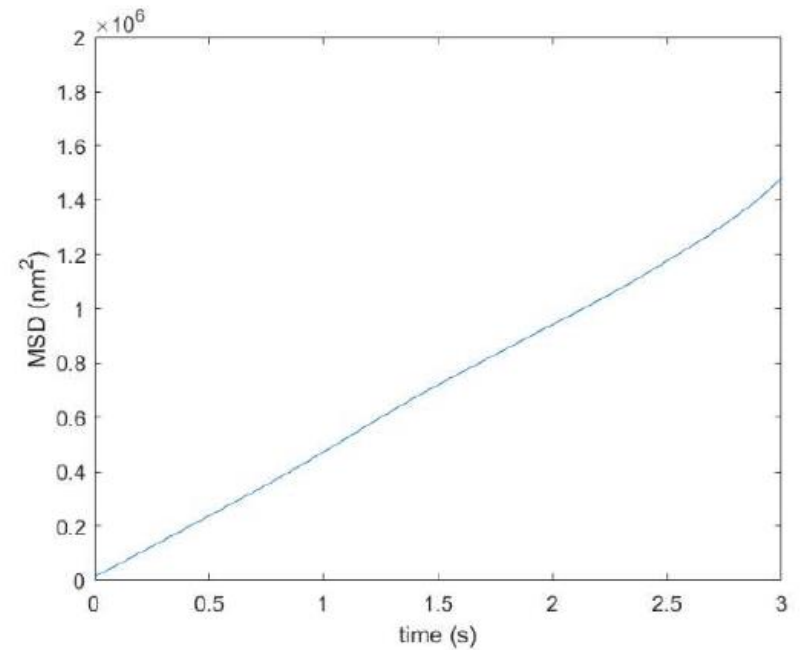
(MSD MATLABem)



modelování reálných dat

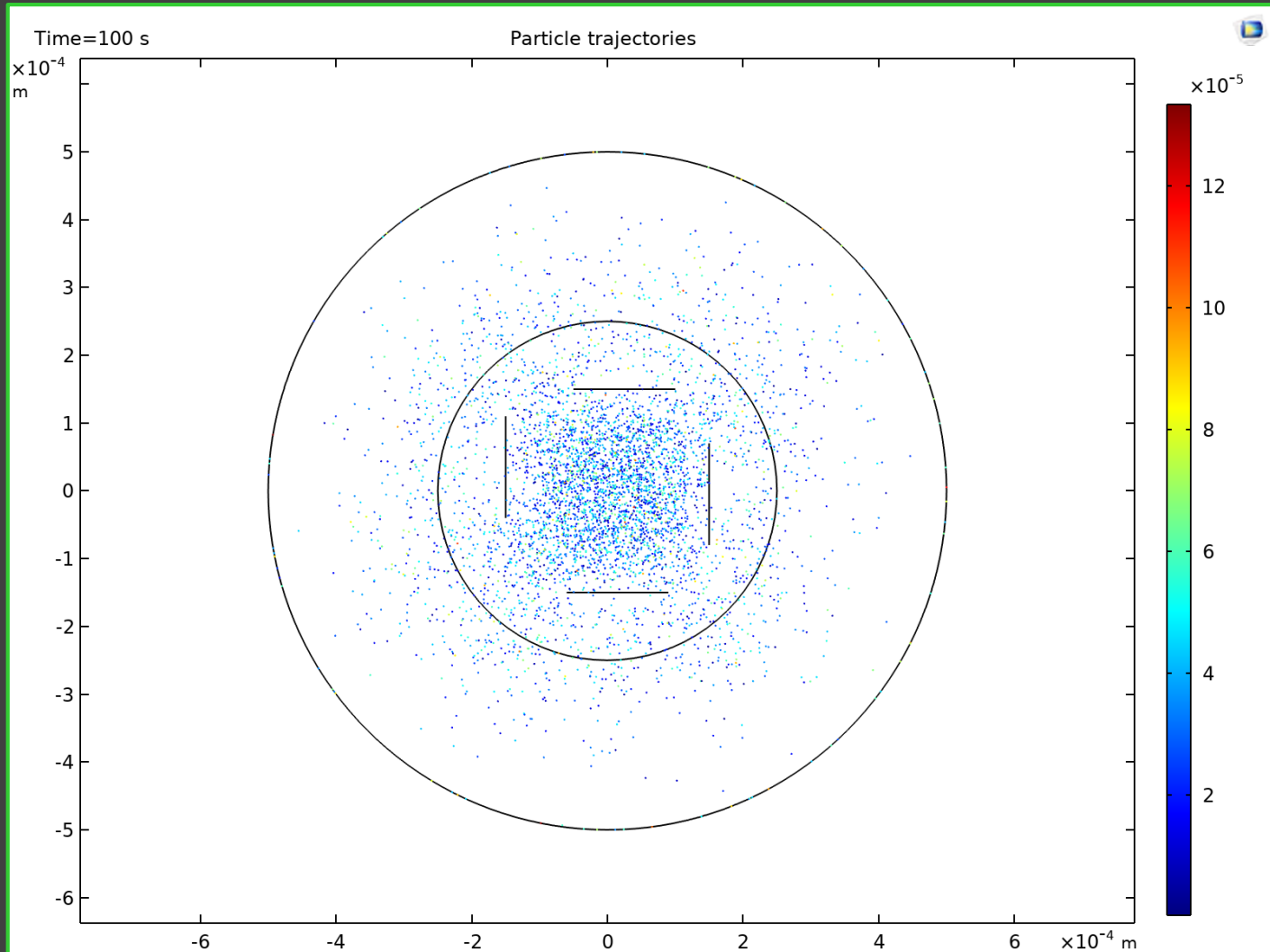


(4946 částic)

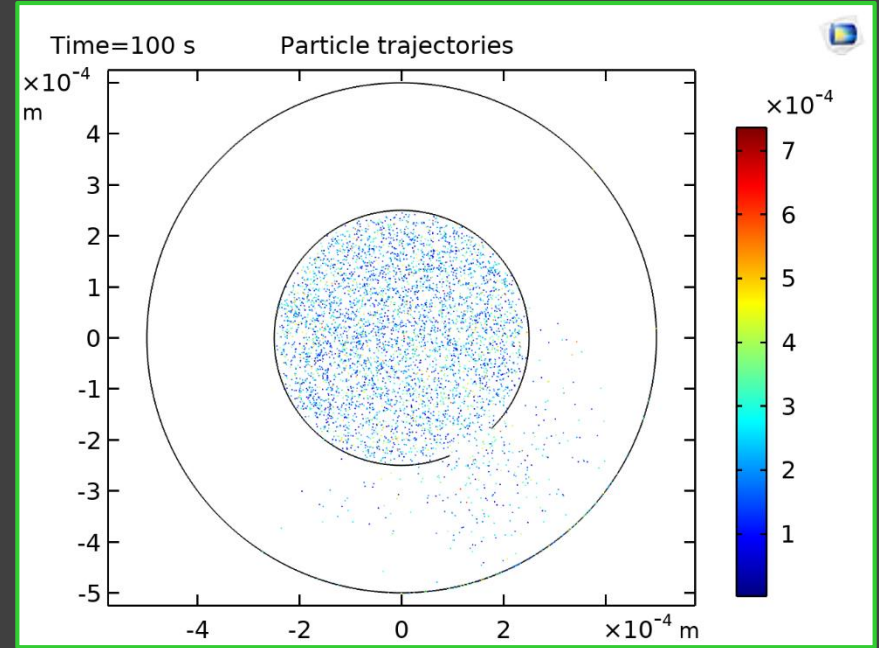
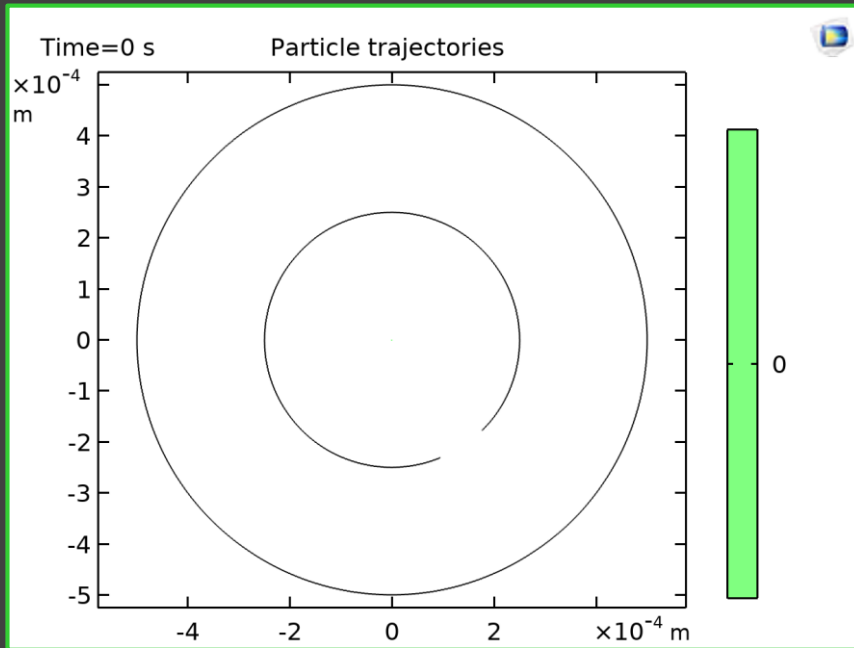


(500 částic)

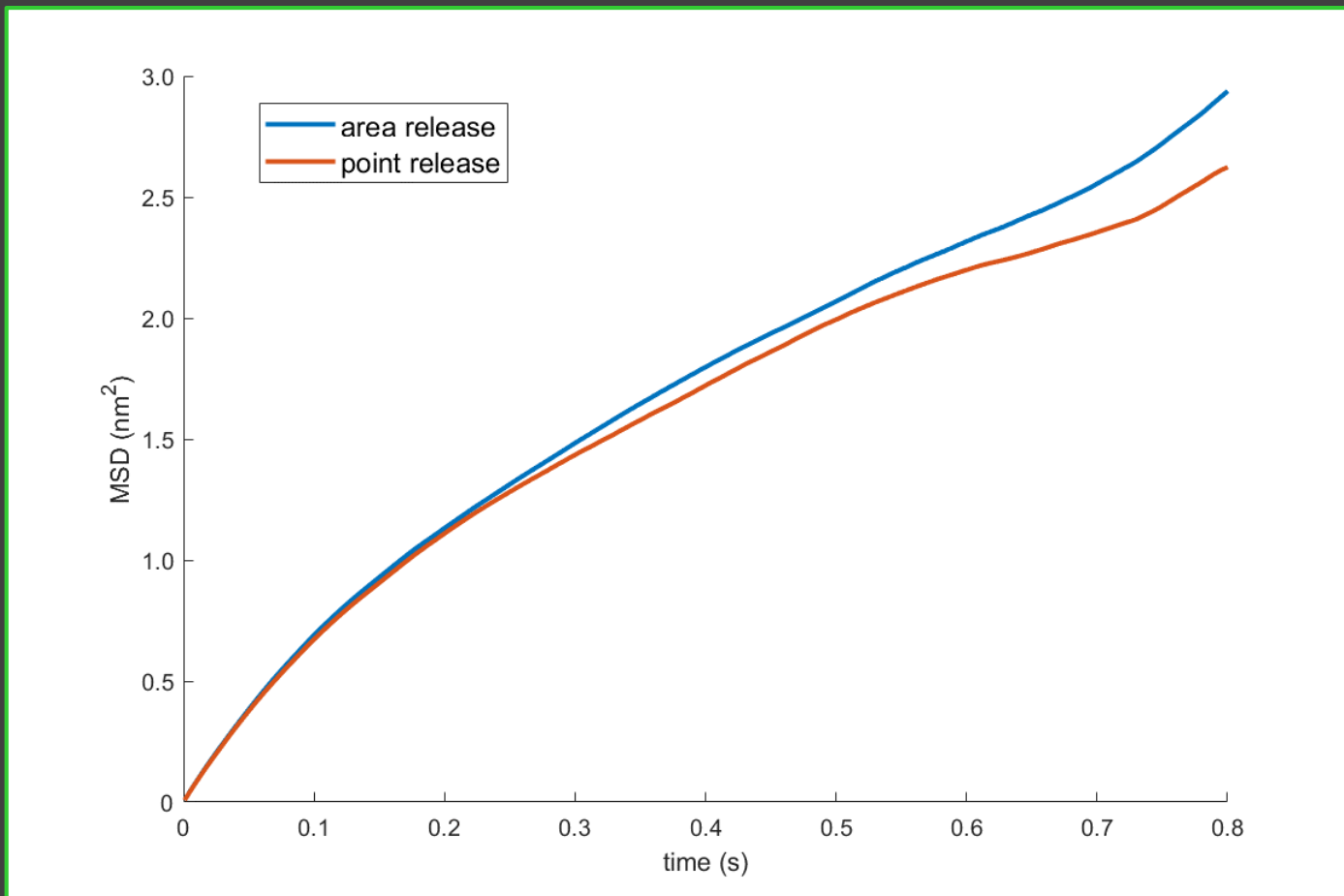
strukturování prostředí 1



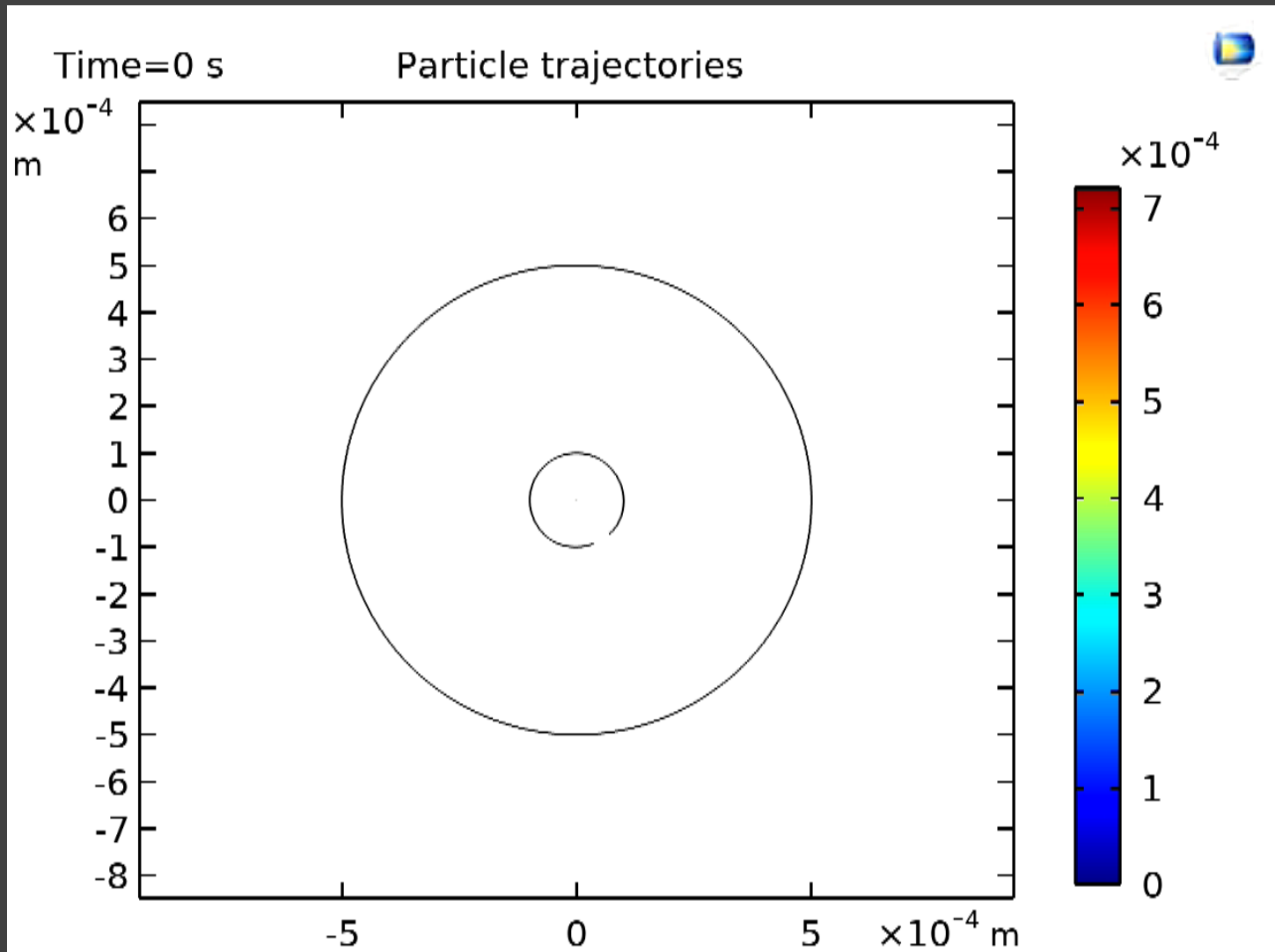
strukturované a pružné prostředí 1



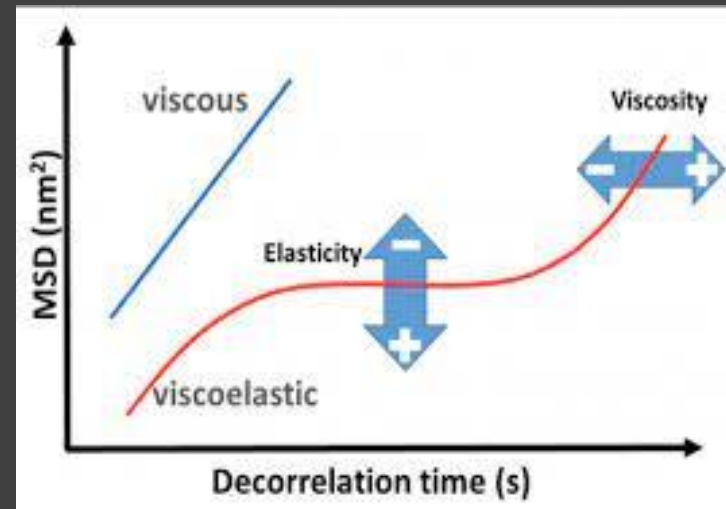
strukturované a pružné prostředí 2



strukturované a pružné prostředí - animace



viskoelastické prostředí hydrogely



$$\mathbf{F}_D = -G_0 \int_0^t \exp\left[-\frac{t-\tau}{\lambda}\right] \mathbf{v}(\tau) d\tau$$