



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ

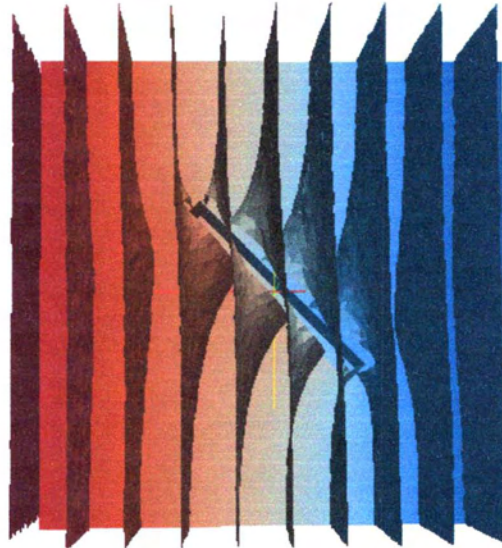
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Διπλωματική Εργασία

**Προσομοίωση διάχυσης διαμέσου σύνθετης
πολυμερικής μεμβράνης : η περίπτωση αέρα διαμέσου
μεμβράνης συσκευασίας τροφίμων.**

Υπό

ΚΩΣΤΙΔΗ ΕΥΑΝΘΙΑ



Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μερους των απαιτησεων για την αποκτηση του
διπλώματος Μηχανολόγου Μηχανικού

Βόλος Σεπτέμβριος 2013



**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ & ΚΕΝΤΡΟ ΠΛΗΡΟΦΟΡΗΣΗΣ
ΕΙΔΙΚΗ ΣΥΛΛΟΓΗ «ΓΚΡΙΖΑ ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ»**

Αριθ. Εισ.: 13312/1
Ημερ. Εισ.: 11-11-2014
Δωρεά: Συγγραφέα
Ταξινόμησης Κωδικός: ΠΤ – ΜΜ
2014
ΚΩΣ

© Κωστίδη Ευανθία

Η έγκριση της διπλωματικής εργασίας από το Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας δεν υποδηλώνει αποδοχή των απόψεων της συγγραφέα (Ν. 5343/32 αρ 202 παρ. 2)

Εγκρίθηκε από τα Μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής

Πρώτος εξεταστής Δρ Αθανάσιος Παπαθανασίου
(Επιβλέπων) Αναπληρωτής Καθηγητής
 Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
 Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Συνεξεταστές:

Δρ Νικόλαος Ανδρίτσος Αναπληρωτής
 Καθηγητής
 Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
 Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Δρ Ερρίκος Σταπουτζής
 Αναπληρωτής Καθηγητής
 Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών
 Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Ευχαριστίες

Στην οικογένειά μου για την ενθάρρυνση και στήριξή τους.

Στον επιβλέποντα για τις πολύτιμες συμβουλές του, το υλικό που μου διέθεσε και το ενδιαφέρον που έδειξε διαβάζοντας και σχολιάζοντας τα κείμενά μου.

Στους συνεπιβλέποντες Νικόλαο Ανδρίτσο και Ερρίκο Σταπουτζή για τις γνώσεις που μου μετέδωσαν, τις πολύτιμες συμβουλές τους και το ενδιαφέρον τους όλα τα χρόνια των σπουδών μου.

Τους φίλους και συμφοιτητές μου για τη γόνιμη ανταλλαγή απόψεων.

Όλους όσους με τις αναρτήσεις τους στο forum OpenFoam¹ με εισήγαγαν σε ένα νέο για μένα λογισμικό και ειδικά τον Bruno Santos που με καθοδήγησε στη αρχική εγκατάσταση του λογισμικού.

¹ <http://www.cfd-online.com/Forums/openfoam/>

Πίνακας Περιεχομένων:

0	ΈΠΟΨΗ	7
1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	10
2	ΜΕΘΟΔΟΣ ΕΡΕΥΝΑΣ	11
3	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΗ ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗ	12
3.1	ΓΕΝΙΚΑ	12
3.1.1	Σύνθετα πολυμερή.....	12
3.1.2	Σύνθετες μεμβράνες.....	14
3.2	ΘΕΩΡΙΑ ΔΙΑΧΥΣΗΣ ΣΕ ΠΟΛΥΜΕΡΕΣ	15
3.2.1	Συντελεστής Παράγοντα Βελτίωσης Φραγμού BIF.....	16
3.3	ΑΝΑΛΟΓΙΑ ΜΕΤΑΞΥ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ ΚΑΙ ΜΑΖΑΣ	19
4	ΔΙΑΘΕΣΙΜΑ ΕΡΓΑΛΕΙΑ	20
4.1	OPENFOAM.....	20
4.2	GMSH.....	21
4.3	PARAVIEW	21
5	ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΩΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ	22
5.1	ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟ ΜΕΛΕΤΗΣ ΚΑΙ ΟΡΙΑΚΕΣ ΣΥΝΘΗΚΕΣ	22
5.2	ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ	24
5.3	ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑ ΤΟΥ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ	25
5.4	ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ 2 ΚΑΙ 3 ΔΙΑΣΤΑΣΕΩΝ	27
5.5	ΠΡΟΕΤΟΙΜΑΣΙΑ – ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΠΟΙΗΣΗ ΓΙΑ ΕΚΤΕΛΕΣΗ ΤΗΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ	27
5.5.1	Διαστάσεις μεγεθών	28
5.5.2	Οριακές συνθήκες	29
5.5.3	Επιλυτής.....	30
5.5.4	Άλλοι επιλυτές.....	31
5.6	ΔΟΚΙΜΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ	31
5.7	ΕΠΑΛΗΘΕΥΣΗ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΓΙΑ ΟΜΟΙΟΓΕΝΕΣ ΥΛΙΚΟ	32
6	ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΚΑΙ ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ.....	34
6.1	ΕΠΙΦΑΝΕΙΕΣ ΊΣΗΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΓΙΑ ΔΙΑΦΟΡΕΣ ΓΩΝΙΕΣ ΦΥΛΛΙΔΙΟΥ	34
6.2	ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ ΓΙΑ ΔΙΑΦΟΡΕΣ ΓΩΝΙΕΣ ΚΑΤΕΥΘΥΝΣΗΣ ΡΟΗΣ-ΦΥΛΛΙΔΙΟΥ 37	
6.2.1	Υπολογισμός γινομένου $\alpha \cdot \phi$	39
6.2.2	Μεταβολή D/D_f με γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου μήκους 0.5.....	40
6.2.3	Μεταβολή D/D_f με γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου μήκους 0.3.....	42
6.2.4	Μεταβολή D/D_f με γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου μήκους 0.1.....	43

6.2.5	Μεταβολή ροής για μήκος φυλλιδίου 0.3 σε κέλυφος ακμής 1	45
6.2.6	Μεταβολή D/D_f για φυλλίδιο 0.3 σε κέλυφος 1	45
6.2.7	Σύγκριση ροής σε κέλυφος χωρίς φυλλίδιο και με φυλλίδιο υπό γωνία θ^0	48
7	ΣΧΟΛΙΑΣΜΟΣ – ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	49
7.1	ΣΧΟΛΙΑΣΜΟΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ	49
7.2	ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	50
7.3	ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ ΓΙΑ ΣΥΝΕΧΙΣΗ ΤΗΣ ΕΡΕΥΝΑΣ	50
8	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	52
9	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ	54
9.1	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 1: ΒΑΣΙΚΑ ΤΜΗΜΑΤΑ ΤΟΥ ΚΩΔΙΚΑ	54
9.1.1	Προετοιμασία πλέγματος	54
9.1.2	Έλεγχος πλέγματος	57
9.1.3	Οριακές συνθήκες	59
9.1.4	Διαστάσεις συντελεστή διάχυσης	60
9.1.5	Έλεγχος ροής	60
9.2	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ 2: ΕΠΙΦΑΝΕΙΕΣ ΙΣΗΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΓΙΑ ΔΙΑΦΟΡΕΣ ΓΩΝΙΕΣ ΦΥΛΛΙΔΙΟΥ ..	64

0 Έποψη

Προσομοίωση διάχυσης διαμέσου σύνθετης πολυμερικής μεμβράνης : η περίπτωση αέρα διαμέσου μεμβράνης συσκευασίας τροφίμων

Κωστίδη Ευανθία

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας 2013

Επιβλέπων: Δρ Αθανάσιος Παπαθανασίου Αναπληρωτής Καθηγητής Τμήμα
Μηχανολόγων Μηχανικών Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Η εργασία μας στοχεύει στη μελέτη διέλευσης μάζας διαμέσου σύνθετης πολυμερικής μεμβράνης με την τεχνική της προσομοίωσης και τη μέθοδο των συνοριακών σημείων. Μελετάται κέλυφος πολυμερούς μεμβράνης στο οποίο αντιστοιχεί (περιέχεται) ένα φυλλίδιο. Το φυλλίδιο κατά τις προσομοιώσεις αλλάζει προσανατολισμό (μεταβάλλεται η γωνία που σχηματίζει το φυλλίδιο με την κατεύθυνση της ροής). Διερευνάται η κατανομή της συγκέντρωσης στο κέλυφος, καθώς και η μεταβολή στη ροή μάζας διαμέσου της μεμβράνης.

Για τη δημιουργία κατά το στάδιο της προεπεξεργασίας (δημιουργία πλέγματος), κατά την εκτέλεση της προσομοίωσης, αλλά και κατά την επεξεργασία των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης, επιλέχθηκε λογισμικό ανοικτού κώδικα μια και έχει σημαντικά πλεονεκτήματα, όπως: οικονομία μέσω της χρήσης διαθέσιμου ελεύθερου κώδικα, μη δέσμευση με συγκεκριμένο προμηθευτή, προσαρμοστικότητα του μοντέλου (παρέμβαση στον κώδικα, κλήση άλλων προγραμμάτων κλπ).

Εξετάζεται η περίπτωση διάχυσης αέρα (οξυγόνου) διαμέσου νανοσύνθετης πολυμερικής μεμβράνης τροφίμων. Πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις για μια σειρά από γωνίες (από 0 μέχρι 90, ανά 15 μοίρες). Παρουσιάζονται η κατανομή της συγκέντρωσης και η ροή μάζας που διαχέεται για μέσου του κελύφους.

Επίσης παρουσιάζονται μια σειρά από γραφήματα του λόγου του συντελεστή διάχυσης σε μεμβράνη χωρίς φυλλίδιο και μεμβράνη με φυλλίδιο.

Από τη μελέτη των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης φαίνεται ότι μπορεί να εμφανιστεί ποιοτικά (αλλά και ποσοτικά) η εικόνα της κατανομής της συγκέντρωσης στο κέλυφος που εξετάζεται. Επίσης μπορεί να εκτιμηθεί η επίπτωση της ύπαρξης του φυλλιδίου στο κέλυφος στην διάχυση. Η εκτίμηση της ροής μάζας που διαχέεται διαμέσου του κελύφους, για μια σειρά από γωνίες φυλλιδίου - κατεύθυνσης ροής επιτρέπει την εξαγωγή συμπερασμάτων για τη λήψη αποφάσεων, ως προς την επιθυμητή γωνία που πρέπει να επιτευχθεί. Η προσομοίωση μπορεί να βοηθήσει στη λήψη αποφάσεων χωρίς την διενέργεια κοστοβόρων και χρονοβόρων πειραμάτων στο εργαστήριο ή τουλάχιστον στον ορθό σχεδιασμό των εργαστηριακών δοκιμών.

Σε γενικές γραμμές οι καμπύλες που σχεδιάστηκαν μετά την επεξεργασία των δεδομένων της προσομοίωσης για 2 και 3 διαστάσεις, παρόλο που παρομοιάζουν, έχουν διαφορές και μπορεί να οδηγήσουν σε εσφαλμένα συμπεράσματα, αν επιδιώκεται ακρίβεια και όχι ταχύτητα.

Πίνακας συμβόλων:

J : ροή μάζας ανά μονάδα επιφάνειας (σε kg/sm^2)

C : συγκέντρωση διαλυμένης ουσίας (kg/m^3)

D : ο συντελεστής διάχυσης ο οποίος εκφράζει την ικανότητα των ατόμων προς διάχυση (σε m^2/s)

∇C : η βαθμίδα συγκέντρωσης της διαχεομένης ουσίας (σε $(\text{kg}/\text{m}^3)/\text{m}$)

∇ : κλίση (ανάδελτα)

A = περιοχή διαθέσιμη για διάχυση στην αρχική μεμβράνη

A_f = περιοχή διαθέσιμη για διάχυση στην ενισχυμένη μεμβράνη

V = όγκος διαθέσιμος για διάχυση στην αρχική μεμβράνη

V_f = όγκος διαθέσιμος για διάχυση στην ενισχυμένη μεμβράνη

D = συντελεστής διάχυσης στην αρχική μεμβράνη

D_f = συντελεστής διάχυσης στην ενισχυμένη μεμβράνη

L = πάχος μεμβράνης

L' = η απόσταση που πρέπει να διανύσουν τα φυλλίδια για να διαπεράσουν την μεμβράνη

H ακμή κελύφους

a (μήκος l /πάχος t του φυλλιδίου)

ϕ ποσοστό (%) φόρτισης των φυλλιδίων.

θ γωνία μεταξύ της κατεύθυνσης ροής μάζας και φυλλιδίου

1 Εισαγωγή

Η διέλευση μάζας διαμέσου της μεμβράνης, επιθυμητή ή όχι, μελετάται με στόχο τη βελτίωση επίτευξης του επιθυμητού αποτελέσματος. Η βελτίωση του φαινομένου μπορεί να επιτευχθεί με την ανάμιξη δύο ή περισσότερων υλικών κατά την κατασκευή της μεμβράνης δημιουργώντας σύνθετα υλικά. Η βελτίωση των ιδιοτήτων μόνωσης των μεμβρανών με την προσθήκη νανοσύνθετων φυλλιδίων στην κατεύθυνση της διάχυσης αποδίδεται στην αύξηση της διανυόμενης απόστασης, την οποία ακολουθούν τα διαχεόμενα μόρια και στην μείωση της περιοχής που διατίθεται για διάχυση.

Ο συντελεστής βελτίωσης φραγμού BIF χρησιμοποιείται για να ποσοτικοποιήσει την βελτίωση στη διάχυση μέσω της μεμβράνης, συνδέοντας τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά (μήκους/πάχος του φυλλιδίου) και το ποσοστό (%) φόρτισης των φυλλιδίων. Οι βασικοί νόμοι που εφαρμόζονται κατά τη διάχυση μιας αραιής διαλυμένης ουσίας μέσω μιας μεμβράνης είναι οι νόμοι του Fick και ο νόμος διατήρησης της μάζας.

Μια περίπτωση σύνθετης πολυμερικής μεμβράνης είναι η μεμβράνη συσκευασίας τροφίμων, όπου με την προσθήκη φυλλιδίων στο πολυμερές, επιδιώκεται η φραγή της εισόδου αέρα (οξυγόνου), μέσω διάχυσης, που οδηγεί στην αλλοίωσή τους.

Για το φαινόμενο της μεταφοράς μάζας διαμέσου μεμβράνης έχουν δημιουργηθεί μοντέλα που το περιγράφουν. Η προσομοίωση αυτών των μοντέλων με προγράμματα υπολογιστών, μπορεί να οδηγήσει σε οικονομικό τρόπο πρόβλεψης των ιδιοτήτων τους. Η δημιουργία μοντέλου και προσομοίωση σε ανοικτό κώδικα (όπως το OpenFOAM) έχει σημαντικά πλεονεκτήματα όπως: οικονομία μέσω της χρήσης διαθέσιμου ελεύθερου κώδικα, μη δέσμευση με συγκεκριμένο προμηθευτή, προσαρμοστικότητα του μοντέλου (παρέμβαση στον κώδικα, κλήση άλλων προγραμμάτων κλπ).

2 Μέθοδος έρευνας

Για τη διεκπεραίωση της εργασίας μας αρχικά διεξήχθη βιβλιογραφική ανασκόπηση. Χρησιμοποιήθηκαν οι κλασικές τεχνικές βιβλιογραφικής ανασκόπησης, έρευνα στις διεθνείς βιβλιογραφικές βάσεις επιστημονικών περιοδικών, η διεθνής και Ελληνική βιβλιογραφία συμπεριλαμβανόμενων επιστημονικών περιοδικών και συνεδρίων. Με την πληροφόρηση που συγκεντρώθηκε στα προηγούμενα βήματα σχεδιάστηκαν τα βήματα εργασίας για τη μελέτη της διάχυσης διαμέσου σύνθετης πολυμερικής μεμβράνης.

Αποφασίστηκε να μελετηθεί σε ένα κέλυφος (cell) που περιέχει ένα φυλλίδιο, η επίπτωση στη ροή μάζας ανά μονάδα επιφάνειας, της αλλαγής (προσανατολισμός των φυλλιδίων) στη γωνία (από 0 μέχρι 90, ανά 15 μοίρες) που σχηματίζει το φυλλίδιο με την κατεύθυνση ροής. Προσδιορίστηκαν οι διαστάσεις του κελύφους και του φυλλιδίου, καθώς και οι οριακές συνθήκες.

Για τη δημιουργία της προσομοίωσης επιλέχθηκε λογισμικό ανοικτού κώδικα (OpenFOAM) μια και έχει σημαντικά πλεονεκτήματα όπως: οικονομία μέσω της χρήσης διαθέσιμου ελεύθερου κώδικα, μη δέσμευση με συγκεκριμένο προμηθευτή, προσαρμοστικότητα του μοντέλου (παρέμβαση στον κώδικα, κλήση άλλων προγραμμάτων κλπ).

Έπρεπε να αλλάζουν τόσο οι διαστάσεις κελύφους και φυλλιδίου καθώς και ο προσανατολισμός του φυλλιδίου. Για την απαιτούμενη δημιουργία του πλέγματος (mesh) της προσομοίωσης επιλέχθηκε το λογισμικό Gmsh. Στη συνέχεια έγινε η μεταφορά του πλέγματος στο λογισμικό OpenFOAM.

Επιλέχθηκε και τροποποιήθηκε επιλυτής και έγινε η προετοιμασία για την προσομοίωση (δημιουργία απαιτούμενων αρχείων, παράμετροι, σταθερές κλπ). Δημιουργήθηκαν τα απαιτούμενα αρχεία για την μετά- επεξεργασία στη συνέχεια με το λογισμικό ParaView.

Κατά τη μετά- επεξεργασία λήφθηκαν διάφορα στοιχεία, όπως ροή μάζας των σημείων κατά μήκος γραμμής και επιφάνειας καθώς επίσης επιφάνειες ίσης συγκέντρωσης. Στη συνέχεια υπολογίστηκαν συντελεστές βελτίωσης και σχεδιάστηκαν διαγράμματα.

Ακολούθησε σχολιασμός, παρατηρήσεις και καταγραφή συμπερασμάτων.

3 Βιβλιογραφική ανασκόπηση

Ανάμεσα στην πληθώρα των εφαρμογών των πολυμερών είναι και οι μεμβράνες διαφόρων χρήσεων. Η επιθυμητή χρήση μπορεί να είναι είτε ο πλήρης αποκλεισμός διέλευσης μιας ουσίας διαμέσου της μεμβράνης, όπως η εισχώρηση αέρα σε μια αεροστεγή συσκευασία τροφίμου, είτε η επιλεκτική διέλευση μιας ουσίας διαμέσου της μεμβράνης, όπως στην αντίστροφη όσμωση.

Η διέλευση μάζας διαμέσου της μεμβράνης, επιθυμητή η όχι, μελετάται με στόχο την βελτίωση επίτευξης του επιθυμητού αποτελέσματος. Η βελτίωση του φαινομένου μπορεί να επιτευχθεί με την ανάμιξη δύο ή περισσότερων υλικών κατά την κατασκευή της μεμβράνης δημιουργώντας σύνθετα υλικά.

Για το φαινόμενο της μεταφοράς μάζας διαμέσου της μεμβράνης έχουν δημιουργηθεί μοντέλα που το περιγράφουν. Η προσομοίωση αυτών των μοντέλων με προγράμματα υπολογιστών μπορεί να οδηγήσει σε οικονομικό τρόπο πρόβλεψης των ιδιοτήτων τους.

3.1 Γενικά

3.1.1 Σύνθετα πολυμερή

Σαν σύνθετο υλικό ορίζεται ο συνδυασμός δύο ή περισσότερων υλικών όπου το καθένα έχει διαφορετικές ιδιότητες. Σε αυτές τις περιπτώσεις λαμβάνουμε ένα εξαιρετικό συνδυασμό ιδιοτήτων με την ανάμιξη δύο ή περισσότερων υλικών. Αυτή η βελτιωμένη συμπεριφορά αναφέρεται σαν αρχή της συνδυασμένης δράσης.

Ο σύγχρονος όρος «σύνθετα υλικά» αναφέρεται σε υλικά που προκύπτουν τεχνητά και όχι φυσικά. Επιπλέον οι δύο φάσεις του σύνθετου υλικού πρέπει να είναι χημικά ανόμοιες και χωρισμένες με μια διακριτή διεπιφάνεια. Τα σύνθετα υλικά ταξινομούνται σε τρεις γενικές κατηγορίες: (α) ενισχυμένα με σωματίδια, (β) ενισχυμένα με ίνες και (γ) δομικά σύνθετα. Κάθε κατηγορία έχει τουλάχιστον δύο υποδιαίρεσεις. Στην πρώτη περίπτωση η διεσπαρμένη φάση έχει ίδιες περίπου διαστάσεις σε όλες τις κατευθύνσεις. Στη δεύτερη περίπτωση η διεσπαρμένη φάση έχει τη γεωμετρία φυλλιδίου (δηλ. μεγάλη αναλογία λόγου μήκους/πάχους). Στην τρίτη περίπτωση υπάρχει συνδυασμός σύνθετων και ομοιογενών υλικών (Μητσούλης Ευ. , 1998).

Τα περισσότερα σύνθετα υλικά αποτελούνται από δύο φάσεις: τη μήτρα, που είναι συνεχής και περιβάλλει την άλλη φάση και τη διεσπαρμένη φάση. Η μήτρα των σύνθετων υλικών είναι ζωτικό κομμάτι της σύστασής τους. Ο ρόλος της μήτρας συνίσταται σε συγκράτηση των φυλλιδίων μεταξύ τους, αλλά και άλλες σημαντικές ιδιότητες του σύνθετου υλικού και η επιλογή της κατάλληλης μήτρας εξαρτάται από τη θερμοκρασία και το περιβάλλον χρήσης του υλικού.

Οι ιδιότητες του σύνθετου υλικού είναι συνάρτηση των ιδιοτήτων των δύο φάσεων, των σχετικών τους ποσοστών αναλογίας και της γεωμετρίας της διεσπαρμένης φάσης. Η τελευταία σημαίνει το σχήμα και το μέγεθος των διεσπαρμένων σωματιδίων, την κατανομή τους και τον προσανατολισμό τους.

Στα προηγμένα σύνθετα υλικά, τα ενισχυτικά μέσα είναι κατασκευασμένα είτε από ανόργανα υλικά (γυαλί, άνθρακας, μέταλλα, κεραμικά) είτε από οργανικά υλικά (πολυμερή).

Σε αντίθεση με τα συμβατικά σύνθετα πολυμερούς μήτρας τα νανοσύνθετα ορίζονται ως τα σύνθετα υλικά στα οποία η διεσπαρμένη φάση αποτελείται από εγκλείσματα με μέγεθος στην τάξη της νανοκλίμακας.

Λόγω της εξαιρετικά μεγάλης ειδικής επιφάνειας των νανοεγκλεισμάτων η προσθήκη μόνο ενός μικρού ποσοστού τους είναι αρκετή για να προκληθούν σημαντικές αλλαγές στις φυσικές, χημικές, μηχανικές, ηλεκτρικές και ιδιότητες μόνωσης του πολυμερούς, ιδίως στις περιπτώσεις όπου απαιτείται η χρήση εγκλεισμάτων με πολύ μεγάλο λόγο μήκους/διαμέτρου (α). Οι Gusev & Lusti (2001) με την εργασία τους συμπεραίνουν ότι φυλλίδια της τάξης aspect ratio του 10^3 είναι εξαιρετικά αποτελεσματικά στην βελτίωση του παράγοντα βελτίωσης φραγμού στα νανοσύνθετα, ενώ αντίθετα αυτά με μικρότερο είναι λιγότερο αποτελεσματικά.

Τα πρόσθετα ενισχυτικά εγκλείσματα που χρησιμοποιούνται μπορούν να έχουν σχηματική μορφή ίνας, σφαίρας, δίσκου, πλακιδίου.

3.1.2 Σύνθετες μεμβράνες

Οι μεμβράνες ορίζονται σαν φραγμοί ικανοί να διαχωρίζουν δύο φάσεις περιορίζοντας παράλληλα τη μεταφορά χημικών συστατικών με επιλεκτικό τρόπο (Intatec 2012 σελ 11).

Τα τελευταία χρόνια παρουσιάστηκε ένα αξιοσημείωτο ενδιαφέρον για σύνθετες μεμβράνες στις οποίες γίνεται χρήση ανόργανων ενισχυτικών μέσων σε μορφή πλάκας ή φυλλιδίου για υψηλές τιμές του λόγου του μήκους του φυλλιδίου προς το πάχος του (aspect ratio). Αυτές οι περιπτώσεις ενίσχυσης περιλαμβάνουν φυλλίδια με διαστάσεις της τάξεως του μικρού (μm), από ανόργανα υλικά όπως η μίκα και πιο πρόσφατα σε διαστάσεις νανοκλίμακας, χρησιμοποιώντας ορυκτά αργίλου όπως ο Hectorite, Saponite και ο Montmorillonite (Silvestre & Cimmino 2013, σ.338).

Έχει αποδειχθεί ότι τέτοιου είδους ενισχυτικά μέσα είναι πολύ αποτελεσματικά αφού έχουν τη δυνατότητα να αυξήσουν σημαντικά τη διανυόμενη απόσταση που ακολουθούν τα διαχεόμενα μόρια διαμέσου της μεμβράνης (Chen & Parathanasiou 2007)(Anadão κ.ά. 2013.)(Bhunia κ.ά. 2012). Επιπλέον πολύ σημαντικό παράγοντα αποτελεί το γεγονός ότι η επίτευξη των επιθυμητών ιδιοτήτων μόνωσης απαιτεί μικρά ποσοστά φόρτισης των ενισχυτικών μέσων και επομένως μικρό συνολικό κόστος όπως συγκεντρωτικά αναφέρουν οι Gusev & Lusti (2001).

Οι (Lusti κ.ά. 2004) συνοψίζουν τους παράγοντες που επηρεάζουν τη μεταβολή του φραγμού στη διάχυση που εμφανίζουν τα δημιουργούμενα σύνθετα υλικά. Τέτοιοι είναι: το ποσοστό φόρτισης των ενισχυτικών μέσων, η σχέση διαστάσεων των φυλλιδίων (aspect ratio), ο βαθμός απολέπισης (exfoliation) των φυλλιδίων, η κατανομή προσανατολισμού των φυλλιδίων, ο πιθανός μετασχηματισμός σε μοριακό επίπεδο στη μήτρα και/ή στη διεπιφάνεια μήτρας φυλλιδίου. Επισκόπηση των πειραματικών και τεχνικών μοντελοποίησης στη διερεύνηση των νανοσύνθετων βιο-πολυμερών μπορεί να βρεθεί στο άρθρο των (Kumar κ.ά. 2011). Καταλήγουν ότι τα μαθηματικά μοντέλα των μηχανικών και ιδιοτήτων φραγμού, των βιο-νανοσύνθετων πολυμερών, μπορούν να βοηθήσουν στην κατανόηση των βελτιωμένων ιδιοτήτων των υλικών αυτών.

Η δημιουργία νανοσύνθετων μεμβρανών συσκευασίας τροφίμων οδηγεί σε βελτίωση της διάχυσης αέρα (οξυγόνου) διαμέσου τους αυξάνοντας τη διατηρησιμότητά τους (Bhunia κ.ά. 2012).

3.2 Θεωρία διάχυσης σε πολυμερές

Η διάχυση μιας αραιής διαλυμένης ουσίας μέσω μιας μεμβράνης είναι μία διαδικασία μεταφοράς μάζας που περιγράφεται βασικά από το δεύτερο νόμο του Fick. Υποτίθεται ότι υπάρχει μόνο μία προς διάχυση ουσία. Η χρονική μεταβολή της συγκέντρωσης, σε κάθε σημείο του διαλύματος, είναι ανάλογη της χωρικής μεταβολής της ροής μάζας (J) και δίδεται, υπό συνθήκες σταθερού συντελεστή διάχυσης, από την παρακάτω σχέση:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (1)$$

όπου:

C: η συγκέντρωση διαχεομένων ατόμων (σε kg/m³)

x: η απόσταση (σε m)

t: ο χρόνος (σε sec)

D: ο συντελεστής διάχυσης (σε m²/s)

Σε σταθερές συνθήκες, ο νόμος της διατήρησης της μάζας απαιτεί

$$\nabla J = 0 \quad (2)$$

και το μοντέλο διάχυσης του Fick που διέπει τη διαδικασία διάχυσης ενός διηθήματος ομοιογενούς σε μια λεπτή μεμβράνη σε σταθερές συνθήκες (συνθήκες μόνιμης κατάστασης) μπορεί να γραφτεί ως:

$$J = - D \cdot \nabla C \quad (3)$$

όπου:

J : ροή μάζας ανά μονάδα επιφάνειας (σε kg/ sm²)

C : συγκέντρωση διαλυμένης ουσίας (kg/m³)

D : ο συντελεστής διάχυσης ο οποίος εκφράζει την ικανότητα των ατόμων προς διάχυση (σε m²/s)

∇C : η βαθμίδα συγκέντρωσης της διαχεομένης ουσίας (σε $(\text{kg}/\text{m}^3)/\text{m}$)

∇ : κλίση (ανάδελτα)

Το αρνητικό πρόσημο δηλώνει ότι η διάχυση γίνεται αντίθετα στη βαθμίδα συγκέντρωσης, δηλ. από περιοχές μεγάλης προς περιοχές μικρής συγκέντρωσης της διαχεόμενης ουσίας.

3.2.1 Συντελεστής Παράγοντα Βελτίωσης Φραγμού BIF

Για να ποσοτικοποιηθεί η βελτίωση που επιτυγχάνεται με την προσθήκη φυλλιδίων στο πολυμερές χρησιμοποιείται ο Συντελεστής Παράγοντα Βελτίωσης Φραγμού BIF. Με αυτόν το συντελεστή συγκρίνεται η διάχυση στο πολυμερές χωρίς φυλλίδιο D , με την διάχυση που επιτρέπει το πολυμερές όταν έχει ενισχυθεί με φυλλίδια D_f .

$$\text{BIF} = D/D_f \quad (4)$$

Η βελτίωση των ιδιοτήτων μόνωσης των μεμβρανών με την προσθήκη νανοσύνθετων φυλλιδίων στην κατεύθυνση της διάχυσης αποδίδεται βασικά σε δύο φαινόμενα:

- στην αύξηση της διανυόμενης απόστασης, την οποία ακολουθούν τα διαχεόμενα μόρια και
- στη μείωση της περιοχής που διατίθεται για διάχυση.

Γι αυτόν τον λόγο ο συντελεστής BIF μπορεί να εκφραστεί ως εξής (Chen & Parathanasiou 2007):

$$\frac{D_0}{D_f} = \left(\frac{A_0}{A_f} \right) \left(\frac{L'}{L} \right) \quad (5)$$

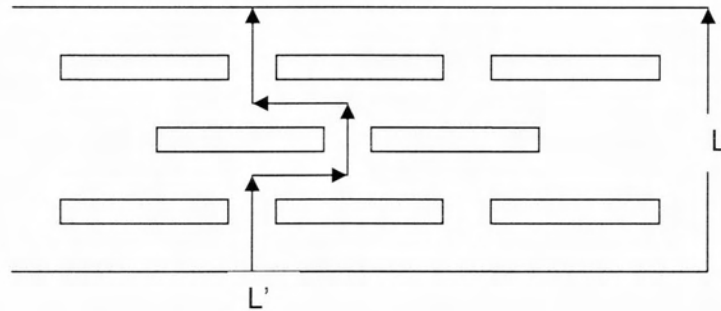
Όπου:

A_0 = περιοχή διαθέσιμη για διάχυση στην αρχική μεμβράνη

A_f = περιοχή διαθέσιμη για διάχυση στην ενισχυμένη μεμβράνη (παράλληλη στην κατεύθυνση ροής)

L = πάχος μεμβράνης

L' = η απόσταση που πρέπει να διανύσουν τα φυλλίδια για να διαπεράσουν την μεμβράνη



Εικόνα 1 Απόσταση που πρέπει να διανύσουν τα φυλλίδια για να διαπεράσουν την μεμβράνη

Ο συντελεστής BIF χρησιμοποιείται για να ποσοτικοποιήσει την βελτίωση στη διάχυση μέσω της μεμβράνης, συνδέοντας τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά (μήκους/πάχος του φυλλιδίου) και το ποσοστό (%) φόρτισης ϕ των φυλλιδίων. Οι τιμές του $a\phi$ οριοθετούν τις ακόλουθες περιπτώσεις:

Ένα αραιό διάλυμα αντιστοιχεί σε $a\phi < 0.1$

Ένα ημι-αραιό διάλυμα αντιστοιχεί σε $0.1 \leq a\phi < 1$

Ένα πυκνό διάλυμα αντιστοιχεί σε τιμές $a\phi \geq 1$

Όπου:

a = λόγος μήκους/πάχος του φυλλιδίου

$$a = \frac{l}{t} \quad (6)$$

με l = το μέγεθος του φυλλιδίου (μήκος)

t = το πάχος του φυλλιδίου

και όπου (ϕ) το ποσοστό (%) φόρτισης των φυλλιδίων

Για την περίπτωση δύο διαστάσεων: $A_0/A_f = 1 - \phi$ (7)

Ενώ αντίστοιχα για τρεις διαστάσεις: $V_0/V_f = 1 - \phi$ (8)

Μοντέλα προτάθηκαν για την ποσοτικοποίηση της επίπτωσης της παρουσίας φυλλιδίων στη διάχυση διαμέσου της μεμβράνης όπως το

Nielsen's model : $\frac{D}{D_f} = \frac{1 + (a/2)\phi}{1 - \phi}$ (9) που αναφέρεται από τους (Chen &

Parathanasiou 2007)

Οι Goodyer & Bungeb (2009) ομαδοποιώντας τα προταθέντα μοντέλα συνοψίζουν :

Οι εξισώσεις που έχουν προταθεί για την εκτίμηση του συντελεστή διάχυσης (σε σύγκριση με αυτόν χωρίς φυλλίδια) αποτελούνται από τρία μέρη. Το πρώτο μέρος παριστάνει την αντίσταση όταν δεν υπάρχουν φυλλίδια, το δεύτερο μέρος την αντίσταση της διάβασης ανάμεσα στα ανοίγματα μεταξύ των φυλλιδίων κάθε στρώσης και το τρίτο μέρος την αντίσταση κατά τη διαδρομή γύρω από τα φυλλίδια. Σε αρκετά άρθρα εκτιμάται ότι η αντίσταση κατά τη διάβαση ανάμεσα στα ανοίγματα μεταξύ των φυλλιδίων της στρώσης είναι αμελητέα σε σύγκριση με αυτή της διάβασης γύρω από τα φυλλίδια ανάμεσα στις στρώσεις (Goodyer & Bunge 2009).

Όταν η διαχεόμενη ουσία συσσωρεύεται μπροστά από τα ανοίγματα της πρώτης στρώσης δημιουργεί σχηματισμό λαιμού, ενώ αντιστροφος σχηματισμός εμφανίζεται κατά την έξοδο από την τελευταία στρώση φυλλιδίων. Αυτός είναι ένας ακόμη παράγοντας που λαμβάνεται υπόψη από ορισμένους ερευνητές και προσθέτει ένα ακόμη μέρος στις εξισώσεις μοντέλων (Chen & Papathanasiou 2007, Pajarito & Kubouchi 2013).

Αν J_f η ροή μετά την προσθήκη φυλλιδίου, ο νέος συντελεστής διάχυσης θα είναι D_f και η σχέση $J = -D \cdot \nabla C$ (3) γίνεται

$$\mathbf{J}_f = -\mathbf{D}_f \cdot \nabla C \quad (10)$$

$$\text{Τότε θα ισχύει } \mathbf{J} / \mathbf{J}_f = \mathbf{D} / \mathbf{D}_f \quad (11)$$

Η αναλογία αυτή εκφράζει και τον παράγοντα βελτίωσης της μόνωσης.

Προϋπόθεση βέβαια είναι να μην αλλάζει η διαλυτότητα και να είναι ίδιες οι συνθήκες υπολογισμού της ροής μάζας (Chen & Papathanasiou 2007).

Η μελέτη μοντέλων προσομοίωσης σε δύο διαστάσεις (2Δ) διευκολύνει την όλη διαδικασία της προσομοίωσης. Όμως όπως συμπεραίνουν οι Minelli κα (2011) μπορεί να οδηγήσει σε υπερεκτίμηση των αποτελεσμάτων φραγμού.

3.3 Αναλογία μεταξύ μεταφοράς θερμότητας και μάζας

Ο όρος μεταφορά μάζας δεν αναφέρεται στη ροή ενός ρεύματος αλλά στη σχετική κίνηση κάποιου ή κάποιων συστατικών σε σχέση με τα υπόλοιπα συστατικά ενός μίγματος. Κινητήρια αιτία - δύναμη για τη μεταφορά μάζας ενός συστατικού από μία περιοχή σε μία άλλη αποτελεί η διαφορά συγκέντρωσης του συστατικού στις δύο περιοχές. Η μεταφορά μάζας γίνεται από την περιοχή υψηλής συγκέντρωσης προς την περιοχή χαμηλής συγκέντρωσης.

Αντίστοιχα κινητήρια αιτία για τη μεταφορά θερμότητας αποτελεί η διαφορά θερμοκρασίας μεταξύ δύο περιοχών. Η μεταφορά θερμότητας γίνεται από την περιοχή υψηλής θερμοκρασίας προς την περιοχή χαμηλής θερμοκρασίας.

	Θερμότητα	Συγκέντρωση
Αιτία	Διαφορά θερμοκρασίας ΔT	Διαφορά συγκέντρωσης ΔC
Κύριοι μηχανισμοί	Αγωγή Συναγωγή Ακτινοβολία	Διάχυση Συναγωγή
Ρυθμός μεταφοράς με αγωγή-διάχυση	Νόμος Fourier	Νόμος Fick

4 Διαθέσιμα εργαλεία

4.1 *openFOAM*

Επιλέχθηκε το λογισμικό, στην περιοχή Υπολογιστικής Ρευστομηχανικής (CFD), ανοικτού κώδικα *openFOAM*², αντί κάποιου άλλου εμπορικού λογισμικού, όπως για παράδειγμα το FLUENT ή ANSYS CFX, για τους παρακάτω λόγους:

Το λογισμικό *openFOAM* είναι μια C++ εργαλειοθήκη για την ανάπτυξη προσαρμοσμένων αριθμητικών επιλυτών, καθώς και βοηθητικών προγραμμάτων (pre-/post-processing) για τη λύση προβλημάτων της Μηχανικής Συνεχούς Μέσου, συμπεριλαμβανομένης της Υπολογιστικής Ρευστομηχανικής (CFD). Ο κώδικας διανέμεται ως ελεύθερο και ανοικτό λογισμικό υπό την άδεια GNU General Public. Συντηρείται από το OpenFOAM Foundation.

Επειδή είναι λογισμικό ανοιχτού πηγαίου κώδικα, ο χρήστης έχει πρόσβαση στον πηγαίο κώδικα ολόκληρου του λογισμικού που είναι γραμμένος σε C++. Με τον τρόπο αυτό είναι σε θέση να γνωρίζει με λεπτομέρειες όλες τις ενέργειες που γίνονται από τον κώδικα κατά την εκτέλεσή του. Παρέχει ευελιξία δίνοντας τη δυνατότητα παρέμβασης στον κώδικα και πραγματοποίησης πιθανών επιθυμητών αλλαγών (λ.χ. πρόσθεση επιπλέον όρων σε εξισώσεις που επιλύονται ή ακόμα και δημιουργία νέων, αλλαγές όρων κλπ). Είναι ανοιχτό, όχι μόνο σε ό,τι αφορά τον πηγαίο κώδικά του, αλλά και όσον αφορά τη δομή του και την ιεραρχική σχεδιάσή του, έτσι ώστε οι εφαρμογές επίλυσης, οι υπηρεσίες και οι βιβλιοθήκες να μπορούν να επεκταθούν. Το OpenFOAM μπορεί να επιλύει μερικές διαφορετικές εξισώσεις που αφορούν οποιοδήποτε τρισδιάστατο πλέγμα πολυεδρικών κελιών. Οι εφαρμογές επίλυσης ροής ρευστών έχουν αναπτυχθεί εντός ισχυρού και ρητού πλαισίου εργασίας λύσεων, παρόλο που μπορούν να εφαρμοστούν και άλλες εναλλακτικές τεχνικές.

Ένα μειονέκτημα (ειδικά για τον αρχάριο) στη χρήση του OpenFOAM είναι ότι η διεπαφή δεν γίνεται μέσω κάποιου γραφικού περιβάλλοντος για το χρήστη αλλά αποκλειστικά δίνοντας τιμές σε μεταβλητές μέσω αρχείων ελέγχου.

² <http://www.openfoam.com/> Επίσκεψη σελίδας 28 Αυγούστου 2013

4.2 GMSH

Το Gmsh³ είναι μια γεννήτρια πλέγματος βασισμένη στη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων που αναπτύχθηκε από τους Christophe Geuzaine και Jean-François Remacle. Κυκλοφόρησε υπό την GNU General Public License (με εξαίρεση τη δυνατότητα σύνδεσης με άλλες ειδικές γεννήτριες πλέγματος), Gmsh είναι ελεύθερο λογισμικό. Σχεδιαστικός στόχος του είναι (κατά το δημιουργό του) να παρέχει ένα γρήγορο, ελαφρύ και εύχρηστο εργαλείο δημιουργίας πλέγματος με παραμετρική είσοδο και προηγμένες δυνατότητες απεικόνισης. Το .Gmsh περιέχει 4 ενότητες: περιγραφή της γεωμετρίας, δημιουργία πλέγματος, λύση, και μετά - επεξεργασία. Οι προδιαγραφές της οποιασδήποτε εισόδου για τις ενότητες αυτές γίνονται είτε αλληλεπιδραστικά χρησιμοποιώντας τη γραφική διεπαφή χρήστη ή με ASCII αρχεία κειμένου χρησιμοποιώντας τη δική του γλώσσα. Παρέχει μηχανισμούς τρισδιάστατης απεικόνισης.

4.3 PARAVIEW

Το Paraview⁴ είναι μια πλατφόρμα για την ανάλυση δεδομένων και την οπτικοποίηση εφαρμογών. Οι χρήστες paraview μπορούν να αναπτύξουν γρήγορα τις απεικονίσεις για να αναλύουν τα δεδομένα τους με ποιοτικές και ποσοτικές τεχνικές. Η εξερεύνηση των δεδομένων μπορεί να γίνει διαδραστικά με τις δυνατότητες επεξεργασίας 3D ή χρησιμοποιώντας προγραμματισμό του paraview.

Το Paraview αναπτύχθηκε για να αναλύσει πολύ μεγάλα σύνολα δεδομένων με χρήση κατανεμημένων υπολογιστικών πόρων μνήμης. Μπορεί να τρέξει σε υπερυπολογιστές για την ανάλυση δεδομένων του terascale καθώς και σε φορητούς υπολογιστές για τα μικρότερα στοιχεία.

³ <http://geuz.org/gmsh/> Επίσκεψη 25 Αυγούστου 2013

⁴ <http://www.paraview.org/> 25 Αυγούστου 2013

5 Περιγραφή των προσομοιώσεων

5.1 Αντικείμενο μελέτης και οριακές συνθήκες

Μελετούμε ένα πολυμερές υλικό διαμέσου του οποίου διαχέεται οξυγόνο (αέρας). Το πολυμερές γίνεται σύνθετο με την τοποθέτηση φυλλιδίων σ' αυτό.

Θεωρούμε ένα κυβικό κέλυφος (cell) του πολυμερούς ακμής αρχικά 1×10^{-8} m (στη συνέχεια θα παραλείπεται το 10^{-8} m) στο κέντρο του οποίου είναι τοποθετημένο ένα φυλλίδιο σχήματος ορθογωνίου παραλληλεπίπεδο (**Εικόνα 3**). Οι διαστάσεις του φυλλιδίου αρχικά είναι :

$$\text{Aspect ratio } a = \frac{l}{t} \quad (\text{το διατηρεί και στη συνέχεια } a=1/10)$$

με l = το μέγεθος του φυλλιδίου (μήκος), $l=0.5$ (το μισό της ακμής)

t = το πάχος του φυλλιδίου, $t=0.05$

και πλάτος φυλλιδίου ίσο με το μήκος (δηλ πλάτος=0.5)

	Περίπτωση 1	Περίπτωση 2	Περίπτωση 3
Μήκος φυλλιδίου l	0.5	0.3	0.1
Πάχος φυλλιδίου t	0.05	0.03	0.01
Aspect ratio $a = \frac{l}{t}$	10	10	10
πλάτος φυλλιδίου	0.5	0.3	0.1
Ακμή κελύφους	1	0.6	0.2

Πίνακας 1 Διαστάσεις φυλλιδίου κάθε περίπτωσης

Το φυλλίδιο στο κέλυφος αλλάζει προσανατολισμό ως προς την κατεύθυνση της ροής (γωνία μεταξύ της κατεύθυνσης ροής και του φυλλιδίου θ). Μελετώνται οι περιπτώσεις γωνίας θ από 0 μέχρι 90, ανά 15 μοίρες.

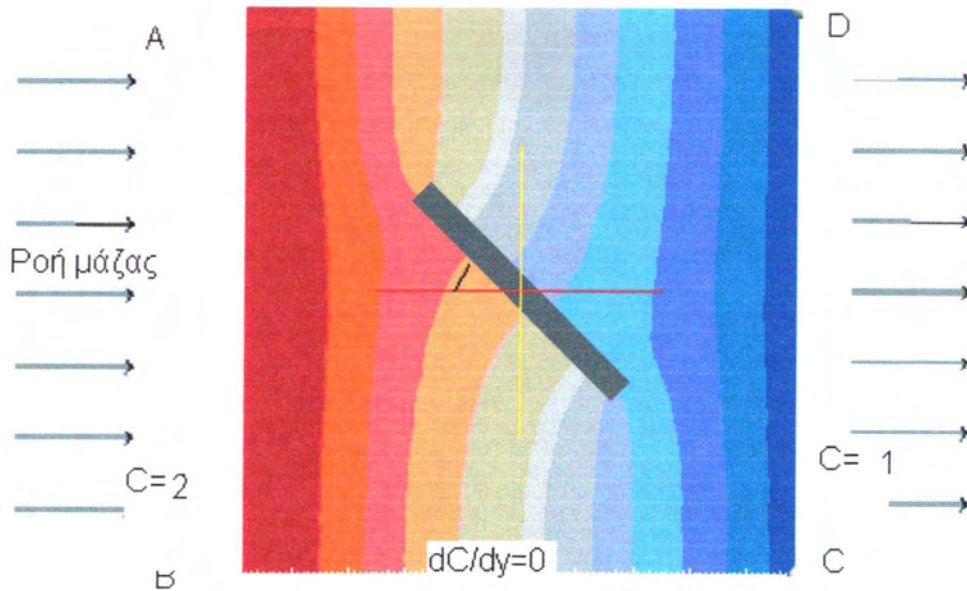
Η μελέτη επαναλαμβάνεται και για άλλα μεγέθη φυλλιδίων. Δηλαδή εκτός από μήκος φυλλιδίου 0.5, για 0.3 και 0.1

Η ακμή του κελύφους (cell) λαμβάνεται διπλάσια του μήκους του φυλλιδίου σε κάθε περίπτωση.

Επίσης η διαδικασία της προσομοίωσης επαναλήφθηκε για διάσταση φυλλιδίου 0.3 σε κέλυφος ακμής 1 (δηλαδή αραιότερο).

Η συγκέντρωση C στην αριστερή πλευρά του κελύφους είναι 2 και στη δεξιά 1.

Η ροή J του διαχεόμενου υλικού είναι από την αριστερή πλευρά του δείγματος προς τη δεξιά.



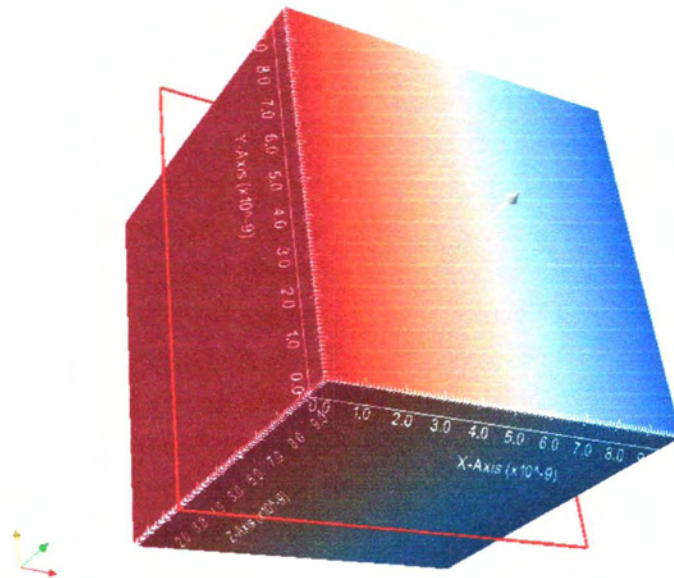
Εικόνα 2 Κατεύθυνση ροής

Ο συντελεστής διάχυσης D για το κέλυφος χωρίς φυλλίδιο λαμβάνεται για τις ανάγκες της προσομοίωσης⁵ $0.35 \times 10^{-11} \text{ kg/s.m}^2$.

Η ροή μέσα στο κέλυφος γίνεται σε τρεις διαστάσεις (3Δ), αλλά διέλευση μάζας έχουμε μόνο στην αριστερή πλευρά του κελύφους (είσοδο μάζας) και από τη δεξιά πλευρά του κελύφους (έξοδο μάζας). Θεωρούμε ότι από τις υπόλοιπες πλευρές δεν έχουμε διέλευση μάζας.

Επίσης θεωρούμε το φυλλίδιο αδιαπέραστο από τη διαχεόμενη ουσία, δηλ δεν έχουμε διέλευση μάζας προς το εσωτερικό του φυλλιδίου. Για τις ανάγκες τις προσομοίωσης ο χώρος που καταλαμβάνει το φυλλίδιο θεωρήθηκε κενός.

⁵ Στους 30 °C (Bhunia κ.ά. 2012)



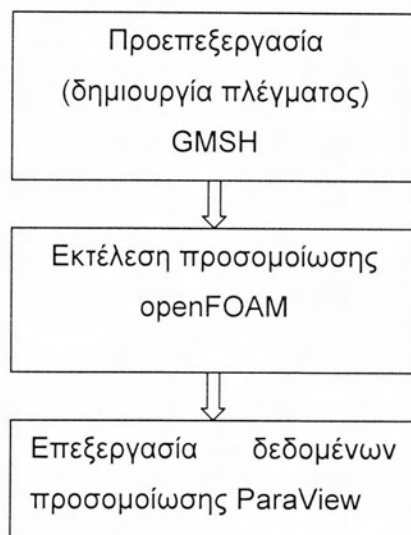
Εικόνα 3 Το κέλυφος σε 3D

5.2 Διαδικασία προσομοίωσης

Μεταμεσα στις εργασίες προετοιμασίας για προσομοίωση με το λογισμικό OpenFOAM είναι η δημιουργία του πλέγματος (mesh) του αντικειμένου. Παρόλο που το ίδιο το λογισμικό διαθέτει εργαλεία (όπως το blockMesh, snappyHexMesh) για την προετοιμασία του πλέγματος, επιλέχθηκε το λογισμικό [Gmsh](http://geuz.org/gmsh/)⁶, για περισσότερη ευελιξία στις τροποποιήσεις. Στη συνέχεια έγινε η μεταφορά του πλέγματος στο λογισμικό OpenFOAM.

Επιλέχθηκε και τροποποιήθηκε επιλυτής και έγινε η προετοιμασία για την προσομοίωση (δημιουργία απαιτούμενων αρχείων, παράμετροι, σταθερές κλπ). Δημιουργήθηκαν τα απαιτούμενα αρχεία για την μετά- επεξεργασία στη συνέχεια με το λογισμικό ParaView.

⁶ <http://geuz.org/gmsh/> Επίσκεψη 25 Αυγούστου 2013



Εικόνα 4 Λογισμικό που χρησιμοποιήθηκε κατά τα στάδια της προσομοίωσης

Επικουρικά χρησιμοποιήθηκε το εμπορικό λογισμικό Excel κυρίως για τη δημιουργία των απαιτούμενων υπολογισμών για τη δημιουργία όσων διαγραμμάτων δεν εξήχθησαν απευθείας από το ParaView.

5.3 Δημιουργία του πλέγματος

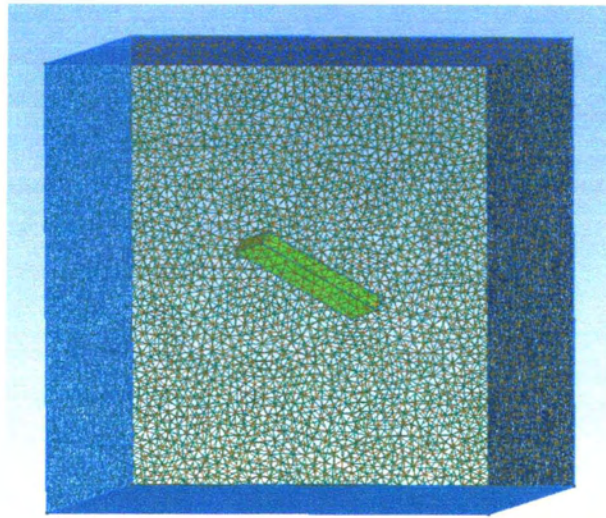
Το απαιτούμενο πλέγμα για την προσομοίωση δημιουργήθηκε με τη βοήθεια της γεννήτριας πλέγματος Gmsh⁷. Γράφτηκε ένας παραμετρικός κώδικας, ώστε να υπάρχει η ευχέρεια αλλαγής μεγεθών, όπως διαστάσεις κελύφους, φυλλιδίου και γωνίας φυλλιδίου-ροής. Ο κώδικας φαίνεται στο παράρτημα. Οι συντεταγμένες είναι σε μέτρα και μεταφέρονται σε πραγματικές χρησιμοποιώντας κλίμακα στην αρχή του κώδικα.

```
Mesh.ScalingFactor=1e-8;
```

Επίσης για την πυκνότητα του πλέγματος ορίζεται παράμετρος.

```
DefineConstant[ lc = { 0.01, Path "Gmsh/Parameters"}];
```

⁷ <http://geuz.org/gmsh/> Επίσκεψη 25 Αυγούστου 2013



Εικόνα 5 Το πλέγμα με το φυλλίδιο

Το πλέγμα μετά τη δημιουργία του αποθηκεύεται. Προσοχή! Η αποθήκευση πρέπει να γίνει σε φάκελο που θα έχει το ίδιο όνομα με το όνομα του αρχείου πλέγματος.

Με τη χρήση του κώδικα στη γραμμή τερματικού:

```
terminal$ gmshToFoam όνομα_αρχείου.msh
```

δημιουργείται ο απαιτούμενος για το [openFOAM](#) φάκελος polyMesh με τις πληροφορίες πλέγματος δηλαδή σημεία (points), κελία (cells), επιφάνειες (faces) και επιφάνειες ορίων (boundary patches).

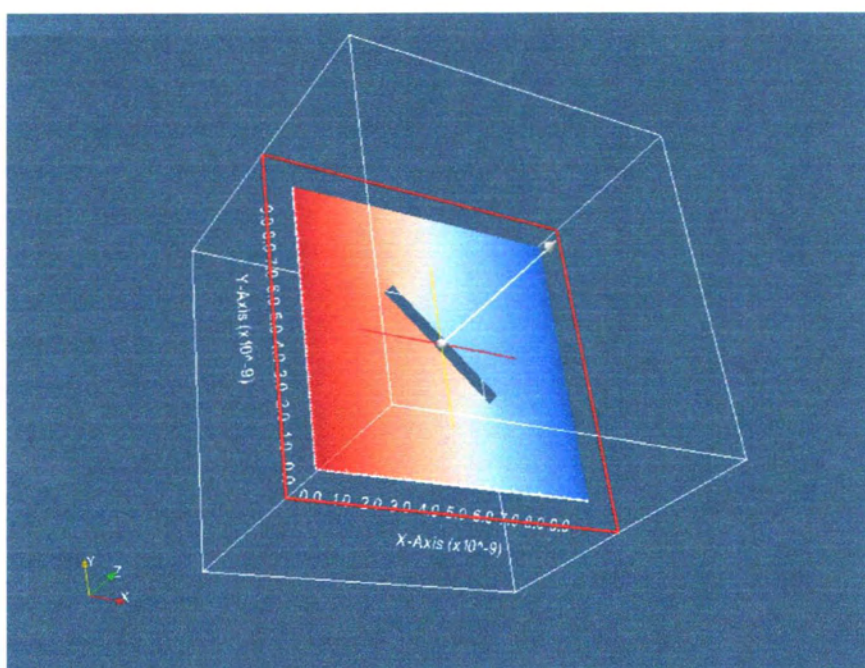
Το πλέγμα που δημιουργήθηκε αποτελείται από:

```
points:      66173
faces:      790523
internal faces: 770729
cells:      390313
boundary patches: 5
```

Πλήρη στατιστικά του πλέγματος όπως λήφθηκαν με την εντολή checkMesh μπορούν να βρεθούν στο παράρτημα 9.1.2 .

5.4 Προσομοίωση 2 και 3 διαστάσεων

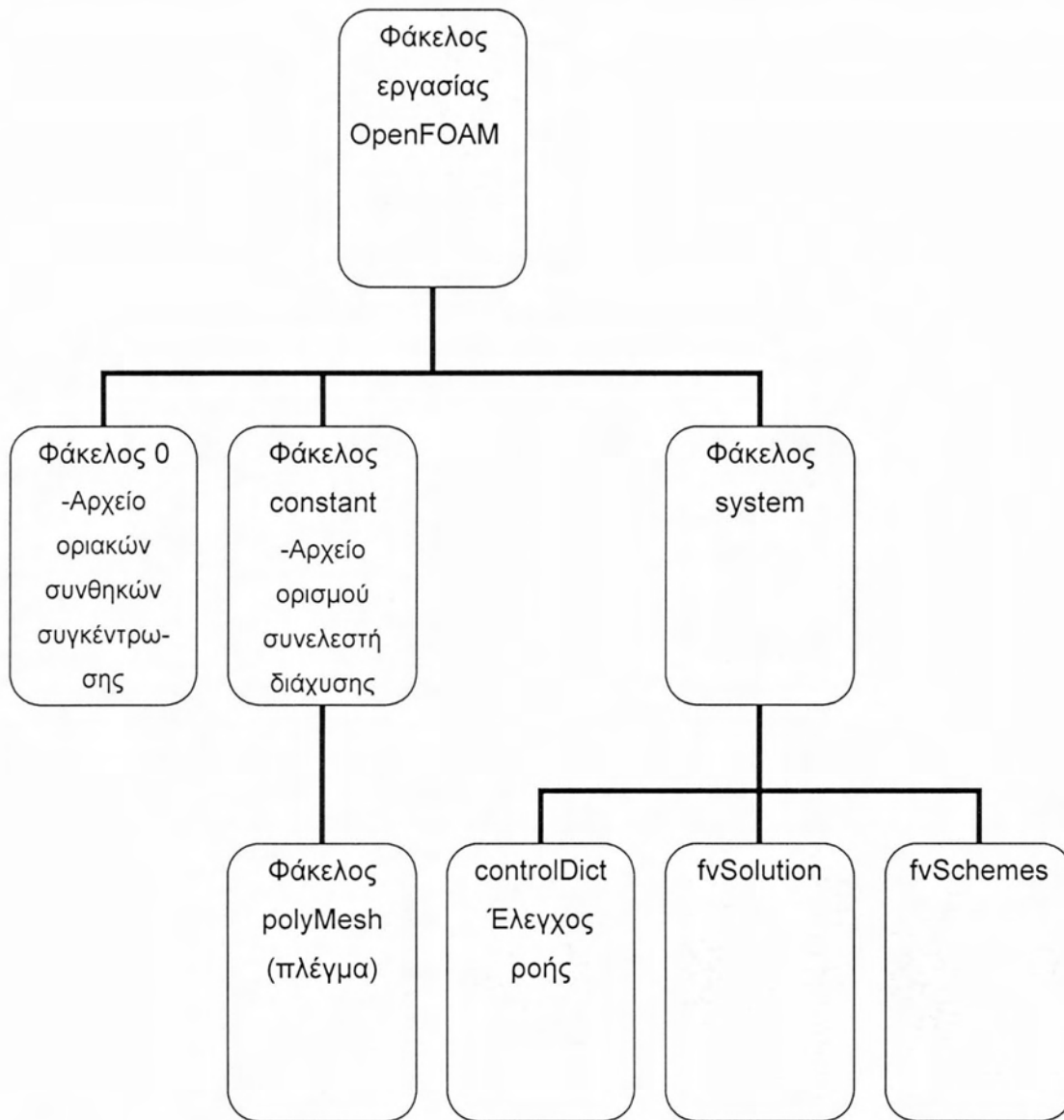
Το openFoam αντιμετωπίζει ακόμη και τα δύο διαστάσεων (2Δ) προβλήματα σαν τριών διαστάσεων (3Δ) με μοναδιαίο πάχος (στη πράξη ορίζεται η επιφάνεια της τρίτης διάστασης «type zeroGradient»). Όμως μια και επιδίωξή μας ήταν η μελέτη με προσομοίωση σε 2Δ και 3Δ το πρόγραμμα έτρεξε σε 3Δ και κατά την μεταεπεξεργασία μελετήθηκε το επίπεδο τομής κάθετο στον άξονα Z στο μέσο της ακμής του κελύφους (δηλ στο κελύφος ακμής 1 στο 0.5). Στη Εικόνα 6 φαίνεται το επίπεδο τομής που μελετήθηκε.



Εικόνα 6 Το επίπεδο τομής κάθετο στον άξονα Z στο μέσο της ακμής του κελύφους

5.5 Προετοιμασία – Παραμετροποίηση για εκτέλεση της προσομοίωσης

Η δομή των απαιτούμενων φακέλων και αρχείων για την παρούσα προσομοίωση στο λογισμικό εμφανίζεται στο διάγραμμα που ακολουθεί.



5.5.1 Διαστάσεις μεγεθών

Τα μεγέθη ορίζονται με προκαθορισμένες μονάδες. Χρησιμοποιούνται επτά βασικά μεγέθη που αναγράφονται στον πίνακα. Οι αλγεβρικές πράξεις πρέπει να εκτελούνται σε αυτά τα μεγέθη χρησιμοποιώντας τις συμβατές μονάδες μέτρησης και ειδικότερα, η πρόσθεση, αφαίρεση και ισότητα έχουν φυσικό νόημα για μεγέθη μονάδων ίδιων διαστάσεων. Σαν ασφαλιστική δικλείδα κατά της εφαρμογής μιας χωρίς νόημα πράξης, το OpenFOAM αποδίδει διαστάσεις στα δεδομένα πεδίου και φυσικά μεγέθη και εκτελεί τον έλεγχο διαστάσεων σε οποιαδήποτε λειτουργία τανυστή.

Αύξων αριθμός διάστασης	Μέγεθος	Μονάδες (S.I.)
1	Μάζα	Kilogram (kg)
2	Μήκος	Meter (m)
3	Χρόνος	Second (s)
4	Θερμοκρασία	Kelvin (K)
5	Ποσότητα	Kilogram-mole (kgmol)
6	Ένταση ρεύματος	Ampere (A)
7	Ένταση φωτός	Candela (cd)

Πίνακας 2 βασικών μεγεθών διαστάσεων

Ο τύπος πεδίου εισόδου / εξόδου κάθε ιδιότητας ορίζεται με του επτά αριθμούς με την προκαθορισμένη σειρά του πίνακα. Για παράδειγμα η πυκνότητα ορίζεται σαν [1 -3 0 0 0 0 0].

Με βάση τα παραπάνω ορίστηκαν οι διαστάσεις της συγκέντρωσης : [1 -3 0 0 0 0 0] και του συντελεστή διάχυσης [0 2 -1 0 0 0 0].

Οι διαστάσεις της συγκέντρωσης επειδή σχετίζεται με οριακές συνθήκες ορίζεται στο αρχείο που ορίζονται και οι οριακές συνθήκες και βρίσκεται στο φάκελο 0.

Ο ορισμός των διαστάσεων του συντελεστή διάχυσης μια και δεν σχετίζεται με οριακές συνθήκες, ορίζεται στο αρχείο transportProperties στο φάκελο system.

5.5.2 Οριακές συνθήκες

Στο κέλυφος που εξετάζουμε έχουμε είσοδο μάζας από την αριστερή πλευρά του κελύφους την οποία έχουμε ορίσει σαν “left” και έξοδο μάζας από τη δεξιά πλευρά που ορίστηκε “right” . Θεωρούμε ότι από τις υπόλοιπες πλευρές, που ορίστηκαν “frontAndback” και “downAndUp” δεν έχουμε διέλευση μάζας.

Επίσης θεωρούμε το φυλλίδιο αδιαπέραστο από τη διαχεόμενη ουσία, δηλ δεν έχουμε διέλευση μάζας προς το εσωτερικό του φυλλιδίου. Εδώ το σύνολο της επιφάνειας το φυλλιδίου ορίστηκε σαν “innerSurface”.

Ο ορισμός των οριακών αυτών συνθηκών γίνεται στο αρχείο συγκέντρωσης στο φάκελο “0” στο τμήμα “ boundaryField ”.

Έτσι οι επιφάνειες (patches) frontAndBack, downAndUp και innerSurface ορίστηκαν

```
{ type      zeroGradient}
```

Ενώ η επιφάνεια εισόδου μάζας right ορίστηκε

```
{  
  type      fixedValue;  
  value     uniform 1;  
}
```

Και αντίστοιχα η επιφάνεια εξόδου

```
left  
{  
  type      fixedValue;  
  value     uniform 2;  
}
```

5.5.3 Επιλυτής

Η ροή μάζας στο φαινόμενο της διάχυσης οφείλεται στη διαφορά συγκέντρωσης. Για τη μελέτη του φαινομένου θα πρέπει να έχουμε την κατανομή της συγκέντρωσης στο κέλυφος. Μια και έχουμε προσομοίωση, θα πρέπει να έχουμε τη συγκέντρωση σε κάθε σημείο ή κελί του πλέγματος. Όπως η εξίσωση της θερμότητας δίνει την κατανομή της θερμοκρασίας, ο δεύτερος νόμος Fick δίνει την κατανομή της συγκέντρωσης. Στη βιβλιοθήκη επιλυτών του openFoam δεν περιλαμβάνεται επιλυτής για διάχυση. Όμως εκμεταλλευόμενοι την αντιστοιχία των νόμων Fick με την εξίσωση της θερμότητας (βλέπε 3.3) και τις κατάλληλες αλλαγές στις διαστάσεις των μεγεθών θερμότητας και συντελεστή αγωγιμότητας με τις αντίστοιχες συγκέντρωσης και συντελεστή διάχυσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο επιλυτής `laplacianFoam`⁸. Ο επιλυτής αυτός βασίζεται στην εξίσωση της θερμότητας. Το βασικό τμήμα του κώδικα είναι:

⁸ Για αναλυτική τεκμηρίωση στο

http://freefoam.sourceforge.net/doc/API/laplacianFoam_8C.html#_details

πρόσβαση 22 Σεπτεμβρίου 2013

```

{
  solve
  (
    fvm::ddt(T) - fvm::laplacian(DT, T)
  );
}

```

στην παραπάνω σχέση T είναι η θερμοκρασία αντίστοιχο μέγεθος της συγκέντρωσης C και

DT είναι ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας αντίστοιχος του συντελεστή διάχυσης D .

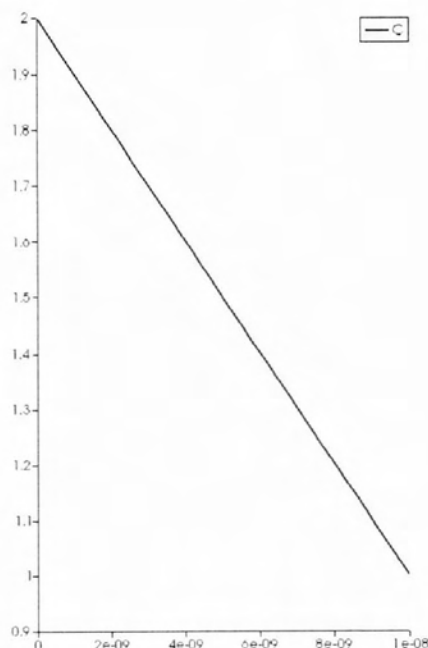
Επίσης έγιναν δοκιμές για διάφορους χρόνους, ώστε να επιβεβαιωθεί ότι για το χρονικό όριο που τέθηκε δεν μεταβάλλεται η κατανομή της συγκέντρωσης.

5.5.4 Άλλοι επιλυτές

Στο `fvSchemes` χρησιμοποιείται η μέθοδος Gauss linear για την επίλυση του συστήματος των γραμμικών εξισώσεων. Επίσης χρησιμοποιείται η μέθοδος Euler.

5.6 Δοκιμή προσομοίωσης

Το πρόγραμμα εκτελέστηκε για κέλυφος χωρίς φυλλίδιο. Σχεδιάστηκε το διάγραμμα (Εικόνα 7) κατανομής συγκέντρωσης κατά μήκος του άξονα X (0,0.5,0.5 – 1,0.5,0.5). Παρατηρούμε ότι σχηματίζεται ευθεία που έχει αρνητική κλίση.



Εικόνα 7 Διάγραμμα κατανομής συγκέντρωσης κατά μήκος του άξονα X (0,0.5,0.5 – 1,0.5,0.5).

Αυτή ήταν και η αναμενόμενη μορφή της καμπύλης για ομοιογενές υλικό από το νόμο Fick, μια και δεν υπάρχει συσσώρευση ή απώλεια υλικού.

5.7 Επαλήθευση του μοντέλου για ομοιογενές υλικό

Στο κέλυφος ακμής $H=1 \times 10^{-8}$ (μονάδες SI)

Για συγκέντρωση C_L στη αριστερή πλευρά (είσοδος) 2 και στη δεξιά C_R 1 και για συντελεστή διάχυσης 0.35×10^{-12} ο νόμος Fick

$$J = -D(C_L - C_R)/H$$

$$\text{Θεωρητικά } J = -0,35 \times 10^{-12} (2-1)/1 \times 10^{-8}$$

$$J = -0,35 \times 10^{-4} \text{ (οι μονάδες όλων των μεγεθών είναι στο σύστημα SI)}$$

Η τιμή $J=3,53 \times 10^{-5}$ από την προσομοίωση είναι πολύ κοντά στην θεωρητική τιμή από την αναλυτική λύση.

Για κέλυφος χωρίς φυλλίδιο υπολογίστηκε η ροή μάζας από προσομοίωση 2Δ και 3Δ και στον Πίνακα 3 συγκρίνεται με τη θεωρητική τιμή (για 1Δ).

Ακμή κελύφους H	Θεωρητική τιμή ροής J $\times 10^{-5}$	Τιμή ροής από προσομοίωση σε 2Δ $J_{2d} \times 10^{-5}$	Ποσοστιαία διαφορά
0,2	0,1750	0,1862	6,40%
0,6	5,833	6,1156	4,84%
1	3,500	3,6661	4,75%

Ακμή κελύφους H	Θεωρητική τιμή ροής J $\times 10^{-5}$	Τιμή ροής από προσομοίωση σε 3Δ $J_{3d} \times 10^{-5}$	Ποσοστιαία διαφορά
0,2	0,1750	0,1847	5,55%
0,6	5,833	6,080	4,23%
1	3,500	3,662	4,63%

Πίνακας 3 Τιμές ροής μάζας θεωρητικές και από την προσομοίωση

Η διαφορά ανάμεσα στη θεωρητική τιμή και στην τιμή που προέκυψε από την προσομοίωση πρέπει να οφείλεται στο ότι οι τιμές τις προσομοίωσης υπολογίστηκαν

κοντά στο οριακό επίπεδο. Προσομοίωση που έγινε για μέση τιμή ροής στη γραμμή (0.90, 0.05, 0.5-0.90, 0.95,0.5) έδωσε αποτέλεσμα πολύ κοντά στη θεωρητική (3,51). Επίσης η μέση τιμή που υπολογίστηκε για επίπεδο κάθετο στο $X=0.90$ και 0.95 ήταν 3,48. Στην περίπτωση αυτή η τιμή θα βελτιωνόταν αν απομακρυνόμαστε και από τα άλλα οριακά επίπεδα.

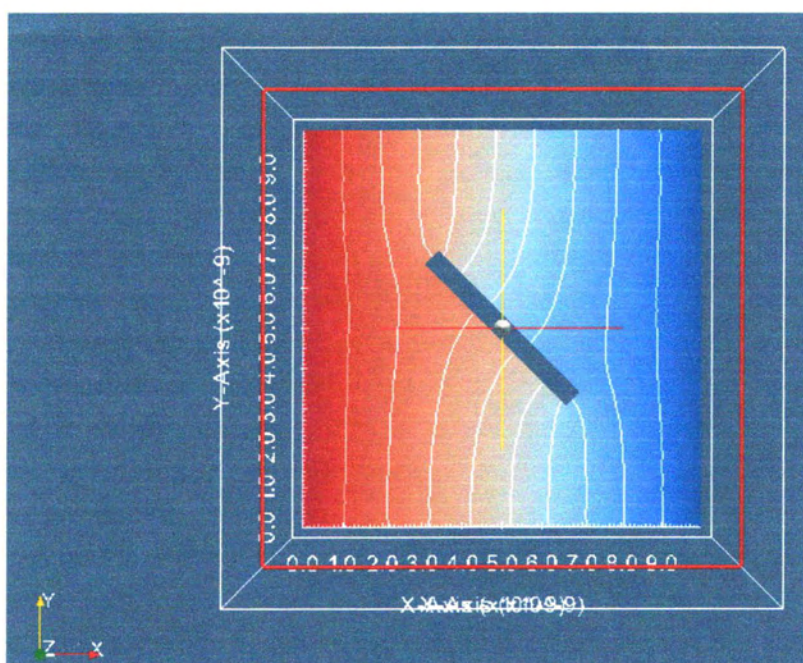
Βέβαια για ορθότερα αποτελέσματα θα πρέπει να χρησιμοποιηθεί επιλυτής που θα λαμβάνει υπόψη τη διάχυση στα όρια.

6 Παρουσίαση και επεξεργασία προσομοιώσεων

6.1 Επιφάνειες ίσης συγκέντρωσης για διάφορες γωνίες φυλλιδίου

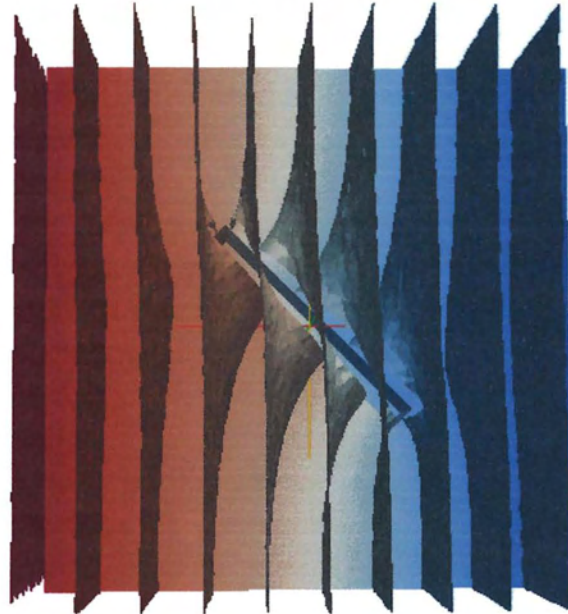
Για να αποκτήσουμε μία εικόνα της κατανομής της συγκέντρωσης στο κέλυφος στην περίπτωση φυλλιδίου 0.5 υπό γωνία 45° έγιναν τομές στο κέλυφος (επίπεδο κάθετο) στο $Z=0.5$, $Y=0.5$ και $X=0.5$.

Στην εικόνα 6-1 φαίνεται σε τομή στο $Z=0.5$ το επίπεδο XY με τις καμπύλες ίσης συγκέντρωσης (για φυλλίδιο υπό γωνία 45°). Στις 7-4 & 5 τα άλλα επίπεδα



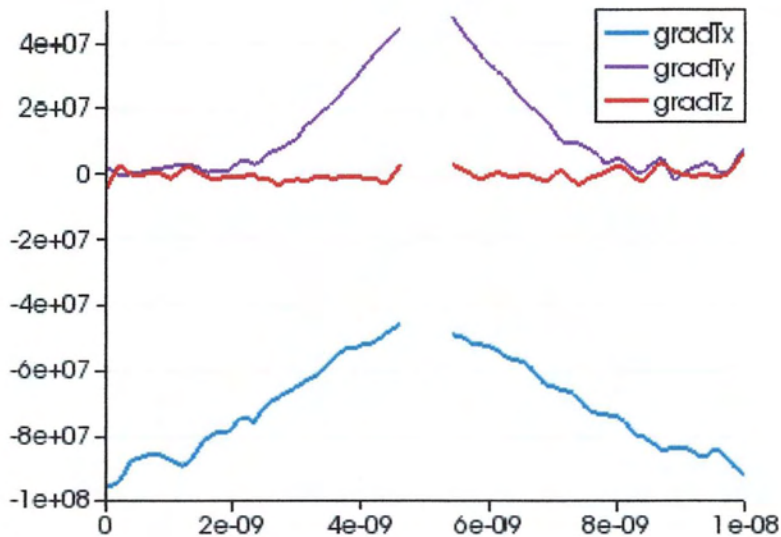
Εικόνα 8 Τομή στο $Z=0.5$ το επίπεδο XY με τις καμπύλες ίσης συγκέντρωσης (για φυλλίδιο υπό γωνία 45°)

Στην εικόνα 6-2 φαίνονται για την ίδια περίπτωση οι επιφάνειες με ίση συγκέντρωση. Και στις δύο εικόνες φαίνεται ότι το παρεμβαλλόμενο φυλλίδιο εμποδίζει τη ροή από τα αριστερά προς τα δεξιά. Παρατηρούμε αύξηση της συγκέντρωσης μπροστά από το φυλλίδιο και αντίστοιχα μείωση της συγκέντρωσης πίσω από το φυλλίδιο.



Εικόνα 9 Οι επιφάνειες με ίση συγκέντρωση

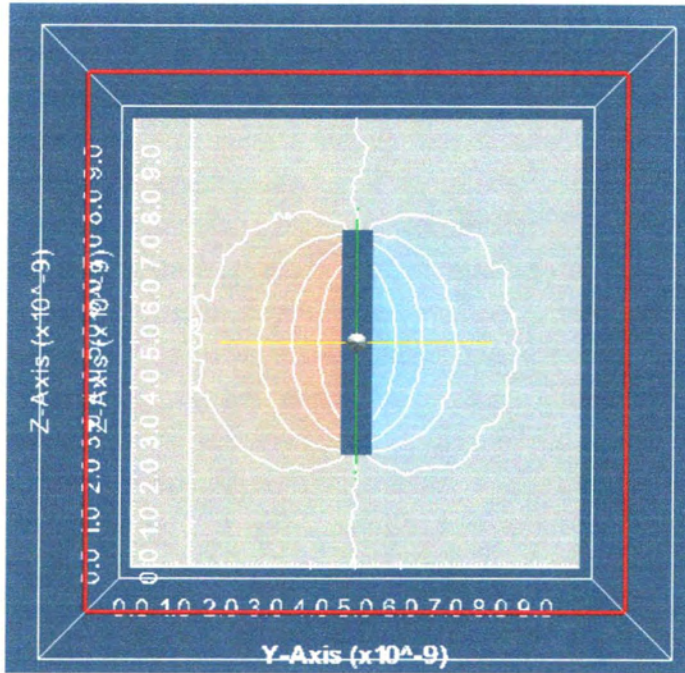
Στην Εικόνα 10 φαίνεται κατά μήκος του άξονα X (0,0.5,0.5 -1.0,0.5,0.5) η κλίση της συγκέντρωσης στους άξονες X,Y,Z.



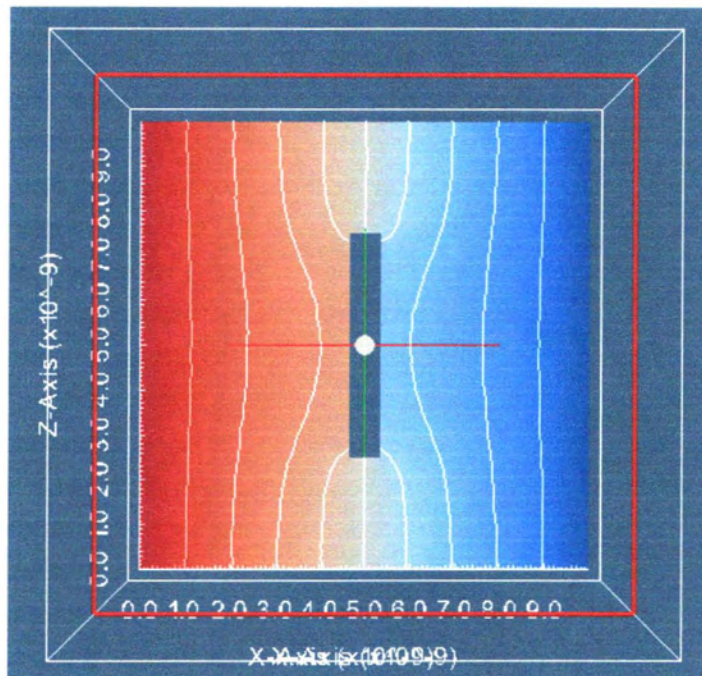
Εικόνα 10 Η κλίση της συγκέντρωσης κατά μήκος του άξονα X (0,0.5,0.5 -1.0,0.5,0.5)

Η διακοπή της καμπύλης στο μέσον είναι ο χώρος που καταλαμβάνει το φυλλίδιο (θεωρήθηκε αδιαπέραστο από τη διαχεόμενη ουσία). Η κλίση στον άξονα X και στον άξονα Y στην πραγματικότητα είναι μη γραμμική και όχι γραμμική, όπως παρουσιάζεται στο παραπάνω διάγραμμα. Αυτό συμβαίνει διότι δεν έγινε πύκνωση του πλέγματος κοντά στα τοιχώματα του φυλλιδίου, για το οποίο έγινε η παραδοχή

ότι είναι αδιαπέραστο (τοίχος ουσιαστικά) και άρα θα έπρεπε η κλίση να έτεινε στο άπειρο(ψευδής απεικόνιση). Η κλίση κατά τον άξονα Z είναι σχεδόν ανύπαρκτη. Η μεγάλη μεταβολή εμφανίζεται κατά τον άξονα X, θετική μπροστά από το φυλλίδιο, αρνητική πίσω από το φυλλίδιο. Παρόμοια κλίση (με μικρότερη τιμή) εμφανίζει η κλίση κατά τον άξονα Y.



Εικόνα 11 Για γωνία 45° γραμμές ίσης συγκέντρωσης στο επίπεδο YZ στο $X=0.5$



Εικόνα 12 Για γωνία 45° γραμμές ίσης συγκέντρωσης στο επίπεδο XZ στο $Y=0.5$

Οι καμπύλες ίσης συγκέντρωσης στην περίπτωση **Εικόνα 12** (επίπεδο XZ) συσχετίζονται με την τομή XY στο Z=0.5 για γωνία 90° **Εικόνα 31 (στο Παράρτημα)**. Η μεταβολή κατά τον άξονα Z είναι ελάχιστη. Φαίνεται και στην **Εικόνα 3** τομή YZ.

Στο παράρτημα φαίνονται εικόνες σε 2Δ και 3Δ για προσομοιώσεις από 0 μέχρι 90, ανά 15 μοίρες. Από τις εικόνες φαίνεται ποιοτικά ότι η διάχυση εμποδίζεται περισσότερο όσο αυξάνει η γωνία του φυλλιδίου με την κατεύθυνση ροής.

6.2 Επεξεργασία προσομοιώσεων για διάφορες γωνίες κατεύθυνσης ροής-φυλλιδίου

Μετά την προσομοίωση έχουμε την κατανομή της συγκέντρωσης στο κέλυφος. Το ParaFoam μας επιτρέπει την εμφάνιση πίνακα των τιμών, αλλά και τη δυνατότητα επεξεργασίας τους.

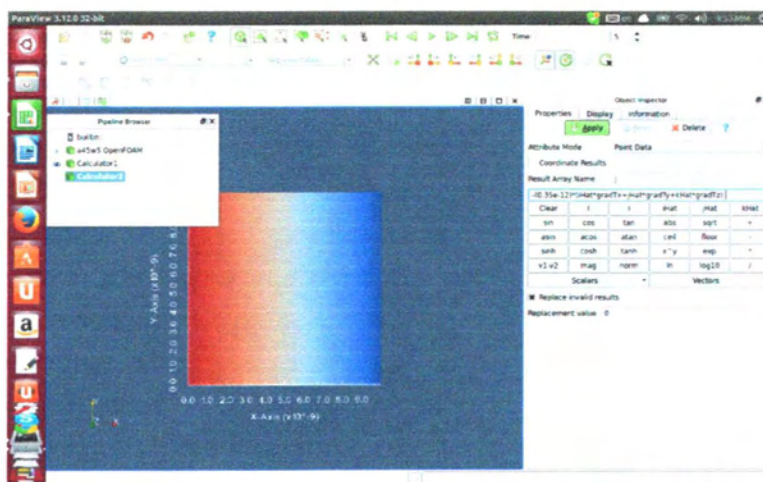
Έτσι η σχέση υπολογισμού της ροής σε 3 διαστάσεις αν i, j και k είναι τα μοναδιαία διανύσματα στην κατεύθυνση X, Y, Z γίνεται:

$$\mathbf{J} = -\mathbf{D} \cdot (\mathbf{i} \cdot dC_x/dx + \mathbf{j} \cdot dC_y/dy + \mathbf{k} \cdot dC_z/dz)$$

Μπορεί να γράφει χρησιμοποιώντας την επιλογή calculator και ορίζοντας τη μεταβλητή ροή μάζας J

$$-(0.35e-12) * (\mathbf{iHat} * \mathbf{gradTx} + \mathbf{jHat} * \mathbf{gradTy} + \mathbf{kHat} * \mathbf{gradTz})$$

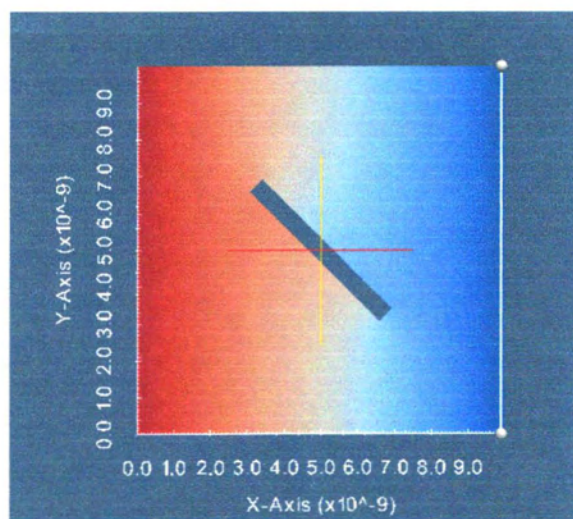
Υπολογίζονται οι τιμές της ροής μάζας για κάθε σημείο του πλέγματος.



Εικόνα 13 Υπολογισμός τιμών ροής μάζας για κάθε σημείο του πλέγματος

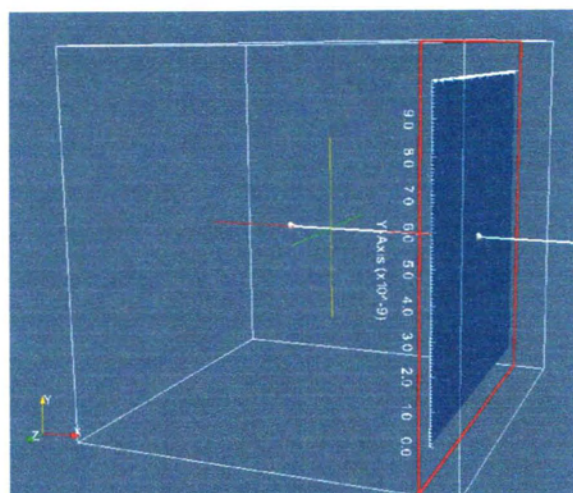
Παρέχεται επίσης η δυνατότητα υπολογισμού της μέσης τιμής ροής μάζας (χρησιμοποιώντας το άθροισμα των τιμών για το 2Δ ή για το 3Δ) . Έχοντας τις τιμές της ροής μάζας για κάθε σημείο του πλέγματος μπορούμε να αθροίσουμε:

1) στην περίπτωση 2Δ τις τιμές των σημείων του πλέγματος που βρίσκονται πάνω στη δεξιά πλευρά της μελετούμενης επιφάνειας και διαιρώντας με το μήκος γραμμής



Εικόνα 14 Γραμμή επιφάνειας υπολογισμού μέσης τιμής ροής μάζας \bar{c} .

2) στην περίπτωση 3Δ τις τιμές των σημείων του πλέγματος που βρίσκονται πάνω στις δεξιά επιφάνεια του μελετώμενου κελύφους και διαιρώντας με το εμβαδόν επιφάνειας.



Εικόνα 15 Επιφάνεια υπολογισμού μέσης τιμής ροής μάζας σε 3Δ

Σημ Για να αποφύγουμε λάθος λόγω των οριακών συνθηκών τα σημεία της γραμμής αθροίζονται από 0.1 μέχρι 0.99 και το επίπεδο τομής στην περίπτωση 3Δ είναι στο 0.99 και όχι 1.

6.2.1 Υπολογισμός γινομένου α.φ

Για κελύφος ακμής διπλάσιας του μήκους του φυλλιδίου

Στην περίπτωση 3Δ

Ακμή κελύφους H	Μήκος φυλλιδίου l	Πάχος φυλλιδίου t	aspect ratio $\alpha=l/t$	Συνολικός όγκος κελύφους V	Όγκος φυλλιδίου	V_f (όγκος διάχυσης)
1	0,5	0,05	10	1	0,0125	0,9875
0,6	0,3	0,03	10	0,216	0,0027	0,2133
0,2	0,1	0,01	10	0,008	0,0001	0,0079

Ακμή κελύφους H	V_f/V	$\varphi=1-(V_f/V)$	α.φ
1	0,0125	0,9875	0,125
0,6	0,0027	0,9973	0,125
0,2	0,0001	0,9999	0,125

Στην περίπτωση 2Δ

Ακμή κελύφους H	Μήκος φυλλιδίου l	Πάχος φυλλιδίου t	aspect ratio $\alpha=l/t$	Συνολική επιφάνεια A	Επιφάνεια φυλλιδίου	A_f (επιφάνεια διάχυσης)
1	0,5	0,05	10	1	0,025	0,975
0,6	0,3	0,03	10	0,36	0,009	0,351
0,2	0,1	0,01	10	0,04	0,001	0,039

Ακμή κελύφους H	A_f/A	$\varphi=1-A_f/A$	α.φ
1	0,025	0,975	0,25
0,6	0,009	0,991	0,25
0,2	0,001	0,999	0,25

Παρατηρούμε ότι το γινόμενο α.φ είναι και για τις τρεις περιπτώσεις μήκους φυλλιδίου που προσομοιώθηκαν ίδιο. Για την περίπτωση 3Δ 0,125 και για την περίπτωση 2Δ 0,25. Αυτός ήταν και ο λόγος που επιλέχθηκε η ακμή του κελύφους να είναι διπλάσια του μήκους του φυλλιδίου.

6.2.2 Μεταβολή D/D_f με γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου μήκους 0.5

Αν

D είναι ο συντελεστής διάχυσης και J η ροή για κέλυφος χωρίς φυλλίδιο

D_f ο συντελεστής διάχυσης και J_f η ροή μετά την προσθήκη φυλλιδίου στο κέλυφος,

Τότε από τη σχέση $J / J_f = D / D_f$ (βλέπε 3.2.1)

Έχοντας από την προσομοίωση τη ροή J για κέλυφος χωρίς φυλλίδιο και J_f τη ροή μετά την προσθήκη φυλλιδίου στο κέλυφος,

Προκύπτει ο λόγος D / D_f

Για προσομοίωση 2Δ

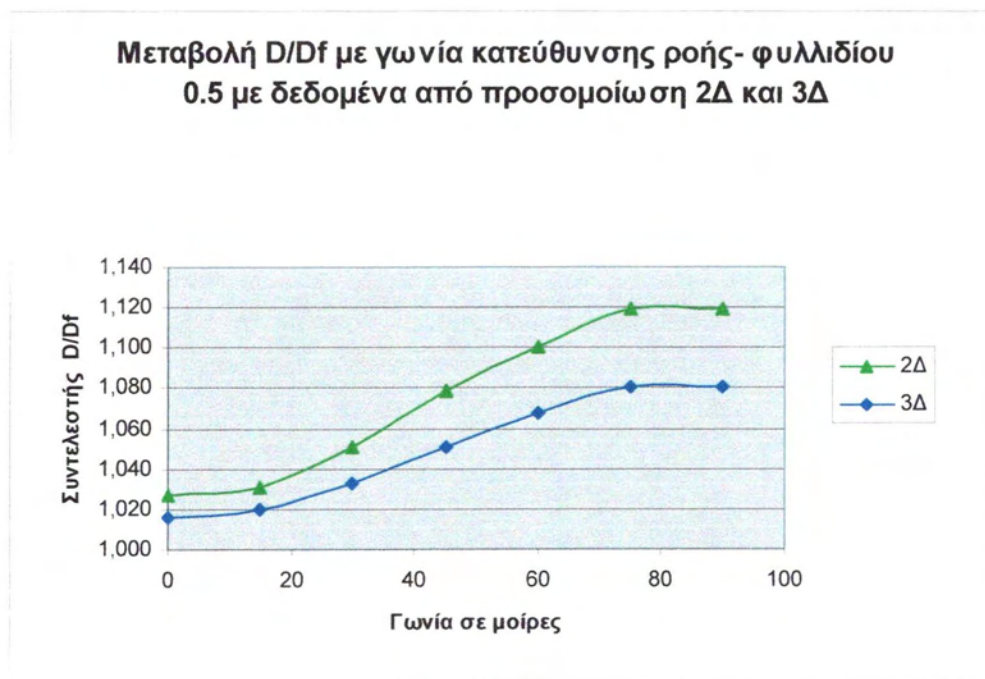
Η τιμή της ροής J για κέλυφος χωρίς φυλλίδιο προέκυψε $3,67 \times 10^{-05}$.

Γωνία μεταξύ κατεύθυνσης ροής και φυλλιδίου	$J / J_f = D / D_f$
0	1,016
15	1,020
30	1,032
45	1,050
60	1,067
75	1,081
90	1,081

Πίνακας 4 Μεταβολή D/D_f με γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου 0.5 με δεδομένα από προσομοίωση 2Δ

Γωνία μεταξύ κατεύθυνσης ροής και φυλλιδίου	$J / J_f = D / D_f$
0	1,027
15	1,031
30	1,051
45	1,079
60	1,100
75	1,119
90	1,119

Πίνακας 5 Μεταβολή D/D_f με γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου 0.5 με δεδομένα από προσομοίωση 3Δ



Εικόνα 16 Μεταβολή D/D_f με γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου 0.5 με δεδομένα από προσομοίωση 2Δ και 3Δ

Παρατηρούμε ότι για γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου 0-15 μοίρες και 75-90 μοίρες η αλλαγή στη σχέση D/D_f είναι πολύ μικρή.

Το σχήμα της καμπύλης είναι ίδιο τόσο για τη 2Δ όσο και για την 3Δ. Η απόστασή τους μεγαλώνει όσο αυξάνει η γωνία.

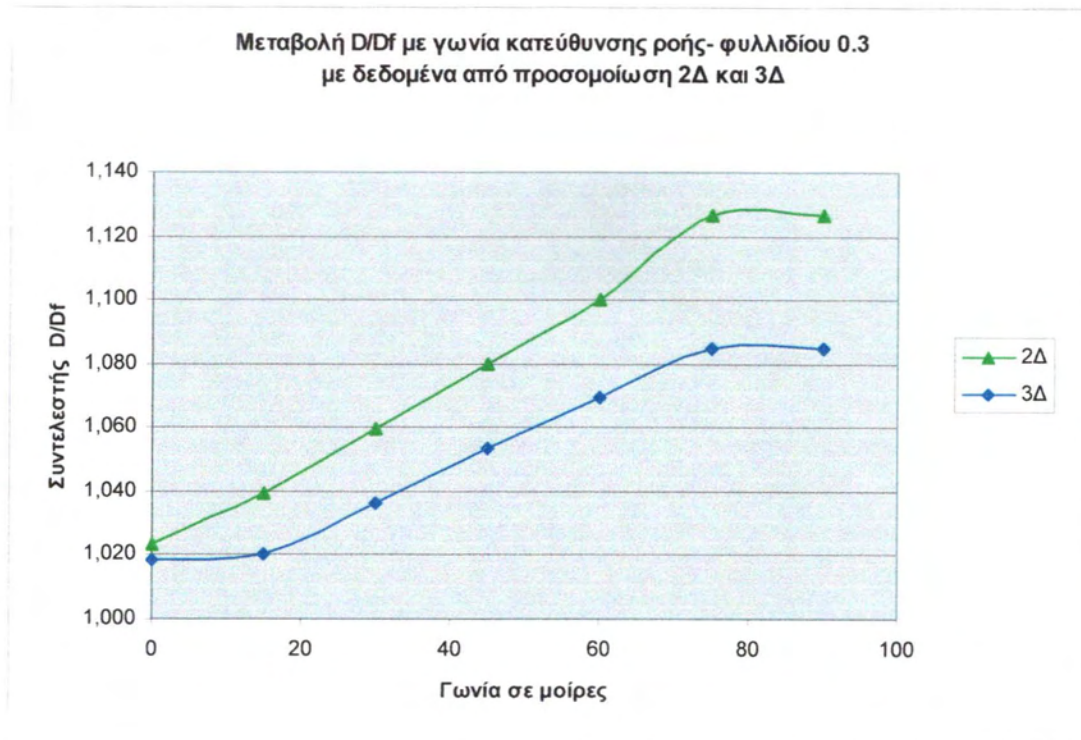
6.2.3 Μεταβολή D/D_f με γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου μήκους 0.3

Γωνία μεταξύ κατεύθυνσης ροής και φυλλιδίου	$J / J_f = D / D_f$
0	1,024
15	1,039
30	1,060
45	1,080
60	1,100
75	1,127
90	1,127

Πίνακας 6 Μεταβολή D/D_f με γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου μήκους 0.3 με δεδομένα από προσομοίωση 2Δ

Γωνία μεταξύ κατεύθυνσης ροής και φυλλιδίου	$J / J_f = D / D_f$
0	1,018
15	1,020
30	1,036
45	1,054
60	1,070
75	1,085
90	1,085

Πίνακας 7 Μεταβολή D/D_f με γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου 0.3 με δεδομένα από προσομοίωση 3Δ



Εικόνα 17 Μεταβολή D/Df με γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου 0.3 με δεδομένα από προσομοίωση 2Δ και 3Δ.

Και στην περίπτωση φυλλιδίου μήκους 0,3 οι παρατηρήσεις για τις καμπύλες είναι ίδιες με αυτές του 0,5. Μια διαφοροποίηση είναι ότι για γωνία 0 μοιρών η τιμή της σχέσης D/Df πλησιάζει.

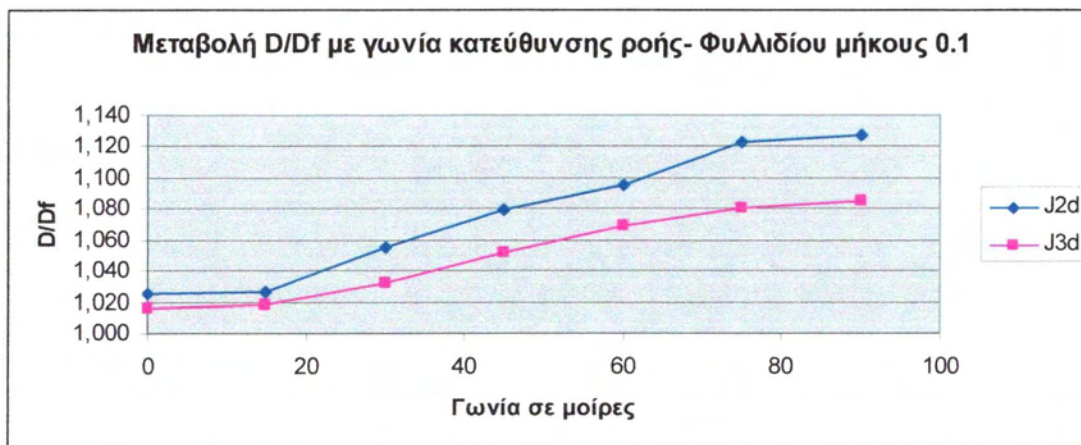
6.2.4 Μεταβολή D/Df με γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου μήκους 0.1

Γωνία μεταξύ κατεύθυνσης ροής και φυλλιδίου	$J / J_f = D / D_f$
0	1,025
15	1,026
30	1,055
45	1,080
60	1,095
75	1,123
90	1,128

Πίνακας 8 Μεταβολή D/Df με γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου 0.1 με δεδομένα από προσομοίωση 2Δ

Γωνία μεταξύ κατεύθυνσης ροής και φυλλιδίου	$J / J_f = D / D_f$
0	1,016
15	1,019
30	1,033
45	1,051
60	1,069
75	1,081
90	1,085

Πίνακας 9 Μεταβολή D/D_f με γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου 0.1 με δεδομένα από προσομοίωση 3Δ

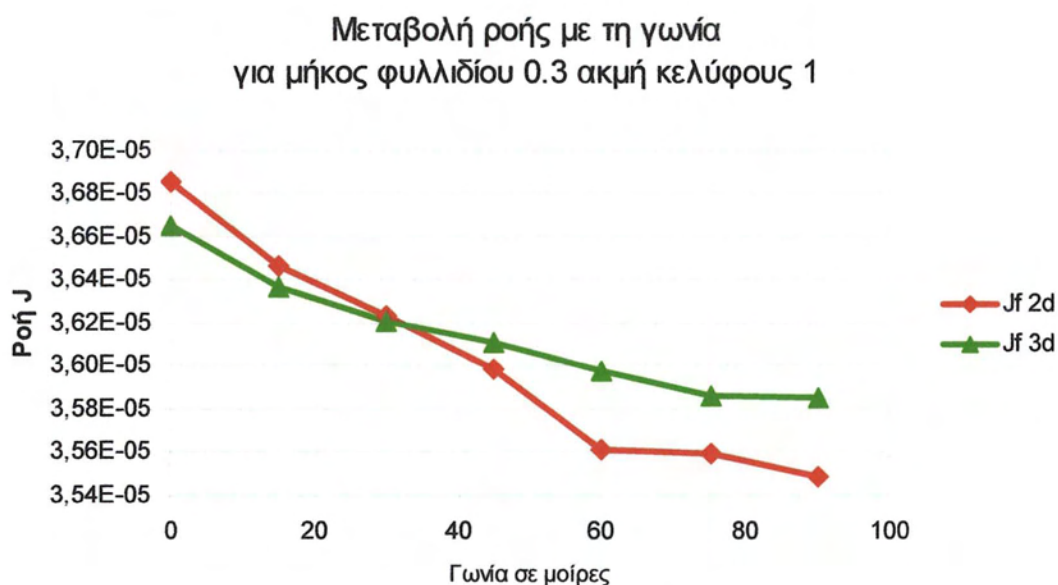


Εικόνα 18 Μεταβολή D/D_f με γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου 0.1 με δεδομένα από προσομοίωση 2Δ και 3Δ

Οι τιμές της σχέσης D/D_f για γωνίες ροής φυλλιδίου 0-15 μοίρες για το 2Δ και 3Δ πλησιάζουν.

6.2.5 Μεταβολή ροής για μήκος φυλλιδίου 0.3 σε κέλυφος ακμής 1

Στο διάγραμμα της εικόνας Εικόνα 19 Μεταβολή φαίνεται η μεταβολή ροής σε διάφορες γωνίες φυλλιδίου 0.3 σε κέλυφος ακμής 1.



Εικόνα 19 Μεταβολή ροής για μήκος φυλλιδίου 0.3 σε κέλυφος 1

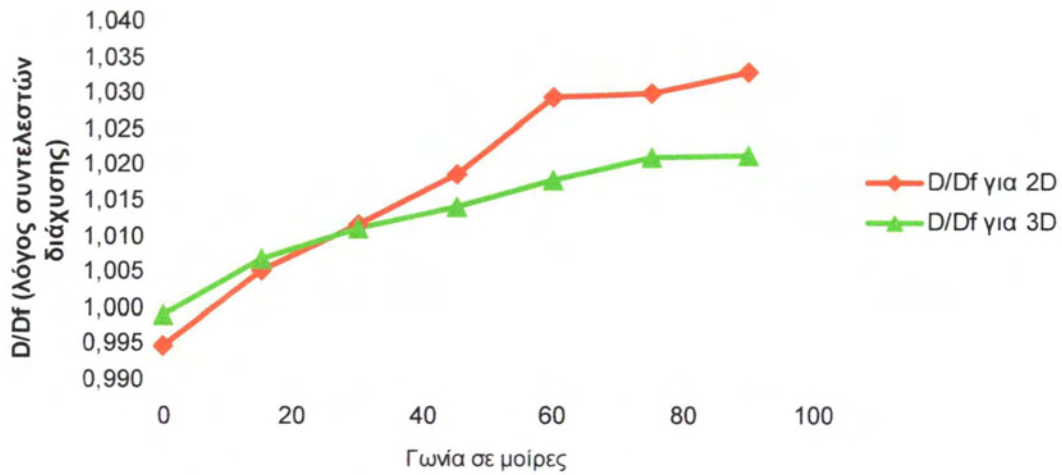
Στην περίπτωση αυτή, δηλαδή με ακμή κελύφους 1 το $\alpha.\varphi=0.09$ για το 2Δ και 0.027 για το 3Δ, σε αντίθεση με 0.25 και 0.125, όταν η ακμή του κελύφους ήταν 0.6 (βλέπε 6.2.1). Έχουμε δηλαδή αραιό διάλυμα (βλέπε 3.2.1)

Παρατηρούμε ότι οι καμπύλες τέμνονται για γωνία φυλλιδίου με τη ροή 30 μοιρών.

6.2.6 Μεταβολή D/Df για φυλλίδιο 0.3 σε κέλυφος 1

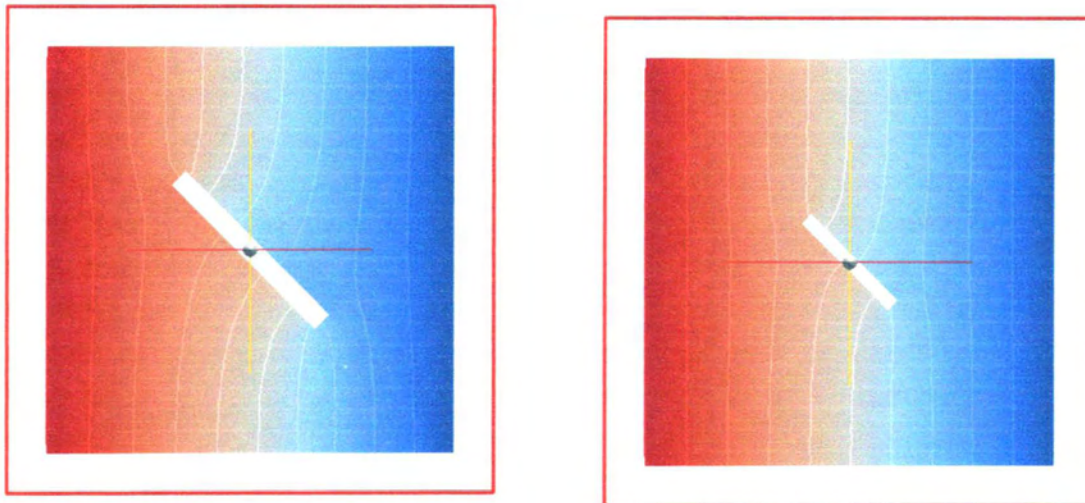
Στο διάγραμμα της εικόνας Εικόνα 19 Μεταβολή φαίνεται η μεταβολή D/Df σε διάφορες γωνίες φυλλιδίου 0.3 σε κέλυφος ακμής 1.

Μεταβολή D/D_f με τη γωνία
για μήκος φυλλιδίου 0.3 ακμή κελύφους 1



Εικόνα 20 Μεταβολή D/D_f για μήκος φυλλιδίου 0.3 σε κέλυφος 1

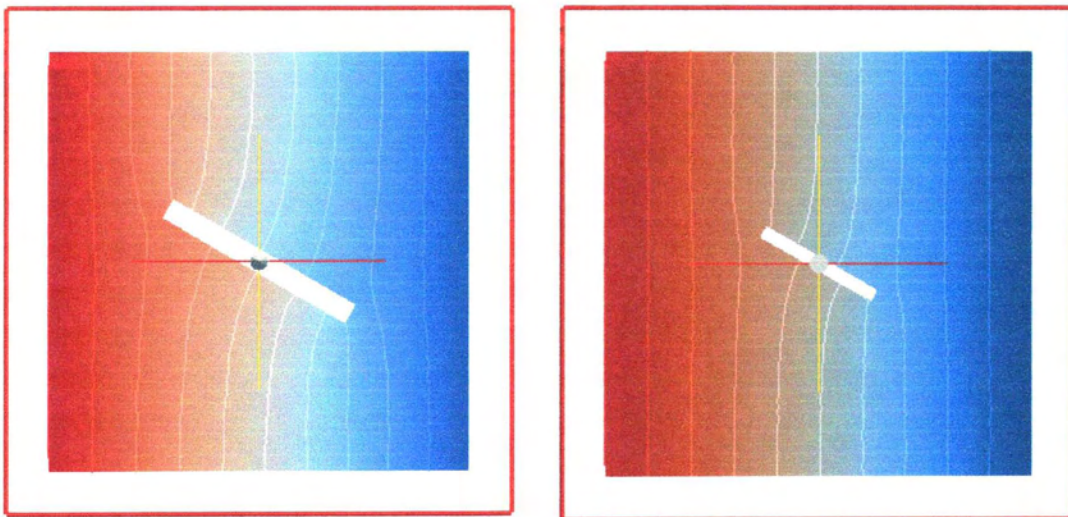
Παρατηρούμε ότι οι καμπύλες D/D_f τέμνονται για γωνία φυλλιδίου με τη ροή 30 μοιρών, σε αντίθεση με την περίπτωση κελύφους ακμής 0.6, όπου η καμπύλη για 2Δ είναι πάνω από την καμπύλη 3Δ (6.2.3) για όλες τις περιπτώσεις γωνίας φυλλιδίου με τη ροή.



Εικόνα 21 Αριστερά κέλυφος ακμής 0.6 και δεξιά κέλυφος ακμής 1 για γωνία 45° .

Στην Εικόνα 21 παρατέθηκαν για σύγκριση τομές του κελύφους σε επίπεδο κάθετο στον άξονα Z στο μέσο της ακμής, για κέλυφος ακμής 0.6 αριστερά και 1 δεξιά για γωνία φυλλιδίου 45° . Και στις δύο περιπτώσεις τα φυλλίδια έχουν ίδιες διαστάσεις. Παρατηρούμε ότι παρόλο που οι γραμμές ίσης συγκέντρωσης έχουν την ίδια μορφή (κάτι αναμενόμενο μια και η γωνίες του φυλλιδίου με την κατεύθυνση ροής είναι ίδιες), η διάχυση γίνεται πιο εύκολη στην περίπτωση κελύφους μεγαλύτερης ακμής. Η προς διάχυση χώρος είναι περισσότερος στη δεύτερη περίπτωση. Σε μία απόσταση (από το φυλλίδιο στον άξονα Y) περίπου το μισό του μήκους του φυλλιδίου, οι γραμμές (ίσης συγκέντρωσης), δεν φαίνεται να επηρεάζονται από την παρουσία του φυλλιδίου.

Ίδιες παρατηρήσεις ισχύουν και για την περίπτωση γωνίας φυλλιδίου 30° (Εικόνα 22)



Εικόνα 22 Αριστερά κέλυφος ακμής 0.6 και δεξιά κέλυφος ακμής 1 για γωνία 30° .

Αριθμητικά η ροή μάζας για φυλλίδιο υπό γωνία 30° στην περίπτωση κελύφους ακμής 0.3 είναι $5,87 \times 10^{-5}$, ενώ αντίστοιχα για κέλυφος ακμής 1 είναι $3,62 \times 10^{-5}$.

6.2.7 Σύγκριση ροής σε κέλυφος χωρίς φυλλίδιο και με φυλλίδιο υπό γωνία 0°

Στους πίνακες που ακολουθούν γίνεται σύγκριση ροής σε κέλυφος με το φυλλίδιο υπο γωνία 0° $J_{\gamma\omega\nu\nu\alpha 0}$ και χωρίς φυλλίδιο $J_{\kappa\epsilon\lambda\upsilon\phi\omicron\varsigma}$.

ΑΚΜΗ κελύφους	$J_{\gamma\omega\nu\nu\alpha 0}$ $\times 10^{-5}$	$J_{\kappa\epsilon\lambda\upsilon\phi\omicron\varsigma}$ $\times 10^{-5}$	Διαφορά
0,2	0,1816	0,1862	2,54%
0,6	5,975	6,116	2,35%
1	3,571	3,666	2,67%

Πίνακας 10 Σύγκριση ροής σε κέλυφος με το φυλλίδιο υπογωνία 0° και χωρίς φυλλίδιο σε προσομοίωση 2Δ

ΑΚΜΗ κελύφους	$J_{\gamma\omega\nu\nu\alpha 0}$ $\times 10^{-5}$	$J_{\kappa\epsilon\lambda\upsilon\phi\omicron\varsigma}$ $\times 10^{-5}$	Διαφορά
0,2	0,1818	0,1847	0,13%
0,6	5,971	6,080	-0,06%
1	3,571	3,662	0,00%

Πίνακας 11 Σύγκριση ροής σε κέλυφος με το φυλλίδιο υπογωνία 0° και χωρίς φυλλίδιο σε προσομοίωση 3Δ

Παρατηρούμε ότι στην περίπτωση προσομοίωσης 2Δ η διαφορά είναι περίπου 2,5%, ενώ στην περίπτωση 3Δ είναι ελάχιστη.

7 Σχολιασμός – Συμπεράσματα

7.1 Σχολιασμός προσομοιώσεων

Μετά την επεξεργασία των δεδομένων των προσομοιώσεων μπορεί να εκτιμηθεί η επίπτωση της ύπαρξης του φυλλιδίου στο κέλυφος.

Από τη μελέτη των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης φαίνεται (**Εικόνα 9 Οι επιφάνειες με ίση συγκέντρωση** και εικόνες στο Παράρτημα 9.2) ότι μπορεί να εμφανιστεί ποιοτικά η εικόνα της κατανομής της συγκέντρωσης στο κέλυφος που εξετάζεται. Ποσοτική αξιολόγηση θα μπορούσε να γίνει με κατάλληλη επεξεργασία των δεδομένων της προσομοίωσης. Στις εικόνες φαίνεται ότι το παρεμβαλλόμενο φυλλίδιο εμποδίζει τη ροή από τα αριστερά προς τα δεξιά. Παρατηρούμε αύξηση της συγκέντρωσης μπροστά από το φυλλίδιο και αντίστοιχα μείωση της συγκέντρωσης πίσω από το φυλλίδιο. Η συσσώρευση (εμπόδιο) μπροστά από το φυλλίδιο αυξάνει με την αύξηση της γωνίας που σχηματίζει το φυλλίδιο με την κατεύθυνση ροής. Φυσικά ο μεγαλύτερος εμποδισμός επιτυγχάνεται όταν το φυλλίδιο είναι κάθετο στη ροή.

Το γινόμενο $a \cdot \phi$ (aspect ratio \times ποσοστό φόρτισης) είναι και για τις τρεις περιπτώσεις μήκους φυλλιδίου που προσομοιώθηκαν ίδιο. Το a (aspect ratio) είναι κατά πολύ μικρότερο από αυτό που συναντάται στη βιβλιογραφία. Κυρίως το μήκος του φυλλιδίου ήταν μικρό. Αύξηση του μήκους φυλλιδίου ή και αύξηση ή μείωση του ποσοστού φόρτισης θα δώσει ευρύτερο φάσμα παρατηρήσεων και δυνατότητα σύγκρισης με άλλες εργασίες (Chen & Papathanasiou 2007)(Bhunia κ.ά. 2012)(Νάκης 2007).

Κατά την αξιολόγηση των διαγραμμάτων του λόγου συντελεστή διάχυσης κελύφους χωρίς φυλλίδιο προς συντελεστή με φυλλίδιο, παρατηρούμε ότι για γωνία κατεύθυνσης ροής- φυλλιδίου 0-15 μοίρες και 75-90 μοίρες η αλλαγή στη σχέση D/D_f είναι πολύ μικρή. Η παρατήρηση αυτή ισχύει και για τα τρία μήκη φυλλιδίων που προσομοιώθηκαν.

Το σχήμα της καμπύλης (Εικόνα 7-8) είναι ίδιο τόσο για τη 2Δ όσο και για την 3Δ. Η απόστασή μεταξύ τους (δηλ. 2Δ και 3Δ) μεγαλώνει όσο αυξάνει η γωνία.

Και στην περίπτωση (Εικόνα 23) φυλλιδίου μήκους 0,3 οι παρατηρήσεις για τις καμπύλες είναι ίδιες με αυτές του 0,5. Μια διαφοροποίηση είναι ότι για γωνία 0 μοιρών η τιμή της σχέσης D/D_f για 2Δ πλησιάζει αυτή για 3Δ. Στην περίπτωση φυλλιδίου μήκους 0,1 οι καμπύλες 2Δ και 3Δ για 0-15 μοίρες είναι πολύ κοντά.

Μιά σύγκριση ροής σε κέλυφος με το φυλλίδιο υπο γωνία 0^0 και χωρίς φυλλίδιο δείχνει ότι η επίπτωση στη ροή είναι μικρή. Η επίπτωση στην περίπτωση προσομοίωσης 3Δ σχεδόν μηδενίζεται.

Στην περίπτωση φυλλιδίου μήκους 0.3 και μεγαλύτερης ακμής κελύφους (από το διπλάσιο του μήκους του φυλλιδίου), δηλαδή αραιότερο διάλυμα φαίνεται ότι οι καμπύλες D/D_f – γωνίας φυλλιδίου διαφοροποιούνται.

7.2 Συμπεράσματα

Με τις προσομοιώσεις που εκτελέστηκαν κατά την παρούσα εργασία, έγινε δυνατή η εκτίμηση της ροής μάζας που διαχέεται διαμέσου του κελύφους πολυμερούς, για μια σειρά από γωνίες φυλλιδίου - κατεύθυνσης ροής. Φάνηκε ότι για γωνία περικλειόμενου φυλλιδίου στο κέλυφος 0 μέχρι 15 και 75 μέχρι 90 μοίρες (με την κατεύθυνση ροής), η επίπτωση στη ροή είναι ελάχιστη.

Η εκτίμηση αυτή επιτρέπει την εξαγωγή συμπερασμάτων για τη λήψη αποφάσεων, ως προς την επιθυμητή γωνία φυλλιδίου που πρέπει να επιτευχθεί, ανάλογα με το επιθυμητό αποτέλεσμα φραγμού. Η προσομοίωση μπορεί να βοηθήσει στη λήψη αποφάσεων χωρίς τη διενέργεια κοστοβόρων και χρονοβόρων πειραμάτων στο εργαστήριο, ή τουλάχιστον στον ορθό σχεδιασμό των εργαστηριακών δοκιμών.

Σε γενικές γραμμές οι καμπύλες που σχεδιάστηκαν μετά την επεξεργασία των δεδομένων της προσομοίωσης για 2 και 3 διαστάσεις, παρόλο που παρομοιάζουν, έχουν διαφορές με ακριβέστερη αυτή των 3Δ. Στις περιπτώσεις που δεν απαιτείται ταχύτητα και απλότητα, αλλά ακρίβεια, θα πρέπει να προτιμηθεί η προσομοίωση σε 3Δ.

7.3 Προτάσεις για συνέχιση της έρευνας

Η έρευνά μας σχεδιάστηκε, ώστε να διεξαχθεί χρονικά στα πλαίσια διπλωματικής εργασίας. Θα μπορούσαν να εξαχθούν ακριβέστερα αποτελέσματα αν διαθέταμε περισσότερο χρόνο για τις προσομοιώσεις. Μια πρώτη βελτίωση θα

μπορούσε να είναι η δημιουργία πυκνότερου πλέγματος. Επίσης στην παρούσα εργασία δεν εξετάστηκε, τί συμβαίνει στις επιφάνειες ορίων, τόσο στην επιφάνεια εισόδου και εξόδου της διαχεόμενης μάζας, όσο και στις επιφάνειες που θεωρήθηκαν αδιαπέραστες (λοιπές επιφάνειες κελύφους, επιφάνεια φυλλιδίου). Θα μπορούσε να διερευνηθεί η χρήση άλλων επιλυτών από τη βιβλιοθήκη του openFOAM, ή ακόμη και η τροποποίηση, ή η δημιουργία νέων.

Το γινόμενο α.φ ήταν και για τις τρεις περιπτώσεις μήκους φυλλιδίου που προσομοιώθηκαν ίδιο. Αύξηση του μήκους φυλλιδίου ή και αύξηση ή μείωση του ποσοστού φόρτισης θα δώσει ευρύτερο φάσμα παρατηρήσεων.

8 Βιβλιογραφία

- Παπαθανασίου Α., 2011, Σημειώσεις Μαθήματος «Ρεολογία & Μορφοποίηση Πολυμερών Υλικών»
- Μητσούλης Ευ. , (1998) Πολυμερή και Σύνθετα Υλικά, Εκδόσεις ΕΜΠ
- Νάκης Λ. 2007, Υπολογιστική μελέτη φαινομένων μεταφοράς διαμέσου σύνθετων πολυμερικών μεμβρανών, Μεταπτυχιακή εργασία, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας.
- Anadão, P. κ.ά., 2013. Influence of the clay content and the polysulfone molar mass on nanocomposite membrane properties. *Applied Surface Science*, 275, σσ.110–120.
- Bhunja, K., Dhawan, S. & Sablani, S.S., 2012. Modeling the Oxygen Diffusion of Nanocomposite-based Food Packaging Films. *Journal of Food Science*, 77(7), σσ.N29–N38.
- Chen, X. & Papathanasiou, T.D., 2007. Barrier Properties of Flake-Filled Membranes: Review and Numerical Evaluation. *Journal of Plastic Film and Sheeting*, 23(4), σσ.319–346.
- Falla, W.R., Mulski, M. & Cussler, E.L., 1996. Estimating diffusion through flake-filled membranes. *Journal of Membrane Science*, 119(1), σσ.129–138.
- Goodyer, C.E. & Bunge, A.L., 2009. Comparison of numerical simulations of barrier membranes with impermeable flakes. *Journal of Membrane Science*, 329(1–2), σσ.209–218.
- Gusev, A.A. & Lusti, H.R., 2001. Rational design of nanocomposites for barrier applications. *Advanced Materials*, 13(21), σ.1641.
- Kumar, P. κ.ά., 2011. A Review of Experimental and Modeling Techniques to Determine Properties of Biopolymer-Based Nanocomposites. *Journal of food science*, 76(1), σσ.E2–E14.
- Lusti, H.R., Gusev, A.A. & Guseva, O., 2004. The influence of platelet disorientation on the barrier properties of composites: a numerical study. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 12(6), σσ.1201–1207.
- Minelli, M., Baschetti, M.G. & Doghieri, F., 2011. A comprehensive model for mass transport properties in nanocomposites. *Journal of Membrane Science*, 381(1–2), σσ.10–20.
- Pajarito, B. & Kubouchi, M., 2013. Flake-Filled Polymers for Corrosion Protection.

Journal of Chemical Engineering of Japan, 46(1), σσ.18–26.

Silvestre, C. & Cimmino, S., 2013. *Ecosustainable Polymer Nanomaterials for Food Packaging: Innovative Solutions, Characterization Needs, Safety and Environmental Issues*, CRC Press.

Εγχειρίδια οδηγιών

Geuzaine C. and Remacle J.-F., Gmsh Reference Manual for Gmsh 2.8 (16 July 2013)

Επίσημος ιστότοπος OpenFOAM <http://www.openfoam.com/> Επίσκεψη σελίδας 28

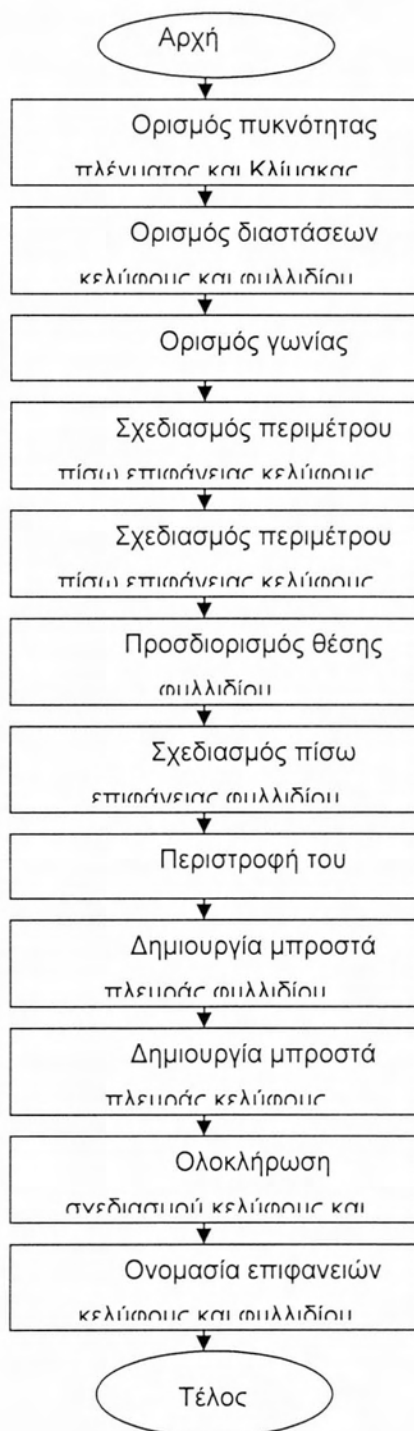
Αυγούστου 2013

Επίσημος ιστότοπος ParaView <http://www.paraview.org/> 25 Αυγούστου 2013

9 Παραρτήματα

9.1 Παράρτημα 1: Βασικά τμήματα του κώδικα

9.1.1 Προετοιμασία πλέγματος



Εικόνα 24 Διάγραμμα ροής προγράμματος δημιουργίας του πλέγματος

```
// Gmsh project created on Thu Aug 1 07:44:25 2013
DefineConstant[ lc = { 0.03, Path "Gmsh/Parameters"}];
Mesh.ScalingFactor=1e-8;
//Platelet dimensions L,W,H length, width, high
L=0.5; W=0.5; H=L/10;//hight 1/10 of platelet lenght
//speciment dimensions sl,sw,sh length, width, high
sl=1.0; sw=1.0; sh=1.0;
angle=Pi/4;
Point(1) = {0.0,0.0,0.0,lc};
Point(2) = {sl,0.0,0.0,lc};
Point(3) = {sl,sw,0.0,lc};
Point(4) = {0,sw,0.0,lc};
Line(1) = {4,3};
Line(2) = {3,2};
Line(3) = {2,1};
Line(4) = {1,4};
Line Loop(5) = {2,3,4,1};//back polymer speciment perimeter
//platelet position pX
pX=(sh-H)/2;
pY=(sl-L)/2;
pZ=(sw-W)/2;
Point(5) = {pX,pY,pZ,lc};
Point(6) = {(pX+H),pY,pZ,lc};
Point(7) = {(pX+H),(pY+W),pZ,lc};
Point(8) = {pX,(pY+L),pZ,lc};
Line(6) = {5, 6};
Line(7) = {6, 7};
Line(8) = {7, 8};
Line(9) = {8, 5};
Line Loop(12) = {9, 6, 7, 8};//back platelet perimeter
Plane Surface(13) = {12};
Rotate {{0, 0, 0.1}, {(sl/2), (sh/2),0}, angle} {Surface{13};}
Translate {0, 0, W} {Duplicata { Surface{13}; }}
Line(19) = {5, 10};
Line(20) = {6, 14};
```

```
Line(21) = {7, 18};
Line(22) = {8, 9};
Plane Surface(23) = {5}; //back polymer specimen surface
//
Translate {0, 0, sw} {Duplicata { Surface{23}; }}
Line Loop(29) = {22, -18, -21, 8};
Plane Surface(30) = {29}; //front polymer surface
Line Loop(31) = {19, 16, -20, -6};
Plane Surface(32) = {31};
Line Loop(33) = {22, 15, -19, -9};
Plane Surface(34) = {33};
Line Loop(35) = {21, -17, -20, 7};
Plane Surface(36) = {35};
Line(37) = {1, 24};
Line(38) = {2, 20};
Line(39) = {3, 19};
Line(40) = {4, 28};
Line Loop(41) = {18, 15, 16, 17};
Plane Surface(42) = {41};
Plane Surface(43) = {12};

Surface Loop(44) = {13, 32, 34, 30, 36, 14};
Physical Surface("innerSurface") = {30, 13, 32, 14, 34, 36}; //innerSurface 45
//Volume(46) = {44};
//Physical Volume(47) = {46}; //platelet 47
Line Loop(48) = {4, 40, -27, -37};
Plane Surface(49) = {48}; //left
Line Loop(50) = {37, -26, -38, 3};
Plane Surface(51) = {50}; //down
Line Loop(52) = {2, 38, -25, -39};
Plane Surface(53) = {52}; //right
Line Loop(54) = {40, 28, -39, -1};
Plane Surface(55) = {54}; //up
Physical Surface("left") = {49}; //56
Physical Surface("right") = {53}; //57
Physical Surface("downAndUp") = {51, 55}; //58
Physical Surface("frontAndBack") = {24, 23}; //59
```

Surface Loop(56) = {49, 23, 53, 51, 24, 55};

Volume(57) = {44, 56};

Physical Volume("polymer") = {57};//58

9.1.2 Έλεγχος πλέγματος

Case : /home/user/w5_130821/a0w5

nProcs : 1

sigFpe : Enabling floating point exception trapping (FOAM_SIGFPE).

fileModificationChecking : Monitoring run-time modified files using
timeStampMaster

allowSystemOperations : Disallowing user-supplied system call operations

// ***** //

Create time

Create polyMesh for time = 0

Time = 0

Mesh stats

points: 66173

faces: 790523

internal faces: 770729

cells: 390313

boundary patches: 5

point zones: 0

face zones: 0

cell zones: 1

Overall number of cells of each type:

hexahedra: 0

prisms: 0

wedges: 0

pyramids: 0

tet wedges: 0

tetrahedra: 390313

polyhedra: 0

Checking topology...

Boundary definition OK.

Cell to face addressing OK.

Point usage OK.

Upper triangular ordering OK.

Face vertices OK.

Number of regions: 1 (OK).

Checking patch topology for multiply connected surfaces ...

Patch	Faces	Points	Surface topology
innerSurface	1860	932	ok (closed singly connected)
frontAndBack	5976	3126	ok (non-closed singly connected)
left	2990	1564	ok (non-closed singly connected)
downAndUp	5972	3124	ok (non-closed singly connected)
right	2996	1567	ok (non-closed singly connected)

Checking geometry...

Overall domain bounding box (0 0 0) (1e-08 1e-08 1e-08)

Mesh (non-empty, non-wedge) directions (1 1 1)

Mesh (non-empty) directions (1 1 1)

Boundary openness (-5.24706e-17 6.73893e-18 9.9397e-19) OK.

Max cell openness = 1.70681e-16 OK.

Max aspect ratio = 253.104 OK.

Minimum face area = 1.56774e-20. Maximum face area = 8.50566e-20.

Face area magnitudes OK.

Min volume = 3.77384e-33. Max volume = 7.86971e-30. Total volume = 9.875e-25. Cell volumes OK.

Mesh non-orthogonality Max: 77.1614 average: 20.8471

*Number of severely non-orthogonal faces: 27.

Non-orthogonality check OK.

<<Writing 27 non-orthogonal faces to set nonOrthoFaces

Face pyramids OK.

***Max skewness = 4.38383, 9 highly skew faces detected which may impair the quality of the results

<<Writing 9 skew faces to set skewFaces

Coupled point location match (average 0) OK.

9.1.3 Οριακές συνθήκες

```
// ***** //  
  
FoamFile  
{  
  version 2.0;  
  format  ascii;  
  class  volScalarField;  
  object  T;  
}  
  
// ***** //  
  
//concentration  
dimensions  [1 -3 0 0 0 0 0];  
  
internalField  uniform 1;  
  
boundaryField  
{  
  frontAndBack  
  {  
    type  zeroGradient;  
  }  
  
  right  
  {  
    type  fixedValue;  
    value  uniform 1;  
  }  
  
  downAndUp  
  {  
    type  zeroGradient;  
  }  
  left
```



```
{
  type      fixedValue;
  value     uniform 2;
}
innerSurface
{
  type      zeroGradient;
}
}
// ***** //
```

9.1.4 Διαστάσεις συντελεστή διάχυσης

```
FoamFile
{
  version  2.0;
  format   ascii;
  class    dictionary;
  location "constant";
  object   transportProperties;
}
// ***** //
//diffusion
DT        DT [ 0 2 -1 0 0 0 ] 0.35e-12;
```

9.1.5 Έλεγχος ροής

```
FoamFile
{
  version  2.0;
  format   ascii;
  class    dictionary;
  location "system";
  object   controlDict;
}
// ***** //
```

application laplacianFoam;

startFrom latestTime;

startTime 0;

stopAt endTime;

endTime 1;

deltaT 0.005;

writeControl runTime;

writeInterval 0.2;

purgeWrite 0;

writeFormat ascii;

writePrecision 6;

writeCompression off;

timeFormat general;

timePrecision 6;

runTimeModifiable true;

Επιλυτής laplacianFoam

```

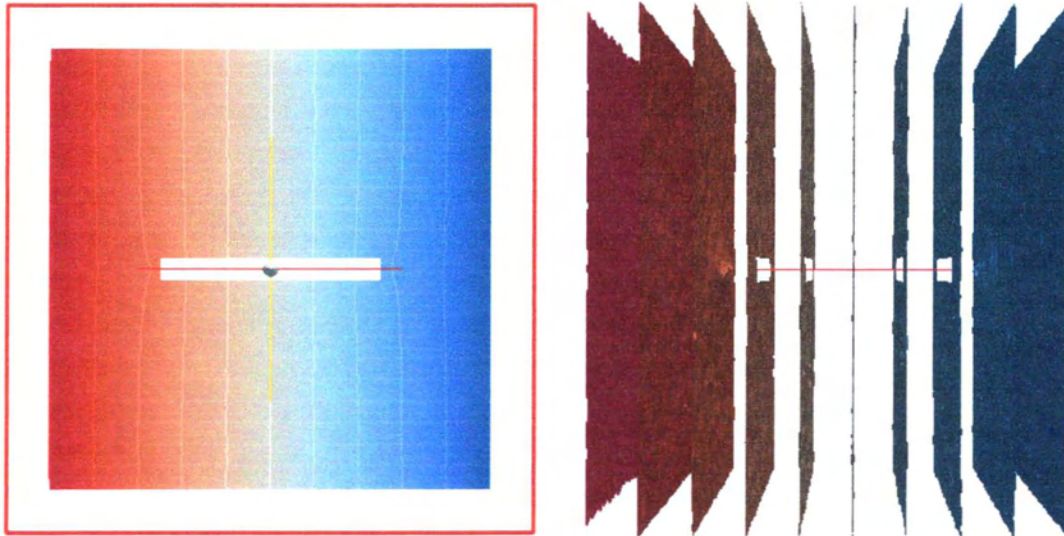
00024 Application
00025     laplacianFoam
00026
00027 Description
00028     Solves a simple Laplace equation, e.g. for thermal
diffusion in a solid.
00029
00030 Usage
00031     - laplacianFoam [OPTION]
00032
00033     @param -case <dir> \n
00034     Specify the case directory
00035
00036     @param -parallel \n
00037     Run the case in parallel
00038
00039     @param -help \n
00040     Display short usage message
00041
00042     @param -doc \n
00043     Display Doxygen documentation page
00044
00045     @param -srcDoc \n
00046     Display source code
00047
00048 \*-----*/
-----*/
00049
00050 #include <finiteVolume/fvCFD.H>
00051
00052
00053 // * * * * *
* * * * * //
00054
00055 int main(int argc, char *argv[])
00056 {
00057
00058 #   include <OpenFOAM/setRootCase.H>
00059
00060 #   include <OpenFOAM/createTime.H>
00061 #   include <OpenFOAM/createMesh.H>
00062 #   include "createFields.H"
00063
00064 // * * * * *
* * * * * //
00065
00066     Info<< "\nCalculating temperature distribution\n" << endl;
00067
00068     while (runTime.loop())
00069     {
00070         Info<< "Time = " << runTime.timeName() << nl << endl;
00071
00072 #       include <finiteVolume/readSIMPLEControls.H>
00073
00074         for (int nonOrth=0; nonOrth<=nNonOrthCorr; nonOrth++)
00075         {
00076             solve

```

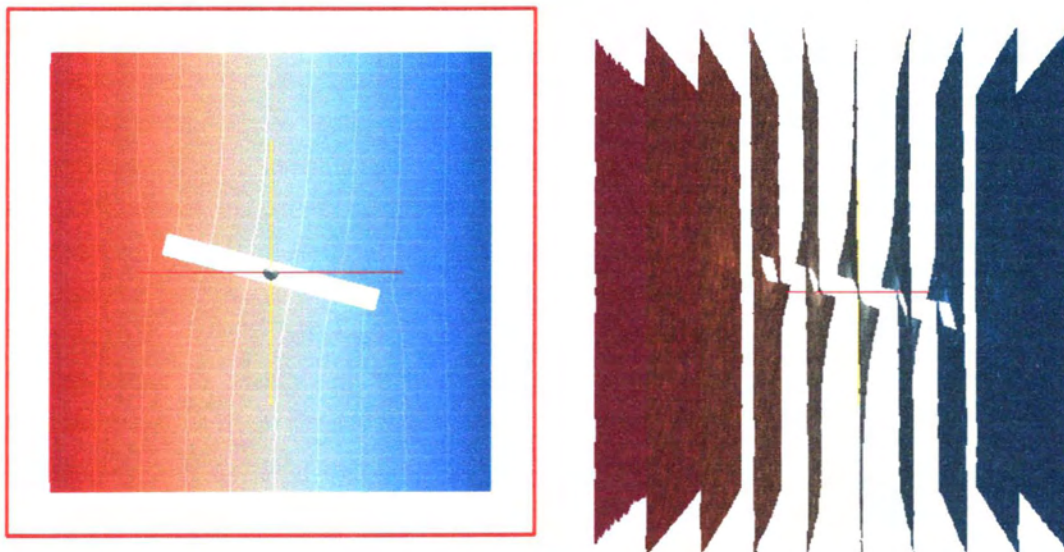
```
00077         (
00078             fvm::ddt(T) - fvm::laplacian(DT, T)
00079         );
00080     }
00081
00082 #       include "write.H"
00083
00084     Info<< "ExecutionTime = " << runTime.elapsedCpuTime()
00085 << " s"
00086         << "   ClockTime = " << runTime.elapsedClockTime()
00087 << " s"
00088         << nl << endl;
00089     }
00090
00091     Info<< "End\n" << endl;
00092
00093     return 0;
00094 }
00095 // ***** vim: set sw=4 sts=4 et:
00096 // *****
```

9.2 Παράρτημα 2: Επιφάνειες ίσης συγκέντρωσης για διάφορες γωνίες ροής φυλλιδίου

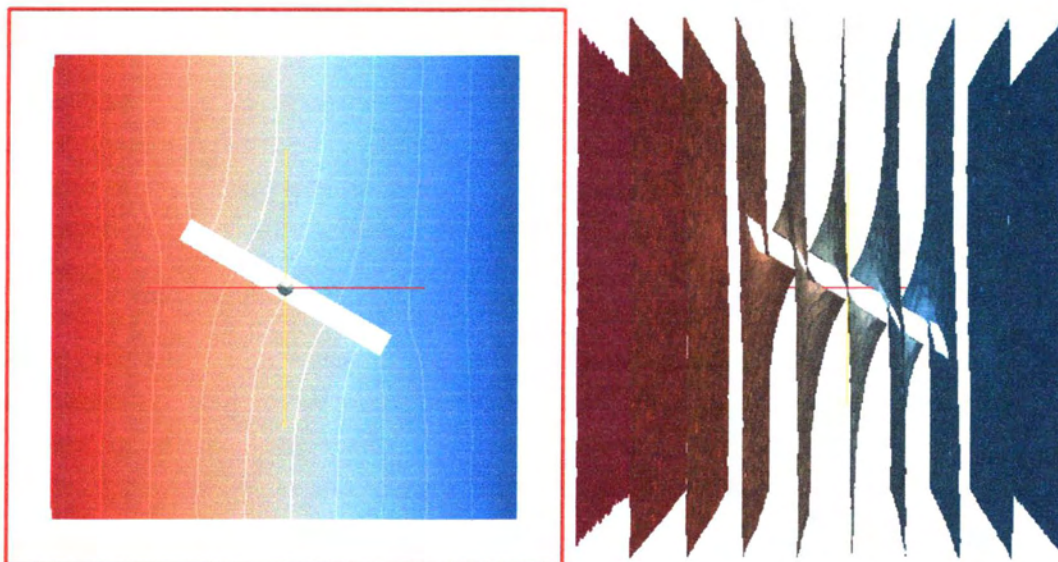
Στις εικόνες που ακολουθούν φαίνονται σε τομή σε επίπεδο XY στο Z 0.5 οι καμπύλες ίσης συγκέντρωσης σε 2Δ και 3Δ



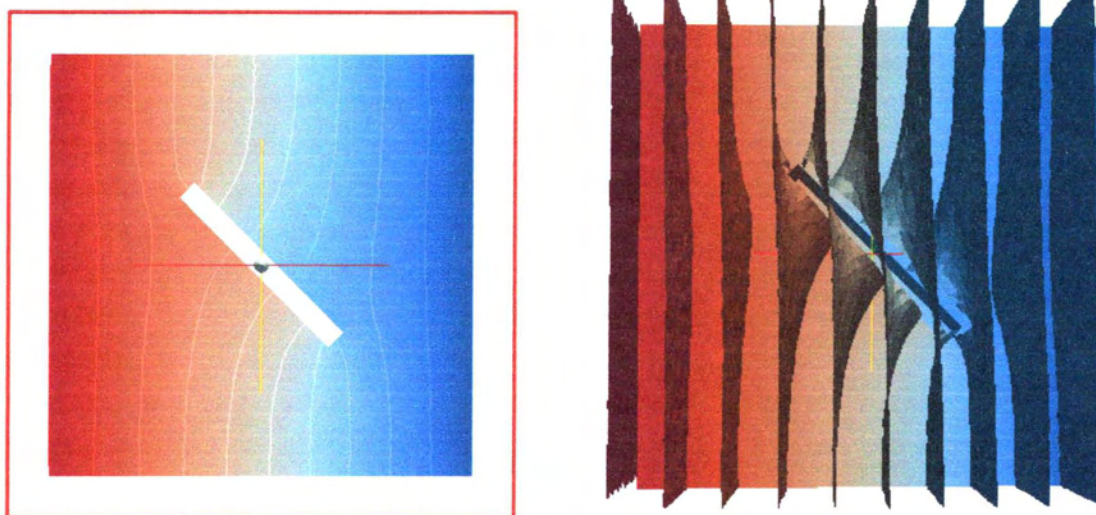
Εικόνα 25 Γωνία ροής φυλλιδίου 0° αριστερά 2Δ, δεξιά 3Δ



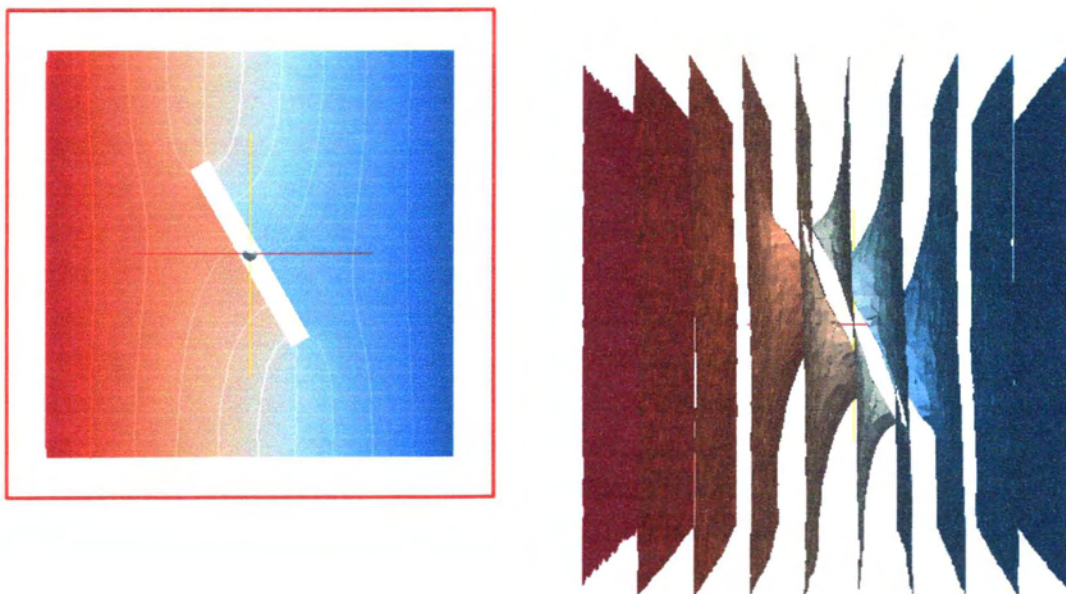
Εικόνα 26 Γωνία ροής φυλλιδίου 15° αριστερά 2Δ, δεξιά 3Δ



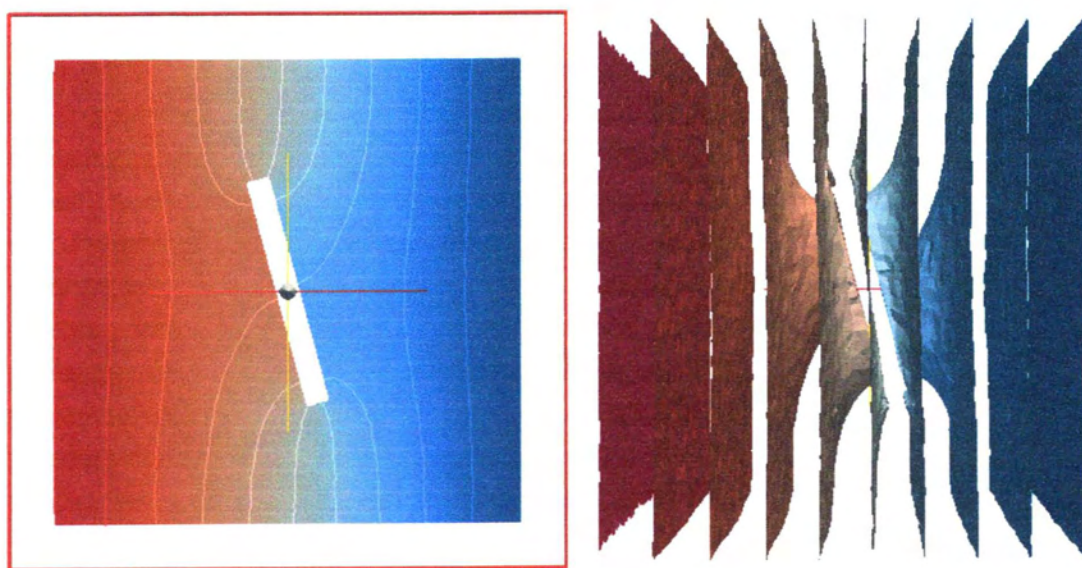
Εικόνα 27 Γωνία ροής φυλλιδίου 30° αριστερά 2Δ, δεξιά 3Δ



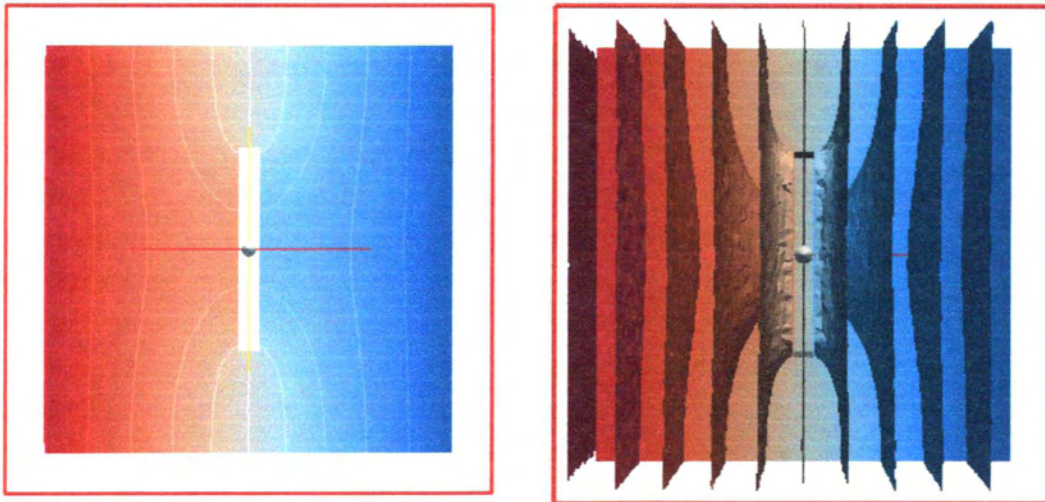
Εικόνα 28 Γωνία ροής φυλλιδίου 45° αριστερά 2Δ, δεξιά 3Δ



Εικόνα 29 Γωνία ροής φυλλιδίου 60° αριστερά 2Δ, δεξιά 3Δ



Εικόνα 30 Γωνία ροής φυλλιδίου 75° αριστερά 2Δ, δεξιά 3Δ



Εικόνα 31 Γωνία ροής φυλλιδίου 90° αριστερά 2Δ, δεξιά 3Δ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ



004000123947