

**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ  
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ  
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ**

**ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ**

**ΣΤΑ ΠΛΑΙΣΙΑ ΤΟΥ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟΥ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΟΣ ΣΠΟΥΔΩΝ**

**ΘΕΜΑ: Υπολογιστική μελέτη φαινομένων μεταφοράς  
μέσω σύνθετων πολυμερικών μεμβρανών**

**ΦΟΙΤΗΤΗΣ: ΑΝΔΡΕΑΣ ΤΣΙΑΝΤΗΣ**

**ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ: ΑΘΑΝΑΣΙΟΣ ΠΑΠΑΘΑΝΑΣΙΟΥ**

**ΒΟΛΟΣ 2016**

**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ  
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ  
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ**

**ΤΟΜΕΑΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ, ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΚΑΙ ΑΝΤΙΡΡΥΠΑΝΤΙΚΗΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ**

**Εγκρίθηκε από τα μέλη της τριμελούς επιτροπής**

**Πρώτος εξεταστής – επιβλέπων :** Αθανάσιος Παπαθανασίου  
Αναπληρωτής Καθηγητής

**Δεύτερος εξεταστής:** Παναγιώτης Τσιακάρας  
Καθηγητής

**Τρίτος εξεταστής:** Νικόλαος Ανδρίτσος  
Καθηγητής

**Ακαδημαϊκό έτος 2015/2016 - Χειμερινό εξάμηνο**

Αφιερωμένο στην οικογένεια μου

## Ευχαριστίες

Η παρούσα μεταπτυχιακή διπλωματική εργασία, εκπονήθηκε στο Εργαστήριο Ρευστομηχανικής και Στροβιλομηχανών του τμήματος Μηχανολόγων Μηχανικών του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας.

Με την περάτωση λοιπόν της παρούσας εργασίας, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή κ. Αθανάσιο Παπαθανασίου για την υπόδειξη του θέματος, την στήριξη της προσπάθειάς μου, την επίβλεψη και την πολύτιμη βοήθεια του καθ' όλη τη διάρκεια υλοποίησης της διπλωματικής εργασίας. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τον κ. Τσιακάρα και τον κ. Ανδρίτσο οι οποίοι ως μέλη της επιτροπής αφιέρωσαν το χρόνο τους στην αξιολόγηση της παρούσης εργασίας.

Ευχαριστώ επίσης τον υποψήφιο διδάκτορα του τμήματος του τμήματος Μηχανολόγων Μηχανικών, κ. Νικόλα Πολυχρονόπουλο για την βοήθεια και τις συμβουλές που μου παρείχε κατά την διεξαγωγή των προσομοιώσεων. Επίσης να ευχαριστήσω τον κ. Νικόλαο Χολέβα και τον κ. Ιωάννη Καβανά για την βοήθεια τους στην ολοκλήρωση του υπολογιστικού cluster χωρίς το οποίο δεν θα ήταν δυνατή η ολοκλήρωση της παρούσης εργασίας. Τέλος να ευχαριστήσω όλα τα μέλη του Εργαστηρίου Ρευστομηχανικής & Στροβιλομηχανών για το ιδιαίτερα φιλικό κλίμα.

Τέλος δεν θα μπορούσα να μην ευχαριστήσω ιδιαίτερα την οικογένεια μου για την καθημερινή συμπαράσταση και υπομονή που δείξαν καθόλο το χρονικό διάστημα που απαιτήθηκε για την ολοκλήρωση της εργασίας.



Επιβλέπων Καθηγητής: Δρ. Αθανάσιος Παπαθανασίου, Αναπληρωτής Καθηγητής,

### Περίληψη

Ένας σημαντικός τομέας της σύγχρονης έρευνας, με μεγάλη τεχνολογική και βιομηχανική σημασία, είναι ο σχεδιασμός νέων πολυμερικών προϊόντων με βέλτιστες ρεολογικές, μηχανικές και οπτικές ιδιότητες, μειωμένο κόστος παραγωγής, μέγιστη δυνατή διάρκεια χρήσης, και φιλικότητα προς το περιβάλλον. Για να αντιμετωπιστεί το πρόβλημα της δημιουργίας νέων πολυμερών με όσο το δυνατόν καλύτερα χαρακτηριστικά που να ταιριάζουν στην αντίστοιχη χρήση θα πρέπει να συσχετιστούν η χημική σύσταση, η μοριακή αρχιτεκτονική και μορφολογία του υλικού (που περιλαμβάνονται στον ευρύτερο όρο «μικροδομή» με τις φυσικές ιδιότητες.

Η παρούσα διπλωματική εργασία παρουσιάζει μια άμεση αριθμητική προσέγγιση για την πρόβλεψη των φαινομένων μεταφοράς διαμέσου σύνθετων πολυμερικών μεμβρανών ενισχυμένων με platelets (φυλλίδια). Γίνεται μια βιβλιογραφική ανασκόπηση και μελετώντας κάποια από τα θεωρητικά μοντέλα της υπάρχουσας βιβλιογραφίας τα οποία επιχειρούν να προβλέψουν τον συντελεστή διάχυσης των σύνθετων πολυμερικών μεμβρανών, επιχειρείται μια αξιολόγηση των αποτελεσμάτων καθώς και ένας σχολιασμός των προβλέψεών τους.

Στη συνέχεια αναπτύσσεται ένα θεωρητικό μοντέλο περιγραφής της μεταβολής των φυσικών ιδιοτήτων και ειδικότερα του ρυθμού μεταβολής του συντελεστή διάχυσης, ανάλογα με τις γεωμετρικές αναλογίες, τον προσανατολισμό και το ποσοστό πλήρωσης των φυλλιδίων στη μικροδομή της πολυμερικής μεμβράνης. Οι αριθμητικοί υπολογισμοί διεξάγονται σε δύο διαστάσεις (2D) για σύνθετες μεμβράνες που περιλαμβάνουν ευθυγραμμισμένα και τυχαία προσανατολισμένα φυλλίδια. Η γεωμετρία είναι περιοδική σε δυο διαστάσεις με περιοδικές συνοριακές συνθήκες και τα μοντέλα επιλύονται χρησιμοποιώντας τον κώδικα ανοικτού λογισμικού OpenFOAM καθώς και υπολογιστικά εργαλεία τα οποία αναπτύχθηκαν από την αρχή στα πλαίσια της παρούσης εργασίας. Γίνεται σύγκριση των υπολογιστικών μοντέλων με την αποτελέσματα της βιβλιογραφίας και στη συνέχεια συγκρίνεται το θεωρητικό μοντέλο με τα υπολογιστικά αποτελέσματα και γίνεται σχολιασμός των αποτελεσμάτων.

## ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ .....	1
2. ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΥΠΟΒΑΘΡΟ .....	4
2.1 Πολυμερή .....	4
2.2 Κατάταξη των πολυμερών: .....	5
2.3 Σύνθετα υλικά .....	6
2.4 Σύνθετα πολυμερή .....	7
3. ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΜΕΜΒΡΑΝΩΝ .....	8
4. ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΜΕΣΩ ΜΕΜΒΡΑΝΩΝ .....	10
4.1 Διάχυση κατά FICK .....	12
5. ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΠΟΥ ΕΠΗΡΕΑΖΟΥΝ ΤΟΝ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ ΔΙΑΧΥΣΗΣ .....	14
5.1 Επίδραση του μήκους των φυλλιδίων .....	14
5.2 Επίδραση του προσανατολισμού των φυλλιδίων .....	14
5.3 Ορισμός παραμέτρου ( $\chi$ ) .....	15
6. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΑΝΑΛΥΤΙΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΔΙΑΧΥΣΗΣ .....	16
7. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ ΛΥΣΗΣ .....	20
8. ΕΠΑΛΗΘΕΥΣΗ ΜΟΝΤΕΛΟΥ .....	22
8.1 Περιγραφή γεωμετρίας .....	22
9. ΕΠΑΛΗΘΕΥΣΗ ΜΟΝΤΕΛΟΥ NIELSEN .....	25
10. ΕΠΑΛΗΘΕΥΣΗ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ARIS .....	32
11. ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΕΠΑΛΗΘΕΥΣΗ ΑΝΑΛΥΤΙΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ (εξ. Ε.23) .....	35
11.1 Υπολογισμός συντελεστή $D_{yy}$ για φυλλίδια προσανατολισμένα κατά $0 < \theta < \pi/2$ .....	36
11.2 Τυπική περίπτωση, $a=100$ , $\alpha\phi=1$ , $0 < \theta < \pi/2$ , $\epsilon=0$ .....	37
11.3 Συγκεντρωτικά αποτελέσματα $D_{yy}$ ως προς τη γωνία προσανατολισμού $\theta$ .....	41
11.4 Τυπική περίπτωση $a=1000$ , $\alpha\phi=1$ , $\theta=0$ , $0 < \epsilon < \pi/2$ .....	42
11.5 Συγκεντρωτικά αποτελέσματα $D_{yy}$ για $\theta=0$ και $0 < \epsilon < \pi/2$ .....	46
12. ΣΧΟΛΙΑΣΜΟΣ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ .....	52
13. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ .....	53
14. ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ .....	56
ΑΝΑΛΥΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ .....	56
14.1 Τυπική περίπτωση $a=50$ , $\alpha\phi=0.01$ , $\theta=0$ , $0 < \epsilon < \pi/2$ .....	56
14.2 Τυπική περίπτωση, $a=50$ , $\alpha\phi=0.1$ , $\theta=0$ , $0 < \epsilon < \pi/2$ .....	58
14.3 Τυπική περίπτωση, $a=50$ , $\alpha\phi=1$ , $\theta=0$ , $0 < \epsilon < \pi/2$ .....	60
14.4 Τυπική περίπτωση, $a=100$ , $\alpha\phi=0.01$ , $\theta=0$ , $0 < \epsilon < \pi/2$ .....	62
14.5 Τυπική Περίπτωση, $a=100$ , $\alpha\phi=0.1$ , $\theta=0$ , $0 < \epsilon < \pi/2$ .....	64
14.6 Τυπική περίπτωση, $a=100$ , $\alpha\phi=1$ , $\theta=0$ , $0 < \epsilon < \pi/2$ .....	66
14.7 Τυπική περίπτωση, $a=1000$ , $\alpha\phi=0.01$ , $\theta=0$ , $0 < \epsilon < \pi/2$ .....	68
14.8 Τυπική περίπτωση, $a=1000$ , $\alpha\phi=0.1$ , $\theta=0$ , $0 < \epsilon < \pi/2$ .....	70
14.9 Τυπική περίπτωση, $a=1000$ , $\alpha\phi=1$ , $\theta=0$ , $0 < \epsilon < \pi/2$ .....	72
14.10 EES v8.4 .....	74
14.11 AutoPilot .....	75
14.12 Αλγόριθμος RSA .....	76
14.13 Salome v7.7.1 .....	77
14.14 Salome Script .....	81
14.15 OpenFOAM v.3.0.1 .....	82
14.16 Paraview v4.4.0 .....	83



Πολυμερικές μεμβράνες από διάφορα υλικά με αξιόλογες ιδιότητες που εξυπηρετούν ένα ευρύτατο φάσμα εφαρμογών αναπτύχθηκαν και εμφανίσθηκαν από την βιομηχανία πολυμερών τις τελευταίες δεκαετίες. Πλησιάζοντας σε χαμηλότερες τάξεις μεγέθους, παρατηρούμε ότι οι νανοσύνθετες πολυμερικές μεμβράνες ανήκουν σε μια νέα κατηγορία σύνθετων υλικών που υπόσχονται πολλά ως υλικά με βελτιωμένες ιδιότητες για σχεδόν το σύνολο των βιομηχανικών εφαρμογών και κυρίως στην ιατρική, στη συσκευασία τροφίμων, στη βιομηχανία παραγωγής ηλεκτρικής ενέργειας (π.χ φωτοβολταϊκά συστήματα και κελιά καυσίμου), σε επικαλύψεις και διάφορους χημικούς διαχωρισμούς στοιχείων που μπορεί να απαιτούνται όπως η αφαλάτωση του νερού καθώς και πλήθος άλλων εφαρμογών. Σε πολλές εφαρμογές και εφόσον απαιτείται, είναι δυνατός ο έλεγχος της διαπερατότητας των μεμβρανών ή αλλιώς της εκλεκτικής τους διαπερατότητας.

Ειδικότερα αναφέρουμε εφαρμογές στον τομέα της ιατρικής ή νανοϊατρικής (εφόσον αναφερόμαστε στην κλίμακα του νανομέτρου-nm (10<sup>-9</sup> m) και συγκεκριμένα στην εξωνεφρική κάθαρση όπου τα επιτεύγματα της νανοτεχνολογίας έχουν κάνει ήδη τη εμφάνιση τους στις πιο πρόσφατες ημιπερατές μεμβράνες των φίλτρων αιμοκάθαρσης. Έχουν εξελιχθεί υψηλής διαπερατότητας μεμβράνες από πολυσουλφόνη, στις οποίες η πορώδης υφή της εσωτερικής στοιβάδας ελέγχεται σε επίπεδο νανοκλίμακας. Έχουν επίσης αναπτυχθεί και δοκιμαστεί πόροι με εκλεκτική διαπερατότητα, γεγονός που καθιστά δυνατή την κατασκευή «έξυπνων» μεμβρανών και την ενσωμάτωση τους σε συνεχούς λειτουργίας, φορητό ή εμφυτεύσιμο σύστημα τεχνητού νεφρού.

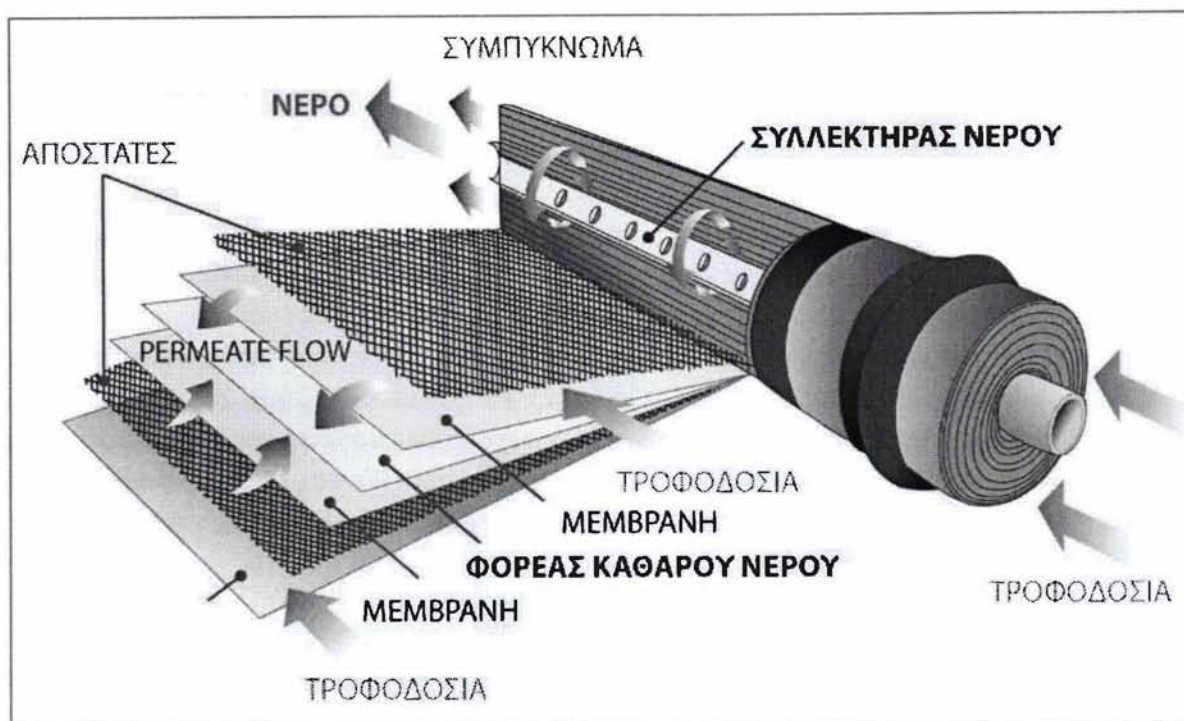
Επίσης έχουμε εφαρμογές στον τομέα της ηλεκτρονικής όπου η παραγωγή σχεδόν χημικά καθαρού απιονισμένου νερού, απαραίτητου για την παραγωγή πλακετών ηλεκτρονικών υπολογιστών και microchips, έγινε δυνατή μετά την εφαρμογή κατάλληλων συστημάτων αντίστροφης ώσμωσης με χρήση νέων σύνθετων πολυμερικών μεμβρανών.

Νανοσύνθετες πολυμερικές μεμβράνες χρησιμοποιούνται επίσης σε εφαρμογές όπως η επεξεργασία αστικών αποβλήτων με στόχο την φίλτρωση και επαναχρησιμοποίηση τους, στη σύγχρονη τεχνολογία τροφίμων αυξάνοντας την ασφάλεια των καταναλωτών και διατηρώντας την ποιότητα των τροφίμων όπως φυσικά και σε πολλές άλλες εφαρμογές διαχωρισμού.

Τέλος η χρήση των μεμβρανών βοηθά στην αντιμετώπιση του πολύ σημαντικού προβλήματος της έλλειψης πόσιμου νερού με μεθόδους διεργασιών διαχωρισμού με μεμβράνες, όπως η αντίστροφη ώσμωση και η αντίστροφη ηλεκτροδιάλυση, ή ακόμη και με μεθόδους θερμικής αφαλάτωσης. Αυτό μας δίνει πρόσβαση στο 97% του συνολικού επίγειου νερού το οποίο βρίσκεται στις θάλασσες και στους ωκεανούς με υψηλή περιεκτικότητα σε διαλυμένα άλατα (περίπου 35.000 mg ανά λίτρο). Σήμερα η ενεργειακά συμφερότερη λύση είναι η αφαλάτωση με χρήση μεμβρανών αντίστροφης ώσμωσης.

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, από ανόργανα υλικά όπως η μίκα και πιο πρόσφατα σε διαστάσεις νανοκλίμακας, χρησιμοποιώντας ορυκτά αργίλου όπως ο Hectorite, Saponite και ο Montmorillonite [1].





Σχ. 1 - Αναπαράσταση συστήματος αφαλάτωσης θαλασσινού νερού με συσκευή αντίστροφης ώσμωσης

Έχει αποδειχθεί ότι τέτοιου είδους ενισχυτικά μέσα είναι πολύ αποτελεσματικά αφού έχουν τη δυνατότητα να αυξήσουν σημαντικά την διανυόμενη απόσταση που ακολουθούν τα διαχεόμενα μόρια διαμέσου της μεμβράνης. 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.

Παρά το γεγονός ότι η ενίσχυση των μεμβρανών είναι μια γνωστή κατηγορία έρευνας, η εξάρτησή των ιδιοτήτων τους από παράγοντες μικροδομής όπως η κατανομή στο χώρο, η διασπορά μεγέθους και ο προσανατολισμός των ενισχυτικών μέσων στην πολυμερική μήτρα δεν είναι πολύ κατανοητά. Μέσα από ένα πλήθος ερευνών που πραγματοποιήθηκαν στον τομέα αυτό και προκειμένου να κατανοηθεί ακόμη περισσότερο το κομμάτι της εξάρτησης των φαινομένων μεταφοράς των σύνθετων μεμβρανών από παράγοντες της μικροδομής των ενισχυτικών μέσων προέκυψαν διάφορα αποτελέσματα τα οποία και θα αναλυθούν.

Η μελέτη τέτοιων συστημάτων (μεγάλης γεωμετρικής πολυπλοκότητας) απαιτεί την αποδοχή ορισμένων υποθέσεων καθώς και ορισμένων παραδοχών προκειμένου να υλοποιηθεί. Παραδείγματος χάριν, για ένα διάλυμα που περιλαμβάνει φυλλίδια με τιμή aspect ratio (λόγος του μήκους προς το πάχος του φυλλιδίου ο οποίος στο εξής θα αναφέρεται με το γράμμα  $\alpha$ ) ίση με 100, θα πρέπει να έχει ένα ποσοστό φόρτισης μικρότερο του 0.01% έτσι ώστε να είναι αραιό και επομένως να μπορεί να προσεγγισθεί με αναλυτικές μεθόδους. Για ένα μη-αραιό διάλυμα η συγκέντρωση της διαχεόμενης ουσίας γύρω από κάθε φυλλίδιο διαταράσσεται λόγω της παρουσίας των γειτονικών φυλλιδίων, πράγμα το οποίο καθιστά την πειραματική επαλήθευση δύσκολη έως αδύνατη και την αριθμητική προσέγγισή τους μονόδρομο. Η συγκέντρωση και πιο συγκεκριμένα το γινόμενο ( $\alpha\phi$ ) (γινόμενο του λόγου aspect ratio επί του ποσοστού (%) φόρτισης των φυλλιδίων ( $\phi$ )) είναι ένας σημαντικός παράγοντας που θα πρέπει να λαμβάνεται υπόψη κατά την ανάλυση τέτοιων συστημάτων [1].

Η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία παρουσιάζει μια άμεση αριθμητική προσέγγιση για την πρόβλεψη των ιδιοτήτων μόνωσης και των φαινομένων μεταφοράς διαμέσου σύνθετων πολυμερικών μεμβρανών ενισχυμένων με φυλλίδια. Ειδικότερα μελετούμε την μεταβολή του συντελεστή διάχυσης τους, σαν συνάρτηση παραμέτρων όπως η συγκέντρωση, οι διαστάσεις και ο προσανατολισμός των φυλλιδίων. Οι αριθμητικοί υπολογισμοί διεξάγονται σε δύο διαστάσεις (2D) για τις σύνθετες μεμβράνες που περιλαμβάνουν προσανατολισμένα και τυχαίου προσανατολισμού φυλλίδια, χρησιμοποιώντας τον κώδικα OpenFOAM.

Επιπλέον κάνοντας μια βιβλιογραφική ανασκόπηση και μελετώντας κάποια από τα θεωρητικά μοντέλα της υπάρχουσας βιβλιογραφίας τα οποία επιχειρούν να προβλέψουν τον συντελεστή διάχυσης των σύνθετων πολυμερικών μεμβρανών, επιχειρείται μια αξιολόγηση των αποτελεσμάτων καθώς και ένας σχολιασμός των προβλέψεών τους.

### 2.1 Πολυμερή

Τα πολυμερή είναι υλικά αποτελούμενα από μεγάλα μόρια (μακρομόρια) τα οποία δημιουργούνται από την επανάληψη δομικών μονάδων (μονομερή) τα οποία συνδέονται μεταξύ τους με ομοιοπολικούς χημικούς δεσμούς. Τα πολυμερή καλύπτουν ένα ευρύ φάσμα εφαρμογών και προέρχονται από οργανικές πρώτες ύλες, βασισμένες στο πετρέλαιο. Σε αυτή την κατηγορία των υλικών κατατάσσονται ο βακελίτης, το νεοπρένιο, το νάιλον, το PVC, το πολυστυρένιο, το πολυακρυλονιτρίλιο κ.α.

Ετυμολογικά, η λέξη πολυμερή προέρχεται από τις ελληνικές λέξεις πολύ+μέρος, ο οποίος είναι ένας ορισμός που περιγράφει κατάλληλα τον τεράστιο αριθμό των μορίων που απαρτίζουν το μακρομόριο.

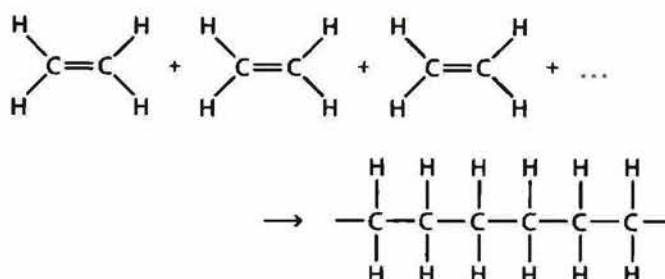
Τα πολυμερή παρασκευάζονται από τη συνένωση πολλών ίδιων μορίων, δηλαδή των μονομερών, με τις εξής διαδικασίες:

- Με την μέθοδο του πολυμερισμού
- Με την μέθοδο της πολυσυμπύκνωσης

**Πολυμερισμός:** Με τη μέθοδο αυτή παρασκευάζονται πολυμερή σώματα που έχουν την ίδια σύσταση με τα αρχικά μονομερή όπως π.χ ο πολυμερισμός του αιθυλενίου προς τον σχηματισμό του πολυαιθυλενίου:

Σε πολυμερισμό μπορούν να υποβληθούν ορισμένες κυκλικές ενώσεις. Κατά τον πολυμερισμό μπορούν να σχηματιστούν προϊόντα διπλάσιου, τριπλάσιου και γενικά πολλαπλάσιου μοριακού βάρους. Ο πολυμερισμός γίνεται με την επίδραση της θερμότητας (θερμικός) ή των ελεύθερων ριζών (ριζικός), ή των καταλυτών (καταλυτικός), ή της ακτινοβολίας (ραδιενεργός) κ.λπ. Σε πολυμερισμό υποβάλλεται το καθαρό μονομερές και τα διαλύματα ή τα γαλακτώματά του. Η ποιότητα και οι ιδιότητες των πολυμερών που παρασκευάζονται με πολυμερισμό επηρεάζονται από διάφορους φυσικούς και χημικούς παράγοντες από τους οποίους σπουδαιότεροι είναι: οι ιδιότητες του μονομερούς, η θερμοκρασία, η πίεση, ο χαρακτήρας του περιβάλλοντος στο οποίο γίνεται ο πολυμερισμός και η παρουσία προσμείξεων ή διεγερτών ή σταθεροποιητών. Ανάλογα με τις προσθήκες και τις συνθήκες διεργασίας παράγονται πολυμερή διαφορετικού μοριακού βάρους των οποίων οι ιδιότητες ποικίλλουν [4,5,Δ4].

Στις παρακάτω εικόνες φαίνεται σχηματικά η διαδικασία του πολυμερισμού:



Σχ. 2 - Πολυμερισμός αιθυλενίου



**Πολυσυμπύκνωση:** Με τη μέθοδο αυτή παράλληλα με το σχηματισμό μεγαλομοριακής ενώσεως αποχωρίζονται και μικρομοριακά προϊόντα, όπως το νερό, το υδροχλώριο, η αλκοόλη κ.λπ. Υπάρχουν δυο ειδών αντιδράσεις πολυσυμπύκνωσης. Η ομοπολυσυμπύκνωση, που είναι διεργασία ανάμεσα σε ίδια μονομερή π.χ. αμινοξέα και η ετεροπολυσυμπύκνωση στην οποία παίρνουν μέρος συνήθως δύο διαφορετικά μονομερή π.χ. το δικαρβονικό οξύ και η διαμίνη. Οι κυριότεροι παράγοντες που επηρεάζουν την πορεία της πολυσυμπύκνωσης και καθορίζουν τις ιδιότητες των παραγόμενων προϊόντων είναι η θερμοκρασία της αντίδρασης, η δομή του αρχικού μονομερούς, τα είδη και οι ποσότητες των καταλυτών. Στη βιομηχανία με τη μέθοδο της πολυσυμπύκνωσης παρασκευάζονται συνθετικές ρητίνες, πολυαμίδια, πολυεστέρες κ.λπ. [8].

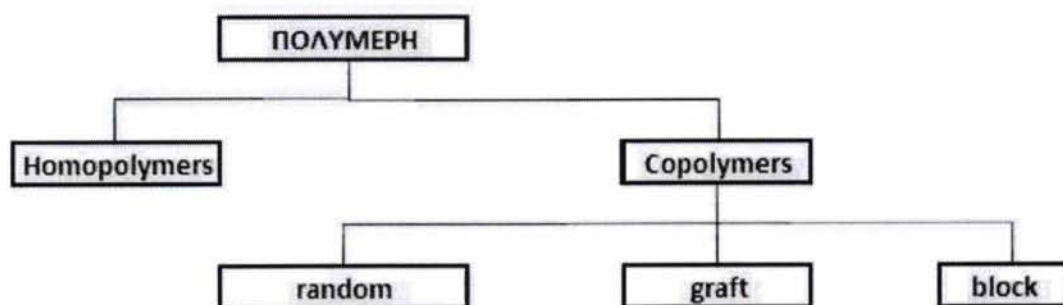
## 2.2 Κατάταξη των πολυμερών:

Η κατάταξη των πολυμερών με κριτήριο την μηχανική τους απόκριση σε υψηλές θερμοκρασίες φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



Σχ. 3 - Κατάταξη πολυμερών βάσει των μηχανικών τους ιδιοτήτων σε υψηλές θερμοκρασίες

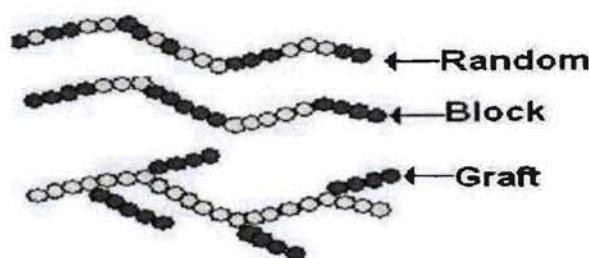
Μία άλλη διάκριση των πολυμερών, μπορεί να γίνει με κριτήριο αν το μονομερές της μοριακής αλυσίδας είναι το ίδιο ή διαφορετικό. Έτσι διακρίνουμε τα homopolymer και τα copolymer (συμπολυμερή), αν έχουμε το ίδιο μονομερές ή διαφορετικό, αντίστοιχα. Στο παρακάτω σχήμα 6 διακρίνεται αυτή η κατάταξη:



Σχ 4 - Κατάταξη πολυμερών βάσει των δομικών τους μονάδων (μονομερή)

Τα συμπολυμερή από την πλευρά τους, όπως είδαμε στο προηγούμενο σχήμα 6, διακρίνονται στις ομάδες random, graft και block ανάλογα με τον τρόπο εναλλαγής των δομικών στοιχείων επάνω

στην πολυμερική αλυσίδα. Στο παρακάτω σχήμα φαίνονται οι διάφορες περιπτώσεις της δομής της μοριακής αλυσίδας για ένα συμπολυμερές.



Σχ.5 - Δομή συμπολυμερών

### 2.3 Σύνθετα υλικά

Ως 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 ανάμειξη 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 (βλ. Σχήμα 8): (α) ενισχυμένα με σωματίδια, (β) ενισχυμένα με ίνες και (γ) δομικά σύνθετα. Κάθε κατηγορία έχει τουλάχιστον δύο υποδιαιρέσεις. 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. Με βάση αυτή την ταξινόμηση ακολουθεί η παρουσίαση των παρακάτω κατηγοριών των υλικών [10].

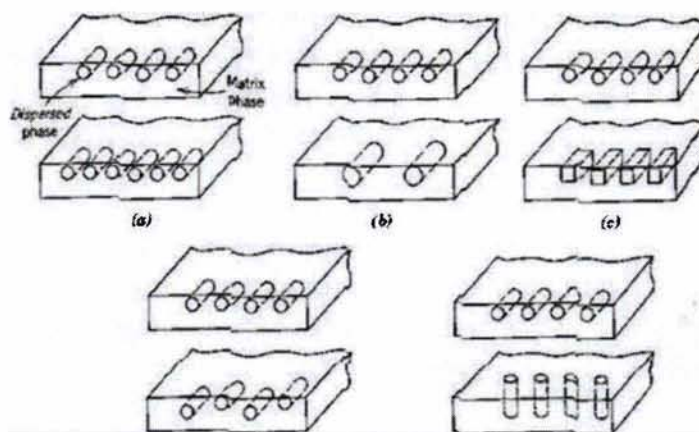


Σχ. 6 - Ταξινόμηση των διαφόρων τύπων σύνθετων υλικών

Από την άλλη πλευρά, η ενισχυτική φάση είναι η φάση που προσδίδει στο σύνθετο υλικό τις βελτιωμένες ιδιότητές του συγκριτικά με τις ιδιότητες της μήτρας. Όμως πέρα από την δομή και την επιφανειακή μορφολογία των σύνθετων υλικών με ενισχυτικά μέσα, υπάρχουν και οι μικροσκοπικοί παράγοντες που αφορούν τα ενισχυτικά αυτά μέσα και που επηρεάζουν τις τελικές ιδιότητες των



συνθέτων όπως είναι η συγκέντρωση, το μέγεθος, το σχήμα, η κατανομή/ευθυγράμμιση, ο προσανατολισμός καθώς και το μήκος τους.



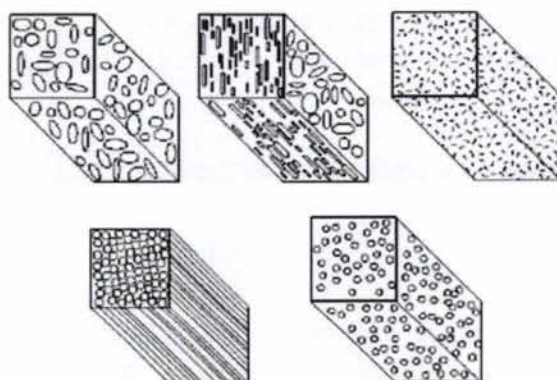
Σχ. 7 - Διάφορα γεωμετρικά χαρακτηριστικά που επηρεάζουν τις ιδιότητες σύνθετων υλικών:  
(α) συγκέντρωση, (β) μέγεθος, (γ) σχήμα, (δ) κατανομή, (ε) προσανατολισμός

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. Τα χαρακτηριστικά αυτά φαίνονται στο παραπάνω Σχήμα 7.

Στην παρούσα εργασία όπως έχει ήδη προαναφερθεί θα επικεντρωθούμε στον τρόπο με τον οποίο μεταβάλλεται ο συντελεστής διάχυσης σε σχέση με τον προσανατολισμό των φυλλιδίων (ε), τον βαθμό πλήρωσης του υλικού (φ) και την αναλογία μήκους πλάτους του φυλλιδίου (α).

## 2.4 Σύνθετα πολυμερή

Τον όρο σύνθετα πολυμερή τον χρησιμοποιούμε για να περιγράψουμε τα πολυμερή που είναι ενισχυμένα με σωματίδια τα οποία συναντώνται σε διάφορες μορφές, όπως είναι τα φυλλίδια, τα σφαιρικά σωματίδια, οι ίνες και τα flakes. Στην παρούσα εργασία θα ασχοληθούμε με ενίσχυση τύπου φυλλιδίων σε πολυμερικές μεμβράνες. Ο προσανατολισμός της ενίσχυσης μπορεί να είναι συγκεκριμένος ή τυχαίος, οπότε και έχουμε τα aligned ή random συστήματα, αντίστοιχα. Στο σχήμα 11 φαίνονται οι διάφορες περιπτώσεις σύνθετων πολυμερών [9]



Σχ. 8 - Κατανομές υλικών πλήρωσης.

Η μεμβράνη είναι μια διαπερατή ή ημιπερατή φάση, η οποία συχνά αποτελείται από ένα λεπτό πολυμερές ή άλλης φύσης υλικό, που περιορίζει την κίνηση ορισμένων συστατικών. Σύμφωνα με τον κατά IUPAC ορισμό πρόκειται για μια δομή, με πολύ μεγάλες πλευρικές διαστάσεις σε σχέση με το πάχος της και μέσω της οποίας, υπό την επίδραση διαφόρων κινητήριων δυνάμεων, μπορεί να λάβει χώρα το φαινόμενο μεταφοράς μάζας [21].

Ένας πιο γενικός ορισμός είναι ο εξής: «Μεμβράνη καλείται μια φάση ή ομάδα φάσεων κειμένη μεταξύ δυο διαφορετικών φάσεων, η οποία είναι φυσικώς ή/και χημικώς διακριτή από αυτές και η οποία, λόγω των ιδιοτήτων της και της εφαρμοζόμενης δύναμης πεδίου, μπορεί να ελέγξει τη μεταφορά μάζας μεταξύ αυτών των δυο φάσεων» [22].

Πιο πρακτικά λοιπόν, είναι ένα υλικό διαμορφωμένο σαν λεπτό στρώμα ή στοιβάδα, που παρεμβάλλεται ανάμεσα σε δύο ρευστές φάσεις (μίγματα ή διαλύματα) και το οποίο είναι διαπερατό από τα συστατικά αυτών των δύο φάσεων. Όμως, επειδή κάθε συστατικό έχει διαφορετική δυνατότητα διέλευσης μέσω της μεμβράνης, μπορούμε να επιβάλλουμε, με τη βοήθεια κατάλληλης κινητήριας δύναμης (π.χ. πίεση, χημικό δυναμικό, συγκέντρωση) τη μετακίνηση υλικού από τη μία φάση προς την άλλη και σαν αποτέλεσμα να έχουμε διαφορετικές συστάσεις στην πλευρά προς την οποία γίνεται η κίνηση σε σχέση με την άλλη πλευρά. Δηλαδή, αυτή η επιπρόσθετη φάση συνιστά έναν φραγμό-μόνωση μεταξύ ενός ρεύματος τροφοδότησης προς διαχωρισμό και ενός ρεύματος προϊόντων.

Η μεμβράνη ελέγχει τους σχετικούς ρυθμούς μεταφοράς των συστατικών μέσω αυτής και χωρίζει την τροφοδοσία σε ένα ρεύμα εμπλουτισμένο σε συγκεκριμένα συστατικά και σε ένα ρεύμα χαμηλής συγκέντρωσης σε αυτά. Γι' αυτό, οι μεμβράνες χαρακτηρίζονται από μια εκλεκτικότητα ως προς τη διέλευση των μορίων και μπορούν να χρησιμεύσουν σε διεργασίες διαχωρισμού μιγμάτων ή διαλυμάτων στα συστατικά τους. Η κινητήρια δύναμη για διαχωρισμό αερίων και ατμών είναι η διαφορά μερικής πίεσης διαμέσου της μεμβράνης, ενώ για υγρά είναι η διαφορά συγκέντρωσης.

Οι μεμβράνες, ανάλογα με το υλικό από το οποίο είναι φτιαγμένες, διακρίνονται σε ανόργανες και πολυμερικές. Οι πρώτες συνήθως αποτελούνται από κεραμικά υλικά ή ζεόλιθους (στερεά σώματα με πόρους πολύ συγκεκριμένων διαστάσεων που συχνά αποκαλούνται «μοριακά κόσκινα»), αν και δε λείπουν και περυπτώσεις κατάλληλα παρασκευασμένων μεταλλικών μεμβρανών. Οι ανόργανες μεμβράνες είναι μικροπορώδεις, δηλαδή η εκλεκτικότητά τους οφείλεται στην ύπαρξη πόρων με πολύ μικρές διαστάσεις που επιτρέπουν τη διέλευση μόνο σε σωματίδια με μέγεθος κάτω από ορισμένες διαστάσεις (μικρομόρια, μακρομόρια, κολλοειδή σωματίδια, ανάλογα με το μέγεθος πόρων της κάθε μεμβράνης).

Ένα παράδειγμα πολυμερικών μεμβρανών είναι αυτό των μη-αγώγιμων πολυμερικών μεμβρανών. Ο Wang [23] και οι συνεργάτες του μελέτησαν τις ιδιότητες εκλεκτικής διαπερατότητας των μεμβρανών οξικής κυτταρίνης ως προς το μέγεθος των προς διάχυση μορίων. Οι μεμβράνες οξικής κυτταρίνης αποτίθενται στην επιφάνεια ηλεκτροδίων συνήθως με την τεχνική εναπόθεσης σταγόνας. Αρχικά το πορώδες της μεμβράνης επιτρέπει τη δίοδο μόνο σε πολύ μικρά μόρια, ενώ με ελεγχόμενη υδρόλυση του πολυμερούς σε διαλύματα βάσεων μπορεί να γίνει κατάλληλη διαμόρφωση του πορώδους, ώστε να επιτρέπεται η διέλευση και σε μεγαλύτερα μόρια [23].



Επίσης, οι διαστάσεις, το σχήμα, η ευκαμψία ή δυσκαμψία και η μάζα των μορίων που μπορούν να διέλθουν μέσα από τους πόρους επηρεάζουν και την ταχύτητα διέλευσης αντίστοιχου συστατικού μέσω της μεμβράνης. Οι ανόργανες μεμβράνες μπορούν να χρησιμοποιηθούν κυρίως στο διαχωρισμό αερίων μιγμάτων, και μάλιστα για συστατικά μικρού μοριακού βάρους, γιατί εκεί έχουμε μεγαλύτερους ρυθμούς διάχυσης αλλά και μεγαλύτερες διαφορές ως προς τη διαχυτότητα, πράγμα που καθιστά τη διεργασία πιο αποδοτική. Οι μεμβράνες αυτές πλεονεκτούν ως προς τη θερμική αντοχή και τη χημική σταθερότητα αλλά μειονεκτούν στο κόστος και στη μηχανική αντοχή.

Οι πολυμερικές μεμβράνες πλεονεκτούν εκεί όπου μειονεκτούν οι ανόργανες - και το αντίστροφο. Είναι κατάλληλες για διεργασίες που λαμβάνουν χώρα σε πιο ήπιες συνθήκες, ιδίως όσον αφορά τη θερμοκρασία που δε μπορεί να ανεβεί σε πολύ υψηλά επίπεδα χωρίς να αποσυντεθεί το πολυμερικό υλικό. Μολονότι είναι δυνατό να σχηματιστούν μεμβράνες με πόρους διαφόρων διαστάσεων, ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζουν οι λεγόμενες ασύμμετρες μη πορώδεις, πυκνές (dense) μεμβράνες. Ο χαρακτηρισμός τους ως ασύμμετρες οφείλεται στην ιδιόμορφη δομή τους από δύο στρώματα με διαφορετικά χαρακτηριστικά. Γενικότερα, οι πυκνές μη πορώδεις μεμβράνες, έχουν πολύ μικρότερο συντελεστή διαπερατότητας από τις μικροπορώδεις αλλά, λόγω του πολύ μικρού πάχους τους, ο ρυθμός διερχόμενης ποσότητας ανά μονάδα εγκάρσιας επιφάνειας μπορεί να είναι πολύ μεγάλος.

Εκτός από τις ασύμμετρες και τις ελαστομερείς μεμβράνες, υπάρχουν επίσης και μεμβράνες αποτελούμενες από άμορφα πολυμερή των οποίων η θερμοκρασία υαλώδους μετάπτωσης ( $T_g$ ) είναι πάνω από τη θερμοκρασία περιβάλλοντος. Σε αυτά, η διαχυτότητα παίζει πρωτεύοντα ρόλο, ενώ στα ελαστομερή υλικά, η διαλυτότητα είναι εξ ίσου, αν όχι περισσότερο σημαντική. Η σχετική ακαμψία που χαρακτηρίζει τη δομή αυτών των άμορφων πολυμερών τα καθιστά παρόμοια από αυτή την άποψη με τις ανόργανες μεμβράνες, αν και από την άποψη των στατικών χαρακτηριστικών μοιάζουν με τις ελαστομερείς μεμβράνες, γιατί πρόκειται για άμορφα υλικά. Έτσι οι άμορφες πολυμερικές μεμβράνες βρίσκουν εφαρμογή περισσότερο σε διαχωρισμούς αερίων μιγμάτων, κυρίως χαμηλού μοριακού βάρους όπως π.χ. για το διαχωρισμό του ατμοσφαιρικού αέρα σε οξυγόνο και άζωτο. Τα ελαστομερή υλικά θα χρησιμεύσουν σε περυστώσεις βαρύτερων συστατικών ή υγρών. Ωστόσο, η διάκριση δεν είναι απόλυτη και σημαντικό ρόλο παίζει η χημική ομοιότητα μεταξύ πολυμερών και διερχόμενων συστατικών [24].

#### 4. ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΜΕΣΩ ΜΕΜΒΡΑΝΩΝ

Υπάρχουν πολλές ιστορικές αναφορές σχετικά με την γέννηση της επιστήμης των μεμβρανών, αλλά όλες αναγνωρίζουν ότι ο Thomas Graham το 1829 ήταν ο πρώτος άνθρωπος που παρατήρησε φαινόμενα μεταφοράς αερίων. Ο Thomas Graham παρατήρησε ότι μια ξεφούσκωτη ουροδόχος κύστη γουρουνιού μπορούσε να διογκωθεί σε σημείο μέχρι να σκάσει εάν εκτίθονταν σε ατμόσφαιρα CO<sub>2</sub>. Πρότεινε τότε ότι το CO<sub>2</sub> διαλύονταν στην υγρή επιφάνεια της κύστης και εν συνεχεία εισέρχονταν στο εσωτερικό της μέσω τριχοειδών φαινομένων. Μετά από 37 χρόνια, το 1866 και μετά από πειράματα που αφορούσαν τον εμπλουτισμό του οξυγόνου με χρήση φυσικού ελαστικού, ο Thomas Graham πρότεινε ένα μηχανισμό διάχυσης τριών σταδίων που τον ονόμασε 'Κολλοειδής διάχυση'. Σήμερα το μοντέλο αυτό είναι γνωστότερο ως «Μοντέλο διάλυσης-διάχυσης» (solution-diffusion model). Πολύ γενικά ο μηχανισμός αυτός περιλαμβάνει την ρόφηση του διαχεόμενου μορίου στην μεμβράνη ακολουθούμενη από την διάχυση του μέσα στην μεμβράνη και εκρόφηση του από την άλλη πλευρά. Κατά την διάρκεια του σταδίου της διάχυσης ο Thomas Graham πρότεινε ότι το διαχεόμενο συστατικό συμπεριφέρεται σαν να ήταν υγρό. Όλα αυτά οδήγησαν στην ανάπτυξη του solution-diffusion model, το οποίο αποτελεί την βάση για την μοντελοποίηση των φαινομένων μεταφοράς μορίων μέσω πολλών υλικών [25,26].

Η μεταφορά αερίων μέσω υλικών με την επίδραση μιας βαθμίδας πίεσεως στα δύο άκρα του υλικού, μπορεί να λάβει χώρα με δύο βασικούς μηχανισμούς:

- 1) διάχυση και ροή του αερίου στο bulk υλικό μέσω του μοντέλου διάλυσης-διάχυσης (solution-diffusion model) και
- 2) ροή μέσω των ατελειών του υλικού (ανομοιογένειες, pinholes, πορώδη, μικροκανάλια, μικροραγίσματα και όρια κόκκων).

Συμπερασματικά, οι μηχανισμοί μεταφοράς αερίων μέσω πολυμερικών μεμβρανών απαιτούν για τον πλήρη καθορισμό τους, ολοκληρωμένο χαρακτηρισμό της μικροδομής και γνώση των ιδιοτήτων διαπερατότητας της ενιαίας δομής.

Πριν αναφερθούν με περισσότερες λεπτομέρειες στους μηχανισμούς, αναφέρονται παρακάτω κάποιες βασικές έννοιες. Οι ιδιότητες μιας μεμβράνης όσον αφορά την διαπερατότητα της από τα αέρια, χαρακτηρίζονται συνήθως: α) από τον ρυθμό διαπερατότητας του αερίου σε σταθερή κατάσταση (transmission rate) που ορίζεται ως ο όγκος του αερίου σε πρότυπες συνθήκες πίεσης και θερμοκρασίας που περνά από μια περιοχή της μεμβράνης σε ένα δευτερόλεπτο από την διαφορά πίεσης στις δύο πλευρές της μεμβράνης και β) από την διαπερατότητα του αερίου στην σταθερή κατάσταση.

Η μέση διαπερατότητα επομένως μέσω ενός υλικού είναι η ροή σταθερής κατάστασης J προς την διαφορά πίεσης στα δύο άκρα. Σε περιπτώσεις ομογενών πολυμερικών μεμβρανών, όπως πολυμερικά φιλμ, και για αέρια που δεν αλληλεπιδρούν έντονα με το πολυμερές, όπως είναι το οξυγόνο, η διαπερατότητα είναι μια βασική ιδιότητα της μεμβράνης ανεξάρτητη του πάχους του πολυμερούς και ονομάζεται εσωτερική διαπερατότητα (intrinsic permeability) [25].

Γενικότερα η διαδικασία μεταφοράς αερίων και ατμών μέσω μεμβρανών ή υμενίων καλείται διαπερατότητα. Η κινούσα δύναμη είναι μια διαφοροποίηση στο χημικό δυναμικό. Σε πολλές περιπτώσεις είναι απλούστερο και εξίσου σωστό να χρησιμοποιήσουμε μια διαφοροποίηση στην συγκέντρωση ή στην πίεση. Αυτό είναι πολύ χρήσιμο στις μετρήσεις διαπερατότητας, οι οποίες



αναπαριστούν την πραγματικότητα, εφαρμόζοντας μια διαφορά στις μερικές πιέσεις στις δύο πλευρές της μεμβράνης.

Σε διάφορες τεχνολογικές εφαρμογές υπάρχει πολύ συχνά ενδιαφέρον στο να υπολογιστεί ο συντελεστής διάχυσης ενός στοιχείου (π.χ ενός αερίου) μέσω πολυμερικής μεμβράνης υπό συνθήκες ισορροπίας. Το μέγεθος που χρησιμοποιείται πρακτικά για να χαρακτηρίσει ποσοτικά τα φαινόμενα μεταφοράς μάζας μίας πολυμερικής μεμβράνης είναι η διαπερατότητα  $P$  που ορίζεται ως:

$$P = \frac{\text{ποσότητα αερίου} * \text{παχος μεμβράνης}}{\text{επιφάνεια} * \text{χρόνος} * \text{πτώση πίεσης}}$$

όπου η παραπάνω σχέση ισχύει για την περίπτωση αερίου διεισδυτή που βρίσκεται υπό διαφορετικές μερικές πιέσεις στις δύο πλευρές της μεμβράνης. Η μεταφορά του αερίου αποτελείται από τα εξής στάδια:

- Ρόφηση του αερίου στην επιφάνεια της μεμβράνης
- Διάχυση του αερίου εντός της πολυμερικής μεμβράνης
- Εκρόφηση από την επιφάνεια της αντίθετης πλευράς της μεμβράνης

Το να προσομοιωθεί, ατομιστικά, το συνολικό φαινόμενο της ροής αερίου σε πολυμερική μεμβράνη είναι αδύνατο καθώς εμφανίζει πολύ αργή χρονική εξέλιξη σε σχέση με τους επιτεύξιμους χρόνους προσομοίωσης. Επίσης, η διαδικασία ρόφησης/ εκρόφησης απαιτεί πληροφορίες για την επιφάνεια του πολυμερούς που δεν είναι διαθέσιμες. Η διαλυτότητα (solubility) ενός αερίου -διεισδυτή σε ένα πολυμερές εξαρτάται από την φύση και την ένταση των αλληλεπιδράσεων πολυμερούς-διεισδυτή σε σχέση με τις αντίστοιχες πολυμερούς-πολυμερούς και διεισδυτή-διεισδυτή καθώς επίσης και από το πλήθος, το μέγεθος και την κατανομή των προσβάσιμων κοιλοτήτων που σχηματίζονται κατά μήκος των αλυσίδων και στις οποίες μπορεί να παραμείνει το αέριο μόριο.

Το μοντέλο διπλού μηχανισμού ρόφησης (dual-mode sorption model) είναι αυτό που δίνει μια ικανοποιητική περιγραφή για την εξάρτηση της διαλυτότητας από τη συγκέντρωση ή την πίεση σε ένα υαλώδες πολυμερές. Σύμφωνα με αυτό το μοντέλο, υπάρχουν δύο διακριτοί μοριακοί πληθυσμοί που αποτελούν το αέριο εντός του πολυμερούς: α) μόρια που είναι διαλελυμένα στο πολυμερές με την συνήθη διαδικασία κατά Henry και η συγκέντρωσή τους  $C_D$  είναι γραμμικά ανάλογη της πίεσης και β) μόρια αερίου συγκέντρωσης  $C_H$  που είναι διαλελυμένα σε ένα περιορισμένο αριθμό από δεδομένες, προϋπάρχουσες κοιλότητες εντός της πολυμερικής μήτρας. Η συγκέντρωση  $C_D$  εξαρτάται από την πίεση  $p$  μέσω της σχέσης:

$$C_D = H_p \quad E.1$$

όπου  $H_p$  είναι η σταθερά Henry. Η συγκέντρωση  $C_H$  δίνεται από την σχέση:

$$C_H = C_\infty \frac{bp}{1 + bp} \quad E.2$$

δηλαδή σχέση τύπου Langmuir όπου  $C_\infty$  η σταθερά κορεσμού και  $b$  η σταθερά συνάφειας.

Η ολική συγκέντρωση  $C$  του διαλελυμένου αερίου σε δεδομένη πίεση  $p$  δίνεται από το άθροισμα των ανωτέρω εξισώσεων:

$$C = C_D + C_H = H_p + C_\infty \frac{bp}{1 + bp} \quad E.3$$

Το μοντέλο διπλού μηχανισμού ρόφησης ισχύει για ένα μεγάλο πλήθος αερίων και πολυμερών, στην περίπτωση όμως μεγάλων μορίων σε υψηλές συγκεντρώσεις εισάγονται δομικές και δυναμικές αλλαγές στην πολυμερική μήτρα εξαιτίας της ύπαρξης του αερίου και θα πρέπει να χρησιμοποιηθούν διαφορετικά μοντέλα. Για τη ρόφηση αερίων σε ελαστικά πολυμερή έχει αποδειχτεί πειραματικά ότι μπορεί να αφαιρεθεί το κομμάτι κατά Langmuir και ο νόμος του Henry ισχύει ακόμα και για πιέσεις εκατοντάδων ατμοσφαιρών [27]. Η διαλυτότητα  $S$  σχετίζεται με την περίσσεια ελεύθερης ενέργειας ενός αερίου διαλυμένου στο πολυμερές μέσω της ακόλουθης σχέσης:

$$S = \exp\left(\frac{-\Delta G}{k_g T}\right) \quad E.4$$

Η διάχυση ενός αερίου διεισδυτή στην άμορφη πολυμερική μήτρα διέπεται από το μοριακό μέγεθος του διεισδυτή και τις αλληλεπιδράσεις του με το πολυμερές καθώς επίσης και από το σχήμα, μέγεθος, κατανομή και συνδετικότητα των διάσπαρτων τμημάτων του προσβάσιμου όγκου του συστήματος. Σε υψηλές θερμοκρασίες (αρκετά πάνω από την θερμοκρασία υαλώδους μετάπτωσης  $T_g$  (κάτω από την  $T_g$  το πολυμερές συμπεριφέρεται σαν γυαλί π.χ. είναι σκληρό και δύσκαμπτο)) η πολυμερική μήτρα εκτελεί τοπικές θερμικές κινήσεις που ανακατανέμουν τον προσβάσιμο όγκο και τη συνδετικότητα του δημιουργώντας ή/και καταργώντας ελεύθερες κοιλότητες. Σε αυτές τις θερμικές κινήσεις των πολυμερικών αλυσίδων συμπαρασύρεται το μόριο-δυσεισδύτης και μεταβαίνει συχνά (σχετικά) σε νέες θέσεις. Συνεπώς, η διάχυση αποτελείται από ένα μεγάλο σύνολο μικρών, τοπικών και τυχαίων κινήσεων του μορίου. Στην περίπτωση χαμηλών θερμοκρασιών ο μηχανισμός διάχυσης σε υαλώδη πολυμερή είναι αρκετά πιο σύνθετος [28,29].

Σε αυτή την περίπτωση η πολυμερική μήτρα είναι λίγο έως πολύ καθηλωμένη και η κατανομή των ελεύθερων κοιλοτήτων της είναι μόνιμη. Το κύριο χαρακτηριστικό της διάχυσης στα υαλώδη πολυμερή είναι ότι το αέριο μόριο περνά τον περισσότερο χρόνο του εγκλωβισμένο σε μία συστάδα ελεύθερου όγκου και σπάνια μεταβαίνει σε μία γειτονική συστάδα μέσω ενός καναλιού που ανοίγει στιγμιαία λόγω θερμικών διαταραχών σε περιοχές χαμηλής πυκνότητας ή ενισχυμένης μοριακής κινητικότητας. Η διαχυτότητα στα υαλώδη πολυμερή είναι τάξεις μεγέθους μικρότερη από την αντίστοιχη τηγμάτων και εξαρτάται από το πλήθος, τη συνδετικότητα των κοιλοτήτων ελεύθερου όγκου καθώς επίσης και από την κατανομή σταθερών ρυθμών που καθορίζουν τις μεταβάσεις μεταξύ αυτών [25,27].

#### 4.1 Διάχυση κατά FICK

Το φαινόμενο αυτού του είδους διάχυσης περιγράφεται μαθηματικά από τους νόμους του Fick και συμβαίνει όταν η συγκέντρωση του διαχεόμενου στοιχείου εμφανίζει βαθμίδα (gradient). Τότε έχουμε μεταφορά μάζας κατά τη διεύθυνση της βαθμίδας και συγκεκριμένα από την υψηλότερη συγκέντρωση κατά τη χαμηλότερη.

Ένας γενικός ορισμός για τους νόμους του Fick θα μπορούσε να είναι ότι ο 1ος νόμος αναφέρεται σε διάχυση υπό συνθήκες συγκέντρωσης χρονικά σταθερές, ενώ ο 2ος νόμος περιγράφει τη διάχυση υπό συνθήκες συγκέντρωσης χρονικά μεταβαλλόμενες.



Ο πρώτος νόμος του Fick μας λέει ότι η ταχύτητα διάχυσης μιας ουσίας (ή η ροή μάζας της ουσίας) μέσα από μια επιφάνεια είναι ανάλογη του εμβαδού της επιφάνειας, και της αρνητικής βαθμίδας της συγκέντρωσης σύμφωνα με την παρακάτω μαθηματική σχέση:

$$J = -D \frac{\partial \phi}{\partial n} \quad E.5$$

J: ροή μάζας ανά μονάδα επιφάνειας (σε  $[\frac{mol}{m^2s}]$ )

D: συντελεστής διάχυσης (σε  $[\frac{m^2}{s}]$ )

$\phi$ : συγκέντρωση του υλικού (σε  $[\frac{mol}{m^3}]$ )

n: μοναδιαίο διάνυσμα (σε [m])

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

Ο δεύτερος νόμος περιγράφεται από την εξής σχέση:

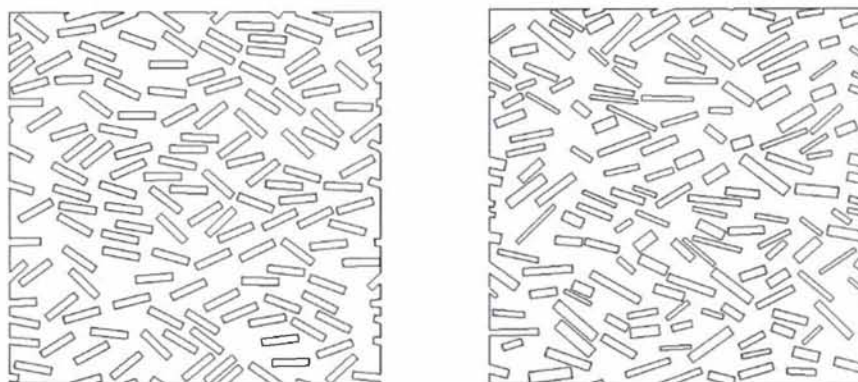
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad E.6$$

Και μας δίνει την μεταβολή της συγκέντρωσης σε σχέση με το χρόνο.

Μια βασική κατανόηση του φαινομένου της διάχυσης μπορεί να βοηθήσει στη διάκριση των χαρακτηριστικών μόνωσης των πολυμερών. Ένα διαχεόμενο μόριο κινείται προς μια επιφάνεια φραγμού με μια διαδικασία όπου αρχικά έρχεται σε επαφή με την επιφάνεια. Στο πολυμερές το μόριο που διεισδύει διαχέεται τυχαία καθώς η δική του θερμική κινητική ενέργεια το διατηρεί σε κίνηση από κενό σε κενό, μεταξύ των μακρομοριακών αλυσίδων του πολυμερούς. Αυτή η τυχαία διάχυση έχει ως τελικό αποτέλεσμα την (μακροσκοπική) κίνηση της διαχεόμενης ουσίας προς την πλευρά που βρίσκεται σε επαφή με μια χαμηλή συγκέντρωση της διαχεόμενης ουσίας.

### 5.1 Επίδραση του μήκους των φυλλιδίων

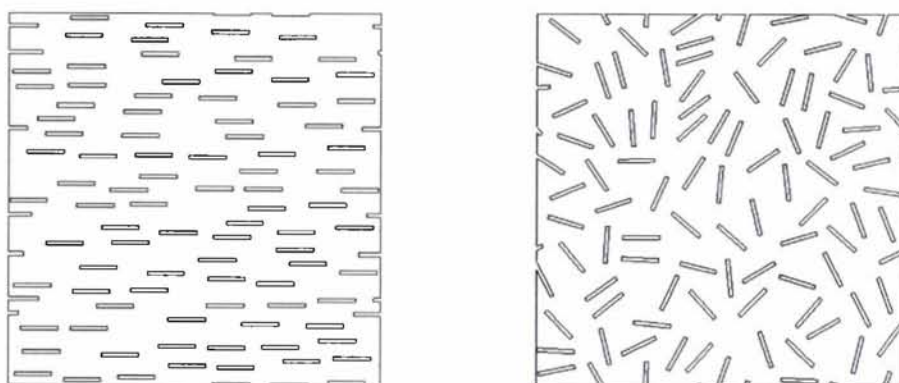
Ο βαθμός δυσκολίας της διευθέτησης των φυλλιδίων στο εσωτερικό του πολυμερούς, αυξάνεται με την αύξηση του μήκους αυτών, καθώς όπως θα δούμε στο κεφάλαιο παρουσίασης των αποτελεσμάτων, ο διαθέσιμος χώρος είναι περιορισμένος και περιορίζεται ακόμη περισσότερο όταν μεγάλο μήκος φυλλιδίων συνδυαστεί με τον τυχαίο προσανατολισμό τους. Οι σύνθετες μεμβράνες διακρίνονται σε εκείνες που το μέγεθος (μήκος) των φυλλιδίων δεν διαφέρει, και σε εκείνες στις οποίες το μέγεθός τους ποικίλει. Στο παρακάτω σχήμα παρατηρούμε εικόνες που περιγράφουν τις δύο προαναφερθείσες κατηγορίες σύνθετων μεμβρανών.



Σχ. 9 - Κατηγορίες μεμβρανών σε σχέση με το μέγεθος των φυλλιδίων (α) σταθερού μήκους, (β) μεταβλητού μήκους και πάχους

### 5.2 Επίδραση του προσανατολισμού των φυλλιδίων

Ο προσανατολισμός των φυλλιδίων σε μια πολυμερική μήτρα, η συγκέντρωσή τους, και η κατανομή τους παίζουν βασικό ρόλο στις ιδιότητες του σύνθετου υλικού. Σχετικά με τον προσανατολισμό υπάρχουν δύο ακραίες διατάξεις: (1) παράλληλη ευθυγράμμιση των φυλλιδίων με τον άξονα τους σε μία κατεύθυνση, και (2) τελείως τυχαία διευθέτηση.



Σχ. 10 - Κατανομή των φυλλιδίων σε σύνθετο υλικό με πολυμερική μήτρα: (α) συνεχή και ευθυγραμμισμένα φυλλίδια, (β) ασυνεχή και τυχαία προσανατολισμένα φυλλίδια

Για υψηλά ποσοστά φόρτισης ( $\phi > 20\%$ ) τίθενται ορισμένα προβλήματα στην κατασκευή του σύνθετου, αφού τα φυλλίδια δεν μπορούν για γεωμετρικούς λόγους να καλυφθούν πλήρως από το υλικό της μήτρας. Πολλές φορές, για την καλύτερη ενίσχυση της μήτρας δεν χρησιμοποιείται ένας, μόνον, τύπος φυλλιδίων αλλά μίγμα δύο ή περισσότερων τύπων. Τα παραγόμενα ονομάζονται υβριδικά σύνθετα (hybrid composites).



### 5.3 Ορισμός παραμέτρου (X)

Στην παρούσα εργασία μελετάμε πως επηρεάζεται ο ρυθμός διάχυσης σε σχέση α) με το εύρος της απόκλισης του προσανατολισμού των φυλλιδίων από έναν μέσο προσανατολισμό που λαμβάνεται να είναι 0 (ε), β) του ποσοστού φόρτισης (φ) και γ) του λόγου μήκους προς πλάτους (α) των φυλλιδίων. Αυτές οι παράμετροι συγκρίνονται με μία κατάσταση αναφοράς η οποία είναι η κατάσταση όπου τα φυλλίδια είναι πλήρως προσανατολισμένα, στην οποία κατάσταση το σχετικό σύνθετο υλικό χαρακτηρίζεται από έναν συντελεστή διάχυσης  $D_{11}$ . Η σχετική απόκλιση εκφράζεται από τον λόγο X σε κάθε συνδυασμό α,φ. Ο λόγος X ορίζεται ως :

$$X = \frac{\frac{D_0}{D_{11}} - 1}{\frac{D_0}{D_{YY}} - 1} \quad E.7$$

Όπου  $D_{11}$  ο συντελεστής διάχυσης όταν η απόκλιση προσανατολισμού των φυλλιδίων (ε) είναι ίση με μηδέν και  $D_{YY}$  ο συντελεστής διάχυσης όταν το εύρος του προσανατολισμού (θ) των φυλλιδίων είναι  $-\varepsilon < \theta < +\varepsilon$  με  $0 < \varepsilon < \pi/2$ .

Οι μονωτικές ιδιότητες της μεμβράνης είθισται να ποσοτικοποιούνται με χρήση του συντελεστή BIF ως ο λόγος  $BIF = D_0/D_{YY}$  όπου  $D_0$  ο συντελεστής διάχυσης της πολυμερικής μήτρας χωρίς φυλλίδια και  $D_{YY}$  ο συντελεστής διάχυσης με φυλλίδια προσανατολισμένα με μέση γωνία μηδέν (δηλαδή κάθετα προς την κατεύθυνση της διάχυσης) και εύρος γωνιών ε.

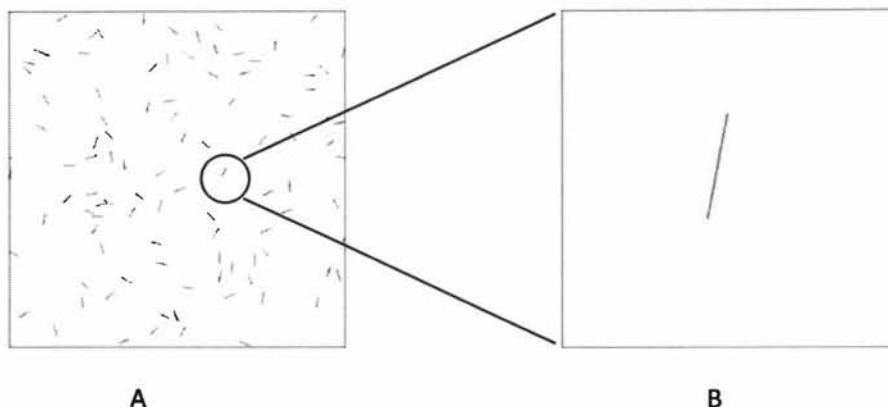
Η παράμετρος (X), όπως φαίνεται και από την μαθηματική διατύπωσή της, σχετίζεται άμεσα με τον συντελεστή βελτίωσης των ιδιοτήτων μόνωσης, (BIF Barrier Improvement Factor) που προκαλείται από την ύπαρξη (φ), μέγεθος (α) και προσανατολισμό των φυλλιδίων. Η φυσική σημασία της παραμέτρου (X) και ο λόγος για τον οποίο χρησιμοποιείται στην παρούσα εργασία είναι το ότι μας παρέχει την δυνατότητα ελέγχου του κατά πόσο η διαπερατότητα ενός συστήματος ατελώς προσανατολισμένων φυλλιδίων απέχει από το ιδανικό, δηλαδή το τελείως προσανατολισμένο σύστημα.

Έτσι βάσει αυτής της παραμέτρου (όπως θα δούμε στη συνέχεια της παρούσας εργασίας, στο κεφάλαιο παρουσίασης των αποτελεσμάτων και στα σχετικά διαγράμματα) γίνεται φανερό ότι καθώς αυξάνεται η συγκέντρωση των διαλυμάτων τα αποτελέσματά μας μεταβάλλονται δραστικά βάσει του μέσου όρου της παραμέτρου (X).

Οι τιμές οι οποίες προέκυψαν από τους υπολογισμούς της παραμέτρου (X) χρησιμοποιούνται στο κεφάλαιο παρουσίασης των αποτελεσμάτων, όπου με αυτές τις τιμές της (X) και ορισμένες παραμέτρους που χρησιμοποιήσαμε ως δεδομένα κατά την εκτέλεση των υπολογιστικών μας πειραμάτων κατασκευάζονται διαγράμματα τα οποία μας βοηθούν στην καλύτερη κατανόηση των υπό μελέτη φαινομένων. Τέλος αυτή η παράμετρος έχει αντίστοιχα χρησιμοποιηθεί και από άλλες μελέτες της βιβλιογραφίας [55] με παρόμοια μορφή μαθηματικής διατύπωσης.

## 6. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΑΝΑΛΥΤΙΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΔΙΑΧΥΣΗΣ

Εξ ορισμού, σε ένα αραιό διάλυμα τα φυλλίδια είναι απομονωμένα και δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Για παράδειγμα όπως φαίνεται παρακάτω, το αριστερό σχήμα μας δείχνει ένα αραιό διάλυμα τυχαία προσανατολισμένων φυλλιδίων με  $\alpha\phi=0.01$  και  $\alpha=100$ , ενώ το δεξιό σχήμα μας δείχνει ένα φυλλίδιο που λόγω της αραιότητας του διαλύματος φαίνεται απομονωμένο από τα υπόλοιπα. Στη συνέχεια θα περιγράψουμε αναλυτικά την ανάπτυξη ενός μαθηματικού μοντέλου για τον συντελεστή διάχυσης ενός τέτοιου αραιού συστήματος.



Σχ.11 Α) Γεωμετρία που περιλαμβάνει φυλλίδια τυχαίας κατανομής και τυχαίου προσανατολισμού και Β) Φυλλίδιο απομονωμένο από τα υπόλοιπα γειτονικά φυλλίδια της γεωμετρίας

Έστω ότι κάθε ιδιότητα που σχετίζεται με φυλλίδια ορισμένων ιδιοτήτων περιγράφεται  $p_i$ . Ο μέσος όρος της ιδιότητας  $p$  συμβολίζεται με  $\langle p \rangle$  και ορίζεται από την σχέση:

$$\langle p \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N p_i \quad E.8$$

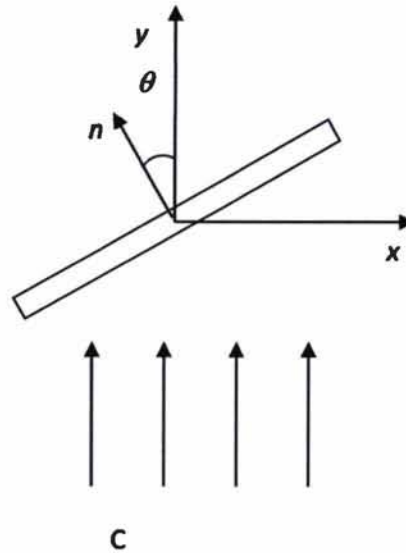
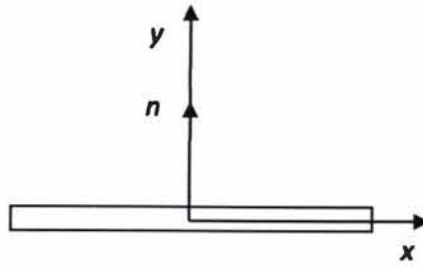
όπου το άθροισμα νοείται σε όλο το εύρος της ιδιότητας που μας ενδιαφέρει.

Παρατηρούμε ότι χρησιμοποιείται η ίδια αρχή με εκείνη ενός αριθμητικού μέσου όρου για τυχαίες περιπτώσεις. Το  $p$  μπορεί να είναι οποιαδήποτε φυσική ποσότητα. Αν έχουμε ένα σύστημα όπου η ιδιότητα ( $p$ ) είναι η γωνία προσανατολισμού των φυλλιδίων και αυτή βρίσκεται κατανεμημένη γύρω από το μηδέν σε ένα εύρος  $\varepsilon$  ( $-\varepsilon < 0 < \varepsilon$ ) με τυχαία ομοιόμορφη σύνθετο στο οποίο κάθε ίνα έχει κατανομή τότε ισχύει:

$$\langle p_i \rangle = 0 \quad E.9$$

Αν τώρα ανάγουμε τον συντελεστή διάχυσης  $D$  στο  $p$ , ομοίως έχουμε:

$$\langle D \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N D_i \quad E.10$$



Σχ.12 – Ανάλυση του προσανατολισμού των φυλλιδίων

Όπου  $D_i$  υποδηλώνει τον συντελεστή διάχυσης ενός συστήματος στο οποίο τα φυλλίδια παρουσιάζουν κλίση ( $\theta$ ), όπως φαίνεται στο Σχ. 12.

Έστω ένα σύστημα στο οποίο ο προσανατολισμός των φυλλιδίων είναι γωνίας  $\theta$  όπως ορίζεται στο Σχ. 12 και έστω  $D_{\perp}$  η διαχυτότητα όταν  $\theta = 0^\circ$  και  $D_{\parallel}$  η διαχυτότητα όταν  $\theta = 90^\circ$ . Προφανώς  $D_{\perp}$  and  $D_{\parallel}$  είναι οι τιμές του τανυστή διάχυσης στις αρχικές διευθύνσεις (principal directions), ο οποίος είναι :

$$D = \begin{bmatrix} D_{\perp} & 0 \\ 0 & D_{\parallel} \end{bmatrix} \quad E.11$$

Σύμφωνα με το μοντέλο του Nielsen [37] ο δισδιάστατος τανυστής της διάχυσης μπορεί να πάρει την μορφή:

$$\begin{bmatrix} D_{\parallel} & 0 \\ 0 & D_{\perp} \end{bmatrix} = D_0 \begin{bmatrix} \frac{1-\varphi}{1+\frac{\varphi}{2\alpha}} & 0 \\ 0 & \frac{1-\varphi}{1+\frac{\alpha}{2}\varphi} \end{bmatrix} \quad E.12$$

Όπου  $D_0$  είναι ο συντελεστής διάχυσης του αρχικού πολυμερούς (χωρίς φυλλίδια).



Η επίδραση του προσανατολισμού των φυλλιδίων εκφράζεται από τον τανυστή περιστροφής ( $Q$ ). Όταν το φυλλίδιο βρίσκεται προσανατολισμένο υπό γωνία  $\theta$  (Σχ. 12), τότε ο τανυστής διαχυτότητας  $D'$  είναι  $D' = QDQ^T$ , όπου  $Q$  είναι ο τανυστής περιστροφής που δίνεται από την σχέση:

$$Q = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \quad E.13$$

Επομένως ο τανυστής διαχυτότητας ενός συστήματος στο οποίο τα φυλλίδια παρουσιάζουν απόκλιση ( $\theta$ ) (Σχ. 12) είναι:

$$\begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{bmatrix}(\theta) = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_{\parallel} & 0 \\ 0 & D_{\perp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{bmatrix}(\theta) = \begin{bmatrix} D_{\parallel}\cos^2\theta + D_{\perp}\sin^2\theta & D_{\perp}\sin\theta\cos\theta - D_{\parallel}\sin\theta\cos\theta \\ D_{\perp}\sin\theta\cos\theta - D_{\parallel}\sin\theta\cos\theta & D_{\perp}\cos^2\theta + D_{\parallel}\sin^2\theta \end{bmatrix} \quad E.14$$

Αυτό που θέλουμε είναι να υπολογίσουμε τον μέσο όρο  $D_{yy}$  για ένα σύνθετο υλικό στο οποίο κάθε ίνα έχει τυχαίο προσανατολισμό, όπου όλοι οι προσανατολισμοί είναι εξίσου πιθανοί.

Ο μέσος όρος  $D_{yy}$  υπολογίζεται από:

$$\begin{aligned} \langle D_{yy} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N D_{yy}(\theta) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=1}^N D_{yy}(\theta) \frac{2\pi}{N} = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=1}^N D_{yy}(\theta) d\theta \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (D_{\perp}\cos^2\theta + D_{\parallel}\sin^2\theta) d\theta \\ &= \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_0^{2\pi} \frac{D_{\perp}}{2} (\cos 2\theta + 1) d\theta + \int_0^{2\pi} \frac{D_{\parallel}}{2} (1 - \cos 2\theta) d\theta \right\} \\ &= \frac{1}{2} (D_{\perp} + D_{\parallel}) \\ &= \frac{1}{2} \left( \frac{1 - \varphi}{1 + \frac{\alpha}{2}\varphi} + \frac{1 - \varphi}{1 + \frac{\varphi}{2\alpha}} \right) D_0 \\ &= - \frac{D_0(\varphi - 1)(\varphi\alpha^2 + 4\alpha + \varphi)}{2\alpha^2\varphi + \alpha\varphi^2 + 4\alpha + 2\varphi} \quad E.15 \end{aligned}$$

Γενικότερα για ένα σύστημα με τυχαία κατανομή προσανατολισμών των φυλλιδίων μεταξύ  $-\varepsilon$  και  $+\varepsilon$  ισχύει:

$$\begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_{11} & 0 \\ 0 & D_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} D_{11}\cos^2\theta + D_{22}\sin^2\theta & D_{11}\cos\theta\sin\theta - D_{22}\cos\theta\sin\theta \\ D_{11}\cos\theta\sin\theta - D_{22}\cos\theta\sin\theta & D_{22}\cos^2\theta + D_{11}\sin^2\theta \end{bmatrix} \quad E.16$$

$$D_{yy} = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{1}{2\varepsilon} (\sin^2\theta D_{11} + \cos^2\theta D_{22}) d\theta = \frac{D_{11} \left( \frac{\varepsilon}{2} - \frac{\sin 2\varepsilon}{4} \right)}{\varepsilon} + \frac{D_{22} \left( \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\sin 2\varepsilon}{4} \right)}{\varepsilon} \quad E.17$$

$$D_{yy} = \frac{1}{2\varepsilon} \left( -\lambda \frac{1-\varphi}{1+\frac{\varphi}{2\alpha}} + \frac{1-\varphi}{1+\frac{\varphi}{2\alpha}} \varepsilon + \lambda \frac{1-\varphi}{1+\frac{\alpha\varphi}{2}} + \frac{1-\varphi}{1+\frac{\alpha\varphi}{2}} \varepsilon \right) \quad E.18$$

$$D_{yy} = \frac{(\varphi-1)(\varphi \sin 2\varepsilon + 8\alpha\varepsilon + 2\varepsilon\varphi + 2\alpha^2\varepsilon\varphi - \alpha^2\varphi \sin 2\varepsilon)}{2\varepsilon(2\alpha^2\varphi + \alpha\varphi^2 + 4\alpha + 2\varphi)} \quad E.19$$

όπου η κατεύθυνση (11) αντιστοιχεί στην κατεύθυνση (x) (||) και η κατεύθυνση (22) στην κατεύθυνση (y) (⊥) όπως φαίνεται στο Σχ. 12. Επομένως όπου  $D_{11}=D_{||}$  και  $D_{22}=D_{\perp}$ .

Βάσει των εξισώσεων:

$$D_{11} = \frac{1-\varphi}{1+\frac{\varphi}{2\alpha}} \quad E.20$$

$$D_{22} = \frac{1-\varphi}{1+\frac{\alpha}{2}\varphi} \quad E.21$$

$$X = \frac{\frac{1}{D_{yy}} - 1}{\frac{1}{D_{22}} - 1} \quad E.22$$

προκύπτει επίσης μια αναλυτική έκφραση για την παράμετρο (X):

$$X = \frac{2F_1}{(\alpha+2)F_2} \quad E.23$$

Όπου:

$$F_1 = 2\varepsilon - \sin 2\varepsilon + \varphi \sin 2\varepsilon + 2\alpha^2\varepsilon + \alpha^2 \sin 2\varepsilon + 8\alpha\varepsilon + 2\varepsilon\varphi + 2\alpha\varepsilon\varphi + 2\alpha^2\varepsilon\varphi - \alpha^2\varphi \sin 2\varepsilon \quad E.24$$

$$F_2 = \varphi \sin 2\varepsilon + 8\alpha\varepsilon + 2\varepsilon\varphi + 2\alpha^2\varepsilon\varphi - \alpha^2\varphi \sin 2\varepsilon \quad E.25$$

Σε περίπτωση που ισχύει  $\varepsilon=\pi/2$  τότε οι εξισώσεις (E.24) και (E.25) διαμορφώνονται ως εξής:

$$F_1 = \pi + 4\pi\alpha + \pi\varphi + \pi\alpha^2 + \pi\alpha^2\varphi + \pi\alpha\varphi \quad E.26$$

$$F_2 = \pi\varphi\alpha^2 + 4\pi\alpha + \pi\varphi \quad E.27$$

Προκύπτει έτσι η τελική αναλυτική λύση της παραμέτρου (X) με μορφή της παρακάτω εξίσωσης:

$$X = \frac{2(1+4\alpha+\varphi+\alpha^2+\alpha^2\varphi+\alpha\varphi)}{(\alpha+2)(\varphi\alpha^2+4\alpha+\varphi)} \quad E.28$$

Μια σημαντική κατηγορία επιστημονικών εργαλείων για την ανάπτυξη της Τεχνολογίας είναι οι Ηλεκτρονικοί Υπολογιστές. Η ραγδαία ανάπτυξη των Ηλεκτρονικών Υπολογιστών και των υπολογιστικών δικτύων έχει καθοριστική επίπτωση στις επιστημονικές εξελίξεις στον τομέα των υλικών. Οι επιστήμονες των κλάδων αυτών αναδεικνύονται μεταξύ των πρωταγωνιστών σε διεθνές επίπεδο στην ανάπτυξη εργαλείων για νέες αρχιτεκτονικές συμπεριλαμβανομένων των δημοφιλών συσσωματωμάτων υπολογιστών (computer clusters) και των κατανεμημένων υπολογισμών.

Η υπολογιστική επιστήμη των υλικών (computational materials science) είναι ένας σχετικά πρόσφατος κλάδος ο οποίος γίνεται όλο και πιο αποδεκτός σαν τρίτη μεθοδολογία έρευνας στην επιστήμη των υλικών, στο ρόλο ενός συνδυαστικού κρίκου μεταξύ θεωρητικής και πειραματικής προσέγγισης. Έχει σαν αντικείμενο τη μελέτη της δομής και των ιδιοτήτων των υλικών μέσω προσομοιώσεων με χρήση ηλεκτρονικών υπολογιστών με σκοπό την καλύτερη κατανόησή τους αλλά και το σχεδιασμό και πρόβλεψη των ιδιοτήτων και της συμπεριφοράς νέων υλικών που δεν υπάρχουν στη φύση. Η πολυπλοκότητα της μελέτης πολλών φαινομένων με αναλυτικό τρόπο καθιστά εξάλλου τη χρήση υπολογιστικών μεθόδων πολλές φορές ως τη μόνη οδό για την ανάδειξη των ποιοτικών και ποσοτικών χαρακτηριστικών τους.

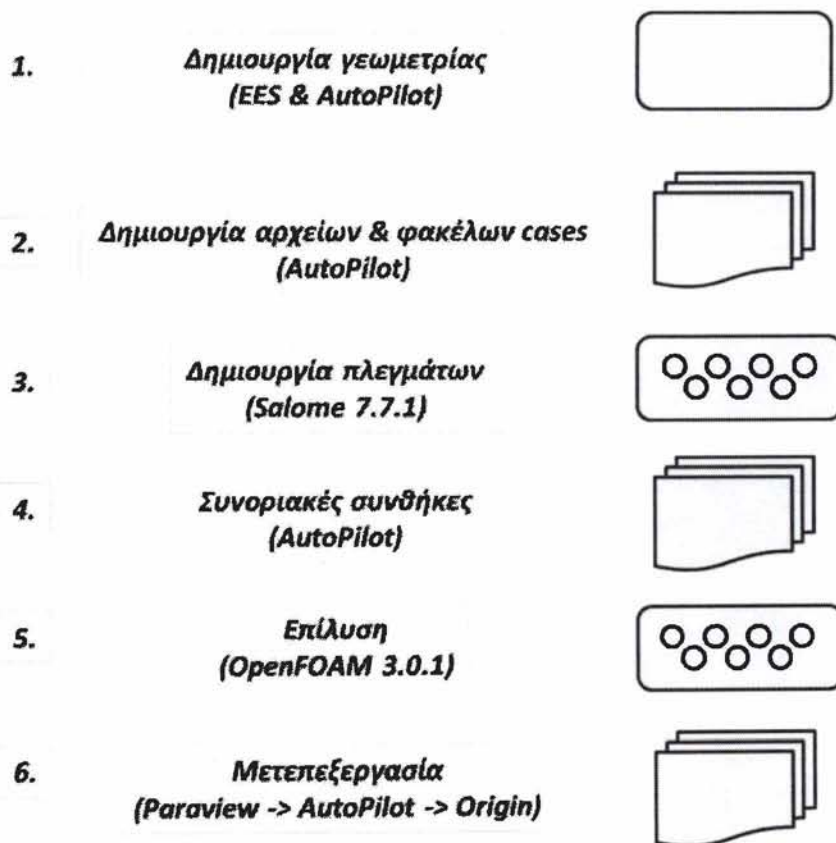
Η μεγάλη πρόοδος που συντελείται στον τομέα της υπολογιστικής επιστήμης των υλικών σήμερα είναι άρρηκτα συνδεδεμένη με τη ραγδαία εξέλιξη των διαθέσιμων υπολογιστικών μέσων. Σήμερα είναι διαθέσιμες μια σειρά από τεχνικές μοντελοποίησης οι οποίες εφαρμόζονται για τη μελέτη μιας ευρείας γκάμας συστημάτων τόσο σε επίπεδο βασικής έρευνας αλλά και σε επίπεδο τεχνολογικών εφαρμογών.

Η έννοια των όρων 'μοντελοποίηση' (modeling) και 'προσομοίωση' (simulation) συχνά ορίζεται με μάλλον αυθαίρετο τρόπο ή οι δύο όροι χρησιμοποιούνται απλά σα συνώνυμα. Θα ήταν επομένως εύλογο σε αυτό το σημείο να αποσαφηνιστεί με όσο το δυνατόν αυστηρότερο τρόπο το νόημα τους. Ο όρος μοντελοποίηση καλύπτει δύο αρκετά διαφορετικές έννοιες, την κατασκευή και διατύπωση ενός θεωρητικού μοντέλου καθώς και την υπολογιστική μοντελοποίηση. Πιο συγκεκριμένα, για τη μελέτη ενός φαινομένου του πραγματικού κόσμου κατασκευάζεται ένα μοντέλο το οποίο περιγράφει το φαινόμενο ικανοποιητικά και με απλουστευμένο τρόπο. Στην περίπτωση της επιστήμης των υλικών ειδικότερα, αυτό το βήμα είναι επιβεβλημένο προκειμένου να μελετηθεί ένα υλικό λόγω της πληθώρας των μηχανισμών που καθορίζουν τις ιδιότητες του και ενεργούν ταυτόχρονα σε όλες τις κλίμακες. Αυτή η φαινομενολογική εικόνα τότε πρέπει να περιγραφεί με ένα μαθηματικό μοντέλο. Ωστόσο, σπάνια το μοντέλο αυτό συμπίπτει με το αριθμητικό καθώς το πρώτο περιέχει συνήθως ένα σύνολο μαθηματικών εκφράσεων με μεγάλη δυσκολία στην αναλυτική επίλυση τους. Η επίλυση του μαθηματικού μοντέλου με αριθμητικές μεθόδους είναι αυτό που παραπάνω ονομάσαμε υπολογιστική μοντελοποίηση και αποτελεί στην ουσία αντικείμενο της προσομοίωσης.

Σκοπός λοιπόν της υπολογιστικής μηχανικής είναι το αν το μοντέλο προσομοίωσης το οποίο χρησιμοποιήθηκε περιγράφει ορθώς το πραγματικό σύστημα δίνει η σύγκριση των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης με τα πραγματικά πειραματικά δεδομένα. Επιπλέον, σύγκριση των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης με αυτά τα οποία προκύπτουν από προβλέψεις της θεωρίας αποτελεί έλεγχο της ορθότητας της δεύτερης. Εξάλλου, στα πλαίσια μιας προσομοίωσης ένα σύστημα μπορεί να μελετηθεί χωρίς κανένα πρόβλημα κάτω από εικονικές ακραίες συνθήκες πίεσης και θερμοκρασίας, κάτι το οποίο δε μπορεί να γίνει εύκολα πειραματικά.



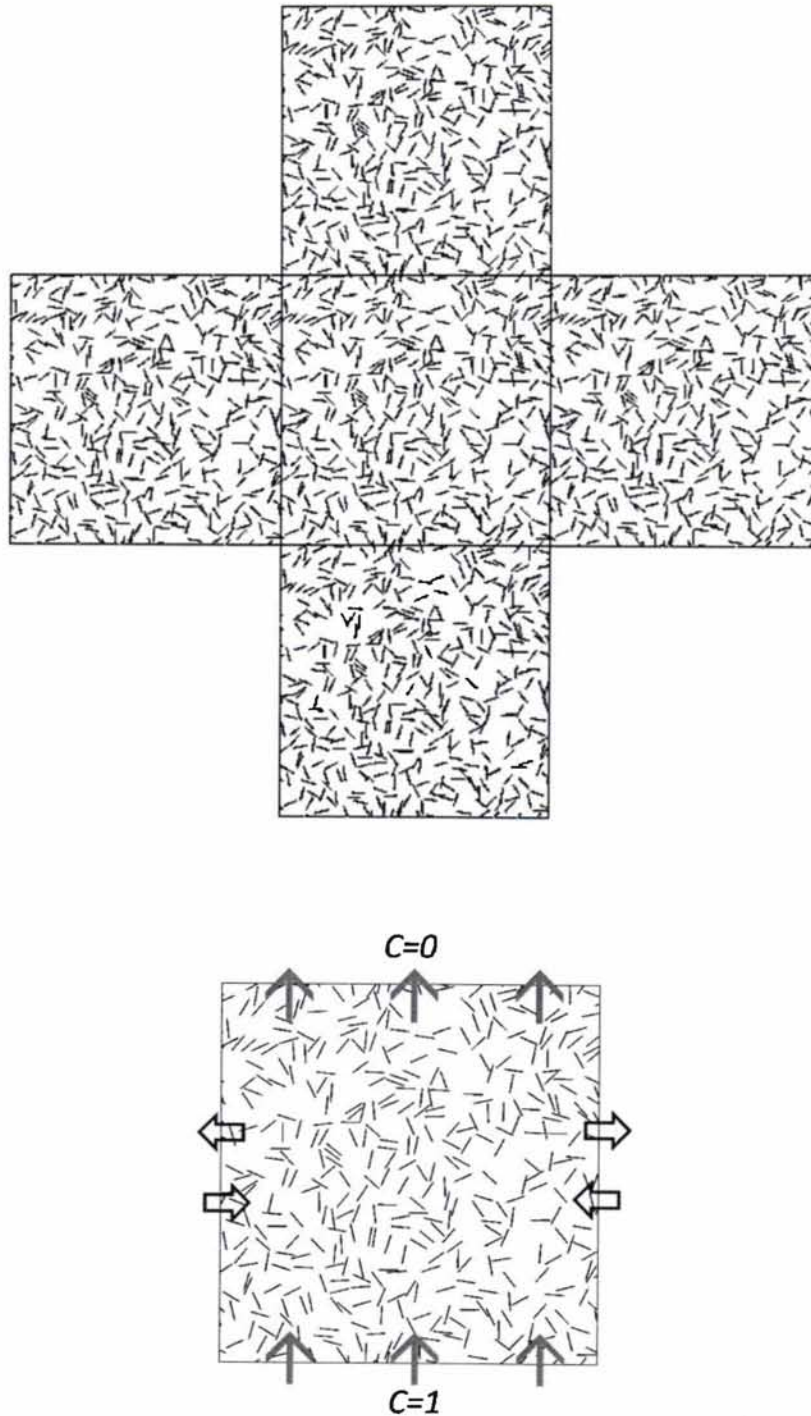
Στη παρούσα μελέτη έγινε χρήση πολλών διαφορετικών προγραμμάτων και επίσης δημιουργήθηκε από το μηδέν (from scratch) ένας κώδικας για τον υπολογισμό των γεωμετριών καθώς και για την αυτοματοποίηση της διαδικασίας του τρεξίματος των μοντέλων. Σχηματικά το διάγραμμα ροής που ακολουθήθηκε για την επίλυση των υπολογιστικών μοντέλων μπορεί να περιγραφεί στο παρακάτω σχήμα :



Σχ. 13 - Περιγραφή υπολογιστικής μεθοδολογίας

### 8.1 Περιγραφή γεωμετρίας

Η γεωμετρία που χρησιμοποιήθηκε στο σύνολο των προσομοιώσεων της παρούσης εργασίας είναι δισδιάστατη με διπλά περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Μια τυπική γεωμετρία φαίνεται στο παρακάτω σχήμα όπου φαίνεται η εφαρμογή και η περιοδικότητα των συνοριακών συνθηκών.

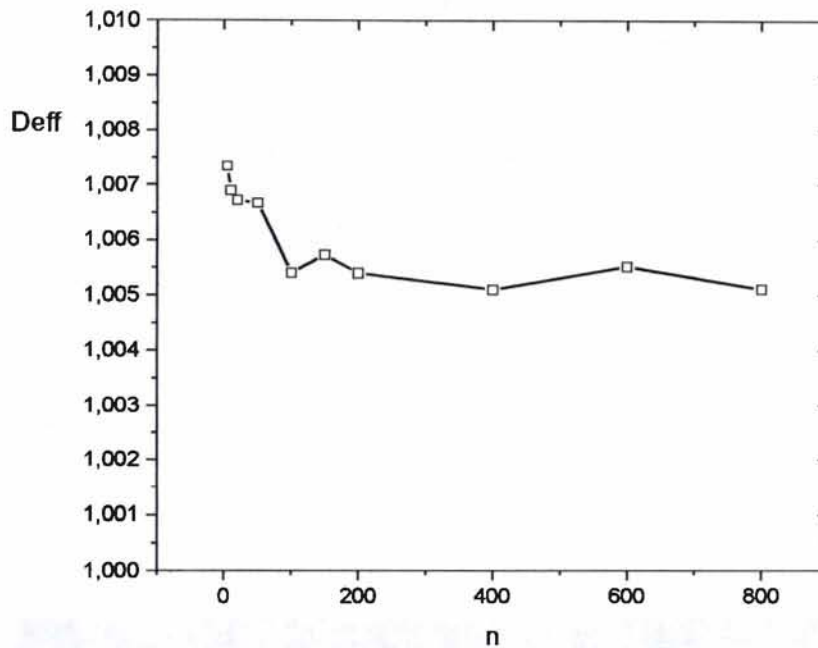


Σχ.14 - Τυπική διπλή περιοδική γεωμετρία

Για να διαπιστωθεί ο βέλτιστος αριθμός φυλλιδίων ( $n$ ) που θα χρησιμοποιούνταν στις προσομοιώσεις έγινε έλεγχος σε μια τυπική γεωμετρία ώστε να διαπιστωθεί κατά πόσο οι τιμές που



υπολογίζονται μεταβάλλονται ανάλογα με τον αριθμό των φυλλιδίων. Έτσι σε μια τυπική γεωμετρία με  $\alpha=100$  και  $\phi=0,0001$  ( $\alpha\phi=0,1$ ) μεταβλήθηκε ο αριθμός των φυλλιδίων και πάρθηκε το παρακάτω διάγραμμα:



Σχ. 15 – Διάγραμμα  $D_{eff}$  σε σχέση με τον αριθμό των φυλλιδίων

Οπότε και διαπιστώθηκε ότι από  $n>100$  οι τιμές της προσομοίωσης μεταβάλλονται στο 4<sup>ο</sup> δεκαδικό σημείο. Έτσι επιλέχθηκε για αριθμός φυλλιδίων το  $n=500$  για όλες τις προσομοιώσεις ως αριθμός ο οποίος αφενός είναι αρκετά μεγάλος για να εξασφαλίσει ότι το αποτέλεσμα δεν εξαρτάται από το  $n$  και αφετέρου δεν είναι απαγορευτικός σε ότι αφορά τους χρόνους κατασκευής του πλέγματος.

Για τον υπολογισμό του  $D_{eff}$  χρησιμοποιήθηκε ο solver LaplacianFoam ο οποίος υπάρχει στον κώδικα OpenFOAM και ο οποίος υπολογίζει την εξίσωση Laplace για μη χρονικά μεταβαλλόμενα προβλήματα [21]:

$$J = -D_{eff} \nabla C \quad E.29$$

Για τη ροή  $J$  ισχύει :

$$J = D_0 \int_L \left( \frac{\partial C}{\partial n} \right) dx \quad E.30$$

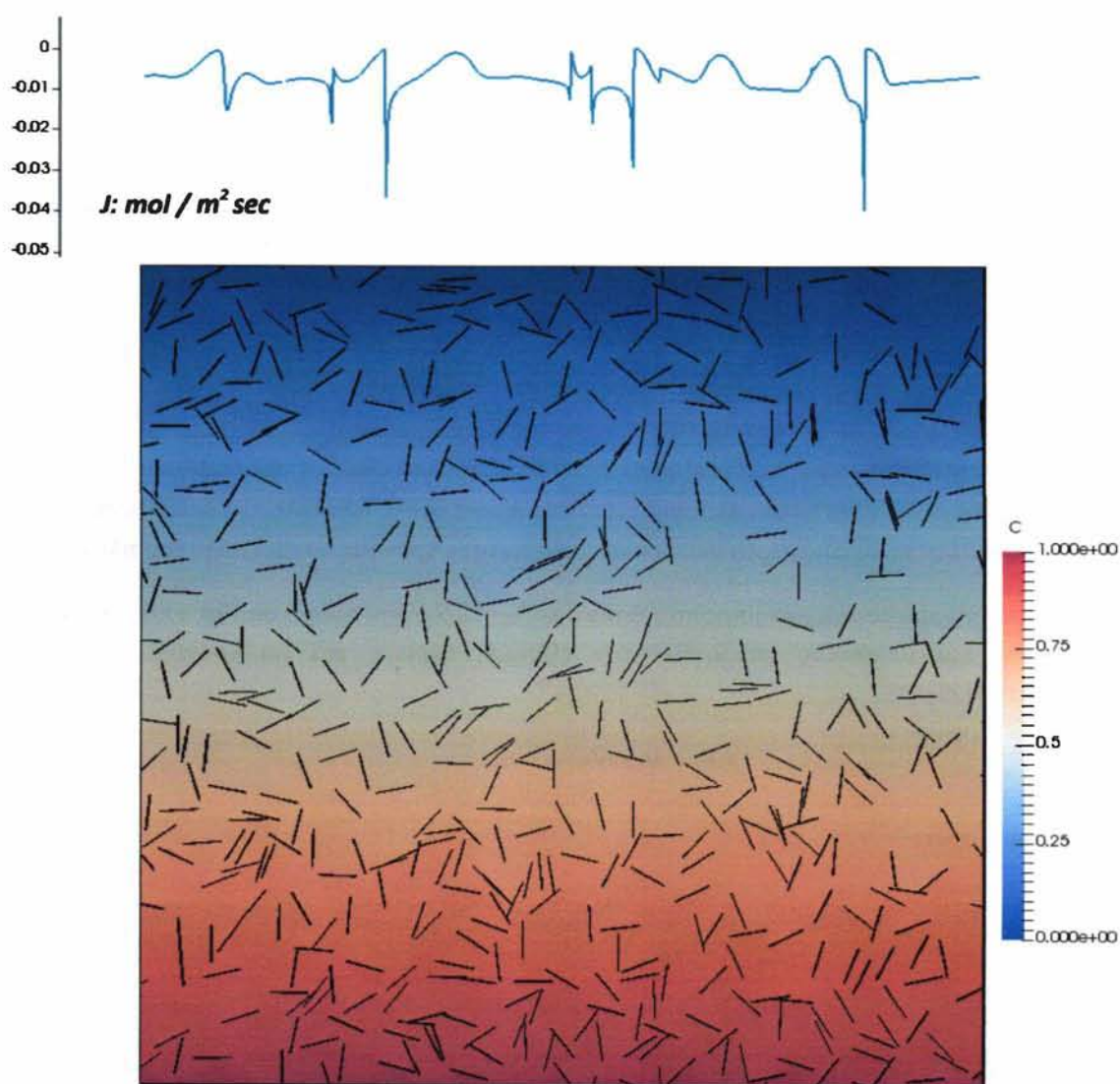
Όπου το ολοκλήρωμα νοείται στο όριο της γεωμετρίας που είναι κάθετο στην κατεύθυνση ( $n$ ) (πάνω οριζόντια γραμμή στο Σχ. 14). Επίσης, από τον ορισμό του ισοδύναμου μέσου (το οποίο και έχει την διαχυτότητα  $D_{eff}$ ) ισχύει:

$$J = D_{eff} \frac{\Delta C}{\Delta y} \quad E.31$$

Όπου  $\Delta y$  είναι η διαφορά συγκέντρωσης που επιβάλλεται μακροσκοπικά ( $\Delta C=1$  στο Σχ. 14) και  $\Delta y$  το μήκος του υπολογιστικού κελιού στην κατεύθυνση της μακροσκοπικής μεταφοράς μάζας). Από τις δυο παραπάνω εξισώσεις και λύνοντας ως προς  $D_{eff}$ :

$$D_{eff} = \int_L \left( \frac{\partial C}{\partial n} \right) dx \frac{\Delta y}{\Delta C} \quad E.32$$

Παρακάτω βλέπουμε μια τυπική γεωμετρία και την αντίστοιχη μεταβολή της ροής στην πάνω επιφάνεια. Σημειώνεται ότι η ροή έχει αρνητικό πρόσημο το οποίο υποδηλώνει την φορά της διάχυσης από τη μεγαλύτερη συγκέντρωση προς τη μικρότερη συγκέντρωση.:



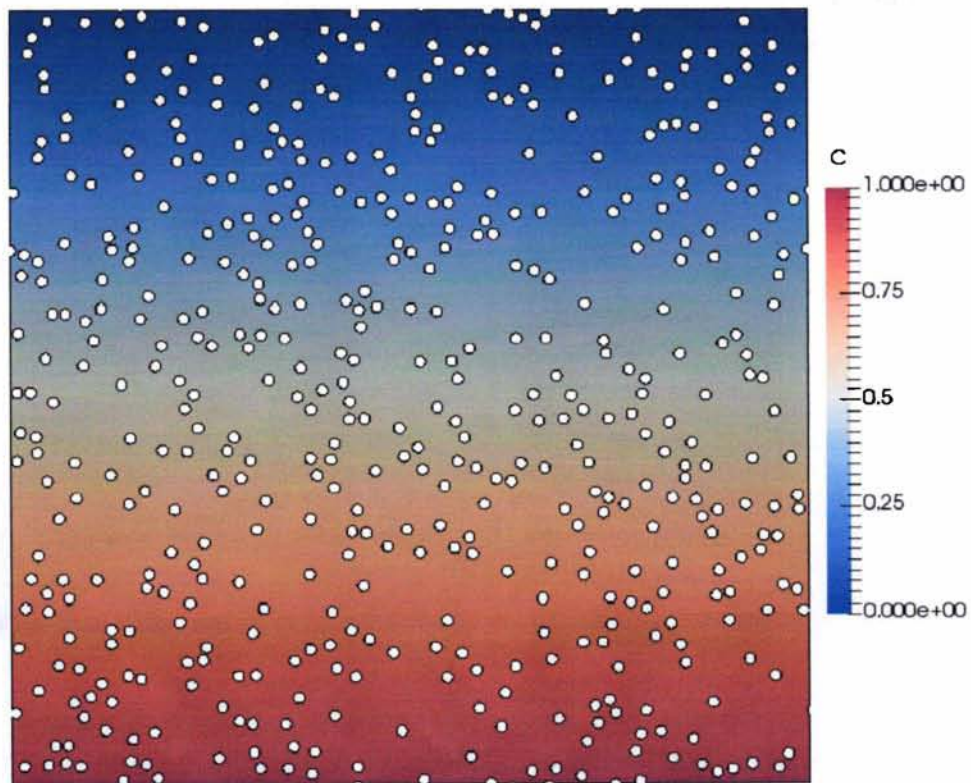
Σχ. 16 – Διάγραμμα συγκέντρωσης για τυπική γεωμετρία

Ο Nielsen διατύπωσε ένα μοντέλο το οποίο δίνει αποτελέσματα του BIF (Barrier Improvement Factor) για μεμβράνες όταν υπάρχουν στο εσωτερικό τους εμπόδια με λόγο πλευρών  $\alpha$  και  $\varepsilon=0$  και το οποίο περιγράφεται από τη σχέση :

$$BIF = \frac{1 + \frac{\alpha}{2}\varphi}{1 - \varphi} \quad E.33$$

Το συγκεκριμένο μοντέλο επιλέχθηκε για να ελεγχθεί ο κώδικας OpenFOAM σε σχέση με την αναλυτική λύση. Για την επαλήθευση δημιουργήθηκαν γεωμετρίες που αντιστοιχούν σε βαθμούς πλήρωσης από  $\phi=0,001$  έως και  $\phi=0,3$  καθώς επίσης και με λόγους πλευρών  $\alpha=1, 10$  και  $50$ . Ειδικά για την περίπτωση  $\alpha=1$  τα φυλλίδια θεωρήθηκε ότι έχουν κυκλική μορφή.

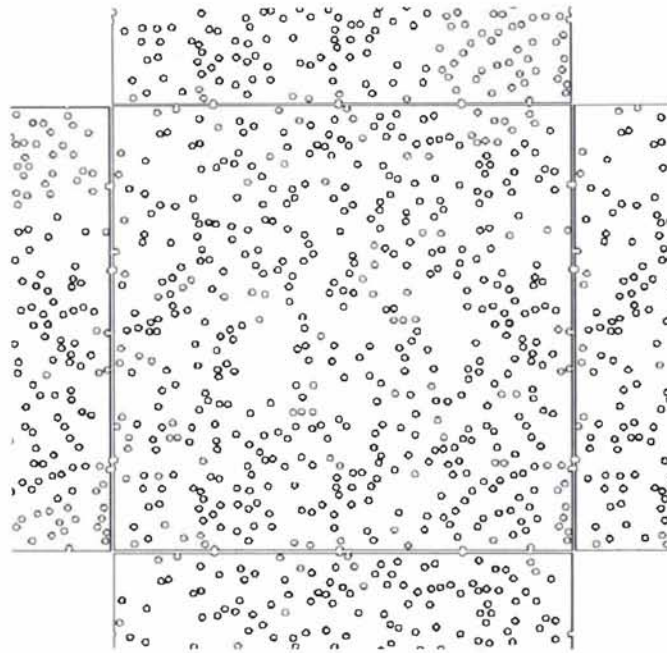
Παρακάτω βλέπουμε μια τυπική διπλή περιοδική γεωμετρία που χρησιμοποιήθηκε για την επαλήθευση. Η συγκέντρωση στη κάτω πλευρά είναι ίση με  $C=1$  και στην πάνω πλευρά ίση με  $C=0$ . Οι συνοριακές συνθήκες στη δεξιά πλευρά είναι κυκλικές με την αριστερή πλευρά. Επίσης οι επιφάνειες των σωματιδίων είναι αδιαβατικές και στο εσωτερικό τους η συγκέντρωση δεν ορίζεται αφού δεν υπάρχει διάχυση:



Σχ. 17 - Τυπική γεωμετρία επαλήθευσης μοντέλου Nielsen με  $\alpha=1$ ,  $\alpha\phi=0.1$

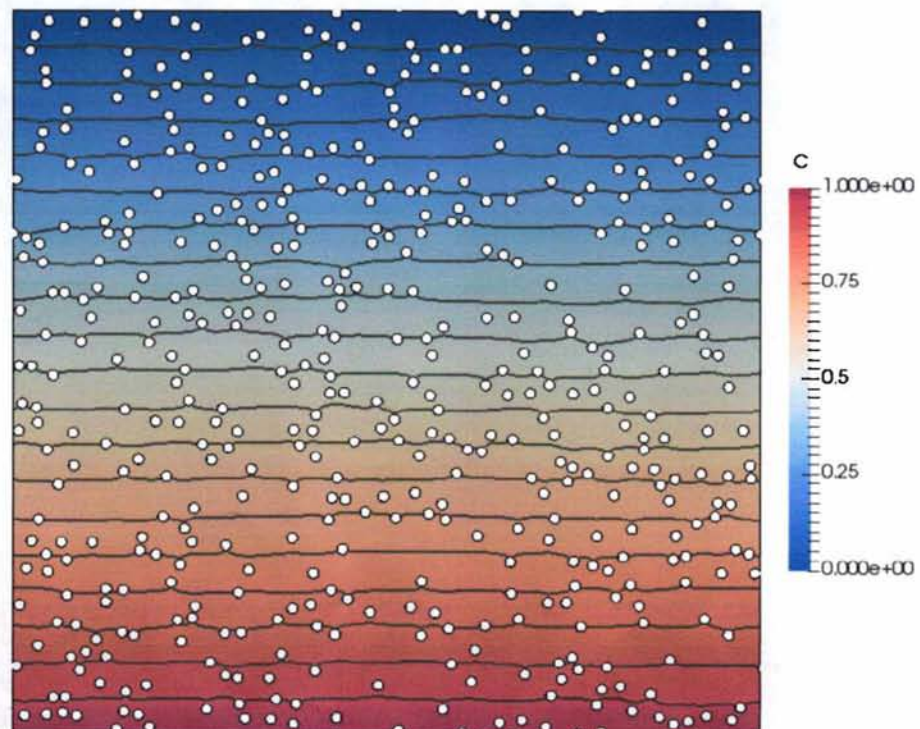


Επίσης βλέπουμε λεπτομέρειες της διτλής περιοδικής γεωμετρίας του πλέγματος μιας τυπικής περίπτωσης που χρησιμοποιήθηκε για την επίλυση:



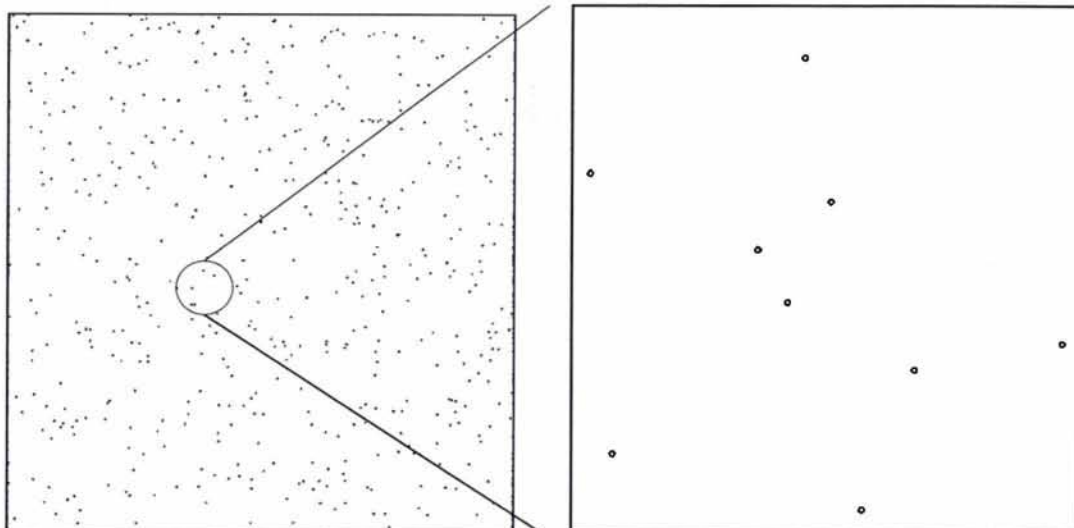
Σχ. 18 - Γενική άποψη διτλής περιοδικής γεωμετρίας πλέγματος,  $\alpha=1$ ,  $\alpha\phi=0.1$

Καθώς επίσης βλέπουμε τις ισοψείς (contour map) της συγκέντρωσης :

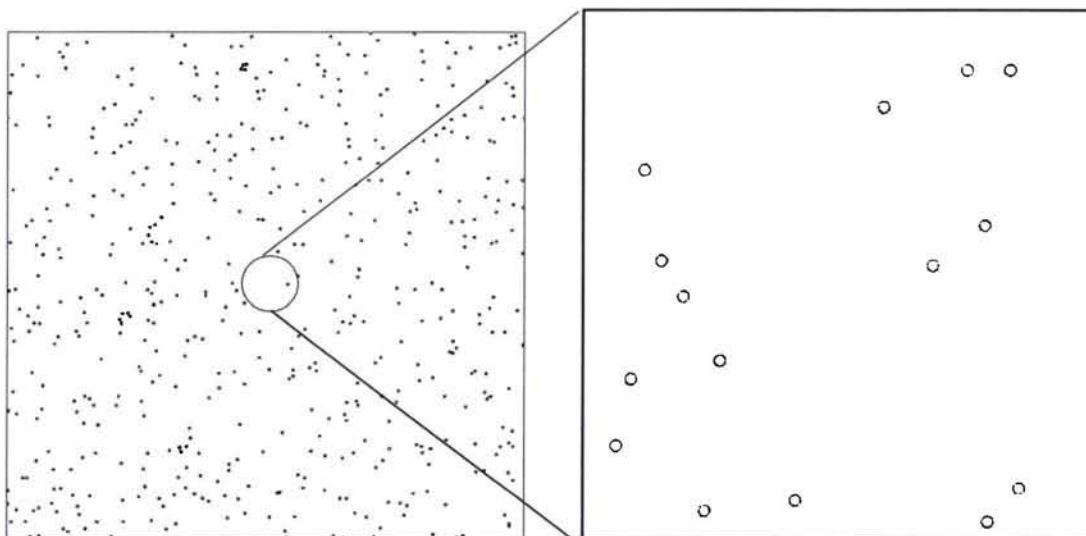


Σχ. 19 - Contour plot,  $\alpha=1$ ,  $\alpha\phi=0.1$ , 20 ισοψείς ανά 0.05

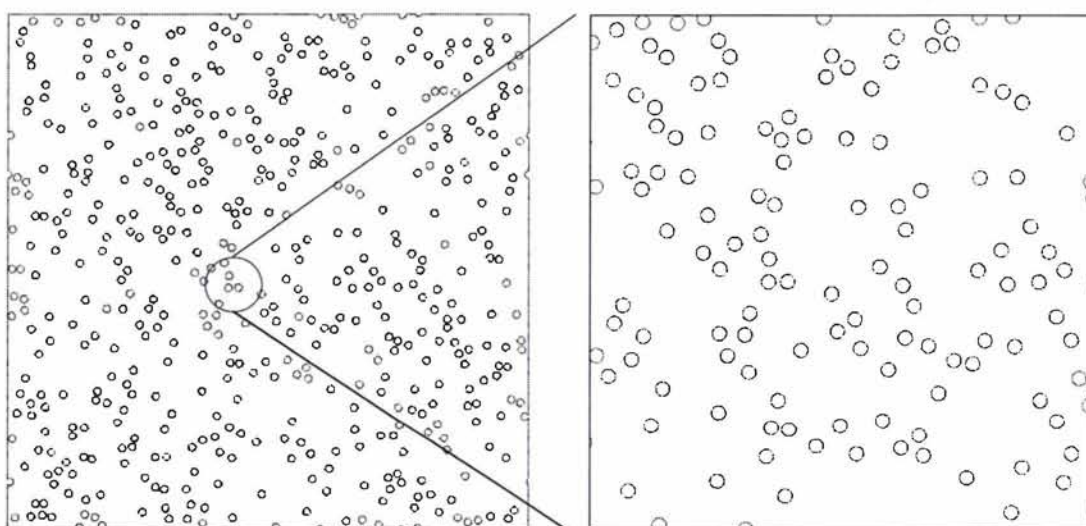
Στα παρακάτω παραδείγματα βλέπουμε ένα εύρος γεωμετριών και πλεγμάτων που χρησιμοποιήθηκαν για την επαλήθευση με  $\alpha=1$ , 10 και 50 σε διάφορα  $\alpha\phi$ :



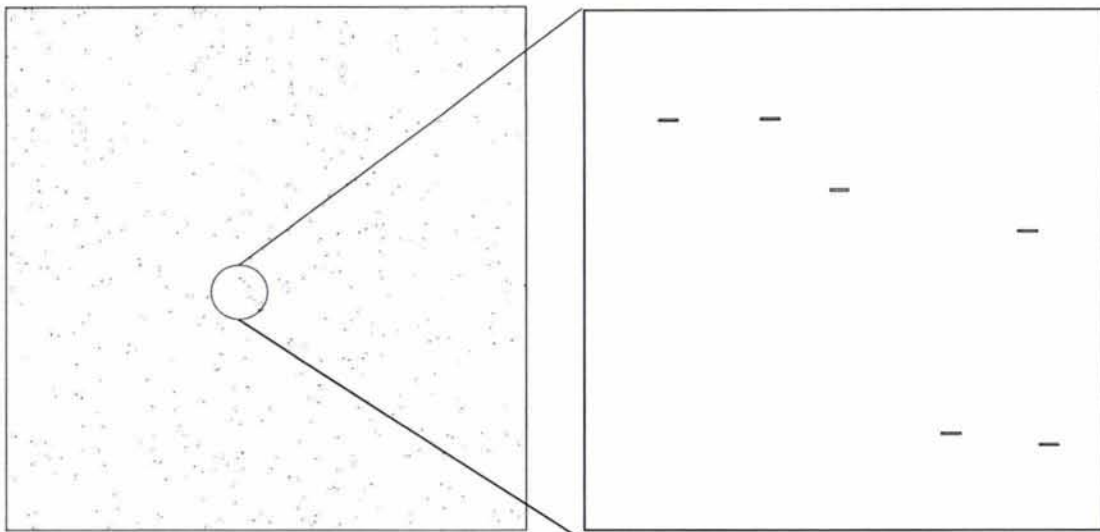
Σχ. 20 – Γεωμετρία και λεπτομέρεια γεωμετρίας επαλήθευσης μοντέλου Nielsen με  $\alpha=1$ ,  $\phi=0.001$ ,  $\alpha\phi=0.001$



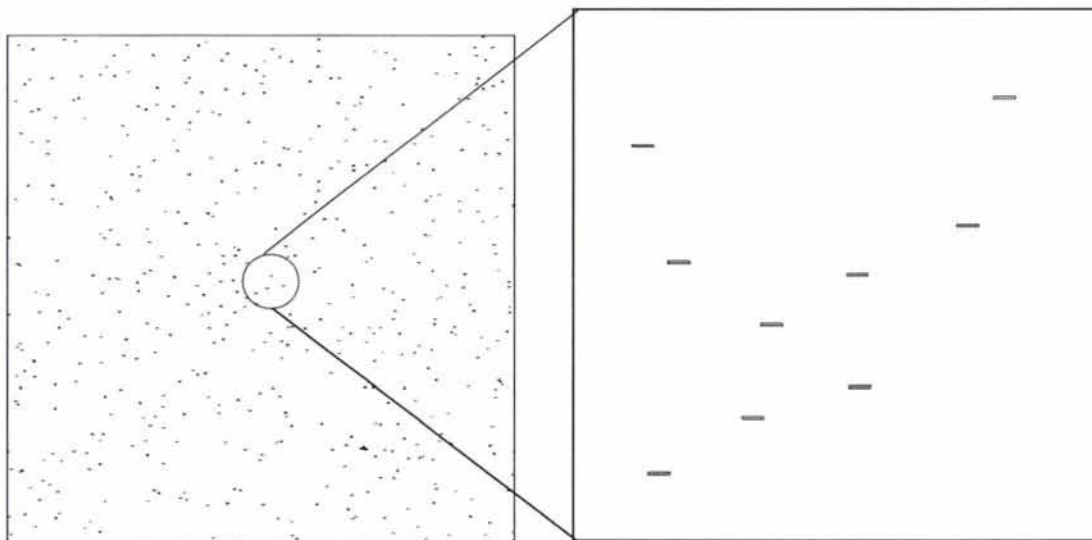
Σχ. 21 – Γεωμετρία και λεπτομέρεια γεωμετρίας επαλήθευσης μοντέλου Nielsen με  $\alpha=1$ ,  $\phi=0.01$ ,  $\alpha\phi=0.01$



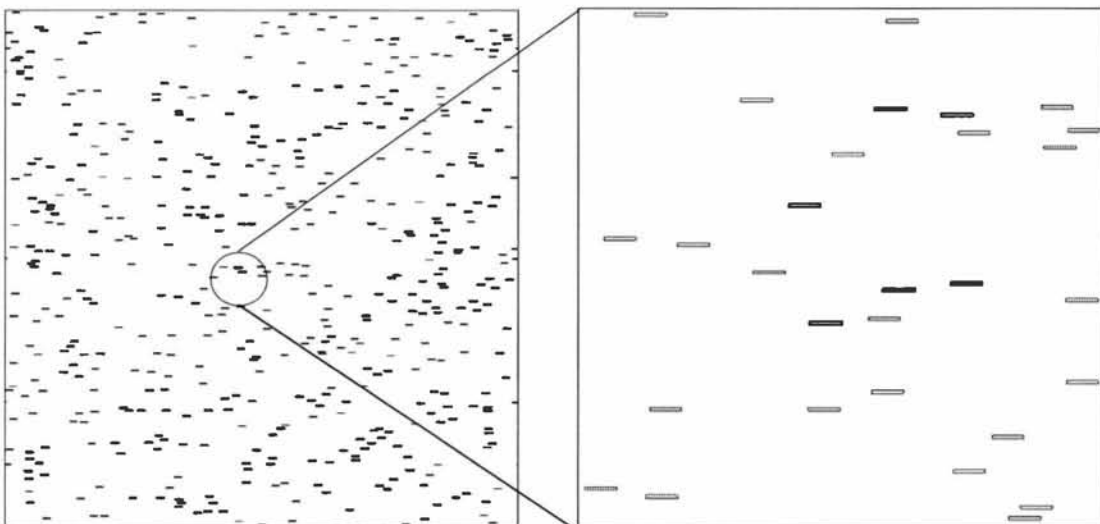
Σχ. 22 – Γεωμετρία και λεπτομέρεια γεωμετρίας επαλήθευσης μοντέλου Nielsen με  $\alpha=1$ ,  $\phi=0.1$ ,  $\alpha\phi=0.1$



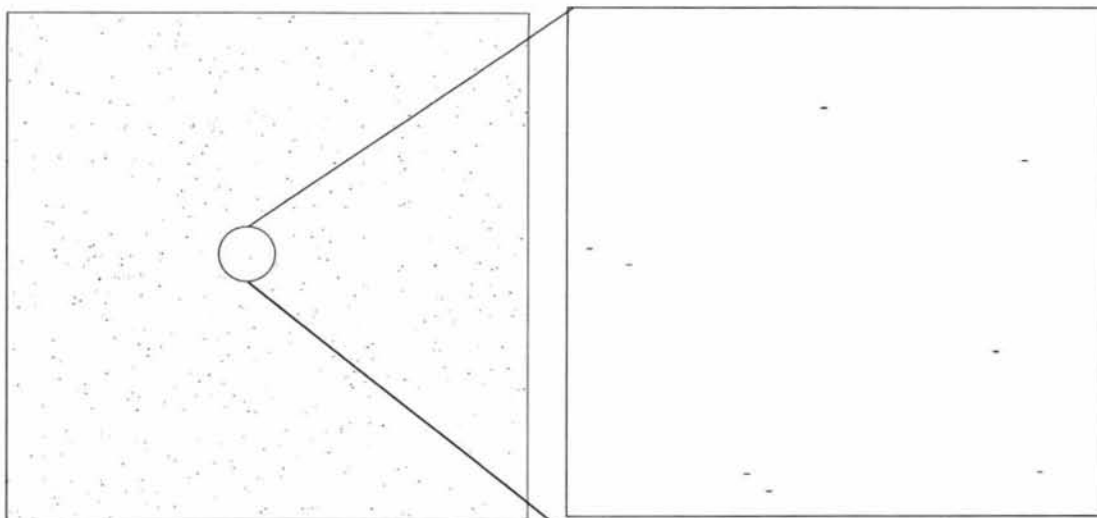
Σχ. 23 – Γεωμετρία και λεπτομέρεια γεωμετρίας επαλήθευσης μοντέλου Nielsen με  $\alpha=10$ ,  $\varphi=0.0001$ ,  $\alpha\varphi=0.001$



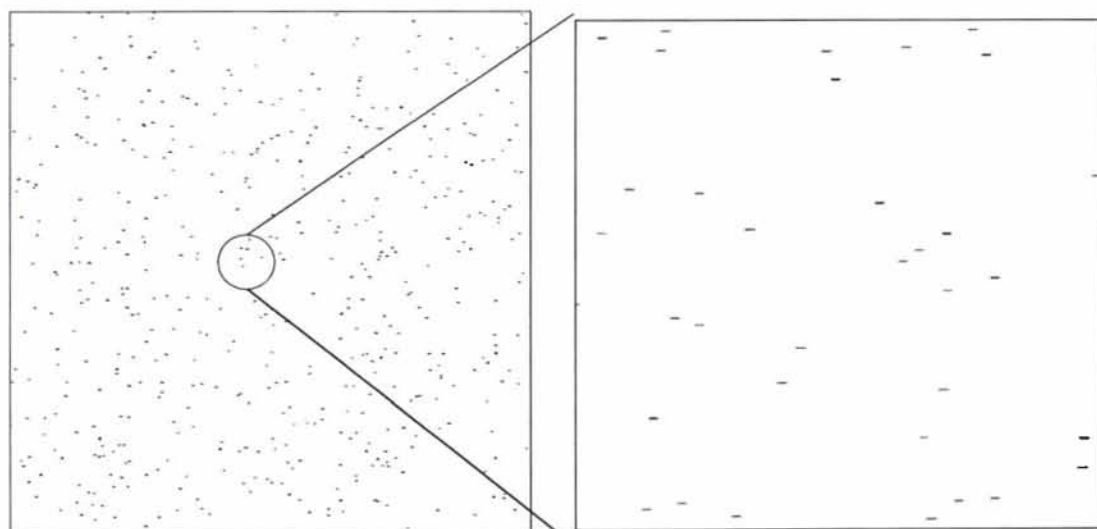
Σχ. 24 - Γεωμετρία και λεπτομέρεια γεωμετρίας επαλήθευσης μοντέλου Nielsen με  $\alpha=10$ ,  $\varphi=0.001$ ,  $\alpha\varphi=0.01$



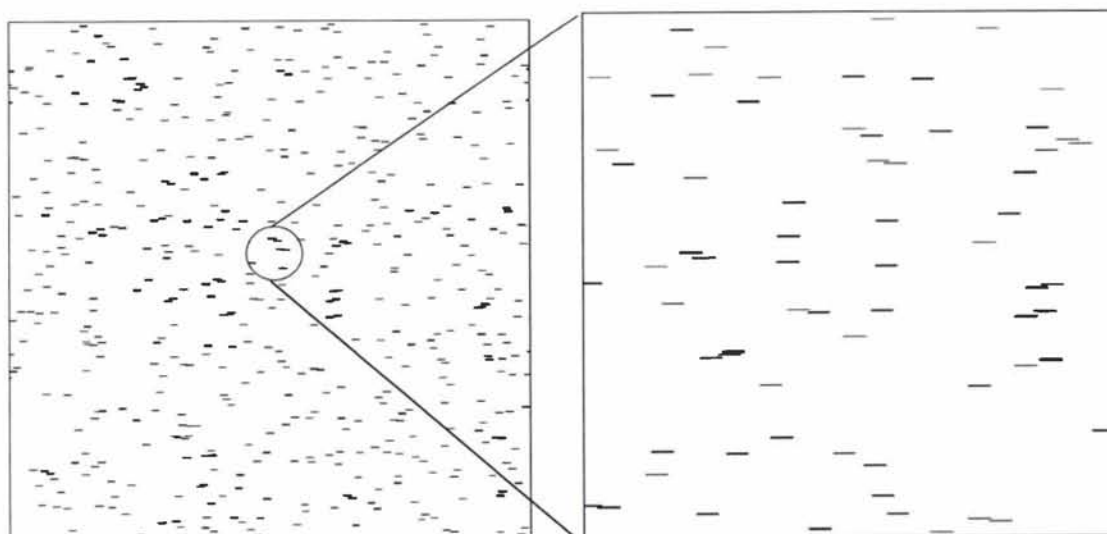
Σχ. 25 - Γεωμετρία και λεπτομέρεια γεωμετρίας επαλήθευσης μοντέλου Nielsen με  $\alpha=10$ ,  $\varphi=0.01$ ,  $\alpha\varphi=0.1$



Σχ. 26 - Γεωμετρία και λεπτομέρεια γεωμετρίας επαλήθευσης μοντέλου Nielsen με  $\alpha=50$ ,  $\varphi=0.00002$ ,  $\alpha\varphi=0.001$

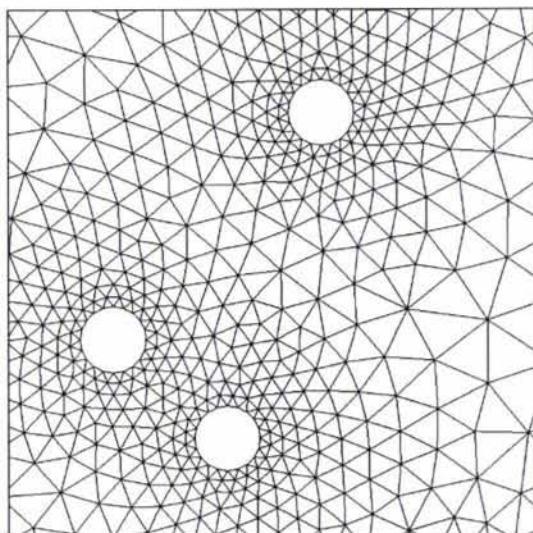


Σχ. 27 - Γεωμετρία και λεπτομέρεια γεωμετρίας επαλήθευσης μοντέλου Nielsen με  $\alpha=50$ ,  $\varphi=0.0002$ ,  $\alpha\varphi=0.01$

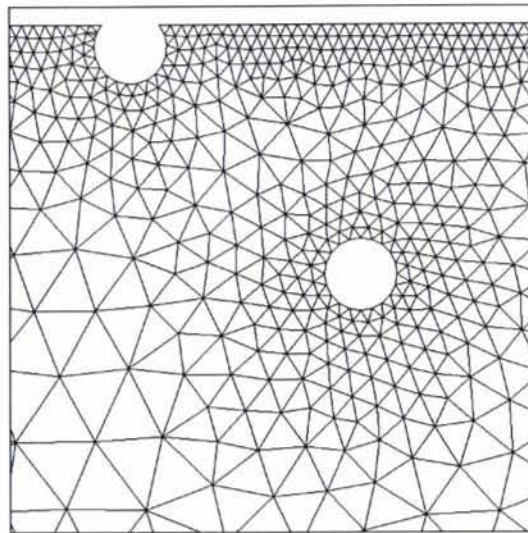


Σχ. 28 - Γεωμετρία και λεπτομέρεια γεωμετρίας επαλήθευσης μοντέλου Nielsen με  $\alpha=50$ ,  $\varphi=0.002$ ,  $\alpha\varphi=0.1$

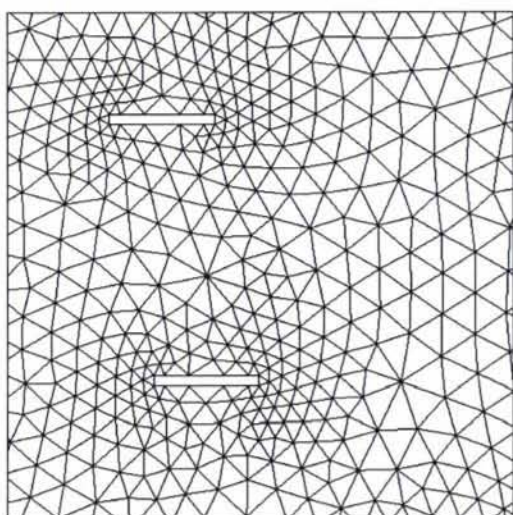




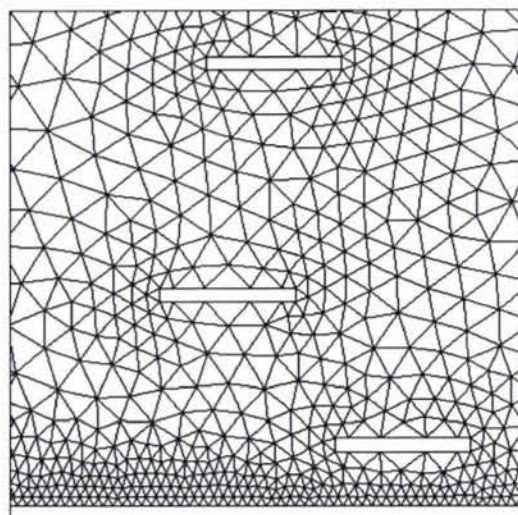
Σχ. 29 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=1$ ,  $\alpha\phi=0.01$



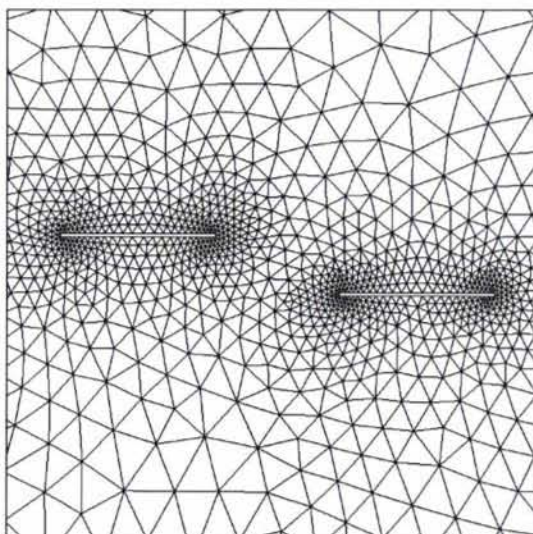
Σχ. 30 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=1$ ,  $\alpha\phi=0.01$



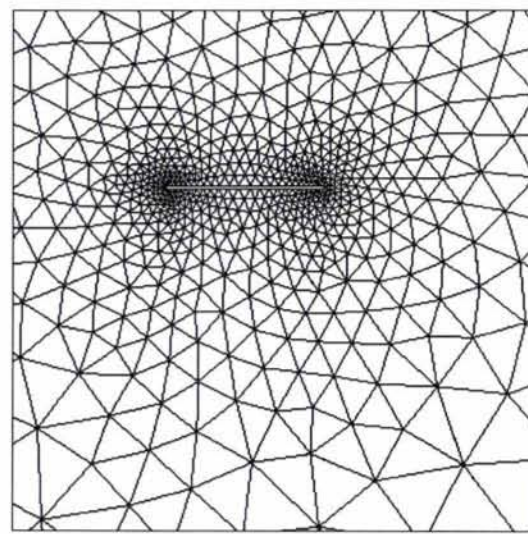
Σχ. 31 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=10$ ,  $\alpha\phi=0.01$



Σχ. 32 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=10$ ,  $\alpha\phi=0.01$



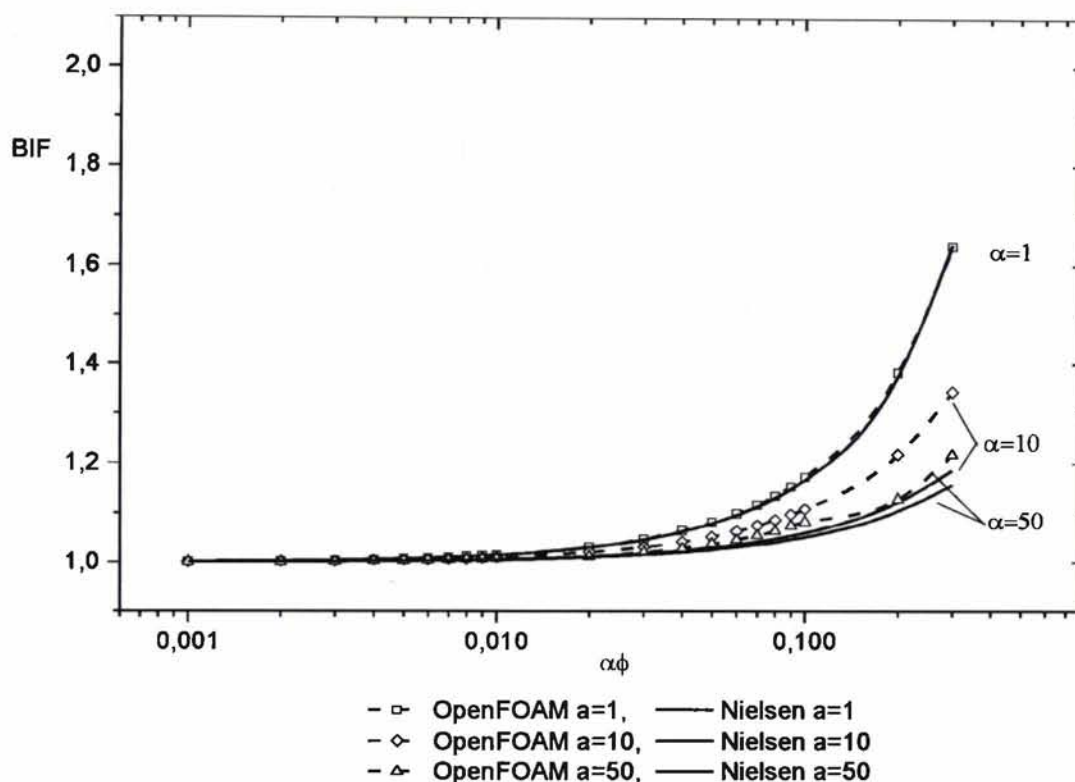
Σχ. 33 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.1$



Σχ. 34 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.1$



Στο παρακάτω διάγραμμα βλέπουμε τις τιμές που υπολογίστηκαν από τον OpenFOAM σε σχέση με την αναλυτική λύση που προτάθηκε από τον Nielsen (εξ. E.31):



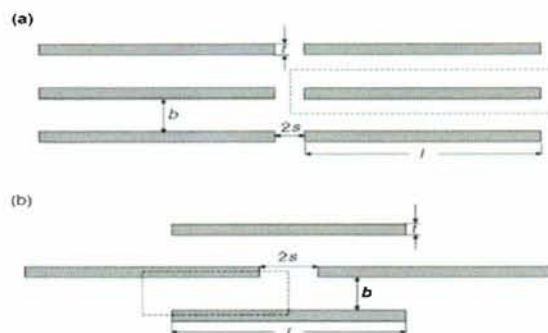
Σχ. 35 – Σύγκριση υπολογισμού συντελεστή BIF, μεταξύ αναλυτικής λύσης μοντέλου Nielsen και υπολογιστικής λύσης OpenFOAM για  $\alpha=1$ ,  $\alpha=10$  και  $\alpha=50$

Παρατηρούμε την πολύ καλή συμφωνία των αποτελεσμάτων του μοντέλου με την υπολογιστική λύση για  $\alpha=1$ . Για μεγαλύτερα  $\alpha$  υπάρχει συμφωνία από  $\phi=0.001$  έως και  $\phi=0.01$  αλλά για  $\phi>0.01$  τα αποτελέσματα αρχίζουν να αποκλίνουν. Αυτή η συμπεριφορά για φυλλίδια με  $\alpha>1$  είναι κάτι το οποίο βρίσκεται σε πλήρη συμφωνία με αντίστοιχα αποτελέσματα της βιβλιογραφίας [56]. Επίσης είναι γνωστό ότι το μοντέλο του Nielsen αποκλίνει σημαντικά για ημιαραιά και πυκνά διαλύματα ( $\phi>0.1$ ) όταν  $\alpha>1$ . Τέλος παρατηρούμε την ασυμπτωτική συμπεριφορά του μοντέλου του Nielsen και η απόκλιση σε σχέση με τα υπολογιστικά αποτελέσματα μειώνεται καθώς αυξάνεται το  $\alpha$ .

Ο ARIS [37], διατύπωσε ένα μοντέλο το οποίο δίνει αποτελέσματα του BIF για μεμβράνες όταν υπάρχουν στο εσωτερικό τους φυλλίδια ως εμπόδια στη διάχυση με  $\alpha \gg 1$  και  $\varepsilon = 0$  και το οποίο περιγράφεται από τη σχέση :

$$BIF = 1 + \frac{\alpha^2 \varphi^2}{4(1-\varphi)} + \frac{\alpha \varphi}{2\lambda} + \frac{2}{\pi} \frac{\alpha \varphi}{(1-\varphi)} \ln \left[ \frac{\pi \alpha^2 \varphi}{4\lambda(1-\varphi)} \right] \quad E.34$$

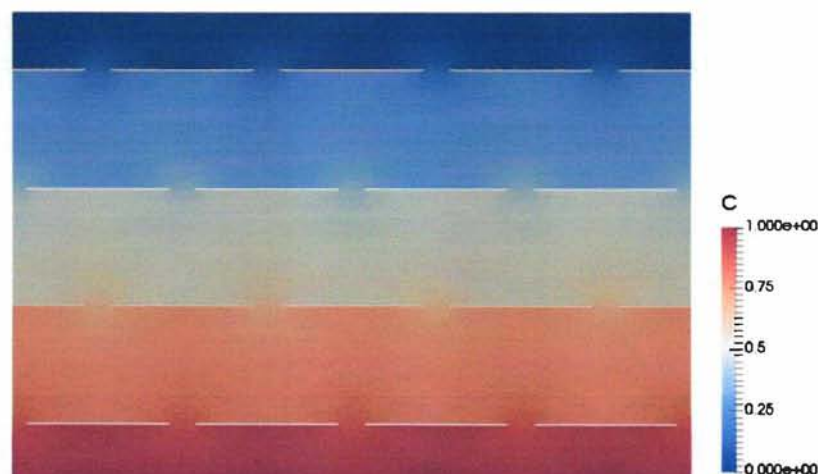
Οπου  $\lambda = 2s/t$  και  $2s$  η απόσταση μεταξύ των φυλλιδίων και  $t$  το πάχος. Επίσης  $\alpha = l/t$  όπου  $l$  το μήκος των φυλλιδίων σύμφωνα με το παρακάτω σχήμα:



Σχ. 36 - Ευθυγραμμισμένα φυλλίδια σε περιοδική διάταξη σύμφωνα με το μοντέλο του Aris: α) ομοιόμορφη κανονική διάταξη και β) ενδιάμεση δισδιάστατη διάταξη. Τα όρια των αντίστοιχων μοναδιαίων κελιών ορίζονται από τις διακεκομμένες γραμμές

Το συγκεκριμένο μοντέλο επίσης επιλέχθηκε για να ελεγχθεί ο κώδικας OpenFOAM σε σχέση με την αναλυτική λύση.

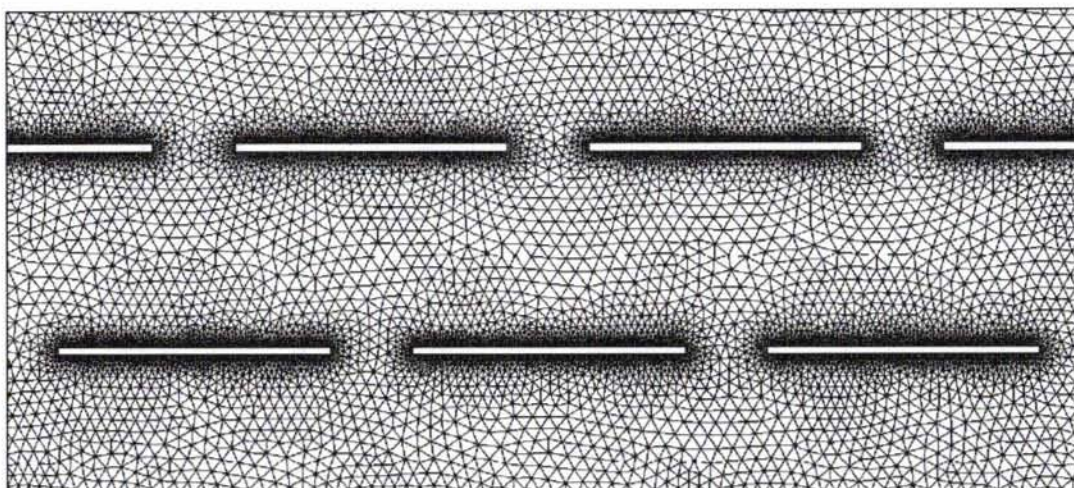
Παρακάτω βλέπουμε μια τυπική δισδιάστατη διπλή περιοδική γεωμετρία που χρησιμοποιήθηκε για την επαλήθευση. Οι συνοριακές συνθήκες είναι ίδιες με τις συνοριακές συνθήκες στο μοντέλο του Nielsen ήτοι μοναδιαία συγκέντρωση στην κάτω πλευρά, μηδενική συγκέντρωση στην πάνω πλευρά, κυκλικές περιοδικές συνοριακές συνθήκες δεξιά και αριστερά και μηδενική κλίση στα εσωτερικά τοιχώματα.



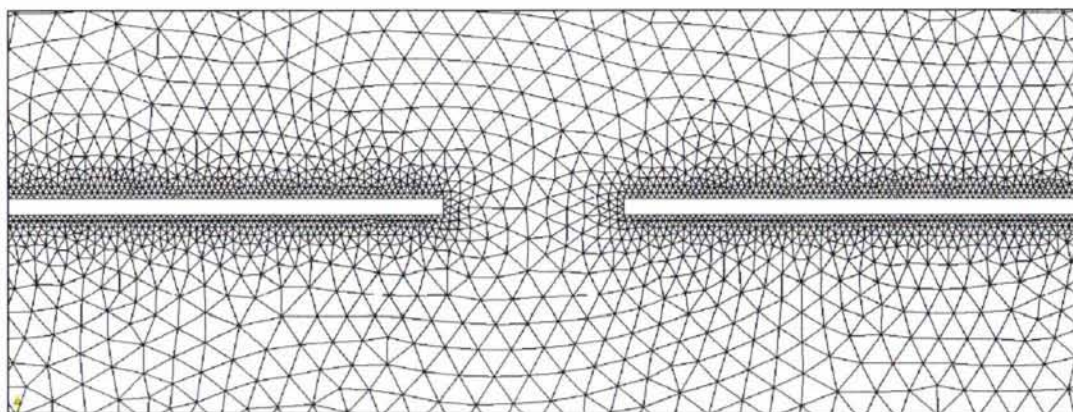
Σχ.37 - Τυπική γεωμετρία επαλήθευσης μοντέλου ARIS



Επίσης βλέπουμε λεπτομέρειες του πλέγματος που χρησιμοποιήθηκε για την επίλυση :

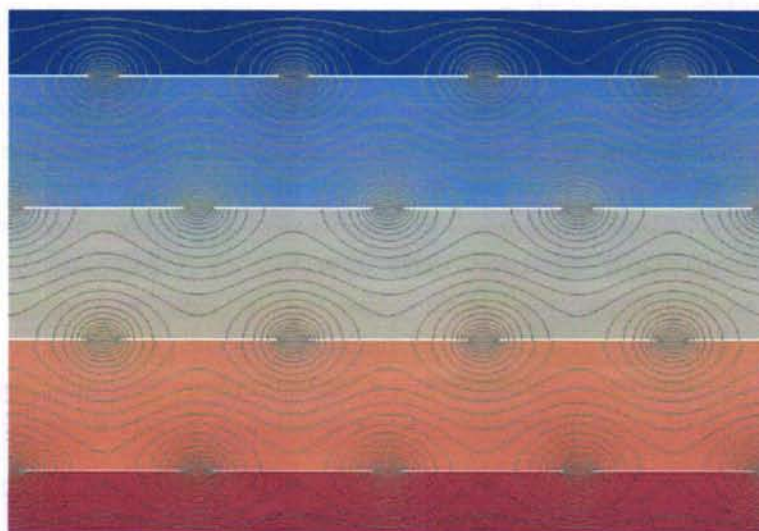


Σχ. 38 - Γενική άποψη πλέγματος



Σχ. 39 - Λεπτομέρεια πλέγματος

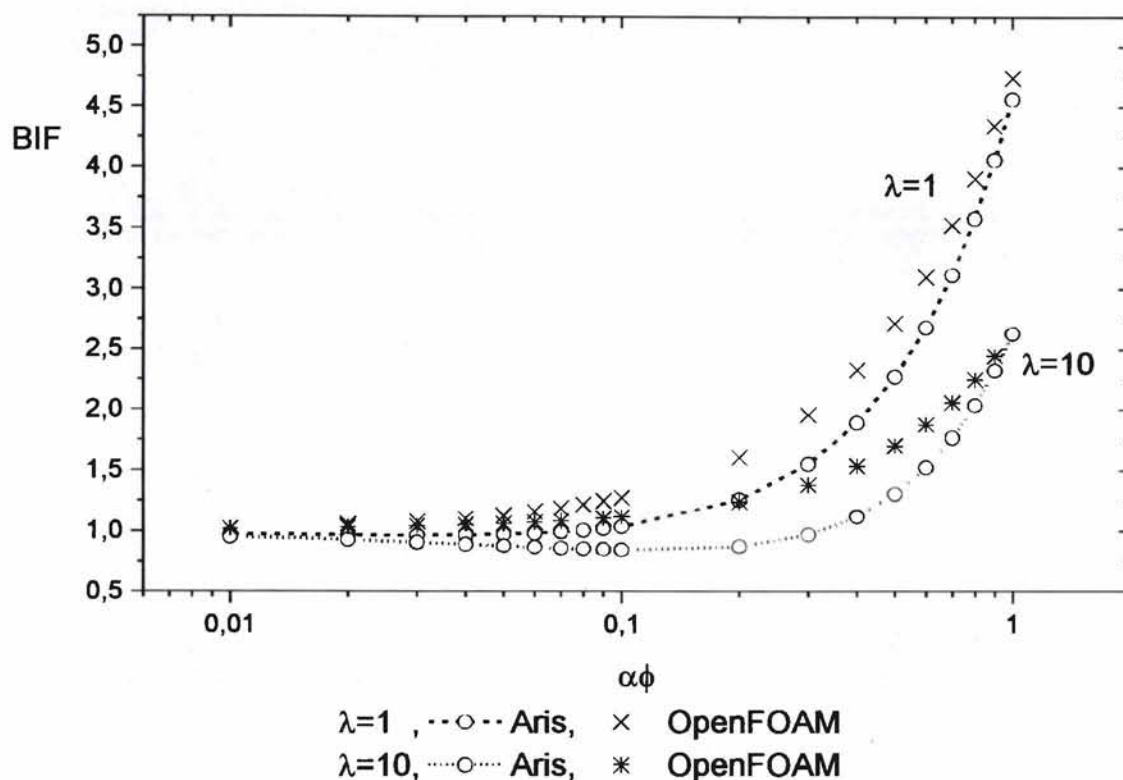
Καθώς επίσης βλέπουμε τις ισοεπιφάνειες (contour map) της συγκέντρωσης :



Σχ. 40 - Contour plot, 50 ισοψείς ανα 0.02



Στο παρακάτω διάγραμμα βλέπουμε τις τιμές του BIF που υπολογίστηκαν από τον OpenFOAM σε σχέση με την αναλυτική λύση που προτάθηκε από τον Aris (Ε.34):



Σχ. 41 -- Σύγκριση υπολογισμού συντελεστή BIF, μεταξύ αναλυτικής λύσης μοντέλου Aris και υπολογιστικής λύσης OpenFOAM για  $\lambda=1$  και  $\lambda=10$

Παρατηρούμε την σχετικά καλή συμφωνία των αποτελεσμάτων σε μεγαλύτερα  $\alpha\phi$  και  $\lambda=1$ . Για μικρά  $\alpha\phi$  και  $\lambda=10$  βλέπουμε ότι δεν υπάρχει καλή συμφωνία και το μοντέλο του Aris δίνει μη ρεαλιστικά αποτελέσματα αφού προβλέπει τιμές του BIF μικρότερες της μονάδας που εξ ορισμού δεν ισχύει.

Μέ βάση τα παραπάνω, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι ο OpenFOAM αποτελεί μία αξιόπιστη υπολογιστική πλατφόρμα για την ανάλυση του προβλήματος που μας ενδιαφέρει. Συγκεκριμένα αποτελέσματα βρέθηκαν να είναι σε συμφωνία με τις προβλέψεις άλλων μοντέλων στη βιβλιογραφία τόσο υπολογιστικών όσο και αναλυτικών. Σχετικά με την ασυμφωνία ή και τις αποκλίσεις των προβλέψεων των αναλυτικών μοντέλων αυτές μπορούν να αποδοθούν σε μια πλειάδα λόγων οι κυριότεροι των οποίων είναι ότι ο κάθε ερευνητής πολλές φορές έχει περιορισμένα σεντ μετρήσεων τα οποία τον οδηγούν σε συγκεκριμένα πεδία τιμών καθώς επίσης οι παραδοχές που γίνονται στην προσπάθεια να απλοποιηθούν οι υπολογισμοί της αναλυτικής επίλυσης μπορούν να οδηγήσουν σε αποκλίσεις στις περιοχές που οι παραδοχές και απλοποιήσεις δεν ισχύουν.

Αφού καταλήξαμε στο συμπέρασμα ότι ο κώδικας OpenFOAM μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εξαγωγή ασφαλών συμπερασμάτων σχετικά με την επαλήθευση του αναλυτικού μοντέλου προχωράμε στην υπολογιστική επαλήθευση των προβλέψεων του μοντέλου που διατυπώθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο (Ε.23). Για την επαλήθευση θα γίνουν δυο σεντ προσομοιώσεων με διαφορετικές συνθήκες προκειμένου να διαπιστωθεί η ορθότητα των διαφόρων παραμέτρων του μοντέλου.

Το πρώτο σεντ περιλαμβάνει τον υπολογισμό του  $D_{\gamma\gamma}$  στην περίπτωση όπου το  $\theta$  μεταβάλλεται από 0 έως  $\pi/2$  rad ( $\theta=0, 0.1, 0.2, 0.3, \dots, 1.0, 1.2, 1.4$  και  $\pi/2$ ) και το εύρος  $\epsilon$  των γωνιών παραμένει ίσο με 0. Αυτό σημαίνει ότι όλες οι ίνες εμφανίζουν τον ίδιο προσανατολισμό. Επίσης, σε όλες τις περιπτώσεις τα φυλλίδια είναι τυχαία κατανομημένα μέσα στο υπολογιστικό κελί. Εξετάζονται τέσσερις περιπτώσεις για το  $\alpha\phi$  ( $\alpha\phi=0.01, 0.1, 1$  και  $10$ ) και το  $\alpha$  παραμένει σταθερό και ίσο με 100.

Το δεύτερο σεντ περιλαμβάνει τον υπολογισμό του  $D_{\gamma\gamma}$  στην περίπτωση όπου το  $\theta$  παραμένει σταθερό και ίσο με 0 και το εύρος  $\epsilon$  των γωνιών μεταβάλλεται από 0 έως  $\pi/2$  ( $\epsilon=0, 0.1, 0.2, 0.3, \dots, 1.0, 1.2, 1.4$  και  $\pi/2$ ). Οι προσομοιώσεις γίνονται για  $\alpha=50, 100$  και  $1000$  και το  $\alpha\phi$  μεταβάλλεται από 0.001 έως 5 ( $\alpha\phi=0.001, 0.005, 0.01, 0.05, 0.1, 0.5, 1$  και  $5$ ).

Για την κατασκευή της γεωμετρίας χρησιμοποιήθηκε ο αλγόριθμος RSA (Random Sequential Addition) (βλ. παράρτημα 14.12) σύμφωνα με τον οποίο υπολογίζεται μια θέση στο εσωτερικό του πλέγματος και μια γωνία ανάλογα με τον συνδυασμό  $\epsilon$  και  $\theta$  της αντίστοιχης περίπτωσης. Στη συνέχεια ελέγχεται αν η τοποθέτηση ενός φυλλιδίου διαστάσεων  $l \times t$ , και  $\alpha=l/t$ , στην θέση και γωνία που υπολογίστηκε βρίσκεται σε αλληλοεπικάλυψη με κάποιο ήδη τοποθετημένο φυλλίδιο και τοποθετείται αν τηρούνται όλοι οι περιορισμοί απόστασης. Αλλιώς επαναυπολογίζεται μια νέα θέση και γωνία και επαναλαμβάνονται οι έλεγχοι μέχρι να συμπληρωθεί ο απαραίτητος αριθμός φυλλιδίων. Σε περίπτωση που ένα φυλλίδιο έχει τμήμα του εκτός του πλέγματος τότε προστίθεται ένα φυλλίδιο σε αντίστοιχη αντιδιαμετρική θέση προκειμένου να επιτευχθεί η διπλή περιοδικότητα του πλέγματος.

Για την δημιουργία του πλέγματος χρησιμοποιήθηκε ο αλγόριθμος NETGEN (βλ. παράρτημα 14.13) με κατάλληλες γεωμετρικές ρυθμίσεις τοπικών συνθηκών ο οποίος παράγει πλέγματα με πρισματικά κελιά. Λόγω της τυχαιότητας της γεωμετρίας η οποία παράγεται αλγοριθμικά εμφανίστηκαν μεμονωμένες περιπτώσεις στις οποίες δεν επιτεύχθηκε σύγκλιση λόγω κακής κατασκευής του πλέγματος από τους αντίστοιχους αλγόριθμους. Αυτές γενικά ήταν λίγες περιπτώσεις οι οποίες δεν επηρέασαν τη στατιστική φύση των αποτελεσμάτων.

Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα συγκεντρωτικά διαγράμματα και γίνεται σχολιασμός των αποτελεσμάτων. Οι υπόλοιπες περιπτώσεις βρίσκονται αναλυτικά στο παράρτημα όπου και παρουσιάζονται και τα γεωμετρικά μοντέλα και καθώς και τα script που χρησιμοποιήθηκαν για την επίλυση τους.

Σημειώνεται ότι στο σύνολο της εργασίας στη παρουσίαση των διαγραμμάτων γεωμετρίας, συγκεντρώσεων κλπ, θεωρούμε ότι η συκέντρωση στη κάτω πλευρά του πλέγματος είναι ίση με 1 και στη πάνω πλευρά είναι ίση με 0. Επίσης οι υπόλοιπες συνοριακές συνθήκες είναι ίδιες με αυτές που περιγράφηκαν και στις περιπτώσεις των μοντέλων των Nielsen και Aris.

### 11.1 Υπολογισμός συντελεστή $D_{yy}$ για φυλλίδια προσανατολισμένα κατά $0 < \theta < \pi/2$

Για τον υπολογισμό του συντελεστή  $D_{yy}$  στη περίπτωση όπου τα φυλλίδια έχουν μεταβαλλόμενο προσανατολισμό ως προς  $\theta$  θυμίζουμε την σχέση E.14 σύμφωνα με την οποία ισχύει:

$$\begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{bmatrix}(\theta) = \begin{bmatrix} D_{\parallel} \cos^2 \theta + D_{\perp} \sin^2 \theta & D_{\perp} \sin \theta \cos \theta - D_{\parallel} \sin \theta \cos \theta \\ D_{\perp} \sin \theta \cos \theta - D_{\parallel} \sin \theta \cos \theta & D_{\perp} \cos^2 \theta + D_{\parallel} \sin^2 \theta \end{bmatrix} \quad E.14$$

Καθώς επίσης και την εξίσωση E.12 σύμφωνα με την οποία ισχύει:

$$\begin{bmatrix} D_{\parallel} & 0 \\ 0 & D_{\perp} \end{bmatrix} = D_0 \begin{bmatrix} \frac{1-\varphi}{1+\frac{\varphi}{2\alpha}} & 0 \\ 0 & \frac{1-\varphi}{1+\frac{\alpha}{2}\varphi} \end{bmatrix} \quad E.12$$

Από τις δυο παραπάνω εξισώσεις αντικαθιστώντας και λύνοντας ως προς  $D_{yy}$  έχουμε :

$$D_{yy} = - \frac{\alpha^2 \tau \varphi - 4\alpha \varepsilon - \alpha^2 \varepsilon \varphi - \tau \varphi - \varepsilon \varphi - \alpha^2 \tau \varphi^2 + 4\alpha \varphi \varepsilon + \alpha^2 \varepsilon \varphi^2 + \tau \varphi^2 + \varepsilon \varphi^2}{\varepsilon(4\alpha + 2\alpha^2 \varphi + 2\varphi + \alpha \varphi^2)} \quad E.35$$

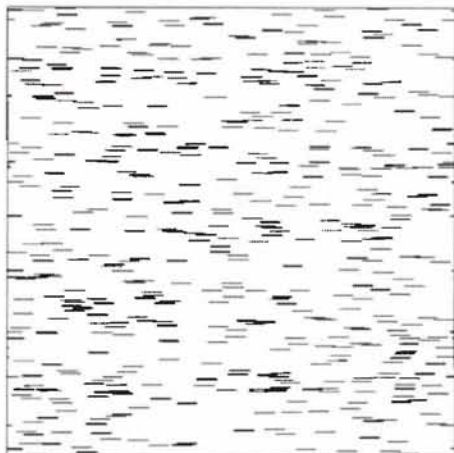
Όπου :

$$\tau = \sin(\varepsilon) \cos(\varepsilon) \quad E.36$$

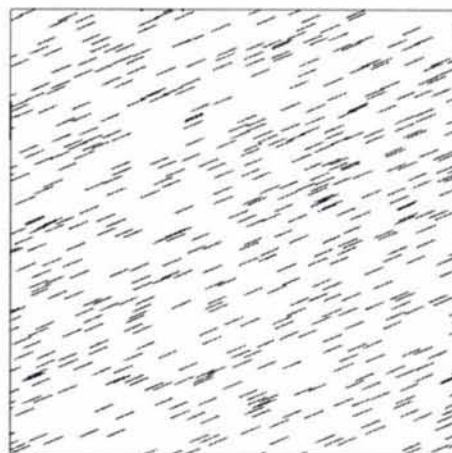


Παρακάτω παρουσιάζεται μια τυπική περίπτωση όπου  $\alpha=100$  και  $\alpha\phi=1$ . Παρουσιάζονται αναλυτικά οι ιδιότητες της γεωμετρίας καθώς και τα στοιχεία της επίλυσης και του πλέγματος. Οι υπόλοιπες περιπτώσεις ( $\alpha\phi=0.01$ ,  $\alpha\phi=0.1$  και  $\alpha\phi=10$ ) παρουσιάζονται περιληπτικά στο παράρτημα.

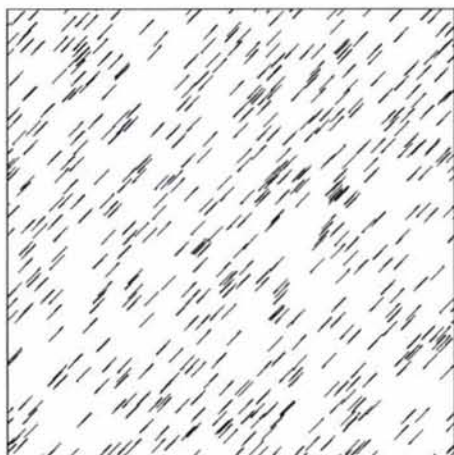
### 11.2 Τυπική περίπτωση, $\alpha=100$ , $\alpha\phi=1$ , $0 < \vartheta < \pi/2$ , $\varepsilon=0$



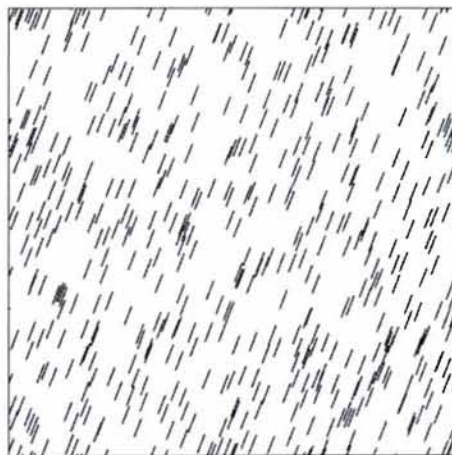
Σχ. 42 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=0$



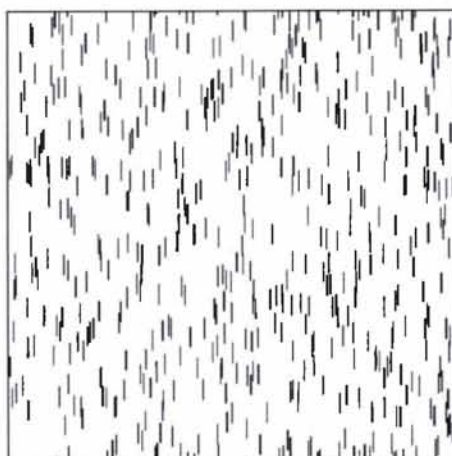
Σχ. 43 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0.4$ ,  $\varepsilon=0$



Σχ. 44 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0.8$ ,  $\varepsilon=0.0$

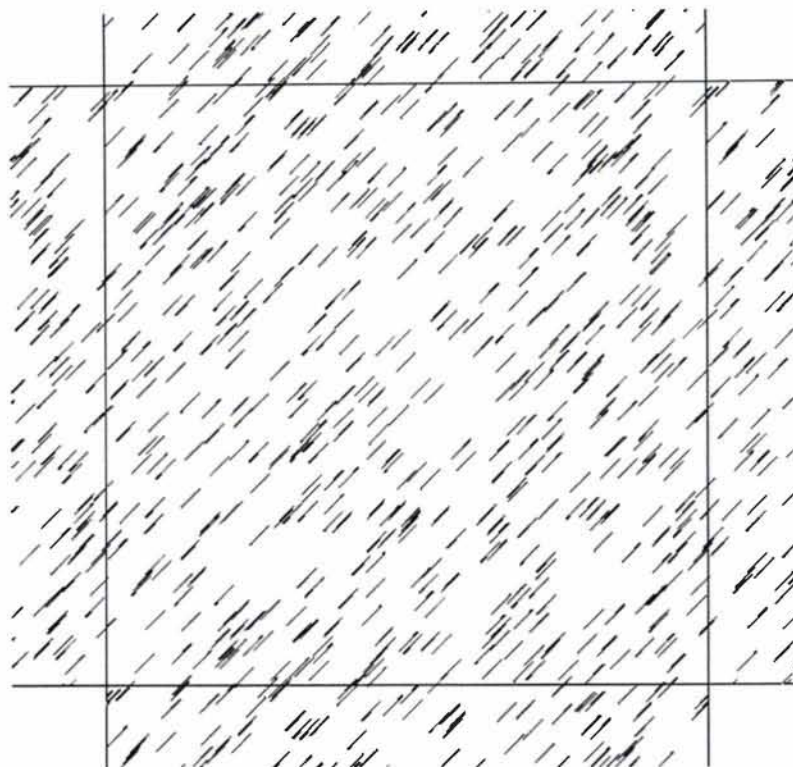


Σχ. 45 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=1.2$ ,  $\varepsilon=0$

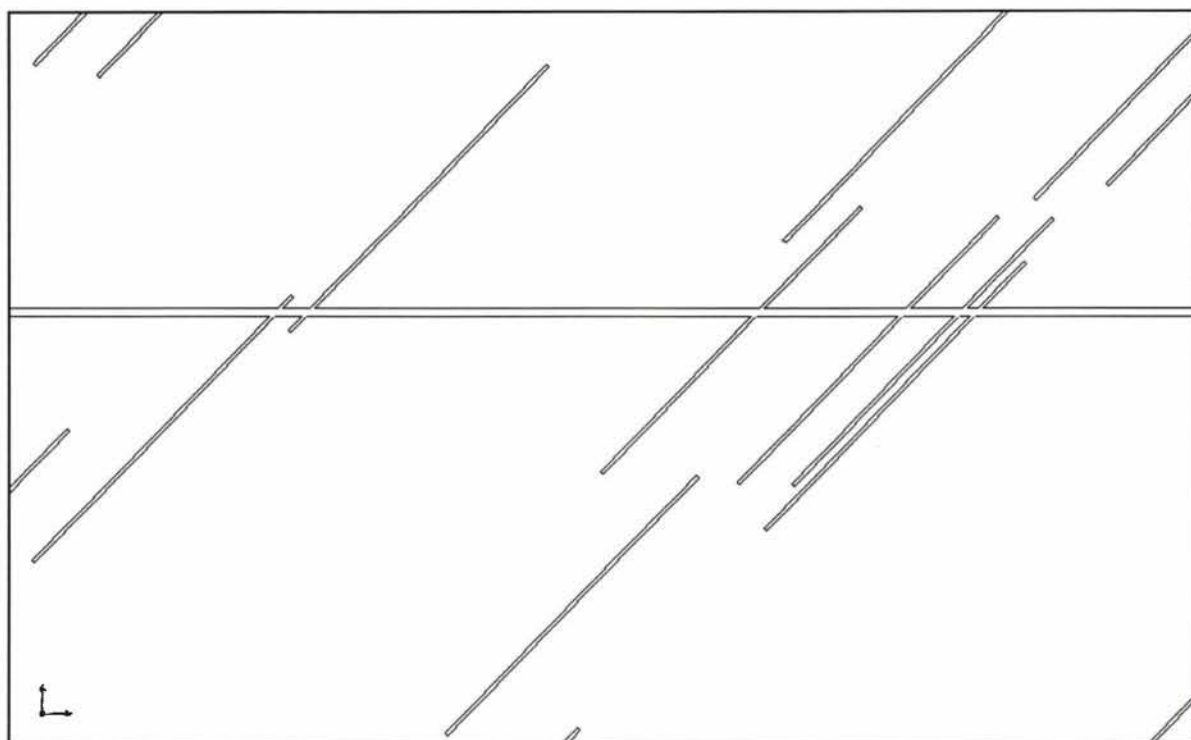


Σχ. 46 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=\pi/2$ ,  $\varepsilon=0$

Βλέπουμε λεπτομέρειες της διτλής περιοδικής γεωμετρίας του πλέγματος:

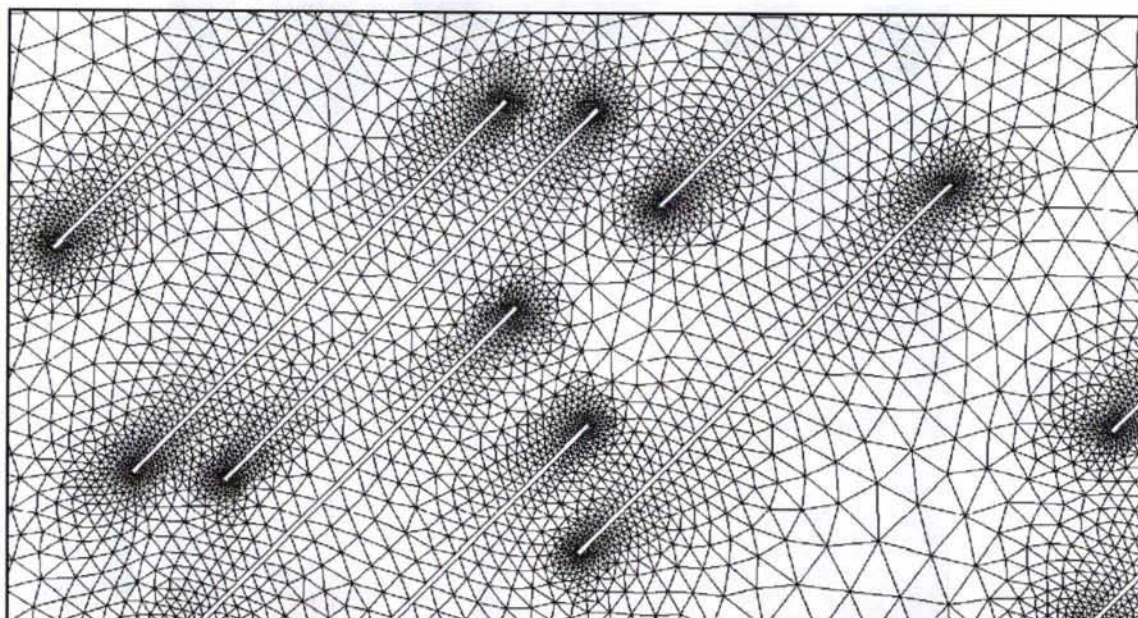


Σχ. 47 - Γενική άποψη διτλής περιοδικής γεωμετρίας πλέγματος,  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0.8$ ,  $\epsilon=0$

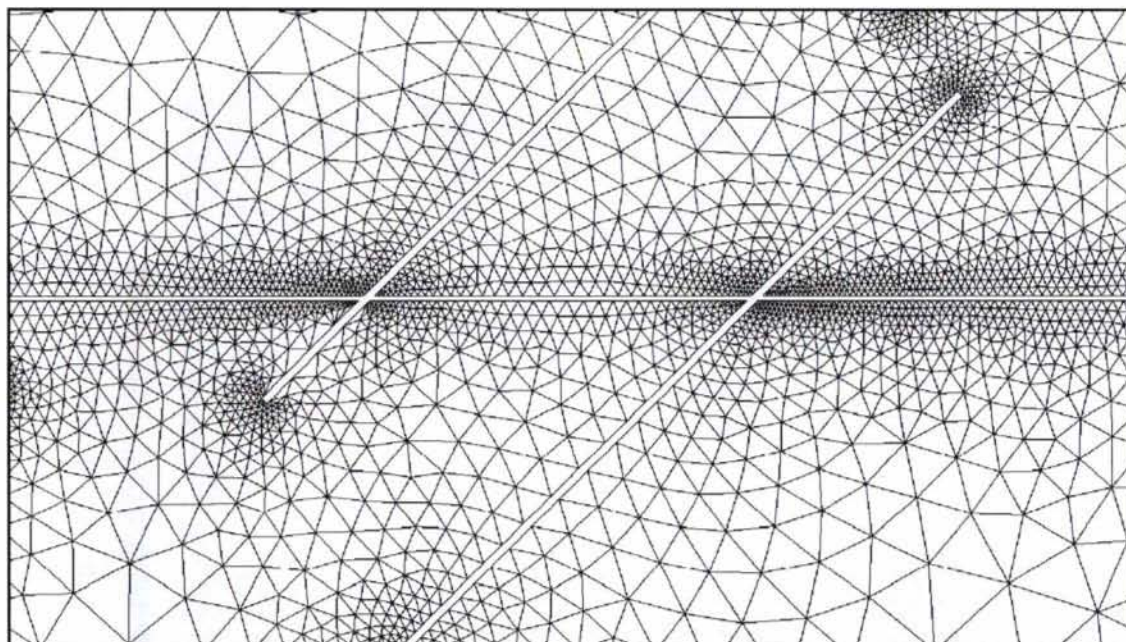


Σχ. 48 – Λεπτομέρεια περιοδικότητας πλέγματος και γεωμετρίας φυλλιδίων,  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0.8$ ,  $\epsilon=0$



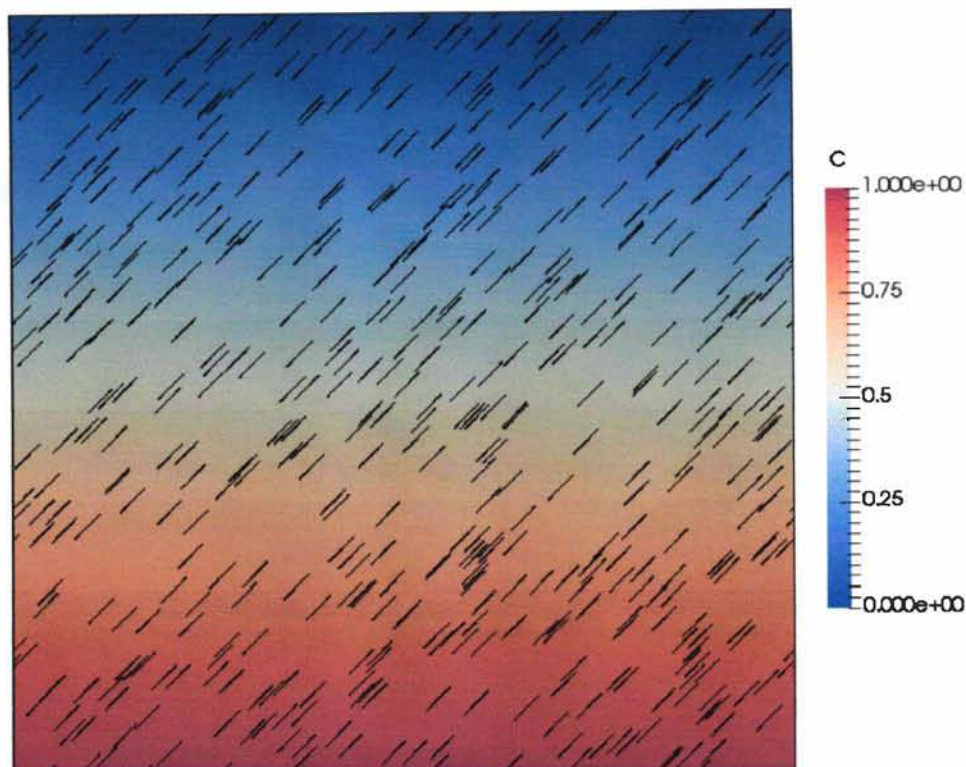


Σχ. 49 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος,  $\alpha=100$ ,  $\alpha\varphi=1$ ,  $\vartheta=0.8$ ,  $\varepsilon=0$

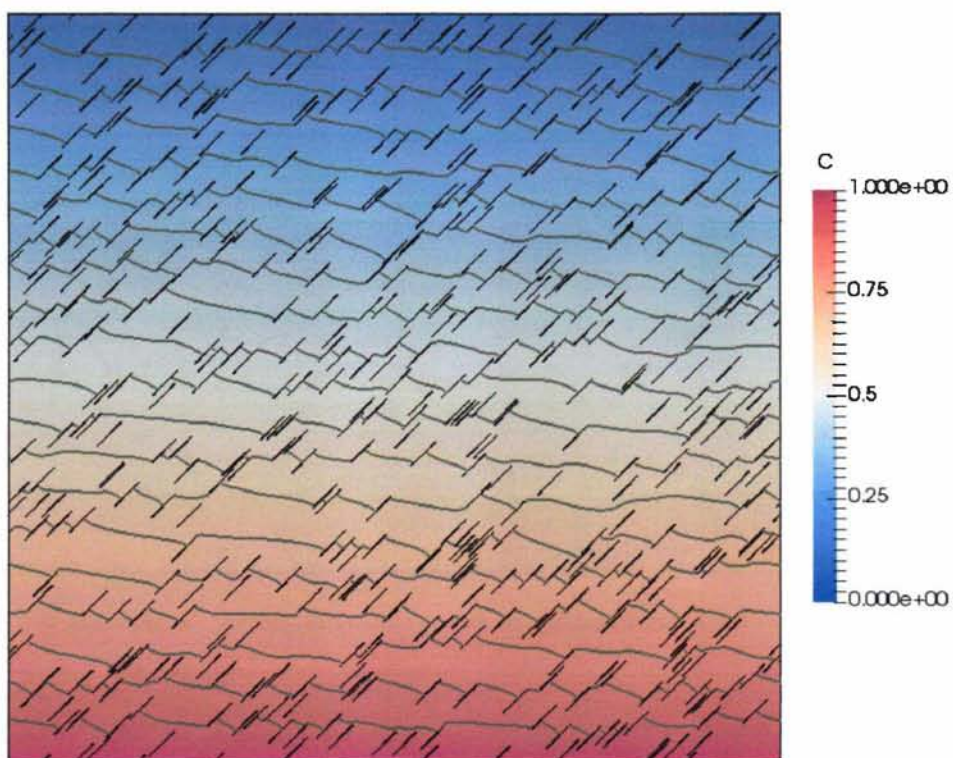


Σχ. 50 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος περιοδικής γεωμετρίας,  $\alpha=100$ ,  $\alpha\varphi=1$ ,  $\vartheta=0.8$ ,  $\varepsilon=0$





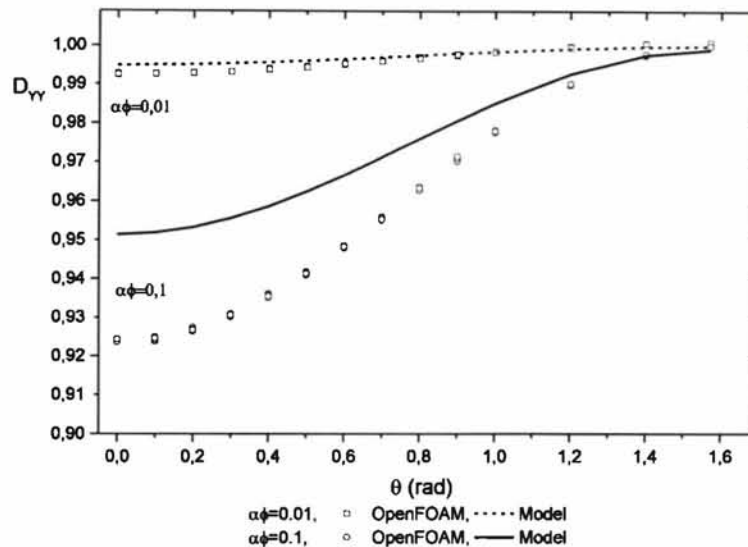
Σχ. 51 – Τυπικό διάγραμμα συγκεντρώσεων για  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0.8$ ,  $\epsilon=0.0$



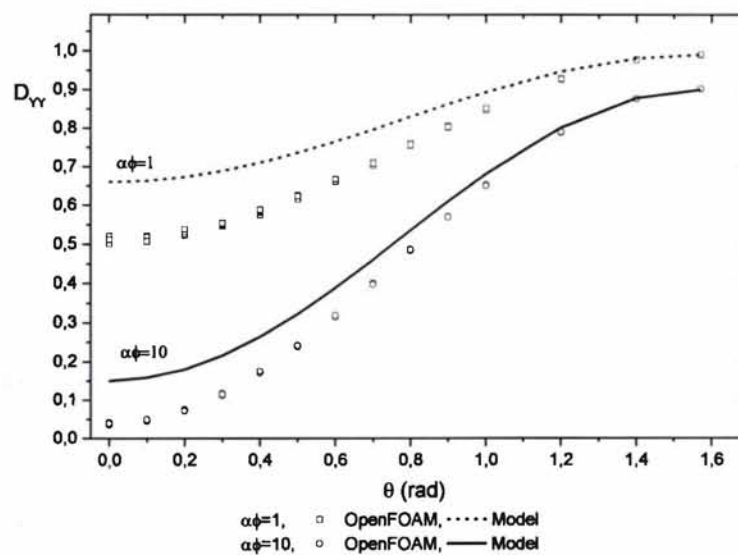
Σχ. 52 – Τυπικό διάγραμμα ισοψών συγκέντρωσης (20 ισοψείς ανά 0.05), για  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0.8$ ,  $\epsilon=0.0$

### 11.3 Συγκεντρωτικά αποτελέσματα $D_{YY}$ ως προς τη γωνία προσανατολισμού $\theta$

Στην περίπτωση αυτή, η διαχυτότητα  $D_{xx}$  και  $D_{yy}$  ενός συστήματος φυλλιδίων τα οποία παρουσιάζουν απόκλιση ( $\theta$ ) ως προς τις κύριες κατευθύνσεις 11 και 22 δίνονται από την εξίσωση E.16. Στα παρακάτω διαγράμματα συγκρίνονται τα υπολογιστικά αποτελέσματα με τα αποτελέσματα της E.16, όπου  $D_{11}$  και  $D_{22}$  υπολογίζονται από το μοντέλο του Nielsen.



Σχ. 53 – Σύγκριση  $D_{YY}$  αναλυτικού και υπολογιστικού μοντέλου για  $\alpha\phi=0.01$  και  $\alpha\phi=0.1$  για μεταβαλλόμενη γωνία  $\theta$  και σταθερό  $\epsilon=0$



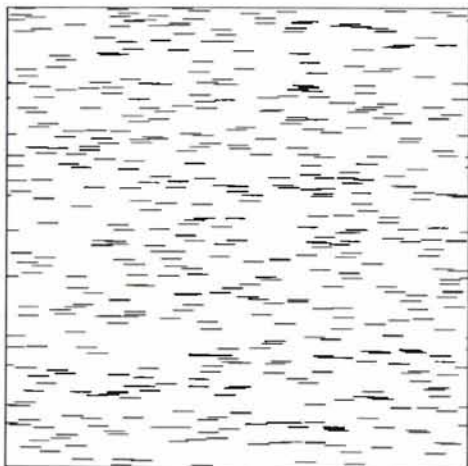
Σχ. 54 – Σύγκριση  $D_{YY}$  αναλυτικού και υπολογιστικού μοντέλου για  $\alpha\phi=1$  και  $\alpha\phi=10$  για μεταβαλλόμενη γωνία  $\theta$  και σταθερό  $\epsilon=0$

Παρατηρούμε την πολύ καλή συμφωνία των αποτελεσμάτων συνολικά για  $\alpha\phi=0.01$ . Επίσης υπάρχει καλή συμφωνία για  $\alpha\phi=0.1$  ειδικά στα μεγάλα  $\theta$ . Για μεγαλύτερες τιμές του  $\alpha\phi$  τα αποτελέσματα παρουσιάζουν πολύ καλή συμφωνία όσο μεγαλώνει το  $\theta$  ενώ σε μικρότερες τιμές του  $\theta$  υπάρχει απόκλιση. Θυμίζουμε ότι  $\pi/2$  αντιστοιχεί στα φυλλίδια τέλεια προσανατολισμένα στην κατεύθυνση της διάχυσης (Σχ. 46), ενώ  $\theta=0$  αντιστοιχεί σε φυλλίδια προσανατολισμένα κάθετα σε αυτήν (Σχ. 42).

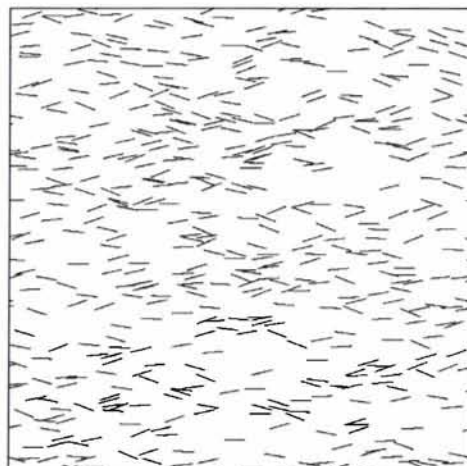


Στην συνέχεια εξετάζουμε το κατά πόσον η τυχόν απόκλιση του προσανατολισμού των φυλλιδίων, (γωνία ( $\epsilon$ ) η οποία παίρνει μία τυχαία τιμή, διαφορετική για κάθε φυλλίδιο μεταξύ 0 και  $\pi/2$ ), γύρω από μία μέση γωνία προσανατολισμού (γωνία  $\vartheta=0$ ) επηρεάζει τον συντελεστή διάχυσης. Παρακάτω παρουσιάζονται λεπτομέρειες μιας τυπικής περίπτωσης όπου  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$  και το  $\epsilon$  μεταβάλλεται από 0 έως  $\pi/2$ . Οι υπόλοιπες περιπτώσεις παρουσιάζονται στο παράρτημα. Επίσης παρουσιάζονται τα συγκεντρωτικά διαγράμματα και γίνεται ανάλυση των αποτελεσμάτων.

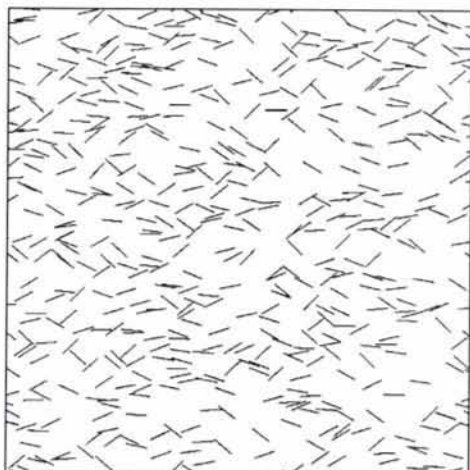
#### 11.4 Τυπική περίπτωση $\alpha=1000$ , $\alpha\phi=1$ , $\vartheta=0$ , $0<\epsilon<\pi/2$



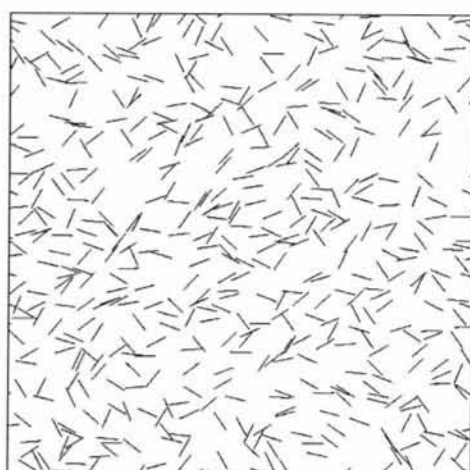
Σχ. 55 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0$



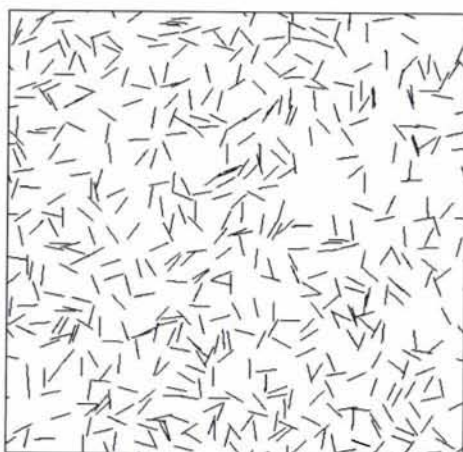
Σχ. 56 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0.4$



Σχ. 57 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0.8$

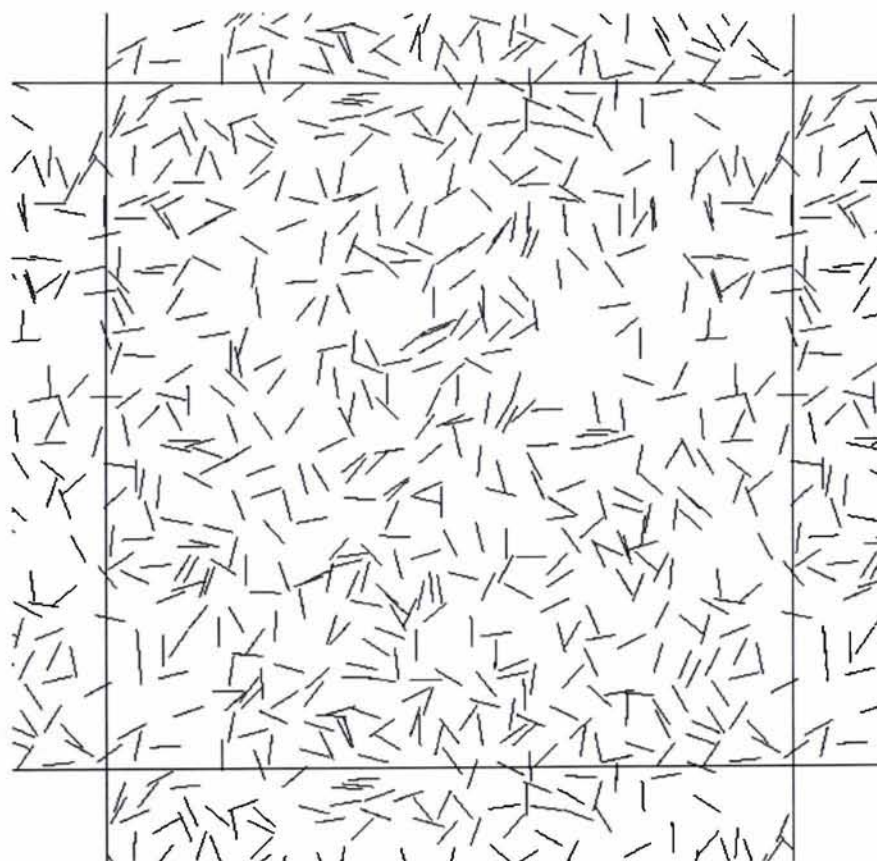


Σχ. 58 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=1.2$

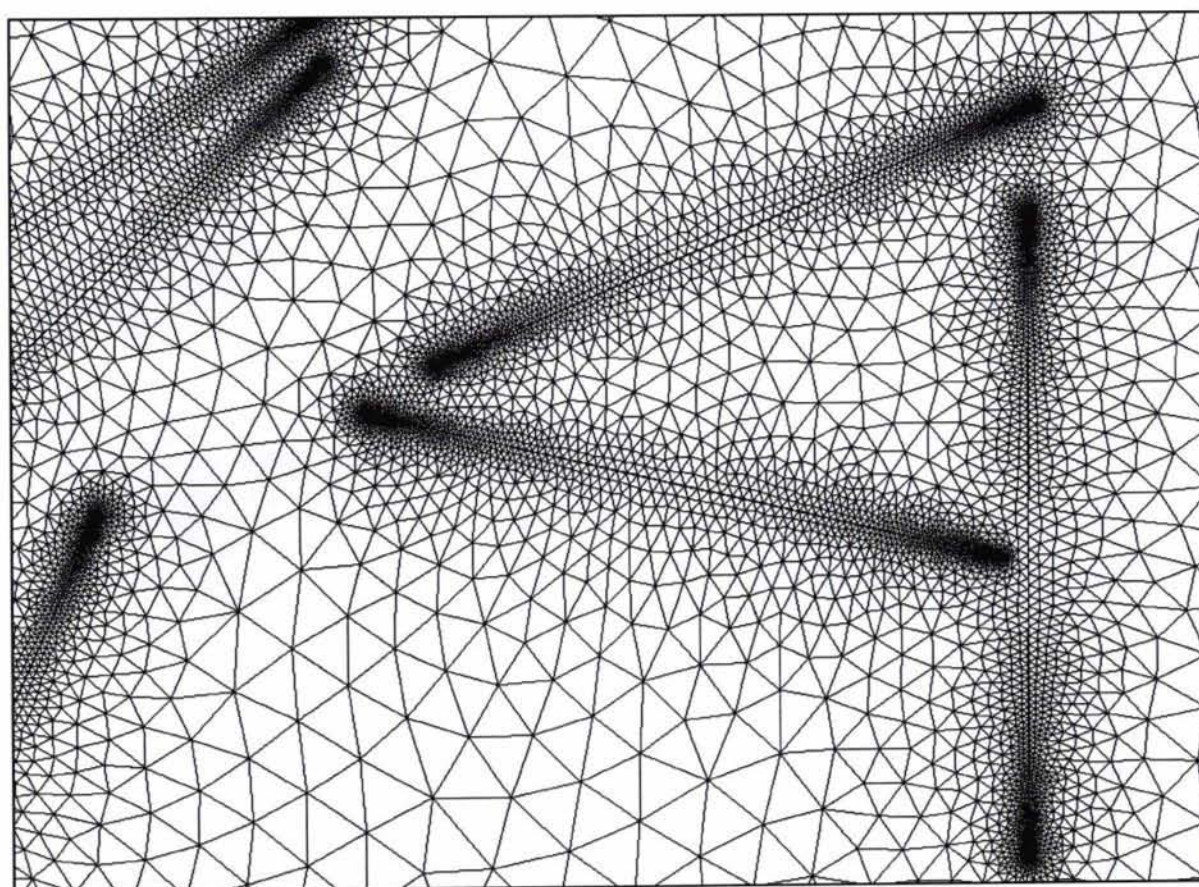


Σχ. 59 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



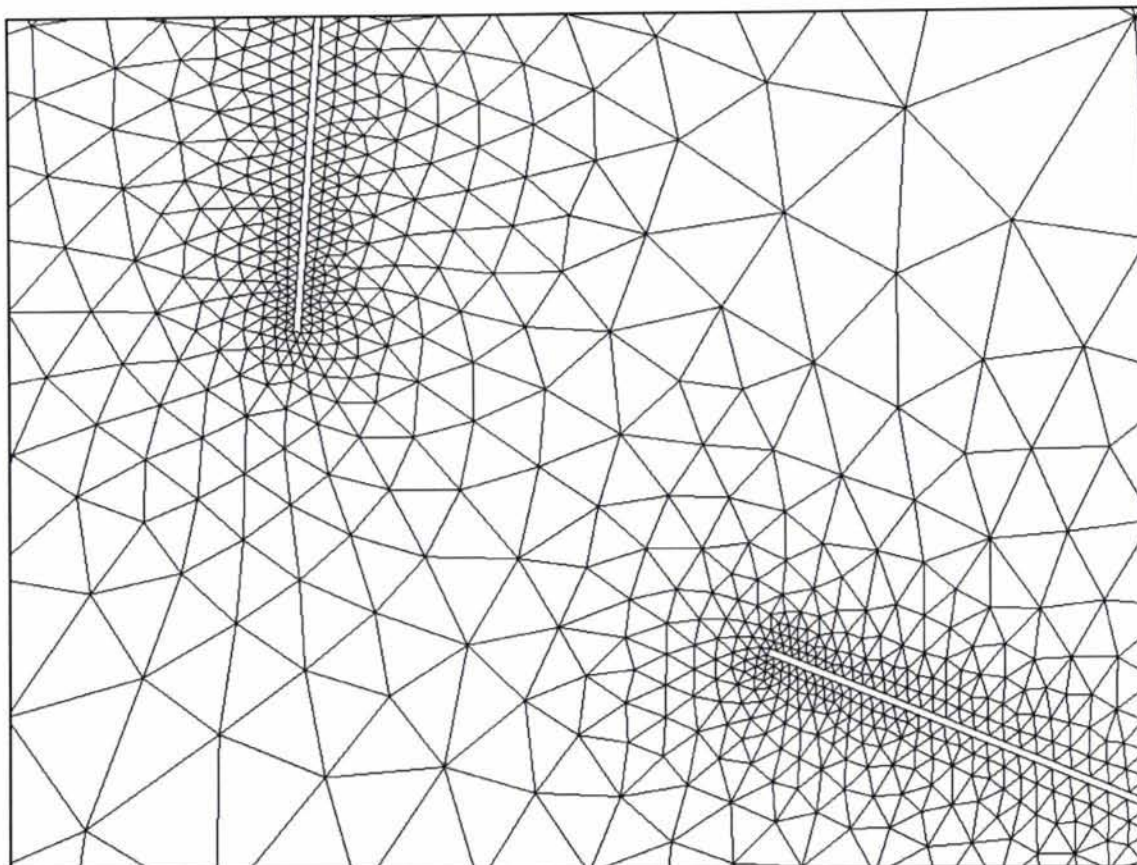


Σχ. 60 - Γενική άποψη διτλής περιοδικής γεωμετρίας πλέγματος,  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\varphi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=\pi/2$

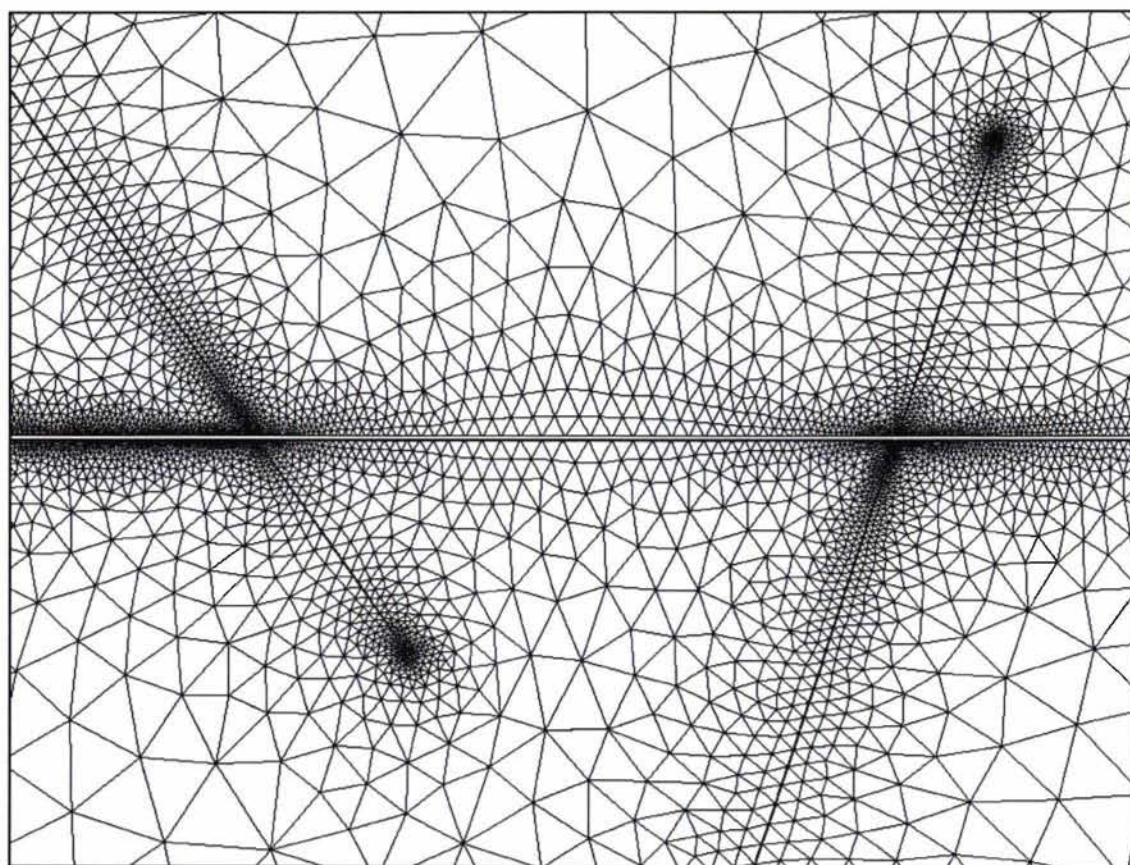


Σχ. 61 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος,  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\varphi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=\pi/2$



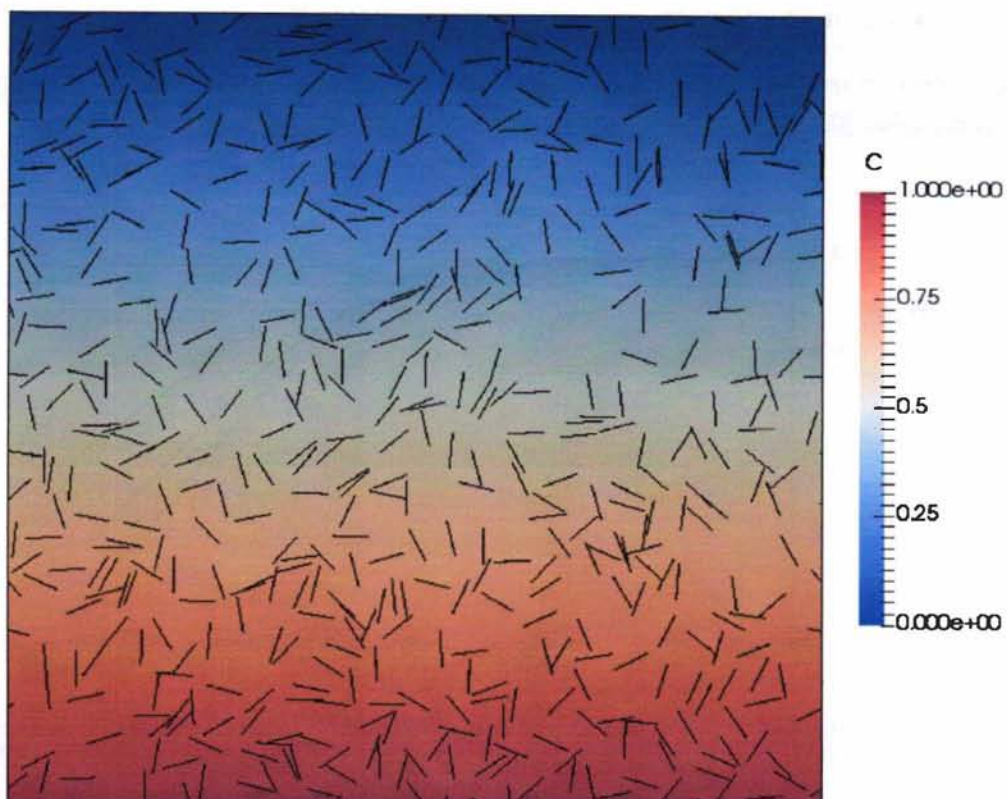


Σχ. 62 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος,  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\varphi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=\pi/2$

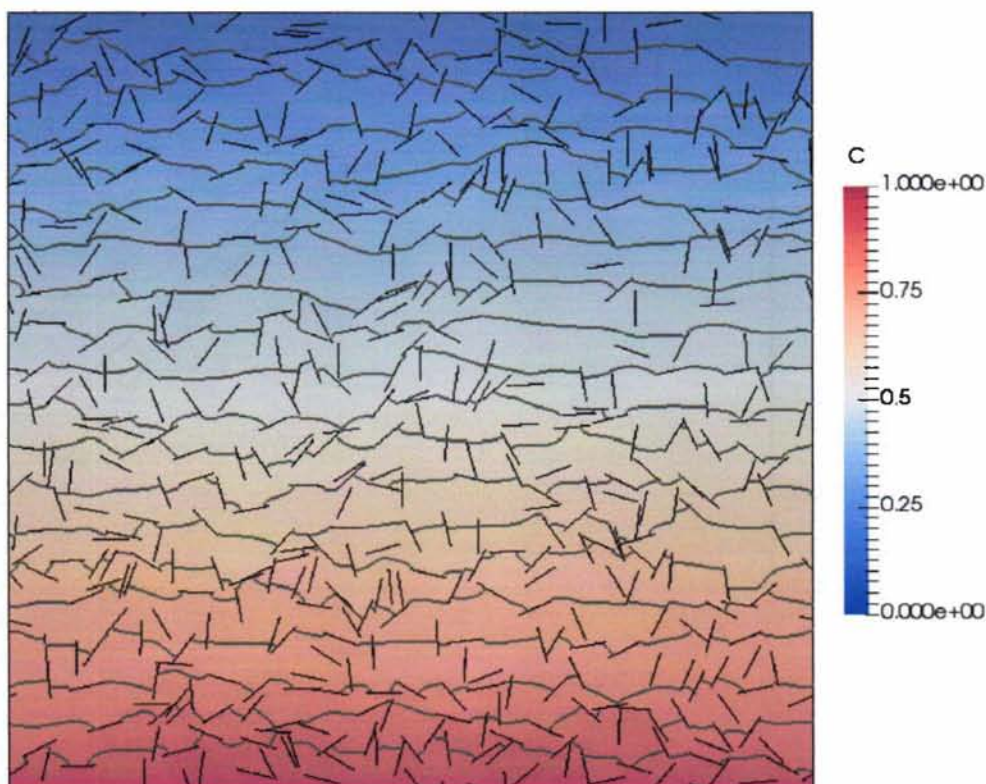


Σχ. 63 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος περιοδικής γεωμετρίας,  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\varphi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=\pi/2$





Σχ. 64 – Τυπικό διάγραμμα συγκεντρώσεων για  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\varphi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=\pi/2$

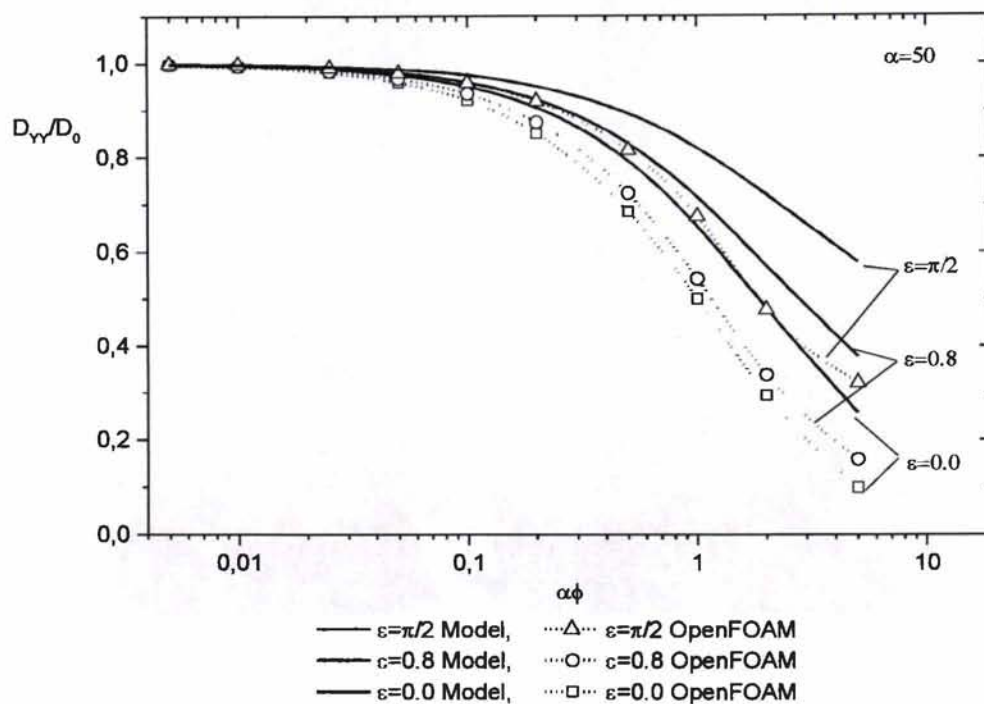


Σχ. 65 – Τυπικό διάγραμμα ισοψών συγκέντρωσης (20 ισοψείς ανά 0.05), για  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\varphi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=\pi/2$

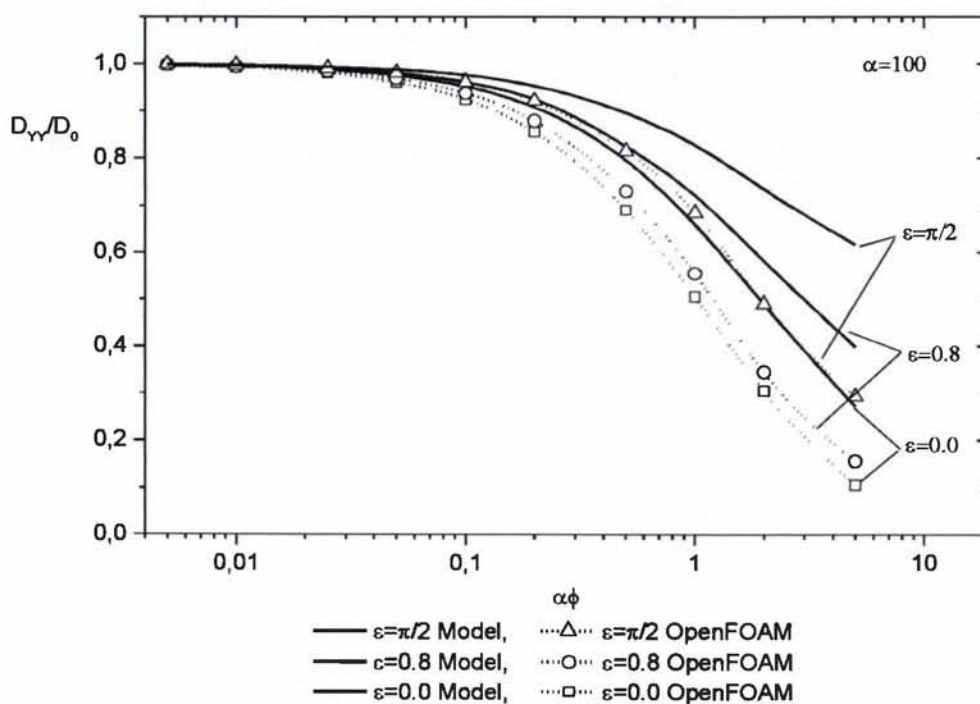


### 11.5 Συγκεντρωτικά αποτελέσματα DYY για $\theta=0$ και $0<\varepsilon<\pi/2$

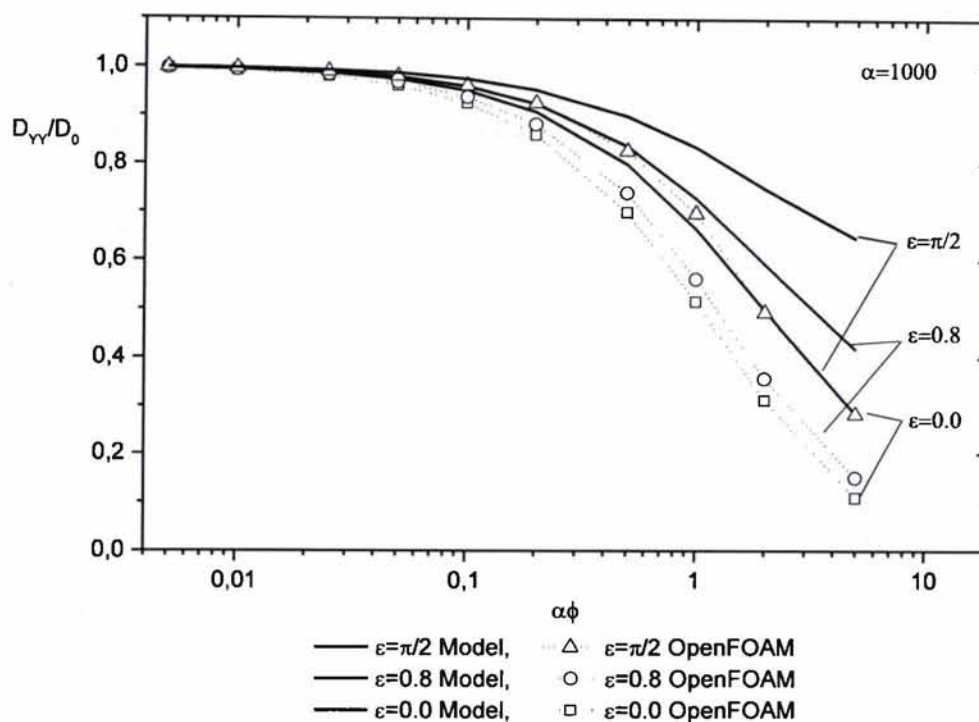
Παρακάτω παρατίθενται τα συγκεντρωτικά αποτελέσματα για όλες τις περιπτώσεις και συγκεκριμένα βλέπουμε πως μεταβάλλονται οι τιμές του  $D_{YY}/D_0$  σε σχέση με το  $\alpha\phi$  :



Σχ. 66 –Διάγραμμα μεταβολής  $D_{YY}/D_0$  για  $\alpha=50$  και μεταβαλλόμενο  $\alpha\phi$  και  $\varepsilon$

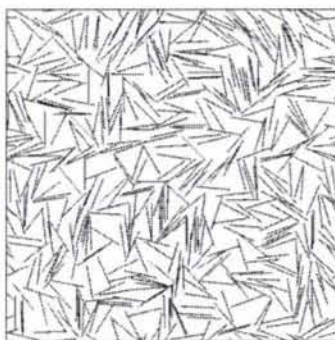


Σχ. 67 –Διάγραμμα μεταβολής  $D_{YY}/D_0$  για  $\alpha=100$  και μεταβαλλόμενο  $\alpha\phi$  και  $\varepsilon$

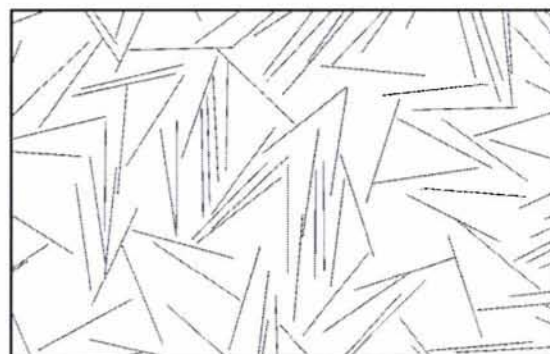


Σχ. 68 –Διάγραμμα μεταβολής  $D_{YY}/D_0$  για  $\alpha=1000$  και μεταβαλλόμενο  $\alpha\phi$  και  $\varepsilon$

Παρατηρούμε την πολύ καλή συμφωνία του μοντέλου με τα δεδομένα των προσομοιώσεων και για τα τρία  $\alpha$  για  $\alpha\phi < 0.05$  καθώς επίσης και την αρκετά καλή συμφωνία στην περιοχή  $\alpha\phi = 0.1$ . Για  $\alpha\phi > 0.5$  τα υπολογιστικά δεδομένα αρχίζουν να αποκλίνουν από την αναλυτική λύση και στην περιοχή των πυκνών διαλυμάτων ( $\alpha\phi > 1$ ) η απόκλιση έχει μεγαλώσει σημαντικά. Και στα τρία διαγράμματα παρατηρούμε μια μικρή ανύψωση της καμπύλης των υπολογιστικών αποτελεσμάτων για  $\alpha\phi > 1$ . Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι αρχίζει και γίνεται μεγάλο το ποσοστό πλήρωσης και ο αλγόριθμος που κατασκευάζει τη γεωμετρία αδυνατεί να συμπληρώσει το πλέγμα με τον απαραίτητο αριθμό φυλλιδίων λόγω του ότι δεν είναι δυνατή η τοποθέτηση για γεωμετρικούς λόγους. Σε αυτή τη περίπτωση τα φυλλίδια συσσωρεύονται σε περιοχές σχηματίζοντας νηματοειδείς σχηματισμούς οι οποίοι δημιουργούν αποκλίσεις από την παραδοχή ότι η τοποθέτηση των φυλλιδίων είναι τυχαία. Στο παρακάτω σχήμα βλέπουμε ένα πλέγμα στο οποίο έχουμε σχηματισμό τέτοιων δομών:

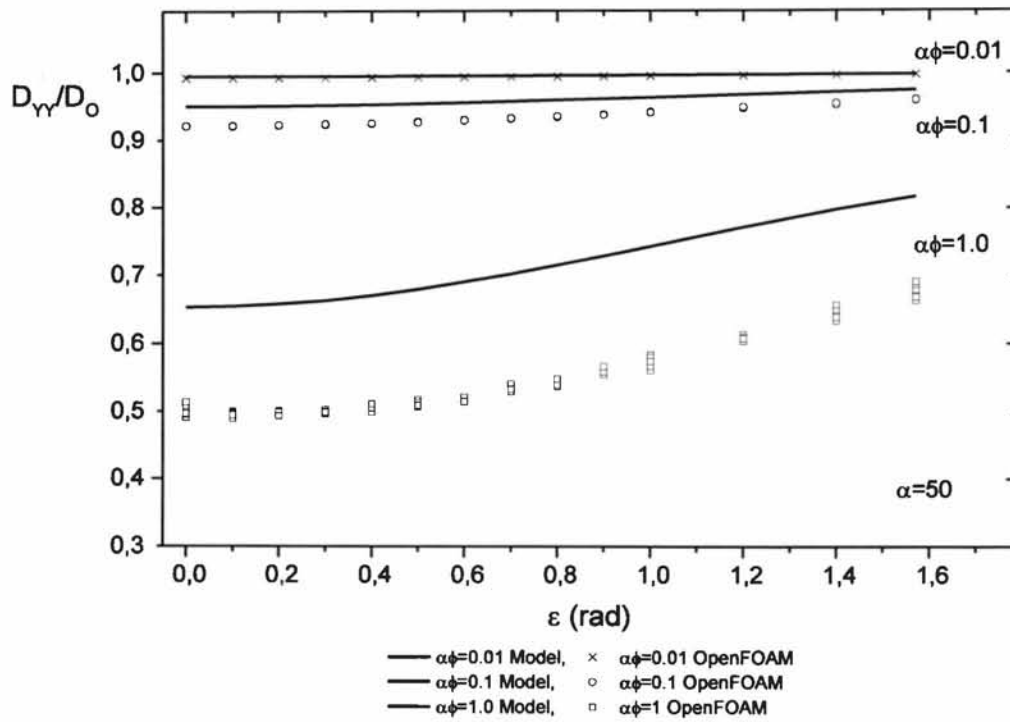


Σχ. 69 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=5$ ,  $\theta=0$ ,  $\varepsilon=\pi/2$

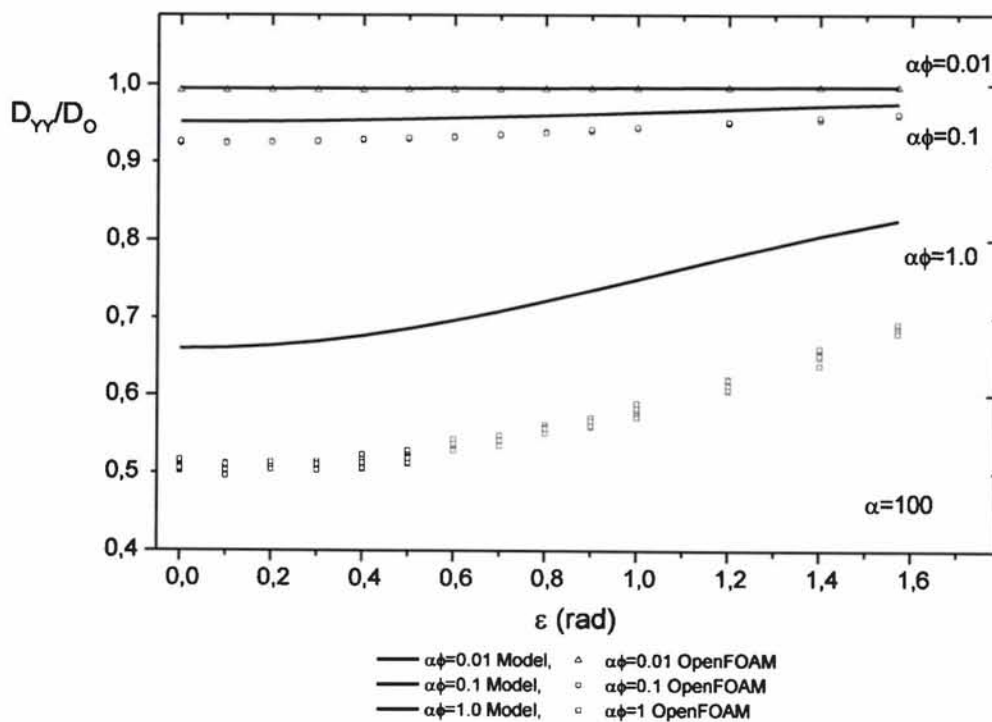


Σχ. 70 –Λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=10$ ,  $\theta=0$ ,  $\varepsilon=\pi/2$

Παρακάτω βλέπουμε τις μεταβολές των τιμών  $D_{yy}/D_0$  για μεταβαλλόμενο  $\alpha\phi$  και  $\epsilon$  και για  $\alpha=50$ ,  $\alpha=100$  και  $\alpha=1000$ .

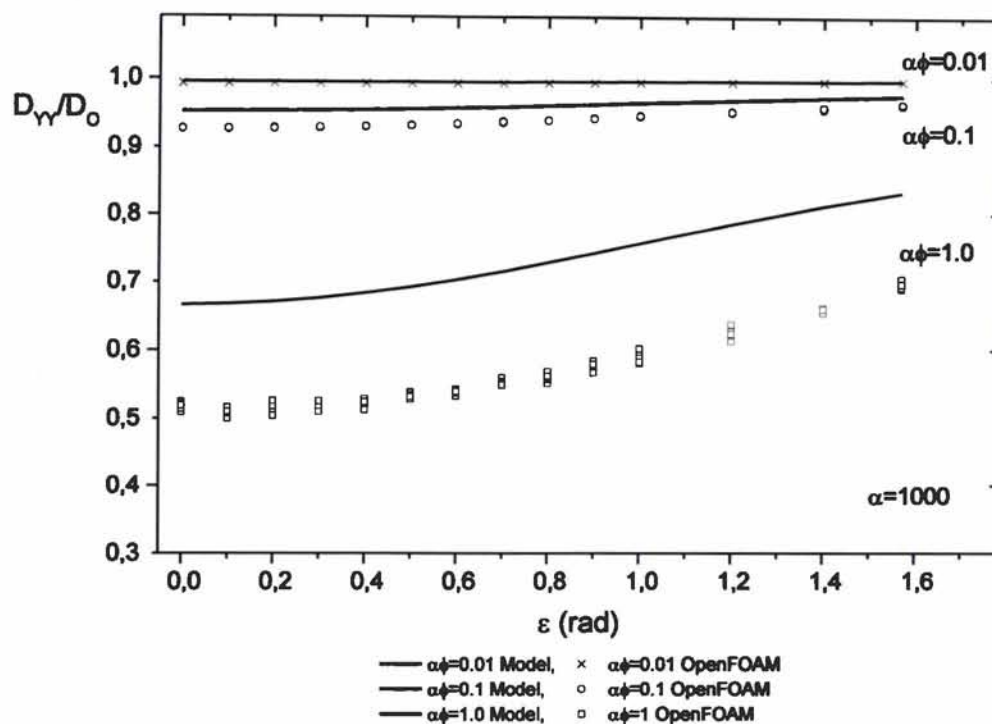


Σχ. 71 –Διάγραμμα μεταβολής  $D_{yy}/D_0$  για μεταβαλλόμενο  $\alpha\phi$  και  $\epsilon$  και για  $\alpha=50$



Σχ. 72 –Διάγραμμα μεταβολής  $D_{yy}/D_0$  για μεταβαλλόμενο  $\alpha\phi$  και  $\epsilon$  και για  $\alpha=100$

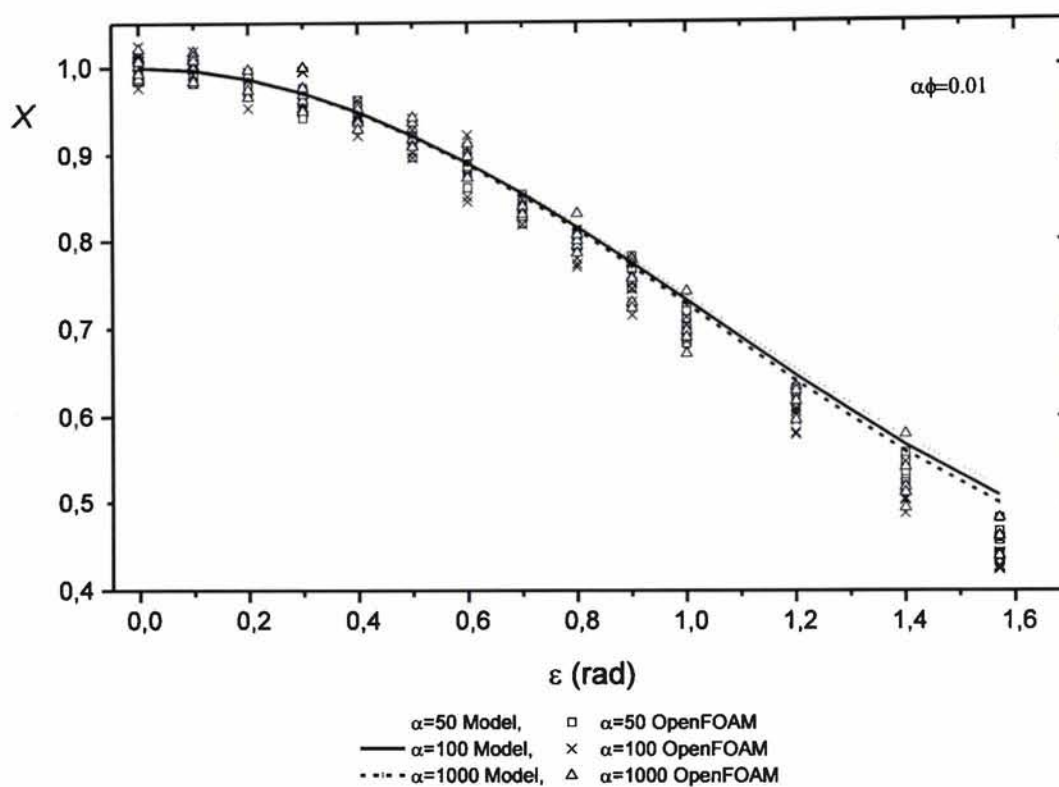




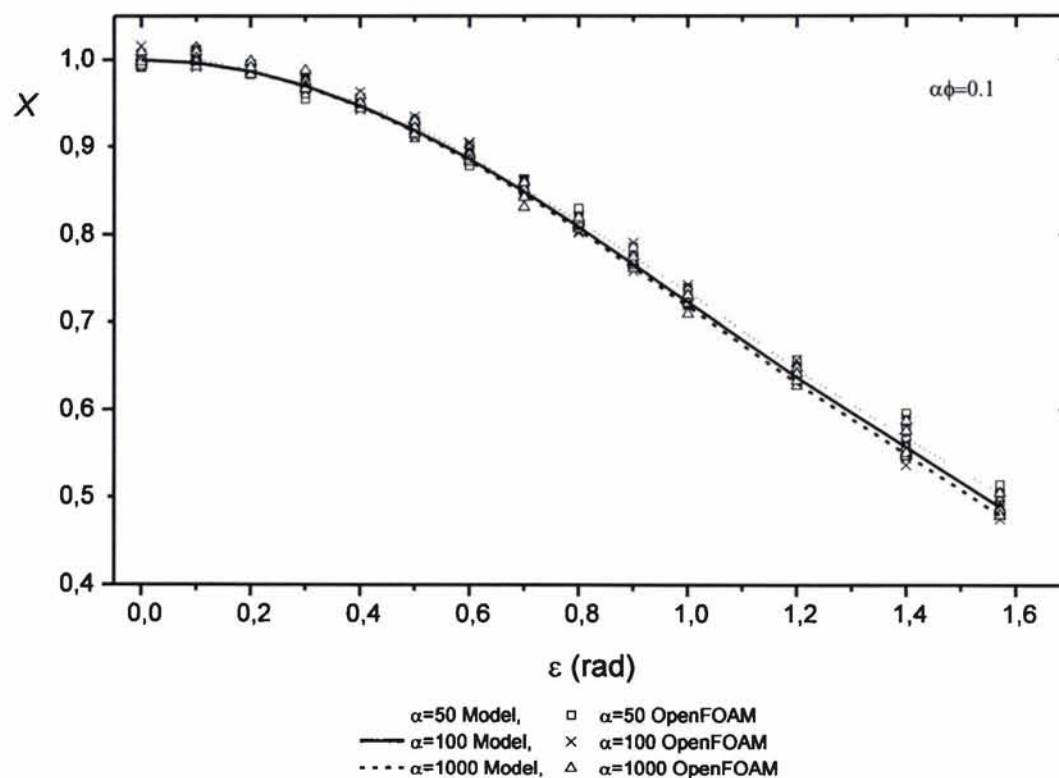
Σχ. 73 –Διάγραμμα μεταβολής  $D_{\gamma\gamma}/D_0$  σε σχέση με το  $\alpha\phi$  και το  $\varepsilon$  για  $\alpha=1000$

Ομοίως και με τα προηγούμενα διαγράμματα παρατηρούμε την πολύ καλή ταύτιση των αποτελεσμάτων για  $\alpha\phi=0.01$  την αρκετά καλή ταύτιση για  $\alpha\phi=0.1$  και την απόκλιση στη περιοχή  $\alpha\phi>0.1$ .

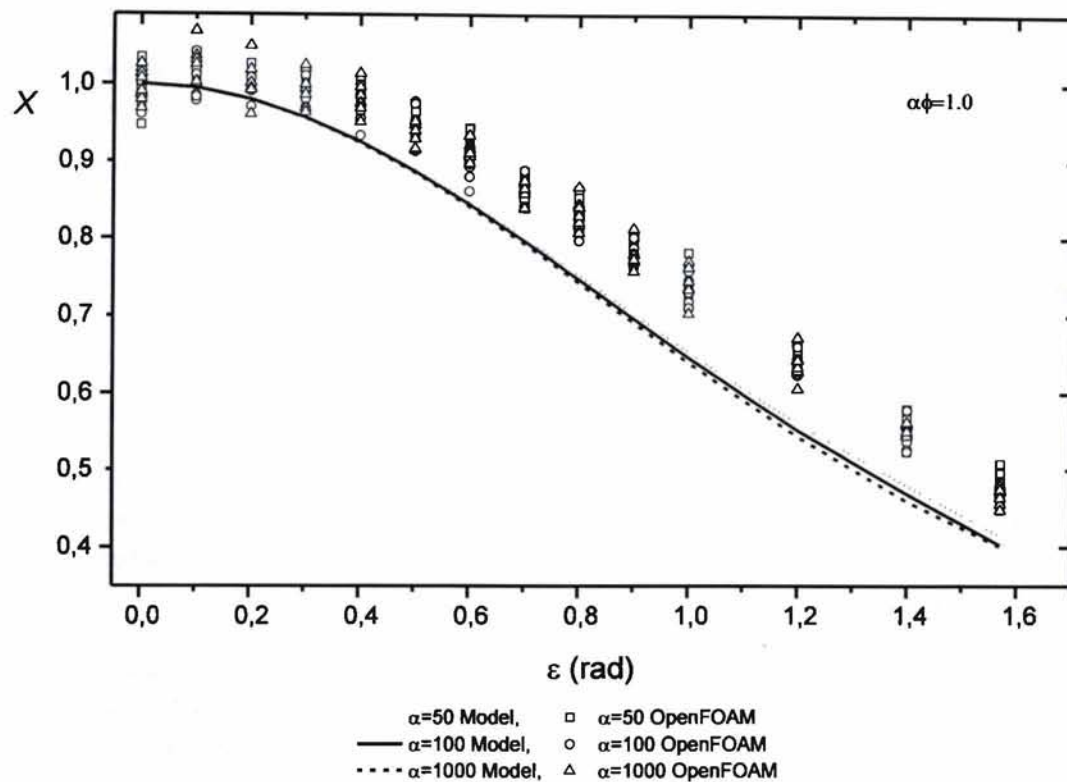
Παρακάτω βλέπουμε τις μεταβολές των τιμών της μεταβλητής  $X$  σε σχέση με το  $\varepsilon$  και το  $\alpha\phi$ .



Σχ. 74 –Διάγραμμα μεταβολής  $X$  σε σχέση με το  $\alpha$  και το  $\varepsilon$  για  $\alpha\phi=0.01$



Σχ. 75 –Διάγραμμα μεταβολής  $X$  σε σχέση με το  $\alpha$  και το  $\varepsilon$  για  $\alpha\phi=0.1$



Σχ. 76 –Διάγραμμα μεταβολής  $X$  σε σχέση με το  $\alpha$  και το  $\varepsilon$  για  $\alpha\phi=1.0$

Παρατηρούμε την πολύ καλή συμφωνία του μοντέλου με τα υπολογιστικά δεδομένα για μικρά  $\varepsilon$  στα  $\alpha\phi=0.01$ . Στο  $\alpha\phi=0.1$  η συμφωνία με τα υπολογιστικά δεδομένα είναι πολύ καλή στο σύνολο των  $\varepsilon$ . Στη περιοχή  $\alpha\phi=1$  το μοντέλο αποκλίνει από τα υπολογιστικά δεδομένα γεγονός που οφείλεται και στο γεγονός ότι η βασική παραδοχή ότι τα φυλλίδια δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους αρχίζει να μην ισχύει αφού πλέον έχουμε πυκνά διαλύματα με αλληλεπιδράσεις μεταξύ των φυλλιδίων οι οποίες τα οδηγούν σε συντεταγμένες μη τυχαίες διατάξεις.



Δημιουργήθηκε ένα αναλυτικό μοντέλο που περιγράφει την μεταβολή των ιδιοτήτων πολυμερικών μεμβρανών σε σχέση με το ποσοστό πλήρωσης των μεμβρανών καθώς επίσης και του λόγου μήκους/πλάτους των φυλλιδίων. Χρησιμοποιήθηκε ο κώδικας OpenFOAM προκειμένου να συγκριθεί η αναλυτική λύση με υπολογιστικά μοντέλα. Μελετήθηκε η χρήση του OpenFOAM για την επίλυση τέτοιων υπολογιστικών προβλημάτων και στη συνέχεια μελετήθηκε μια ευρεία περιοχή του  $\alpha\phi$  καθώς επίσης και του λόγου μήκους/πλάτους ( $\alpha$ ) των φυλλιδίων.

Για την αραιή περιοχή ( $\alpha\phi=0.01$ ) τα αποτελέσματα του μοντέλου βρίσκονται σε πλήρη συμφωνία με τα υπολογιστικά αποτελέσματα καθώς επίσης και με αντίστοιχα αποτελέσματα της βιβλιογραφίας. Στην ημιαραιή ( $\alpha\phi=0.1$ ) περιοχή τα αποτελέσματα του μοντέλου βρίσκονται σε καλή συμφωνία σε σχέση με τα υπολογιστικά αποτελέσματα. Συγκεκριμένα οι διαφορές των τιμών είναι μικρότερες από 10% στο σύνολο των αποτελεσμάτων. Στην πυκνή περιοχή ( $\alpha\phi \geq 1$ ) το μοντέλο αποκλίνει από τα αποτελέσματα λόγω της μη τήρησης των βασικών παραδοχών με τις οποίες υπολογίστηκε το αναλυτικό μοντέλο.

Τα αποτελέσματα μας μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την πρόβλεψη ιδιοτήτων πολυμερικών μεμβρανών στην αραιή και ημιαραιή περιοχή οι οποίες έχουν φυλλίδια που βρίσκονται σε ένα μέγεθος της τάξης του νανόμετρου και που οι περιοχές γύρω τους μπορούν να θεωρηθούν ομογενείς. Σε μικρότερες κλίμακες διάφορες παραμορφώσεις περιμετρικά των φυλλιδίων δημιουργούν αντίστοιχες περιοχές όπου ο τοπικός συντελεστής διάχυσης είναι διαφορετικός από ότι στο κύριο σώμα της μεμβράνης και έτσι θα υπάρχουν περισσότερες αποκλίσεις σε σχέση με την αναλυτική λύση. Αυτό είναι ένα θέμα που χρήζει περαιτέρω περιγραφής και υπολογιστικών ή πειραματικών επαληθεύσεων.

### 13. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. «Barrier Properties of Flake-Filled Membranes: Review and Numerical Evaluation», Xiaoming Chen - Department of Chemical Engineering, University of South Carolina Columbia, SC 29208, USA, T.D. Papathanasiou - Department of Chemical Engineering, University of South Carolina Columbia, SC 29208, USA.
2. Yano K, Usuki A, Okada A. Synthesis and properties of polyimide-clay hybrid films. *Journal of Polymer Science and Polymer Chemistry*. 1997
3. I. W. Hamley, *Introduction to soft Materials*, John Willey and Sons, New York, 2000.
4. W.D. Callister, Jr. *Materials Science and Engineering, An introduction* 5<sup>th</sup> edition, John Willey and Sons, New York, 1999.
5. Σημειώσεις μαθήματος «Ρεολογία και μορφοποίηση πολυμερών υλικών», Dr Παπαθανασίου Αθ., τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, ΠΘ.
6. Μ. Καμπούρη - Κ. Δ. Παπασπυρίδη «Τεχνολογία Πολυμερών (Δομή - Ιδιότητες Πολυμερών)», ΕΜΠ, Αθήνα 1999.
7. Κ. Παναγιώτου, Θεσσαλονίκη 2000, Επιστήμη και Τεχνολογία Πολυμερών.
8. Potschke, P. Fornes, T. D. Paul, D. R. Rheological behaviour of multiwall carbon nanotube / polycarbonate composites, *Polymer* 43 (2002).
9. L. E. Nielsen, R. F. Lander, *Mechanical properties of polymers and composites*, 2nd edition, Marcell Dekkerv, 1994.
10. Γ. Παπανικολάου, Μουζάκης, Σύνθετα υλικά, εκδόσεις Κλειδάριθμος, 2007.
11. Matthews, L. και Rawlings, R.D. *Composite Materials - Engineering and Science*.
12. *Polymer Nanocomposites as Dielectrics and Electrical Insulation-perspectives for Processing Technologies, Material Characterization and Future Applications*. Tankara, T., Montanari, G.C. και Mulhaupt, R. *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, vol. 11, No. 5. Antonio Luque, Steven Hegedus, *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering*.
13. Koshio, A., Yudasaka, M. Zhang, M. Iijima S, A Simple Way to Chemically React Single-Wall Carbon Nanotubes with Organic Materials Using Ultrasonication *Nano Lett.* 2001.
14. Shaffer, M. S. P.; Windle, A. H. Fabrication and characterization of carbon nanotube/poly(vinyl alcohol) composites *Adv. Mater.* 1999.
15. Alexander Star, Dr., J. Fraser Stoddart, Prof. , David Steuerman, Mike Diehl, Akram Boukai, Eric W. Wong, Dr., Xin Yang, Dr., Sung-Wook Chung, Hyeon Choi, Dr., James R. Heath, Prof. Preparation and Properties of Polymer-Wrapped Single-Walled Carbon Nanotubes Department of Chemistry and Biochemistry University of California, Los Angeles 405 Hilgard Avenue, Los Angeles, CA, *Angew and Chemie International Edition*
16. Λ.Νάκης, Τ. Τσούφης, Δ. Γουρνής, Α. Λεκάτου και Μ. Α. Καρακασίδης, «Σύνθεση και χαρακτηρισμός νανοσύνθετων υλικών Nylon-6/10 με φυλλόμορφους αργίλους και νανοσωλήνες άνθρακα»
17. Carrette, L., Friedrich, K.A., Stimming, U., "Fuel cells - fundamentals and applications." *Fuel Cells*, 1 (2001) p.p. 5-39
18. Alexandre M, Dubois P. Polymer-layered silicate nanocomposites: preparation, properties and uses of a new class of materials. *Materials Science & Engineering*. 2000
19. Koros, W. J., Ma, Y. H., Simidzu, T. J. *Memb. Sci.* 1996, 120, 149. Παρατίθεται αυτούσιος ο ορισμός: «membrane: structure, having lateral dimensions much greater than its thickness, through which mass transfer may occur under a variety of driving forces».
20. Diffusion of water in swollen poly(vinyl alcohol) membranes studied by molecular dynamics



simulation F. Muller-Plathe, Acta Polymer.

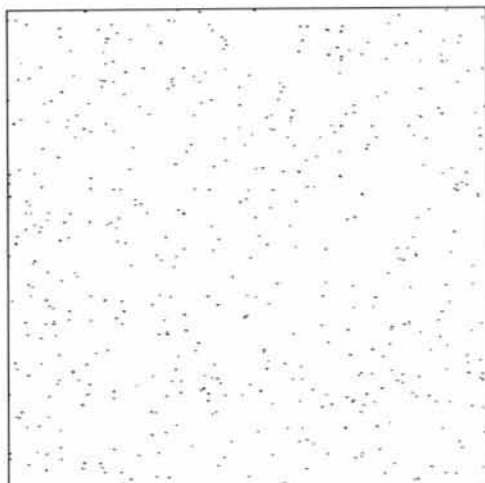
21. OpenFOAM User Guide, <http://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a4/UserGuide.pdf>
22. (α) Bitter, J. G. A. Transport Mechanisms in Membrane Separation Processes, Plenum Press, New York, 1991 (β) Ho, W. S. W., Sirkar, K. K. Eds., Membrane Handbook, van Nostrand Reinhold, New York, 1992. Παρατίθεται αυτούσιος ο ορισμός: «A membrane is a phase or a group of phases that lies between two different phases, which is physically and/or chemically distinctive from both of them and which, due to its properties and the force field applied, is able to control the mass transport between these phases».
23. Σημειώσεις για το μάθημα «Εφαρμοσμένη Ηλεκτροχημεία: Ανάπτυξη Χημικών και Βιοχημικών Αισθητήρων» «ΑΜΠΕΡΟΜΕΤΡΙΚΟΙ ΑΙΣΘΗΤΗΡΕΣ» Μάμαντος Ι. Προδρομίδης Ιωάννινα, 2007 .
24. Scott, K., Hughes, R. Industrial Membrane Separation Technology, Chapman & Hall, (1996).
25. D.N. Theodorou, Diffusion in Polymers, edited by P. Neogi (Marcel Dekker, New York, 1996).
26. Physical and gas permeation properties of a series of novel hybrid inorganicorganic composites based on a synthesized fluorinated polyimide' C. J. Cornelius, PhD. Thesis, Virginia (2000).
27. D. Hofmann, L. Fritz, J. Ulbrich, C. Schepers, M. Bohning, "Detailed-atomistic molecular modelling of small molecule diffusion and solution processes in polymeric membrane materials", Macromol. Theory Simul., 2000.
28. J. G. Wijmans, R. W. Baker, The solution-diffusion model: a review, Journal of Membrane Science 107 (1995)
29. Hanika M, Langowski H-C, Moosheimer U, Peukert W. Inorganic layers on polymeric films— influence of defects and morphology on barrier properties. Chem Eng Technol 2003
30. W.F. Smith, Foundations of Materials Science and Engineering 3 ed., McGraw-Hill (2004).
31. Jean Philibert, One and a Half Century of Diffusion: Fick, Einstein, before and beyond, Diffusion Fundamentals 2, (2005).
32. ΦΑΙΝΟΜΕΝΑ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ - Μια ενοποιημένη προσέγγιση - Robert S. Broadkey, Harry C. Hershey - (Τίτλος προτοτύπου Transport phenomena) - copyright A. TZIOLA E. (1990) - Μετάφραση Γ. Α. Μπλήρης - Καθηγητής Α.Π.Θ. τόμος Α' - Β'.
33. Hood Chatham, Surface and Coatings Technology 78 (1996)
34. D. Raabe. Computational materials science: the simulation of materials microstructures and properties. Wiley-VCH, (1998).
35. Goldberg HA, Feeney CA, Karim DP, Farrell M. Gas barrier properties of butyl rubber/vermiculite nanocomposite coatings, Rubber World 2002
36. Cussler, E.L., Hughes, S.E., Ward, W.J. and Aris, R. (1988). Barrier Membranes, Journal of Membrane Science.
37. Nielsen, L.E. (1967). Models for Permeability of Filled Polymer Systems, Journal of Macromolecular Science
38. Aris, R. (1986). On a Problem in Hindered Diffusion, Archives for Rational Mechanics and Analysis.
39. Wakeham, W.A. and Mason, E.A. (1979). Diffusion through Multiperforate Laminae, Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals
40. Falla, W.R., Mulski, M. and Cussler, E.L. (1996). Estimating Diffusion through Flake- filled Membranes, J. Membr. Sci.
41. Lape, N.K., Nuxoll, E.E. and Cussler, E.L. (2004). Polydisperse Flakes in Barrier Films, Journal of Membrane Science.
42. Fredrickson, H.G. and Bicerano, J. (1999). Barrier Properties of Oriented Disk Composites, J. Chem. Phys.



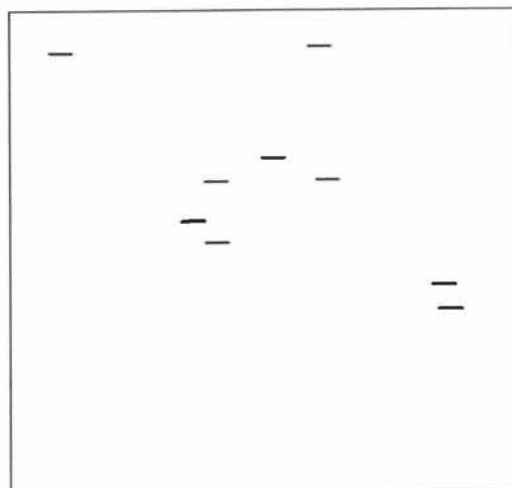
43. Bharadwaj K. Modeling the Barrier Properties of Polymer-Layered Silicate Nanocomposites, *Macromolecules* 2001.
44. Polymer nanotechnology: Nanocomposites - D.R. Paul a, L.M. Robeson - Department of Chemical Engineering and Texas Materials Institute- University of Texas at Austin, Austin, TX 78712, United States Lehigh University, 1801 Mill Creek Road, Macungie, PA 18062, United States (2008).
45. Numerical simulation of the effects of volume fraction, aspect ratio and fibre length distribution on the elastic and thermoelastic properties of short fiber composites Hine PJ, Lusti HR, Gusev AA - COMPOSITES SCIENCE AND TECHNOLOGY, 2002
46. Barrier properties of model epoxy nanocomposites Luyi Suna,b,W.-J. Booa, a. Clearfieldb, H.-J. Suea, H.Q. Phamca Polymer Technology Center, Department of Mechanical Engineering, Texas A&M University, College Station, TX 77843, USA b. Department of Chemistry, Texas A&M University, College Station, TX 77842, USA c. Epoxy R&D, The Dow Chemical Company, Freeport, TX 77541, USA.
47. G. Choudalakis, A.D. Gotsis, Permeability of polymer/clay nanocomposites: A review Department of Sciences, Technical University of Crete, GR-73100, Hania, Greece.
48. T. D. Papathanasiou, David C. Guell. Flow - induced alignment in composite materials.
49. Finite element assessment of the potential of platelet - filled polymers for membrane gas separations - Olga Guseva, Materials Simulations GmbH - Zurich, Switzerland, Empa Swiss Federal Laboratories For Materials Testing and Research - Dubendorf, Switzerland - Andrei A. Gusev, Institute of polymers, Department of Materials, Zurich, Switzerland.
50. Hamid, S, Amin, M.B., Maadhah, A.G 'Handbook of polymers degradation', 1st edition, Marcell Decker, Inc., p575.
51. 'Determination of permeation parameters of experimental PET films coated with SiO<sub>x</sub> to ethyl acetate, oxygen and water vapour' Adamantiadi A, Badeka A, Kontominas MG., Laboratory of Food Chemistry and Technology, Department of Chemistry, University of Ioannina, Greece. (Abstract from Food Addit Contam. 2001 Nov).
52. E.L. Cussler, Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems, third Edition (Cambridge University Press, London, 1997).
53. NANO-Textured Functional Layers for Sustainable Products - Eva Maria Moser, Jacques Painot, Anne Dimitrov and Edmond Goy.
54. Hussain F., Hojjati M., Okamoto M., Gorga R.E. Polymer-matrix nanocomposites, processing, manufacturing and application: an overview. *J. Comp. Mater.*
55. Olga Guseva, Hans Rudolf Lusti, Andrei Gusev, Matching thermal expansion of mica-polymer nanocomposites and metals.
56. Hans Rudolf Lusti, Andrei A Gusev and Olga Guseva, The influence of platelet disorientation on the barrier properties of composites: a numerical study
57. Νακης Λάμπρος, Μεταπτυχιακή Εργασία «Υπολογιστική μελέτη φαινομένων μεταφοράς διαμέσου σύνθετων πολυμερικών μεμβρανών» , Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Εργαστήριο Ρευστομηχανικής & Ρευστομηχανικής, Βόλος 2010.

ΑΝΑΛΥΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

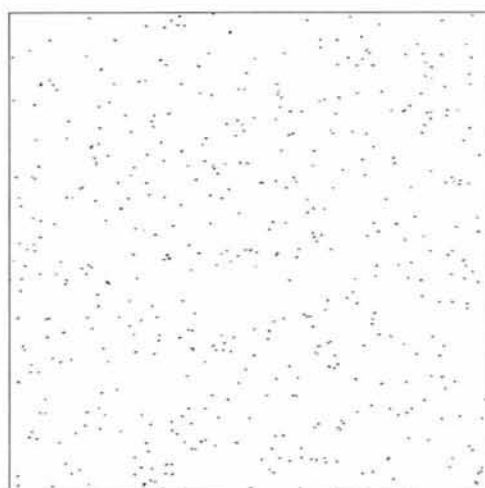
14.1 Τυπική περίπτωση  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $0 < \epsilon < \pi/2$



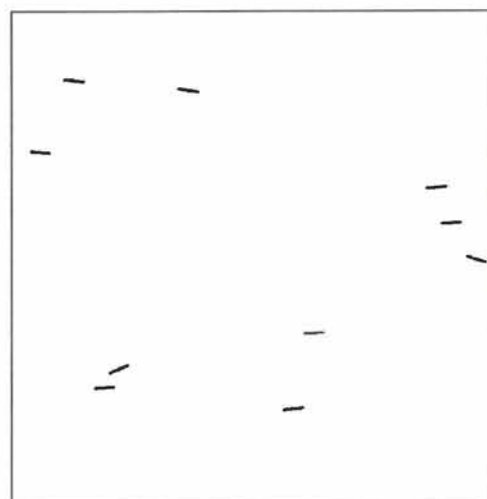
Σχ. 77 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0$



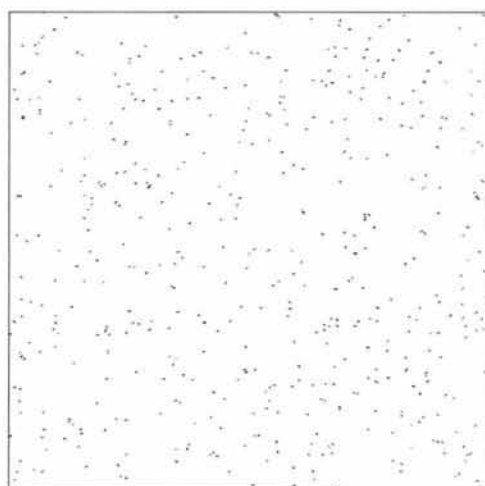
Σχ. 78 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0$



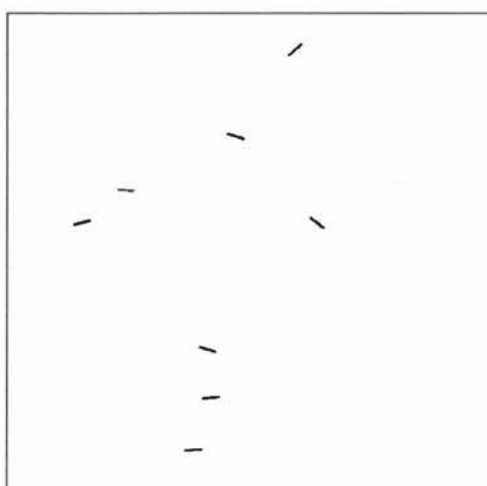
Σχ. 79 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0.4$



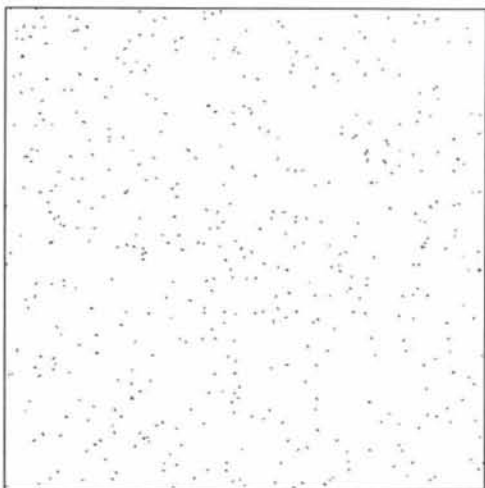
Σχ. 80 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0.4$



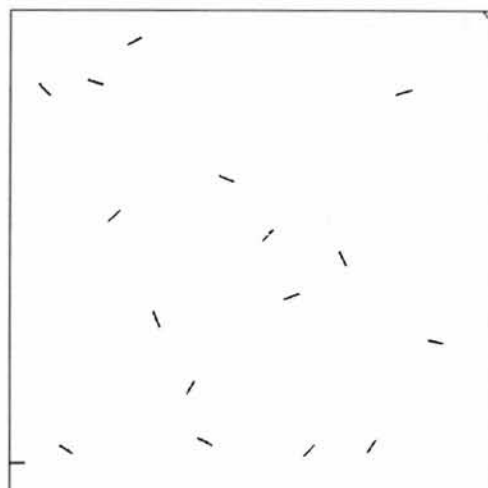
Σχ. 81 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0.8$



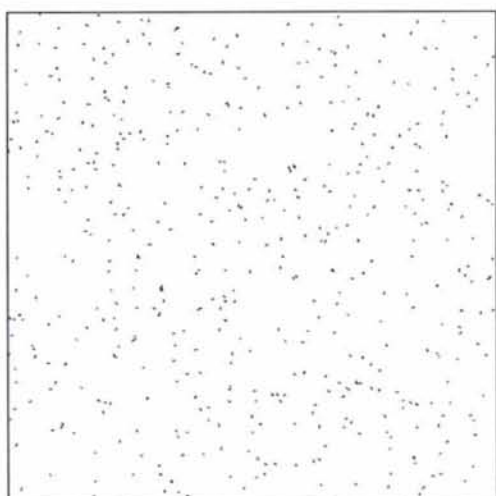
Σχ. 82 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0.8$



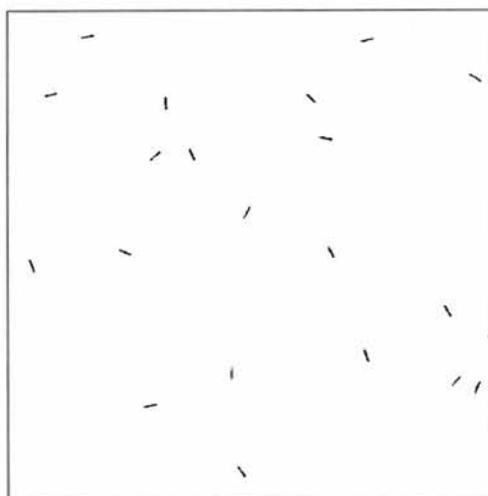
Σχ. 83 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



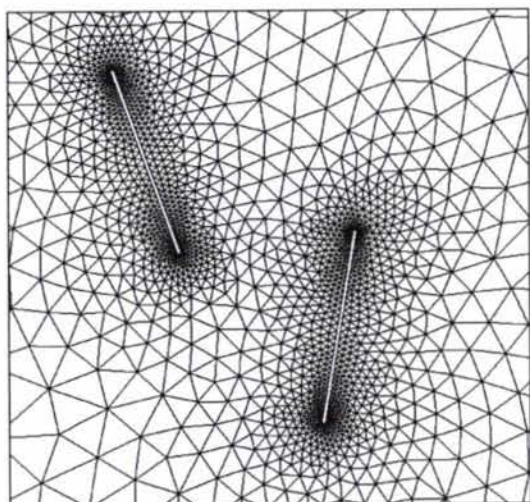
Σχ. 84 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



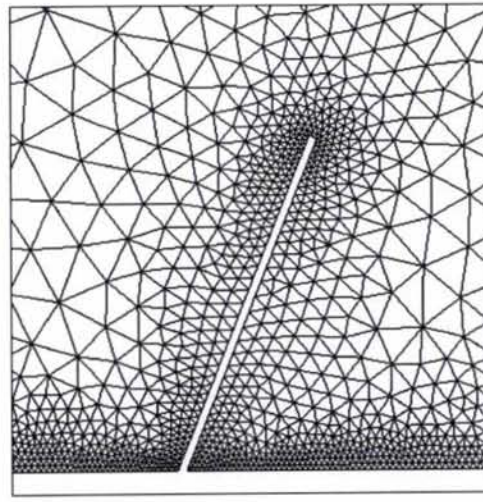
Σχ. 85 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



Σχ. 86 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



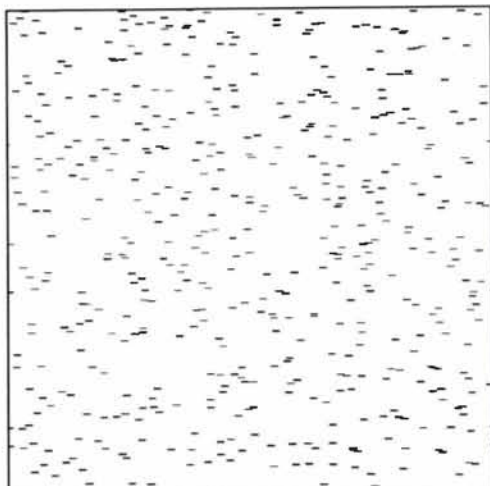
Σχ. 87 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



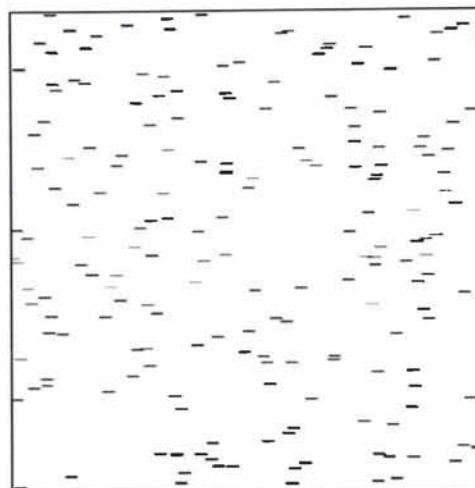
Σχ. 88 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



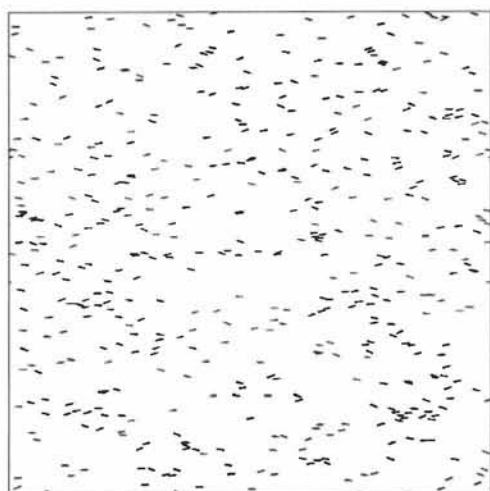
## 14.2 Τυπική περίπτωση, $a=50$ , $\alpha\phi=0.1$ , $\theta=0$ , $0 < \epsilon < \pi/2$



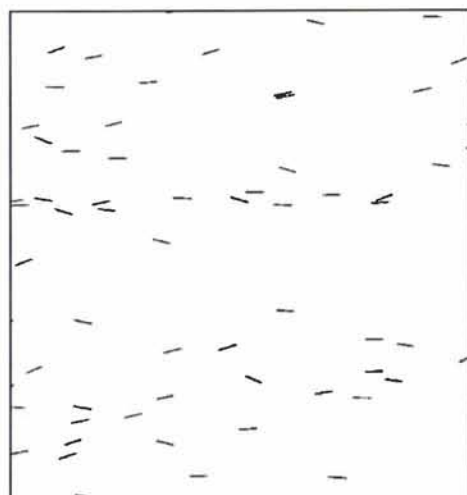
Σχ. 89 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0$



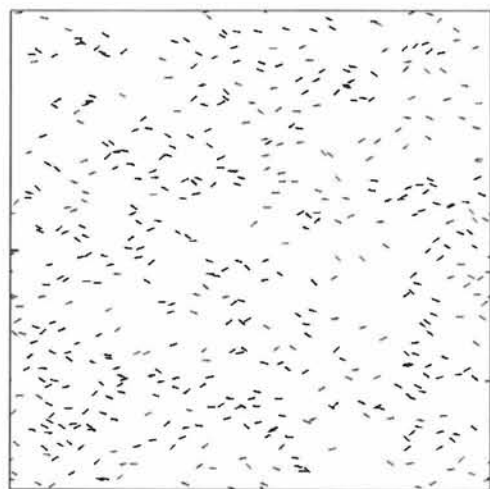
Σχ. 90 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0$



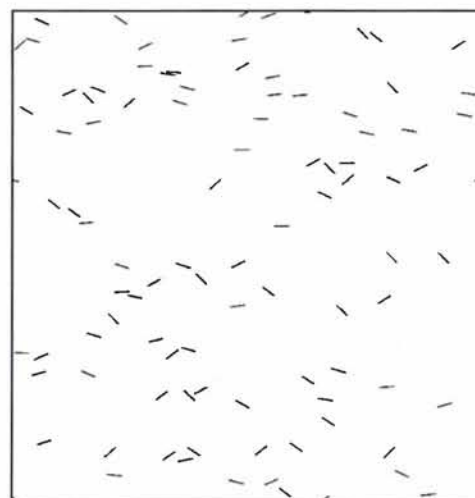
Σχ. 91 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0.0$ ,  $\epsilon=0.4$



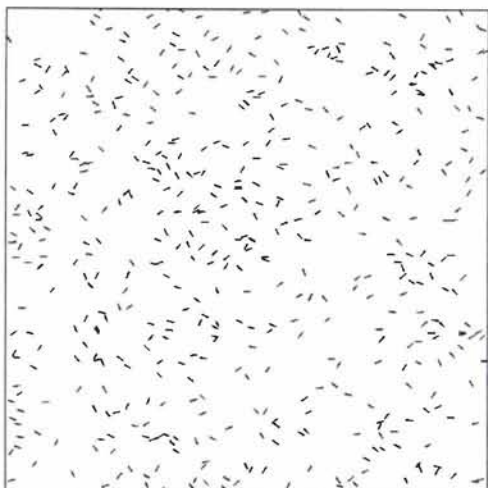
Σχ. 92 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0.4$



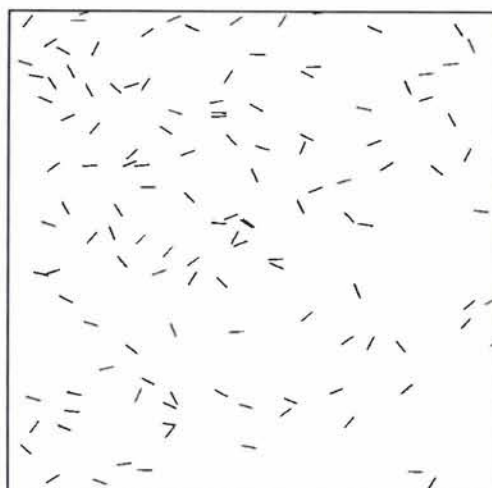
Σχ. 93 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0.8$



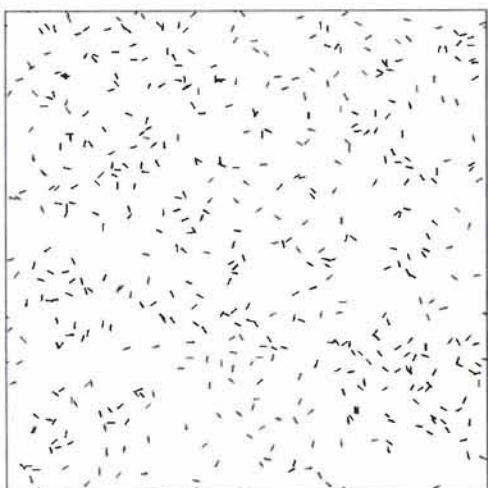
Σχ. 94 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0.8$



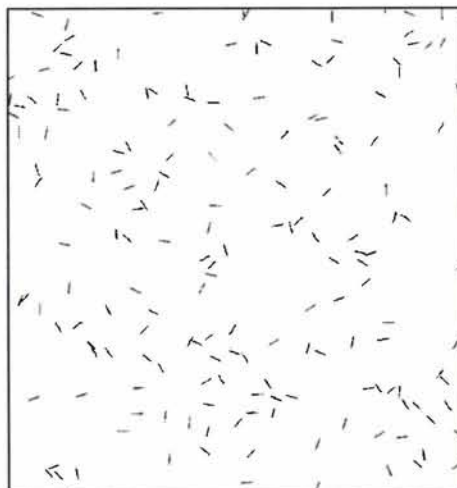
Σχ. 95 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



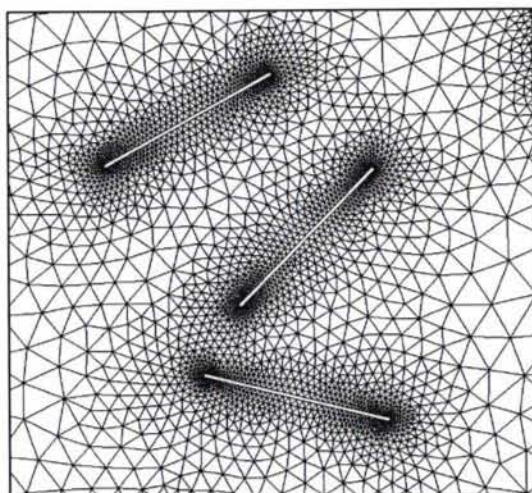
Σχ. 96 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



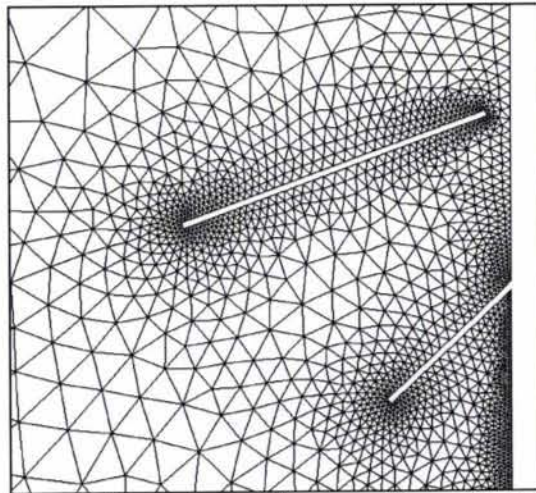
Σχ. 97 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



Σχ. 98 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$

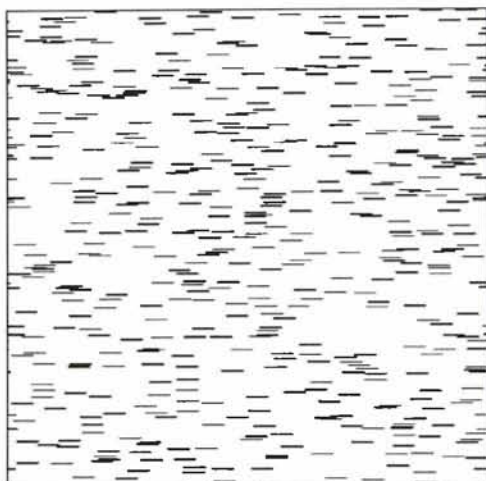


Σχ. 99 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



Σχ. 100 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$

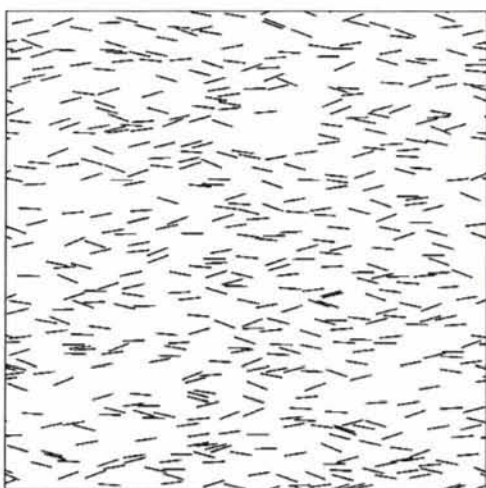
### 14.3 Τυπική περίπτωση, $\alpha=50$ , $\alpha\phi=1$ , $\vartheta=0$ , $0 < \epsilon < \pi/2$



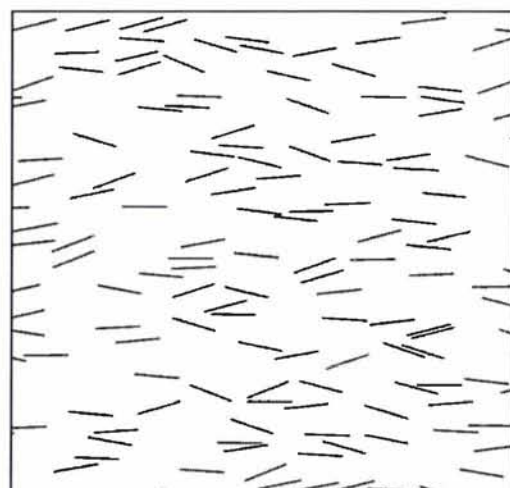
Σχ. 101 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0$



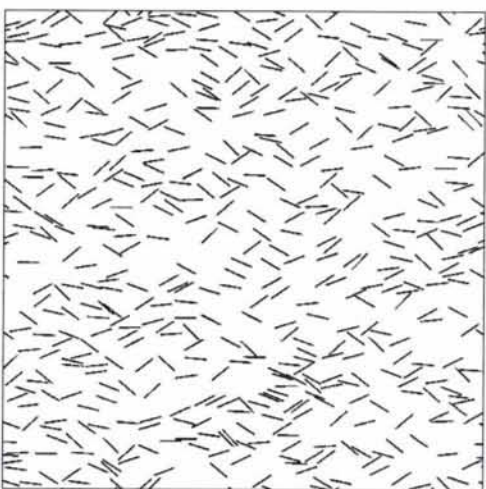
Σχ. 102 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0$



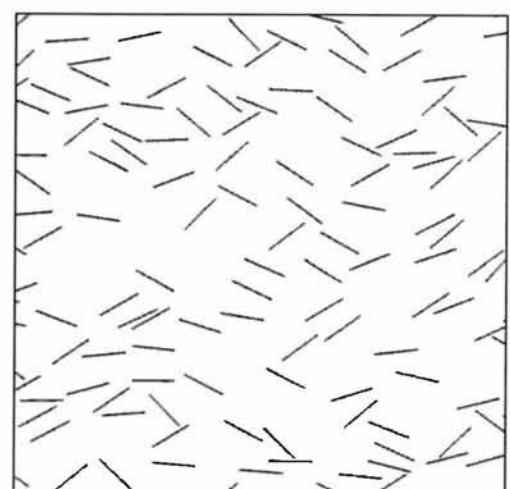
Σχ. 103 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0.0$ ,  $\epsilon=0.4$



Σχ. 104 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0.4$

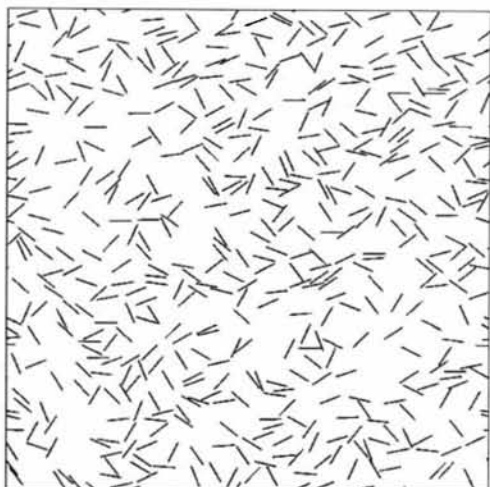


Σχ. 105 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0.8$

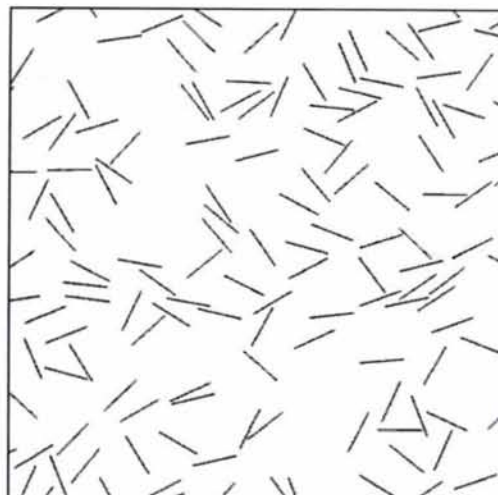


Σχ. 106 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0.8$

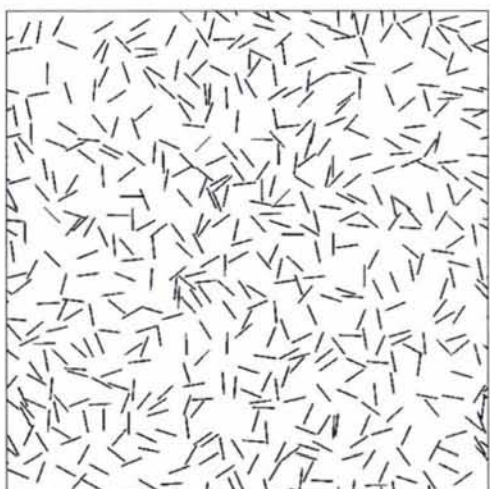




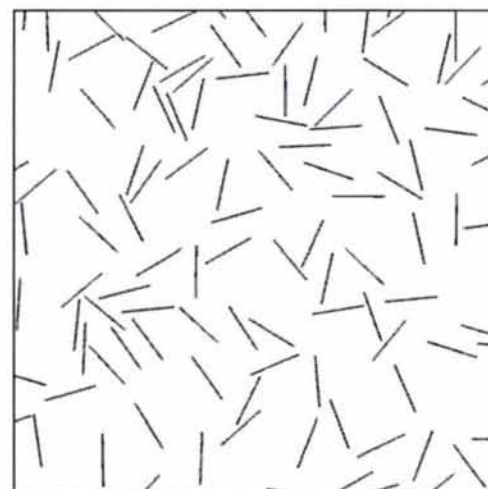
Σχ. 107 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



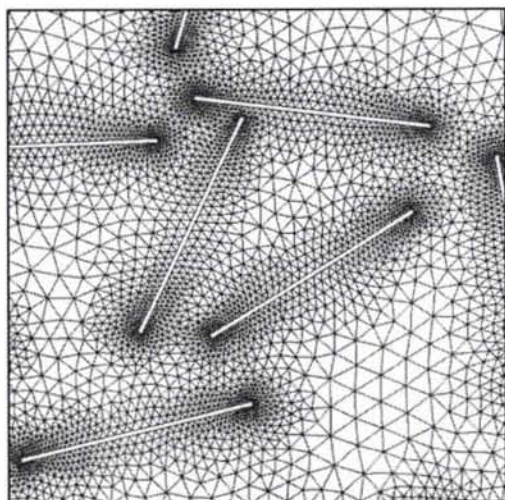
Σχ. 108 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



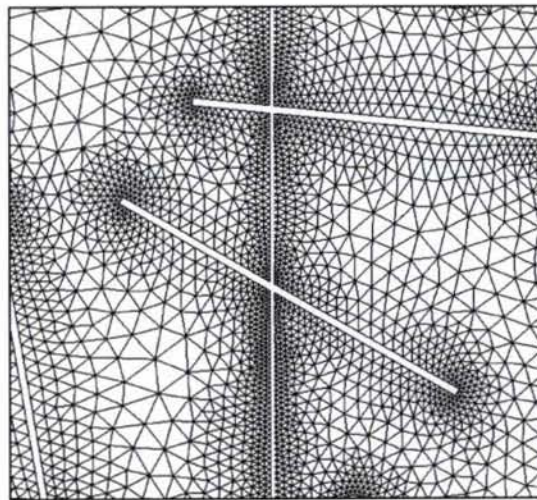
Σχ. 109 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



Σχ. 110 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$

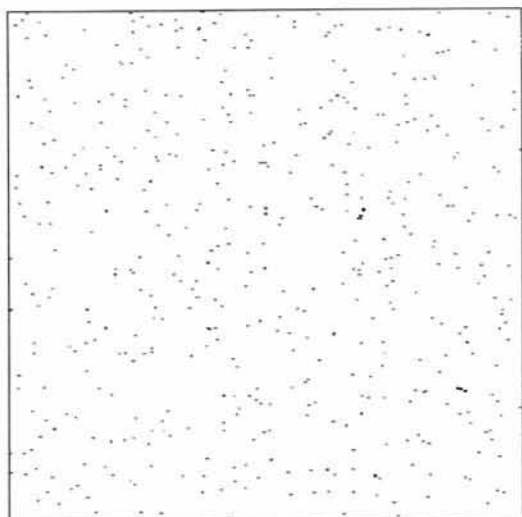


Σχ. 111 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$

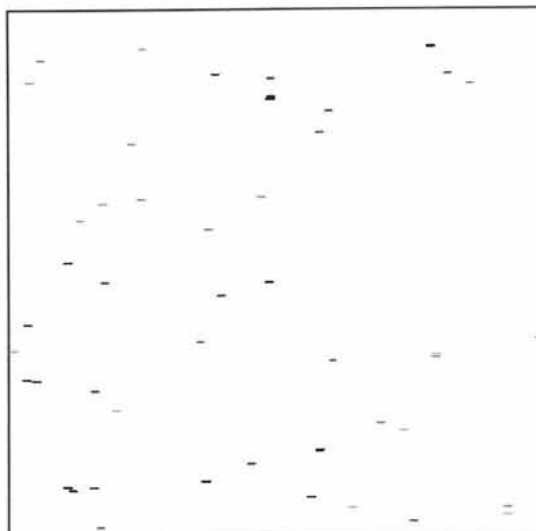


Σχ. 112 – Τυπική λεπτομέρεια περιοδικής γεωμετρίας  $\alpha=50$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$

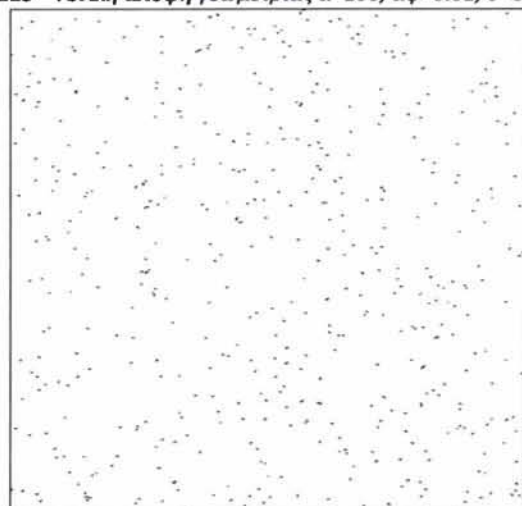
#### 14.4 Τυπική περίπτωση, $\alpha=100$ , $\alpha\phi=0.01$ , $\theta=0$ , $0 < \epsilon < \pi/2$



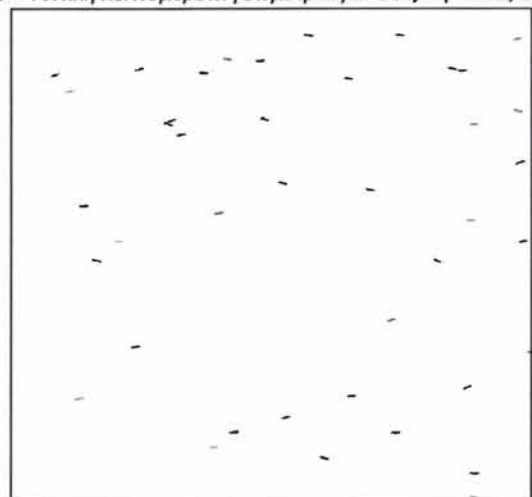
Σχ. 113 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0$



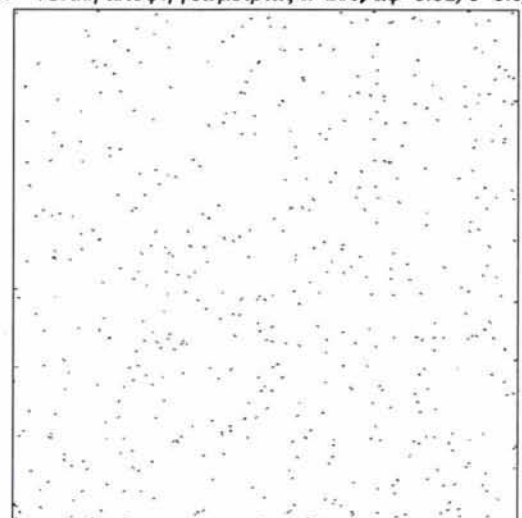
Σχ. 114 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0$



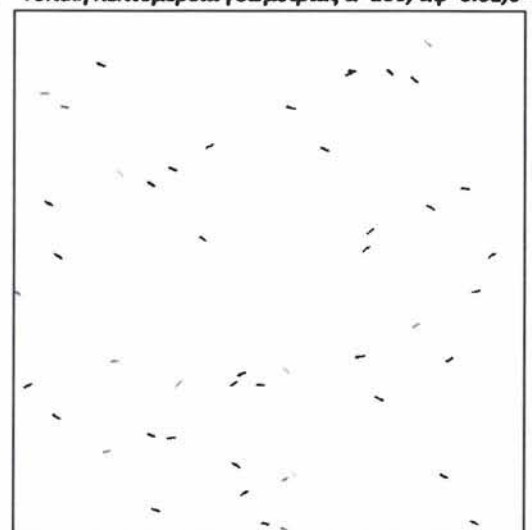
Σχ. 115 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0.4$



Σχ. 116 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0.4$

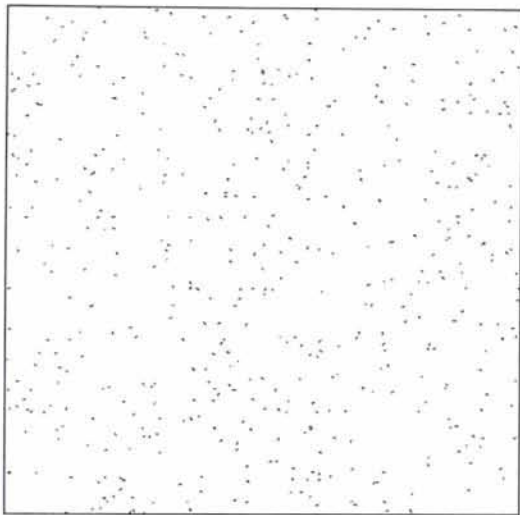


Σχ. 117 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0.8$

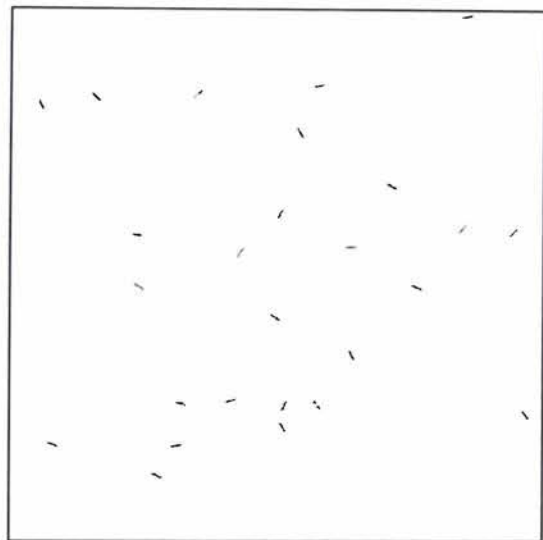


Σχ. 118 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0.8$

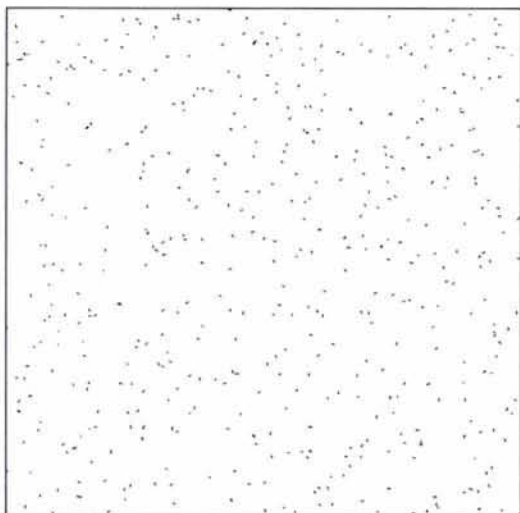




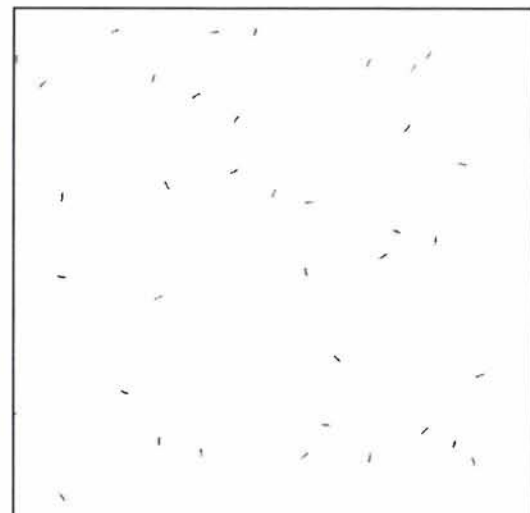
Σχ. 119 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



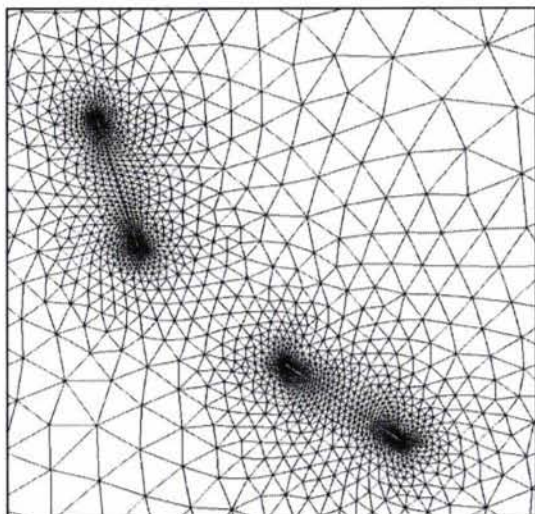
Σχ. 120 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



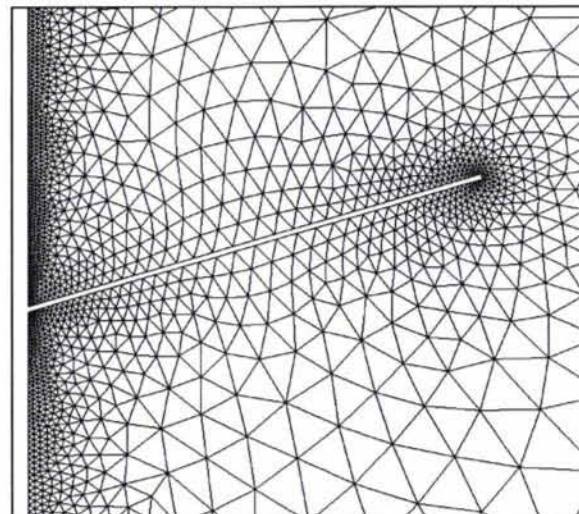
Σχ. 121 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



Σχ. 122 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



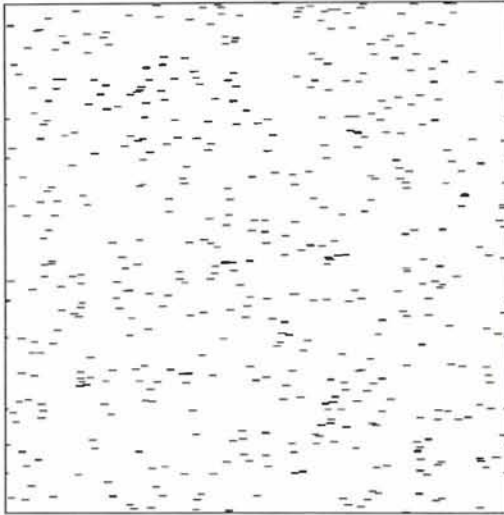
Σχ. 123 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



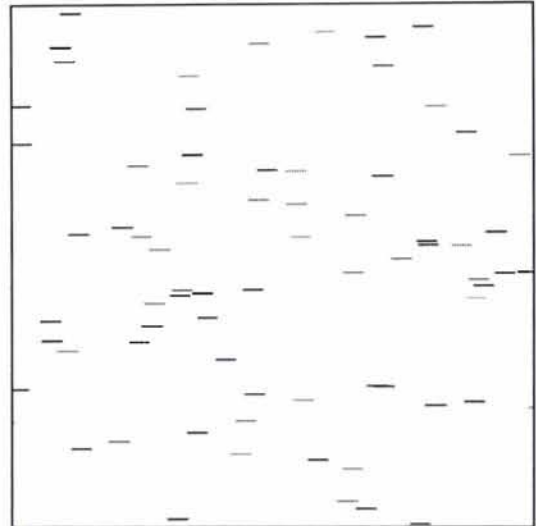
Σχ. 124 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.01$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



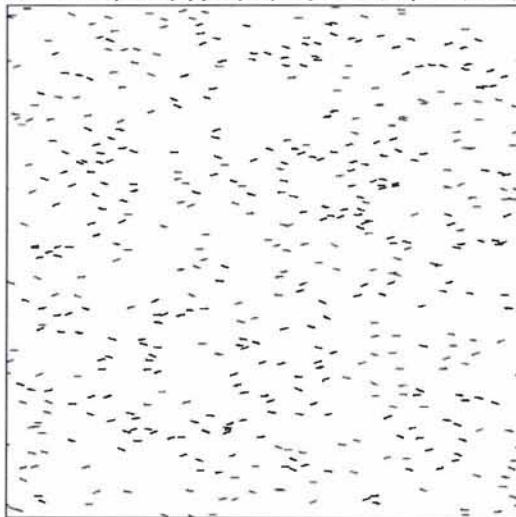
**14.5 Τυπική Περίπτωση,  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $0 < \epsilon < \pi/2$**



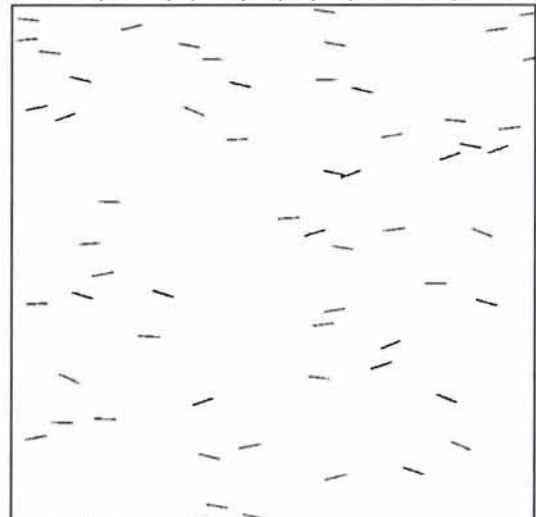
Σχ. 125 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0$



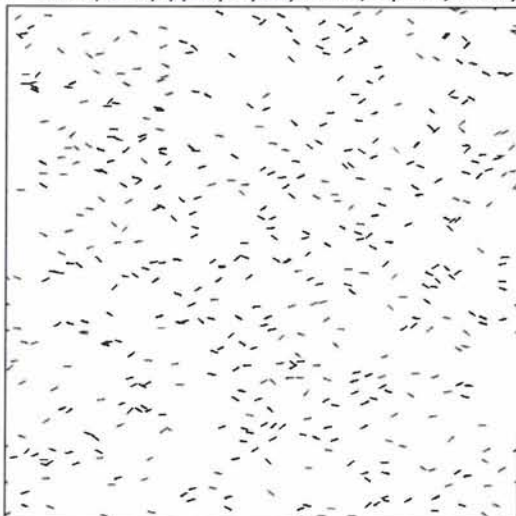
Σχ. 126 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0$



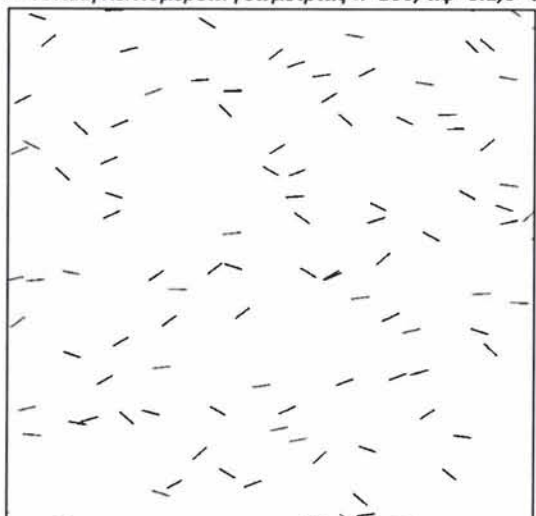
Σχ. 127 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0.0$ ,  $\epsilon=0.4$



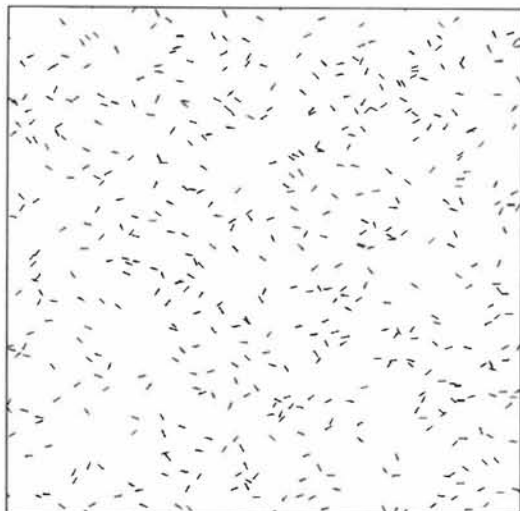
Σχ. 128 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0.4$



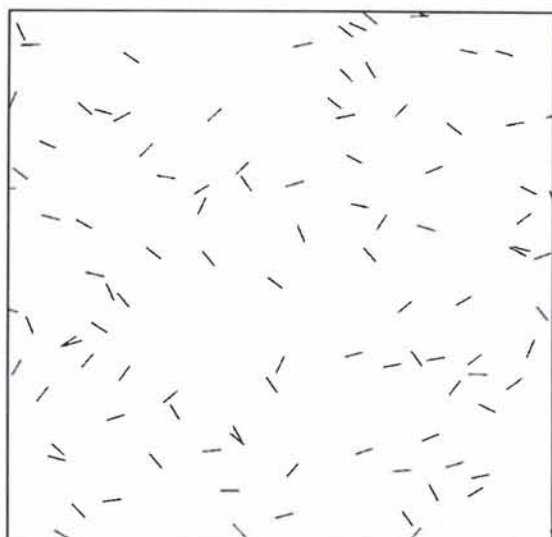
Σχ. 129 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0.8$



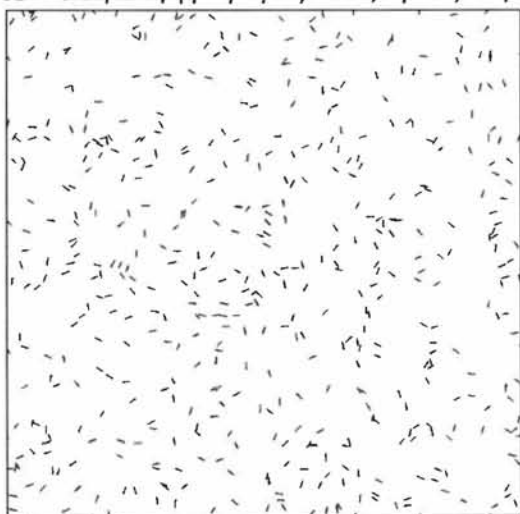
Σχ. 130 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=0.8$



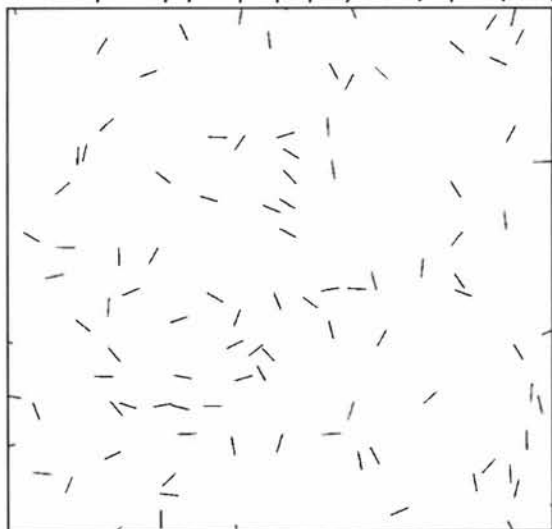
Σχ. 131 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



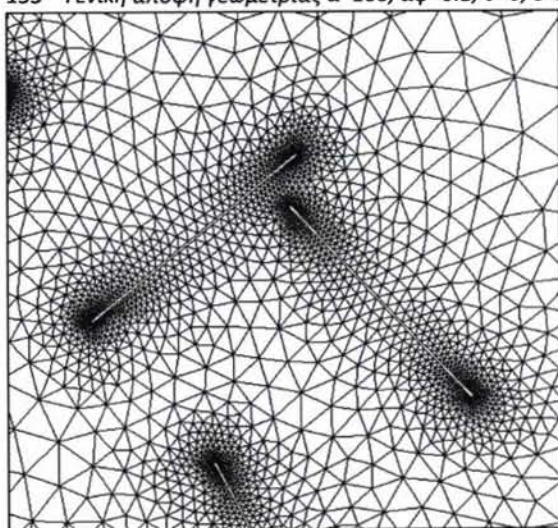
Σχ. 132 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



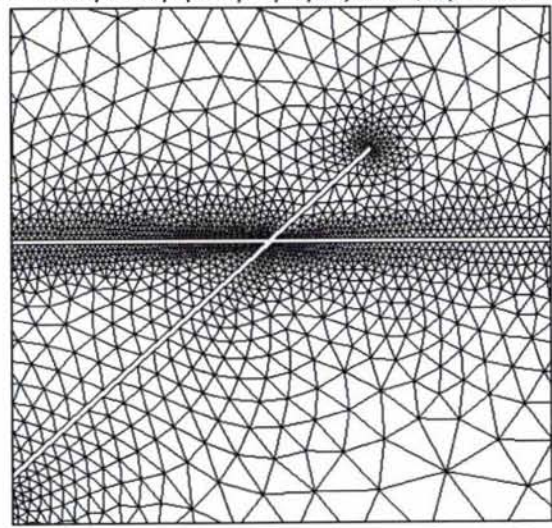
Σχ. 133 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



Σχ. 134 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



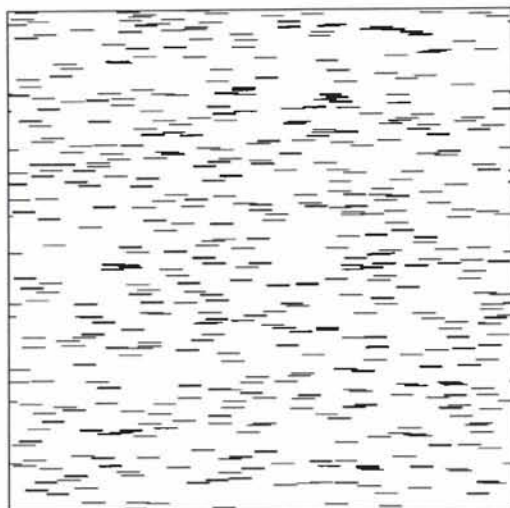
Σχ. 135 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



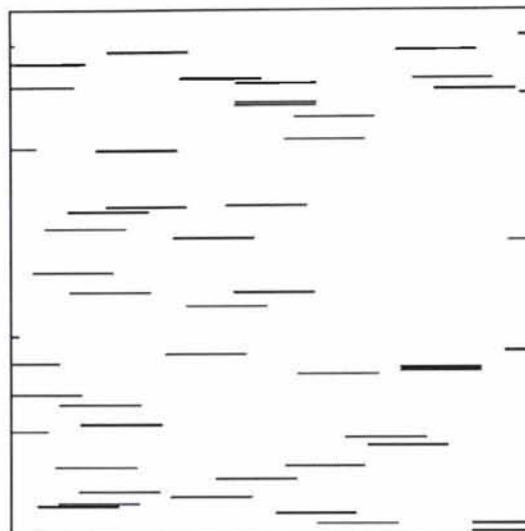
Σχ. 136 – Τυπική λεπτομέρεια περιοδικής γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



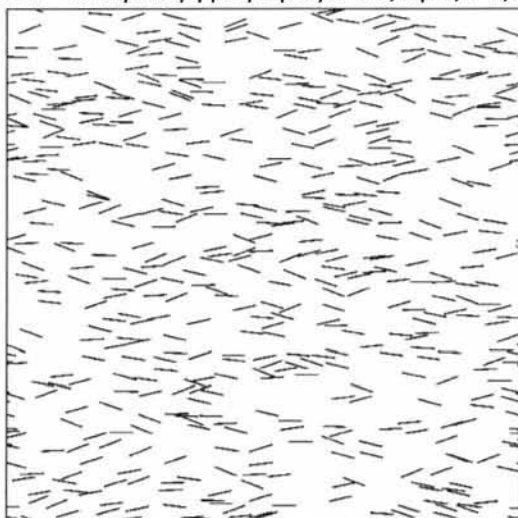
#### 14.6 Τυπική περίπτωση, $\alpha=100$ , $\alpha\phi=1$ , $\vartheta=0$ , $0 < \epsilon < \pi/2$



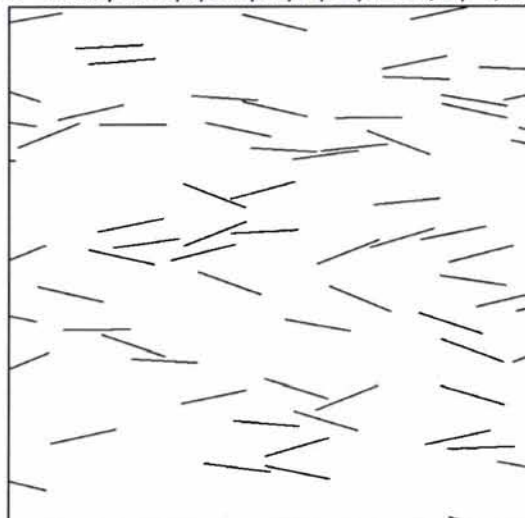
Σχ. 137 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0$



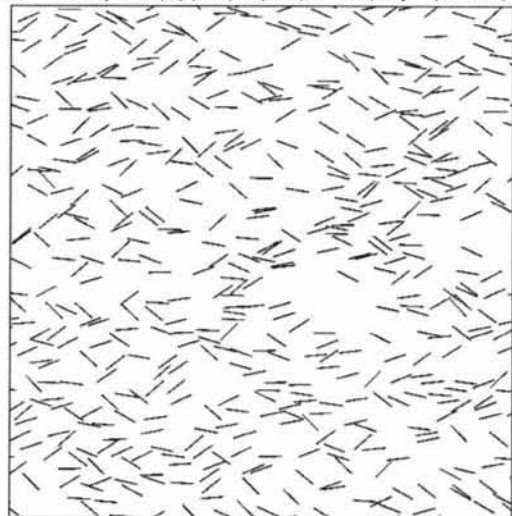
Σχ. 138 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0$



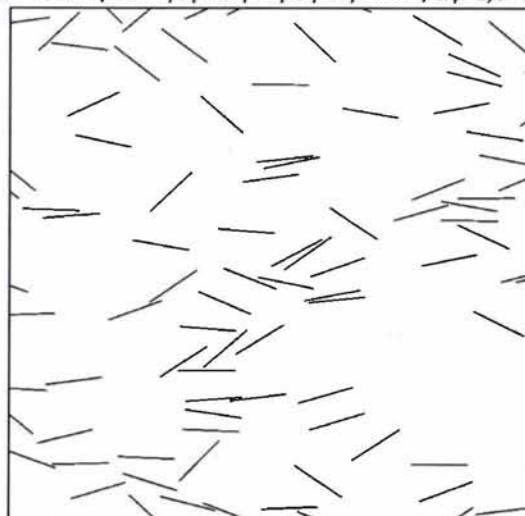
Σχ. 139 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0.0$ ,  $\epsilon=0.4$



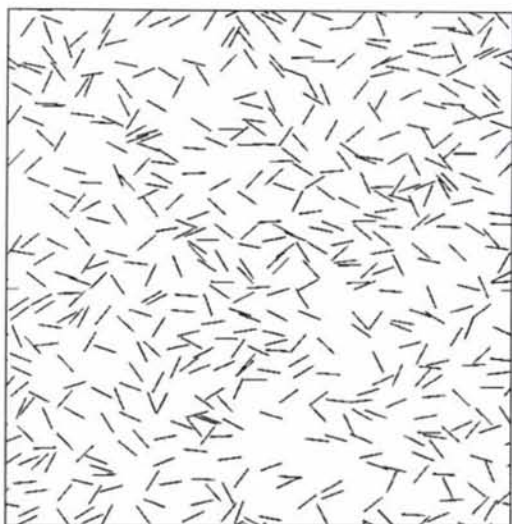
Σχ. 140 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0.0$ ,  $\epsilon=0.4$



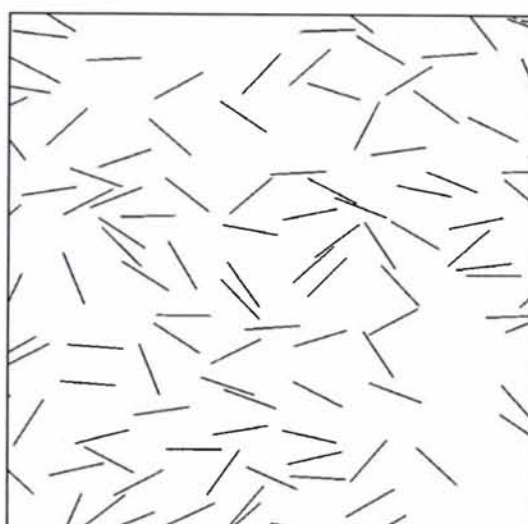
Σχ. 141 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0.8$



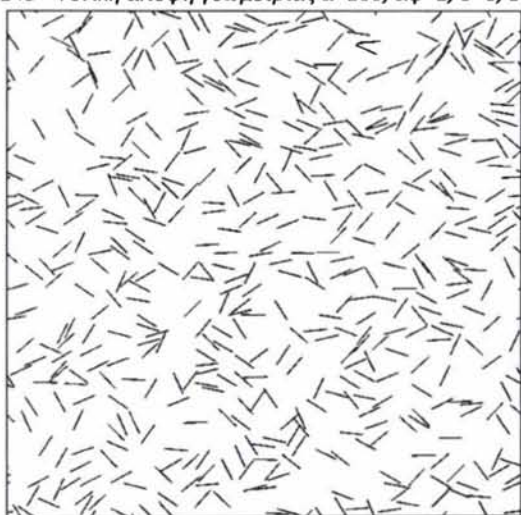
Σχ. 142 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0.8$



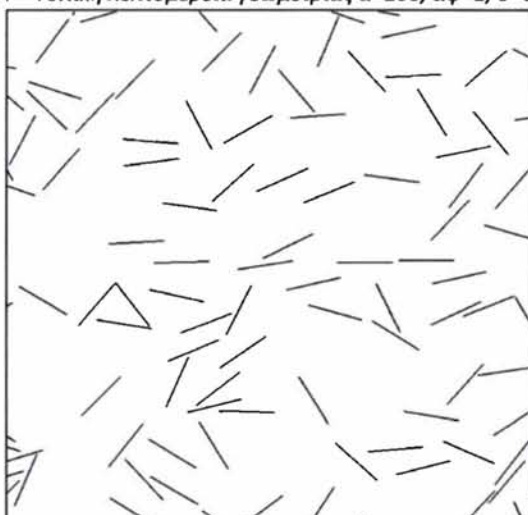
Σχ. 143 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



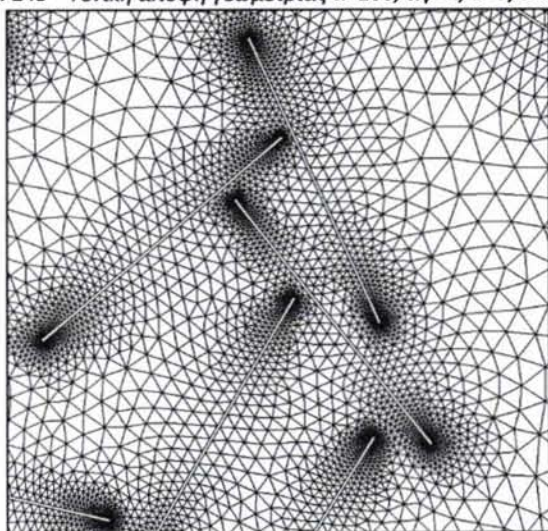
Σχ. 144 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



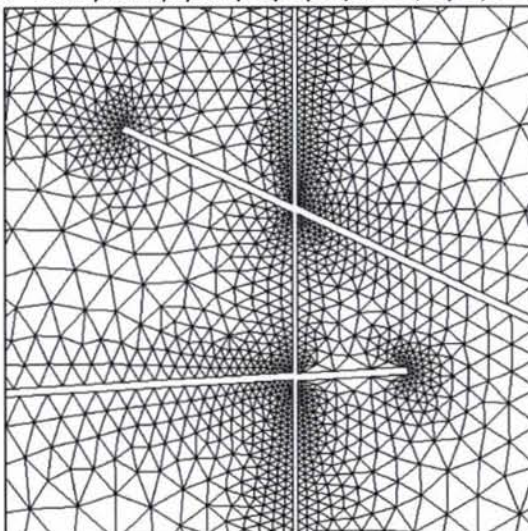
Σχ. 145 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



Σχ. 146 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



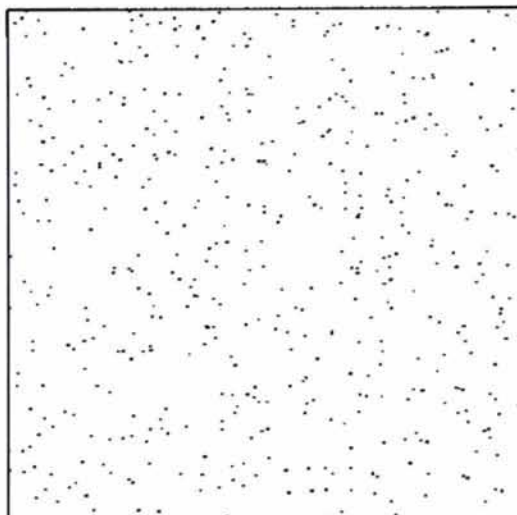
Σχ. 147 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



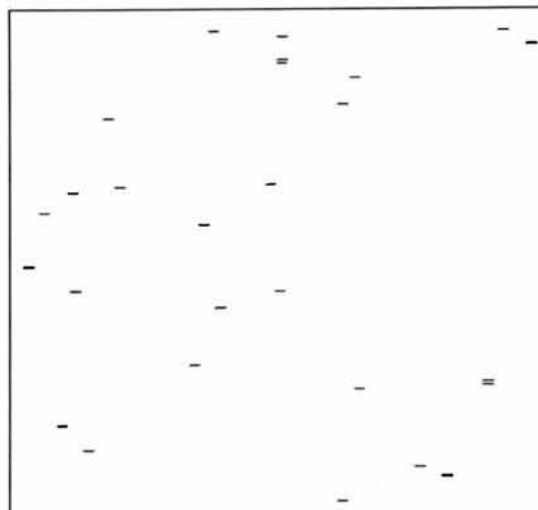
Σχ. 148 – Τυπική λεπτομέρεια περιοδικής γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



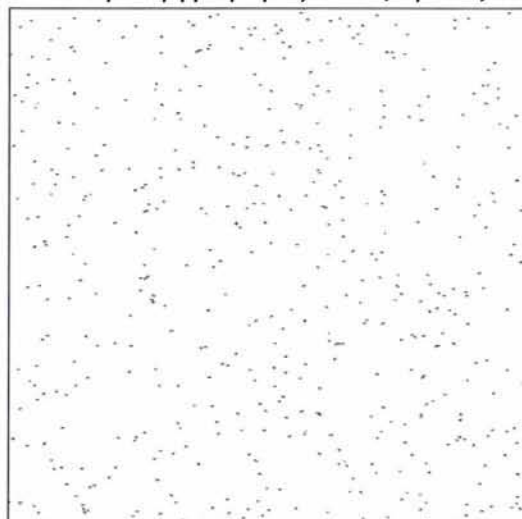
**14.7 Τυπική περίπτωση,  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\varphi=0.01$ ,  $\vartheta=0$ ,  $0 < \varepsilon < \pi/2$**



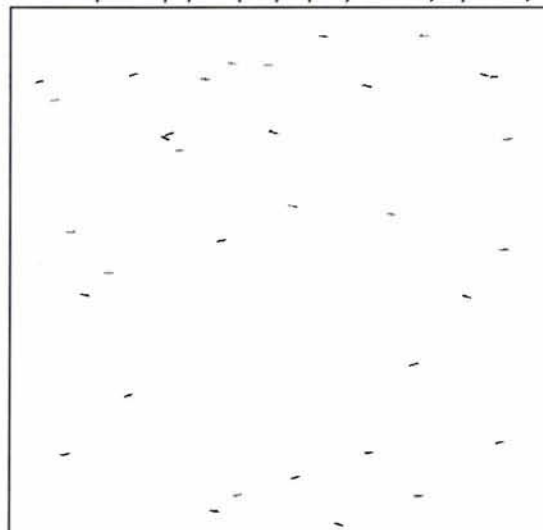
Σχ. 149 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\varphi=0.01$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=0$



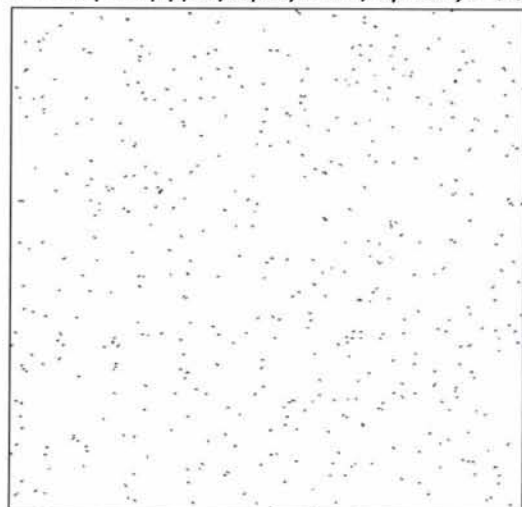
Σχ. 150 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\varphi=0.01$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=0$



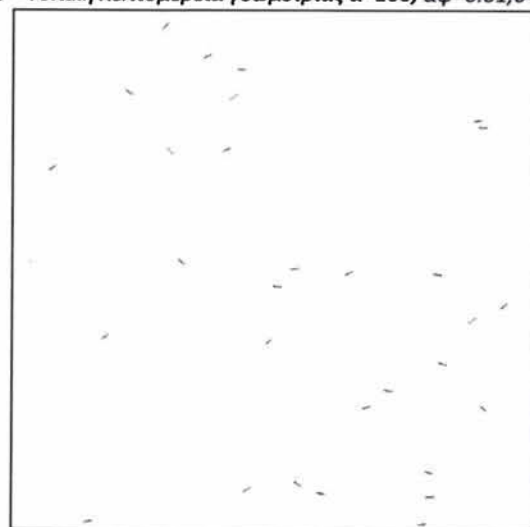
Σχ. 151 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\varphi=0.01$ ,  $\vartheta=0.0$ ,  $\varepsilon=0.4$



Σχ. 152 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=100$ ,  $\alpha\varphi=0.01$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=0.4$

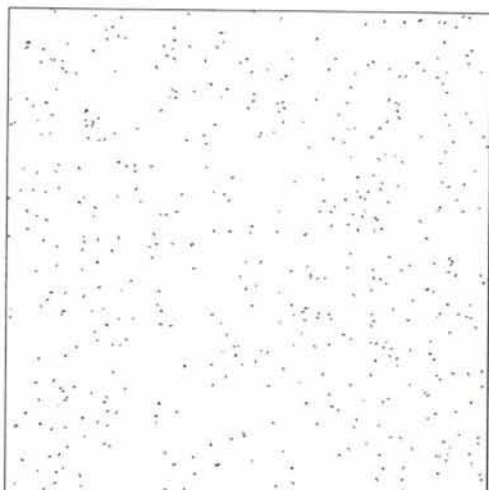


Σχ. 153 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\varphi=0.01$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=0.8$

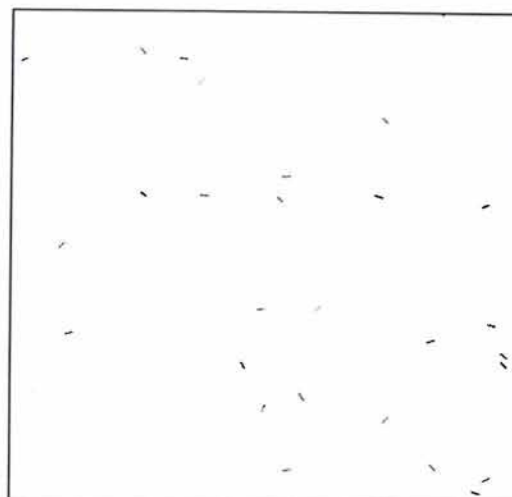


Σχ. 154 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\varphi=0.01$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=0.8$

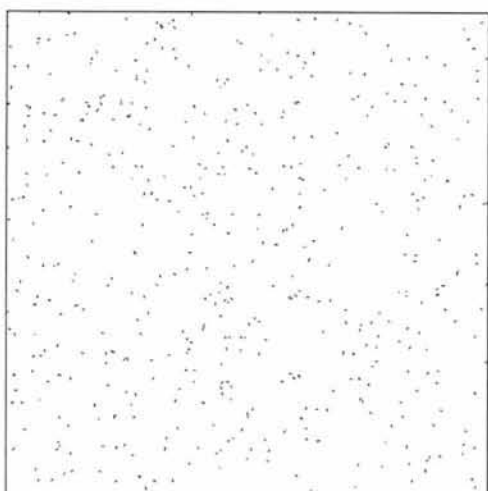




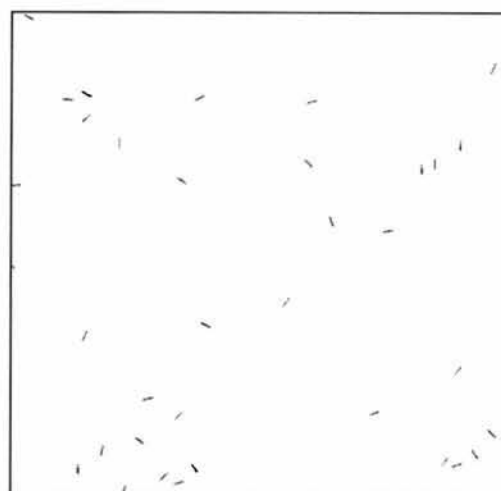
Σχ. 155 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha_f=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



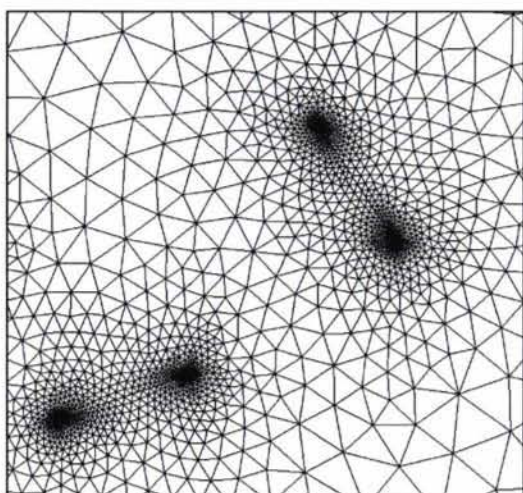
Σχ. 156 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha_f=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



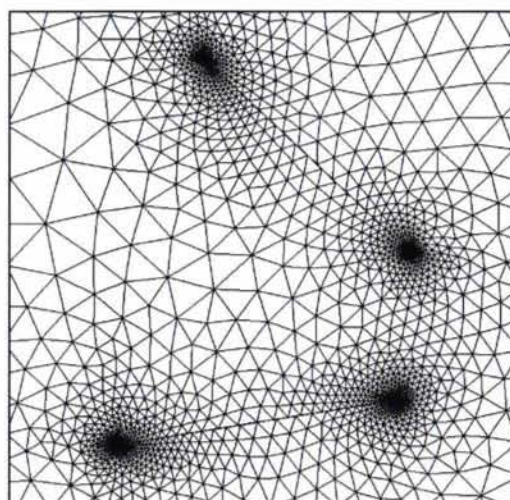
Σχ. 157 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha_f=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



Σχ. 158 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha_f=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$

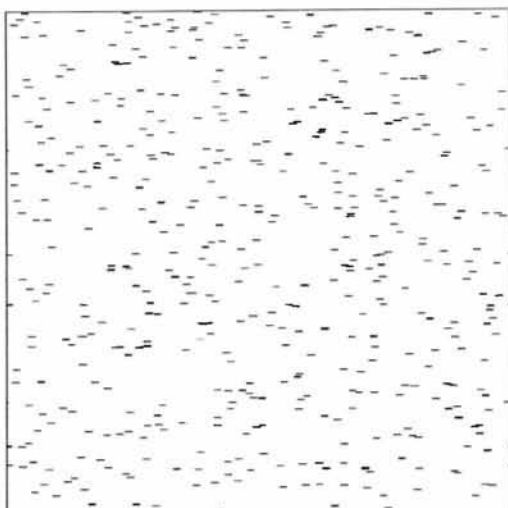


Σχ. 159 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=1000$ ,  $\alpha_f=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$

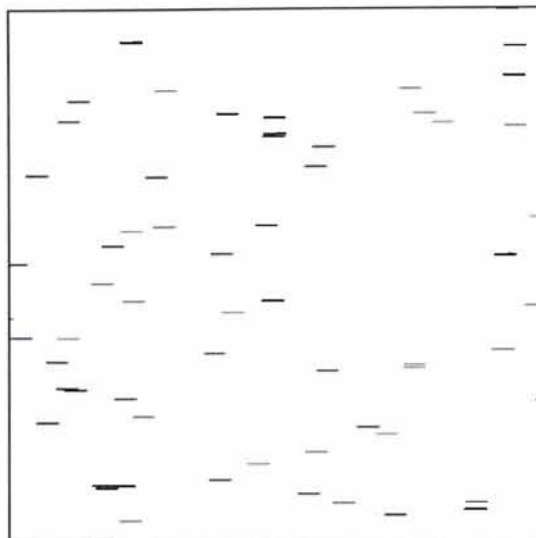


Σχ. 160 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=1000$ ,  $\alpha_f=0.01$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$

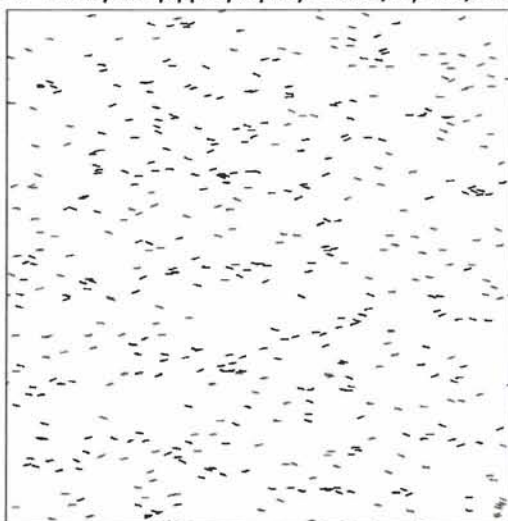
**14.8 Τυπική περίπτωση,  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $0 < \epsilon < \pi/2$**



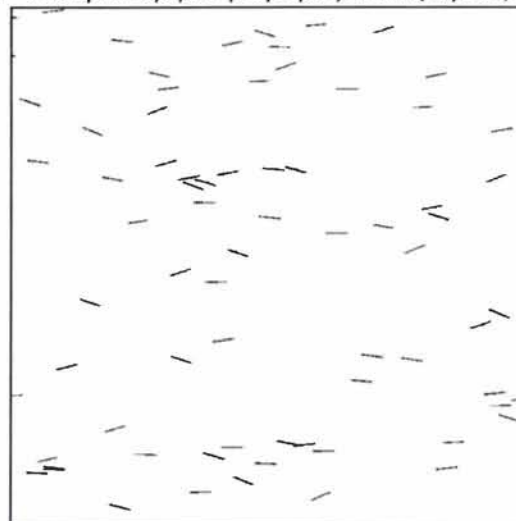
Σχ. 161 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0$



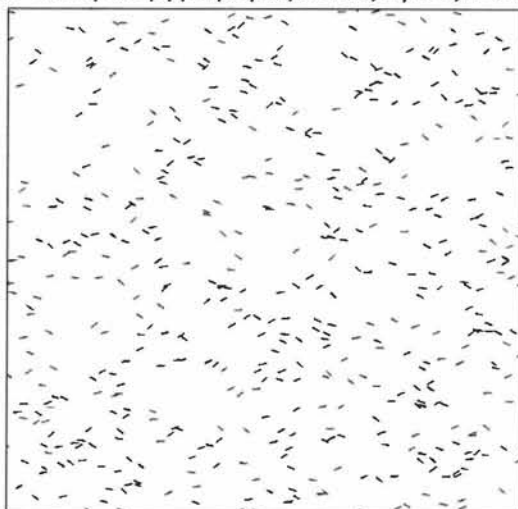
Σχ. 162 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0$



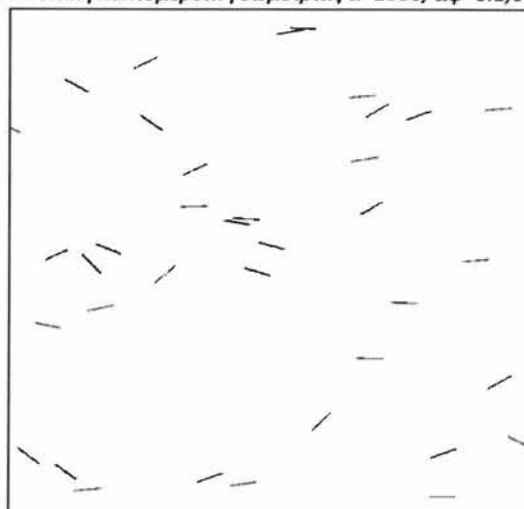
Σχ. 163 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\vartheta=0.0$ ,  $\epsilon=0.4$



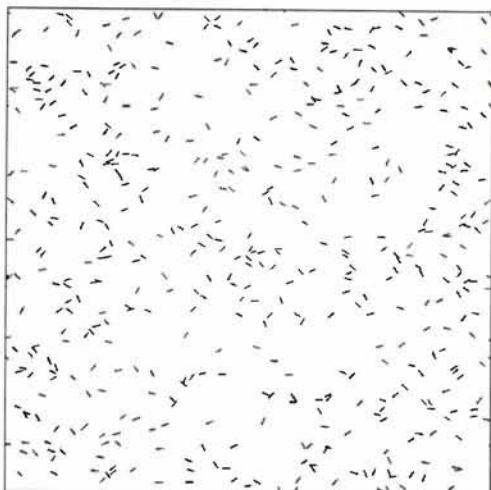
Σχ. 164 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0.4$



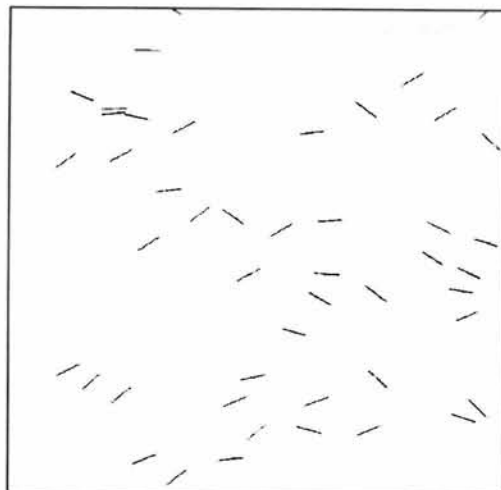
Σχ. 165 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0.8$



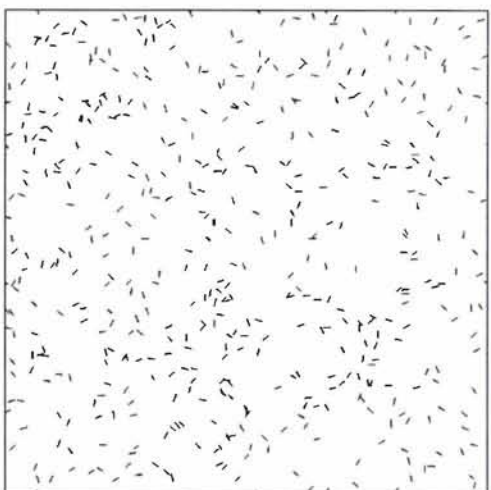
Σχ. 166 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\epsilon=0.8$



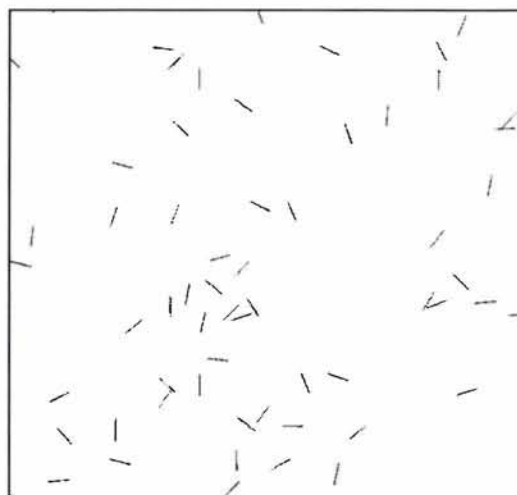
Σχ. 167 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



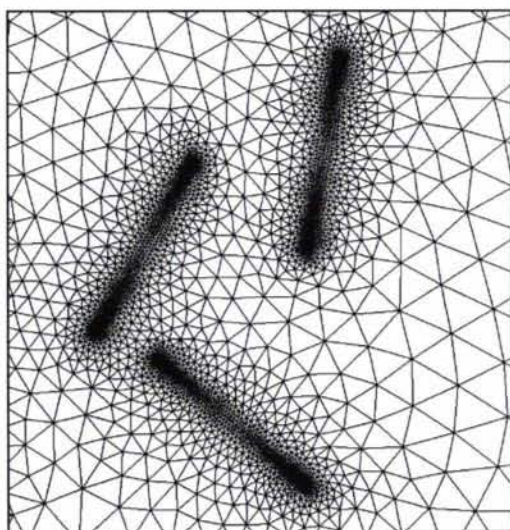
Σχ. 168 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



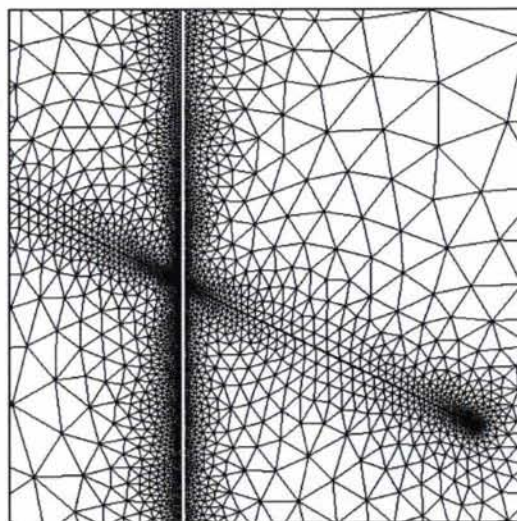
Σχ. 169 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



Σχ. 170 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



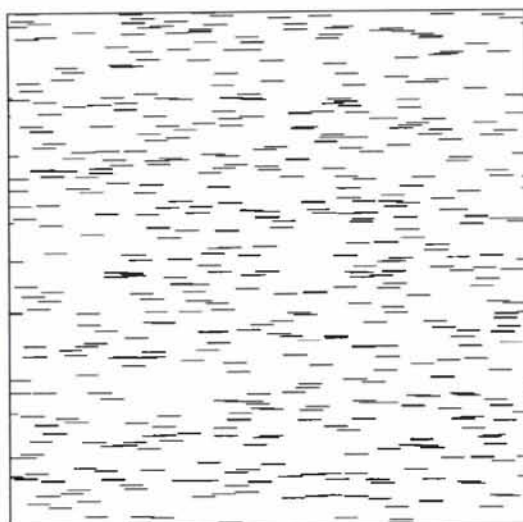
Σχ. 171 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



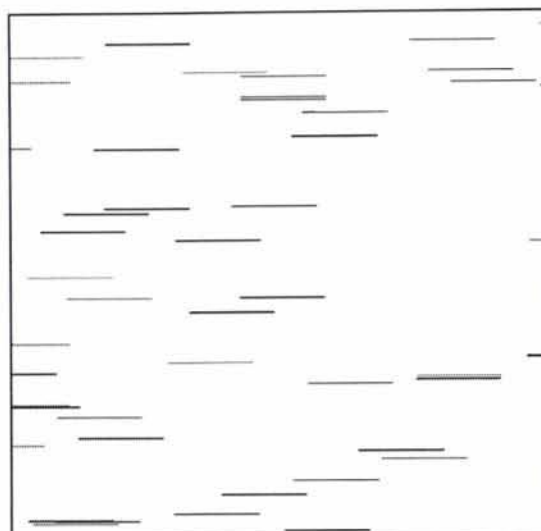
Σχ. 172 – Τυπική λεπτομέρεια περιοδικής γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=0.1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



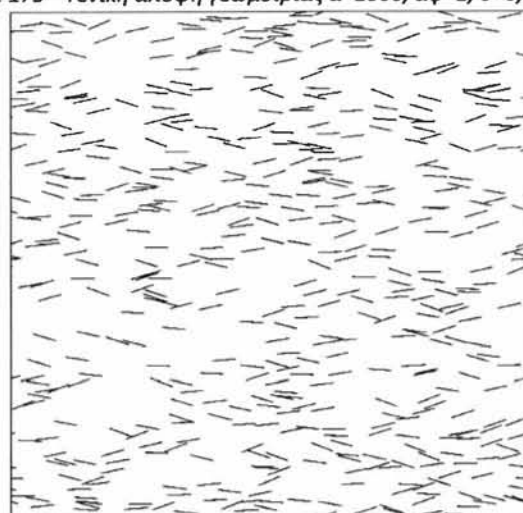
**14.9 Τυπική περίπτωση,  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $0 < \varepsilon < \pi/2$**



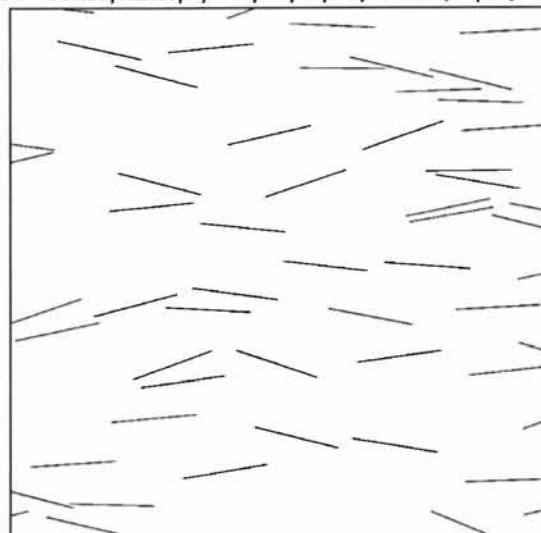
Σχ. 173 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=0$



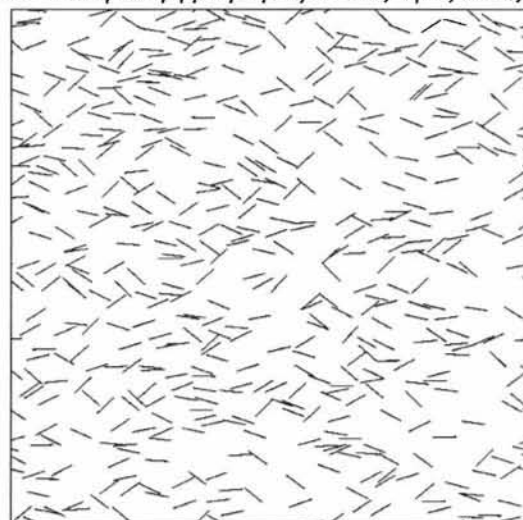
Σχ. 174 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=0$



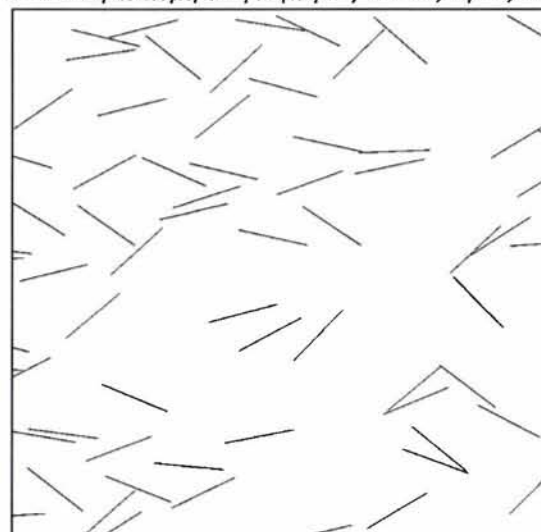
Σχ. 175 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0.0$ ,  $\varepsilon=0.4$



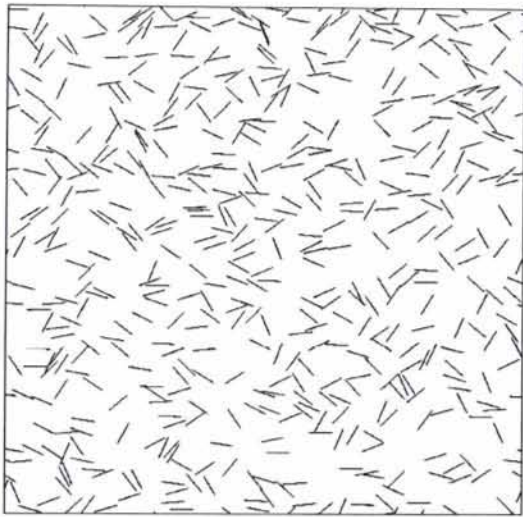
Σχ. 176 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=0.4$



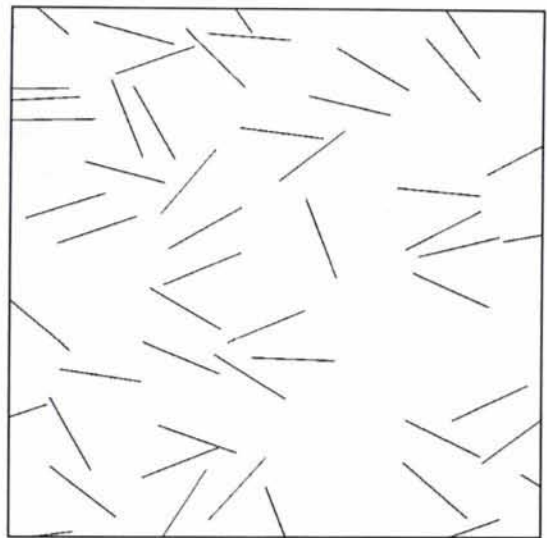
Σχ. 177 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=0.8$



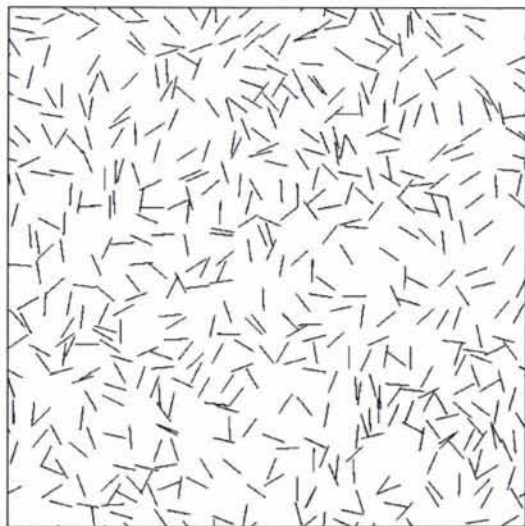
Σχ. 178 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\vartheta=0$ ,  $\varepsilon=0.8$



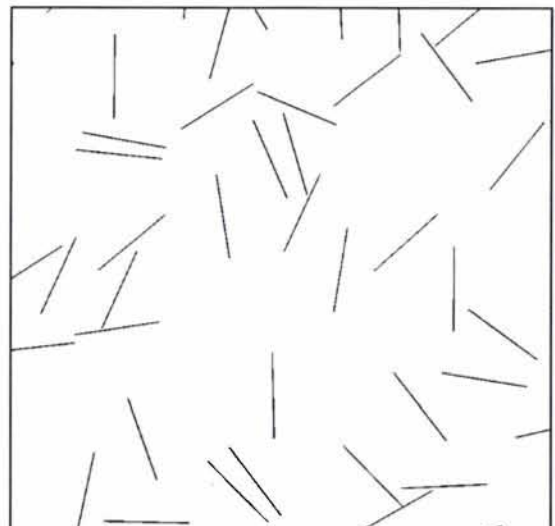
Σχ. 179 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



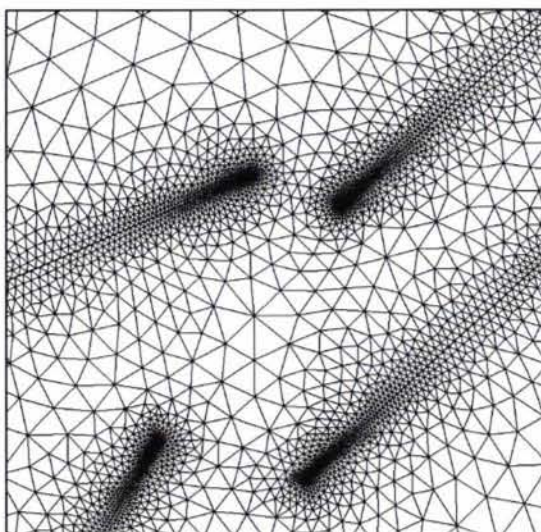
Σχ. 180 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=1.2$



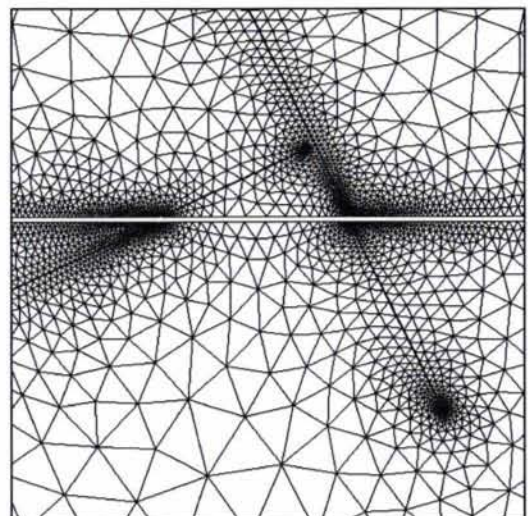
Σχ. 181 – Γενική άποψη γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



Σχ. 182 – Τυπική λεπτομέρεια γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



Σχ. 183 – Τυπική λεπτομέρεια πλέγματος  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



Σχ. 184 – Τυπική λεπτομέρεια περιοδικής γεωμετρίας  $\alpha=1000$ ,  $\alpha\phi=1$ ,  $\theta=0$ ,  $\epsilon=\pi/2$



#### 14.10 EES v8.4

Παρατίθεται το πρόγραμμα του EES για τον υπολογισμό των γεωμετριών του μοντέλου. Οι τιμές των  $n$  και  $e$  δίνονται σε πίνακα ως εξής :  $n=500, e=0, 0.1, 0.2, \dots, 1.0, 1.2, 1.4, 1.5708$ . Από το πρόγραμμα υπολογίζονται οι τιμές των  $by, L, t$  οι οποίες στη συνέχεια διαβάζονται από το πρόγραμμα AutoPilot για την κατασκευή της γεωμετρίας.

```
f=0,001
a=1000

bx=100
bx=by
vb=bx*by

vf=f*vb
vf2=vf/n
L*t=vf2
a=1/t

dtr=e*180,0/pi

check2=vf/vb
check=a*f

n=500
```

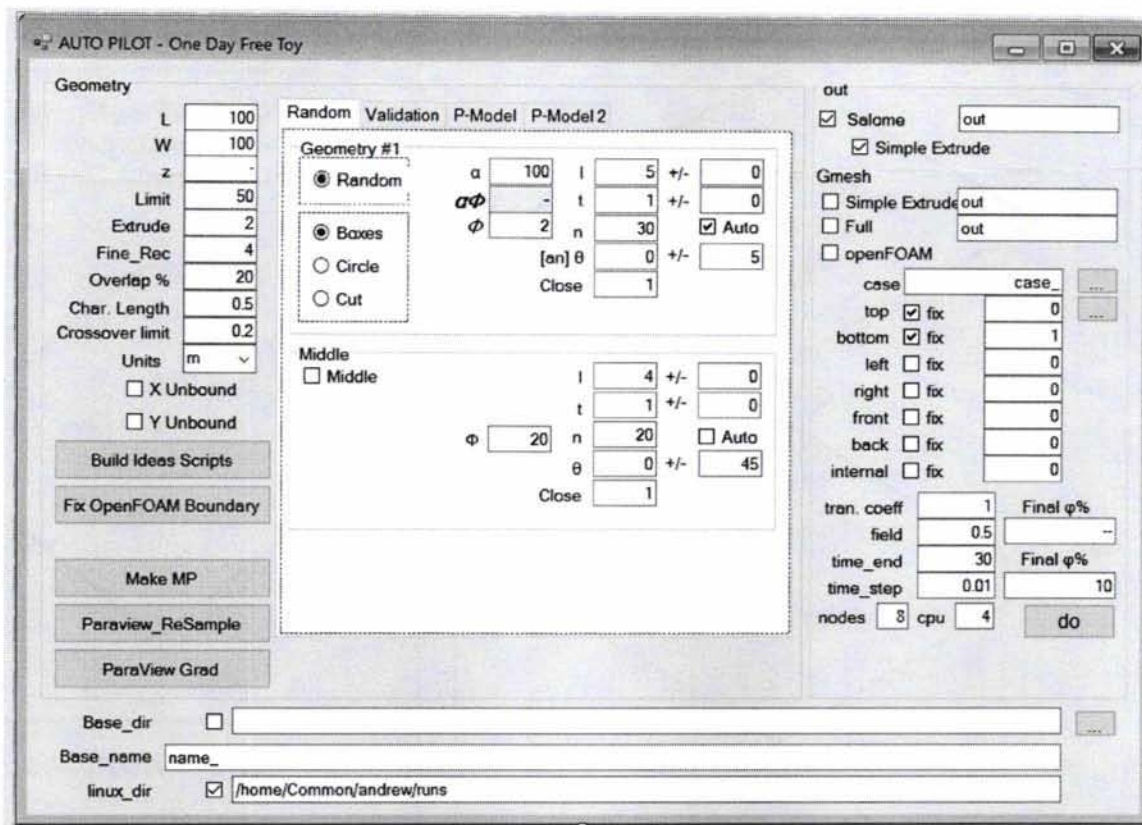
Πίνακας που παράγεται από το EES για κατασκευή γεωμετρίας:

vb	bx	by	L	t	n	model	dtr	e	a	af	vf	c2	DYY	Model
10000	100	100	4,472	0,004472	500	1	0	0	1000	1	10	0,001	0,666	1
10000	100	100	4,472	0,004472	500	0,995028	5,73	0,1	1000	1	10	0,001	0,667108	0,995028
10000	100	100	4,472	0,004472	500	0,980329	11,46	0,2	1000	1	10	0,001	0,670405	0,980329
10000	100	100	4,472	0,004472	500	0,956532	17,19	0,3	1000	1	10	0,001	0,675812	0,956532
10000	100	100	4,472	0,004472	500	0,924623	22,92	0,4	1000	1	10	0,001	0,6832	0,924623
10000	100	100	4,472	0,004472	500	0,885864	28,65	0,5	1000	1	10	0,001	0,692395	0,885864
10000	100	100	4,472	0,004472	500	0,841696	34,38	0,6	1000	1	10	0,001	0,70318	0,841696
10000	100	100	4,472	0,004472	500	0,793639	40,11	0,7	1000	1	10	0,001	0,715302	0,793639
10000	100	100	4,472	0,004472	500	0,743204	45,84	0,8	1000	1	10	0,001	0,728482	0,743204
10000	100	100	4,472	0,004472	500	0,691819	51,57	0,9	1000	1	10	0,001	0,742419	0,691819
10000	100	100	4,472	0,004472	500	0,640779	57,3	1	1000	1	10	0,001	0,756801	0,640779
10000	100	100	4,472	0,004472	500	0,544063	68,75	1,2	1000	1	10	0,001	0,78564	0,544063
10000	100	100	4,472	0,004472	500	0,459915	80,21	1,4	1000	1	10	0,001	0,81258	0,459915
10000	100	100	4,472	0,004472	500	0,401179	90	1,57086	1000	1	10	0,001	0,832507	0,401179



### 14.11 AutoPilot

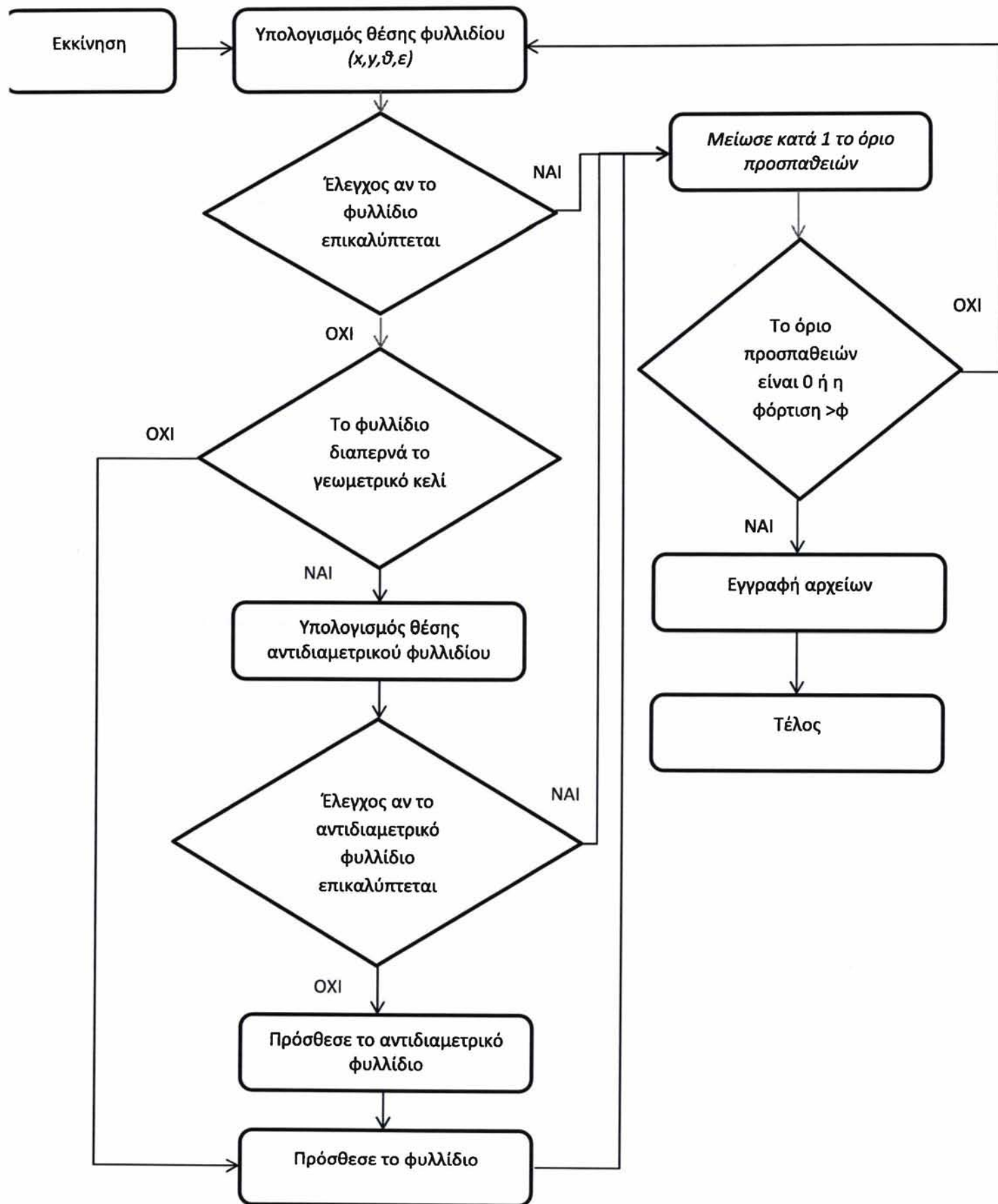
Παρατίθεται εικόνα του GUI του προγράμματος που κατασκευάζει τη γεωμετρία καθώς και τα script που χρησιμοποιούνται από το cluster για τη επίλυση των μοντέλων:



Ενδεικτικά αναφέρεται ότι το πρόγραμμα κατασκευάστηκε από το μηδέν (from scratch) σε Visual Basic .NET σε περιβάλλον Microsoft Visual Studio 2015 για τις ανάγκες της διπλωματικής εργασίας και μπορεί να κάνει τα εξής :

1. Παράγει αρχεία πλεγμάτων για το Salome και το GMesh.
2. Παράγει τα script που απαιτούνται για τον υπολογισμό των πλεγμάτων από το Salome στο περιβάλλον του υπολογιστικού cluster του εργαστηρίου.
3. Παράγει τα script που απαιτούνται για την μετατροπή των πλεγμάτων από το βοηθητικό πρόγραμμα του OpenFOAM ideasUnvToFoam.
4. Παράγει τα αρχεία των συνοριακών συνθηκών που απαιτούνται από τον OpenFOAM.
5. Παράγει τα αρχεία που απαιτούνται για την εκτέλεση των υπολογισμών από το υπολογιστικό cluster.
6. Παράγει τα αρχεία μακροεντολών που απαιτούνται από το ParaView για τον υπολογισμό των μεταβλητών πεδίου.
7. Διαβάζει τα παραγόμενα αρχεία από το ParaView και τα εξάγει για χρήση από το Origin ή το Excel.

#### 14.12 Αλγόριθμος RSA



### 14.13 Salome v7.7.1

Παρατίθεται ενδεικτικά ένα αρχείο σε python για την κατασκευή της γεωμετρίας από το Salome.

```
import salome
salome.salome_init()
import GEOM
from salome.geom import geomBuilder
geompy = geomBuilder.New(salome.myStudy)
import SMESH
from salome.smesh import smeshBuilder
smesh = smeshBuilder.New(salome.myStudy)
import math
theStudy = salome.myStudy
from geompy import *
# basic unit
unit = 1
# extrusion length
extru = 0.1
duct_height = 20
duct_length = 20
# basic coordinate
#
p0 = geompy.MakeVertex(0, 0, 0)
dx = geompy.MakeVectorDXDYDZ(unit, 0, 0)
dy = geompy.MakeVectorDXDYDZ(0, unit, 0)
dz = geompy.MakeVectorDXDYDZ(0, 0, unit)
geompy.addToStudy(p0, 'p0')
geompy.addToStudy(dx, 'dx')
geompy.addToStudy(dy, 'dy')
geompy.addToStudy(dz, 'dz')
print 'basic coordinate built. File :test_r'

# geometry construction
#
# points
p1 = geompy.MakeVertex(duct_length, 0, 0)
p2 = geompy.MakeVertex(0, duct_height, 0)
p3 = geompy.MakeVertex(0, 0, extru)
p4 = geompy.MakeVertex(duct_length, duct_height, 0)
p5 = geompy.MakeVertex(duct_length, duct_height, extru)
p6 = geompy.MakeVertex(0, duct_height, extru)
p7 = geompy.MakeVertex(duct_length, 0, extru)
geompy.addToStudy(p1, 'p1')
geompy.addToStudy(p2, 'p2')
geompy.addToStudy(p3, 'p3')
geompy.addToStudy(p4, 'p4')
geompy.addToStudy(p5, 'p5')
geompy.addToStudy(p6, 'p6')
geompy.addToStudy(p7, 'p7')
# build edges
Face_0 = geompy.MakePolyline([p0, p1, p4, p2], True)
geompy.addToStudy(Face_0, 'fc_0')
Cut_Mesh = Face_0
PL_1_1 = geompy.MakeVertex(3.745181, 13.02711, 0)
PL_1_2 = geompy.MakeVertex(7.808177, 10.113, 0)
PL_1_3 = geompy.MakeVertex(7.837317, 10.15363, 0)
PL_1_4 = geompy.MakeVertex(3.774321, 13.06774, 0)
Curve_1 = geompy.MakePolyline([PL_1_1, PL_1_2, PL_1_3, PL_1_4], True)
bx_1 = geompy.MakeFaceWires([Curve_1], 1)
PL_2_1 = geompy.MakeVertex(14.32505, 13.66838, 0)
PL_2_2 = geompy.MakeVertex(18.28507, 16.72096, 0)
PL_2_3 = geompy.MakeVertex(18.25455, 16.76056, 0)
PL_2_4 = geompy.MakeVertex(14.29453, 13.70798, 0)
Curve_2 = geompy.MakePolyline([PL_2_1, PL_2_2, PL_2_3, PL_2_4], True)
bx_2 = geompy.MakeFaceWires([Curve_2], 1)
PL_3_1 = geompy.MakeVertex(9.358787, 1.290644, 0)
PL_3_2 = geompy.MakeVertex(14.33463, 0.7997788, 0)
PL_3_3 = geompy.MakeVertex(14.33954, 0.8495372, 0)
PL_3_4 = geompy.MakeVertex(9.363696, 1.340402, 0)
Curve_3 = geompy.MakePolyline([PL_3_1, PL_3_2, PL_3_3, PL_3_4], True)
bx_3 = geompy.MakeFaceWires([Curve_3], 1)
PL_4_1 = geompy.MakeVertex(3.336898, 14.53473, 0)
PL_4_2 = geompy.MakeVertex(7.18287, 11.33966, 0)
PL_4_3 = geompy.MakeVertex(7.21482, 11.37812, 0)
PL_4_4 = geompy.MakeVertex(3.368848, 14.57319, 0)
Curve_4 = geompy.MakePolyline([PL_4_1, PL_4_2, PL_4_3, PL_4_4], True)
bx_4 = geompy.MakeFaceWires([Curve_4], 1)
```



```

PL_5_1 = geompy.MakeVertex(2.395424,19.30967,0)
PL_5_2 = geompy.MakeVertex(7.36714,19.84074,0)
PL_5_3 = geompy.MakeVertex(7.361829,19.89046,0)
PL_5_4 = geompy.MakeVertex(2.390114,19.35939,0)
Curve_5 = geompy.MakePolyline([PL_5_1, PL_5_2, PL_5_3, PL_5_4], True)
bx_5 = geompy.MakeFaceWires([Curve_5], 1)
PL_6_1 = geompy.MakeVertex(5.307559,18.44845,0)
PL_6_2 = geompy.MakeVertex(6.022166,13.49978,0)
PL_6_3 = geompy.MakeVertex(6.071652,13.50693,0)
PL_6_4 = geompy.MakeVertex(5.357046,18.4556,0)
Curve_6 = geompy.MakePolyline([PL_6_1, PL_6_2, PL_6_3, PL_6_4], True)
bx_6 = geompy.MakeFaceWires([Curve_6], 1)
PL_7_1 = geompy.MakeVertex(18.83805,3.522845,0)
PL_7_2 = geompy.MakeVertex(19.15469,8.512809,0)
PL_7_3 = geompy.MakeVertex(19.10479,8.515975,0)
PL_7_4 = geompy.MakeVertex(18.78815,3.526011,0)
Curve_7 = geompy.MakePolyline([PL_7_1, PL_7_2, PL_7_3, PL_7_4], True)
bx_7 = geompy.MakeFaceWires([Curve_7], 1)
PL_8_1 = geompy.MakeVertex(1.027985,2.075407,0)
PL_8_2 = geompy.MakeVertex(5.507099,4.297462,0)
PL_8_3 = geompy.MakeVertex(5.484879,4.342253,0)
PL_8_4 = geompy.MakeVertex(1.005764,2.120198,0)
Curve_8 = geompy.MakePolyline([PL_8_1, PL_8_2, PL_8_3, PL_8_4], True)
bx_8 = geompy.MakeFaceWires([Curve_8], 1)
PL_9_1 = geompy.MakeVertex(7.787908,14.92778,0)
PL_9_2 = geompy.MakeVertex(9.302697,10.16276,0)
PL_9_3 = geompy.MakeVertex(9.350347,10.17791,0)
PL_9_4 = geompy.MakeVertex(7.835557,14.94293,0)
Curve_9 = geompy.MakePolyline([PL_9_1, PL_9_2, PL_9_3, PL_9_4], True)
bx_9 = geompy.MakeFaceWires([Curve_9], 1)
Cut_Mesh = geompy.MakeFaceWires([Cut_Mesh, bx_1, bx_2, bx_3, bx_4, bx_5, bx_6, bx_7, bx_8, bx_9], 1)
Cut_Mesh = geompy.MakeCutList(Cut_Mesh, [], True)
mem = geompy.MakePrismVecH(Cut_Mesh, dz, extru)
geompy.addToStudy( mem, 'membrane' )
sub_faces = SubShapeAllSorted(mem, ShapeType['FACE'])
g_sym = CreateGroup(mem, ShapeType['FACE'])
UnionList(g_sym, sub_faces)

# inlet
sub_faces = GetShapesOnPlane(mem, ShapeType['FACE'], dx, GEOM.ST_ON)
g_inlet = CreateGroup(mem, ShapeType['FACE'])
UnionList(g_inlet, sub_faces)
DifferenceList(g_sym, sub_faces)
addToStudyInFather(mem, g_inlet, 'inlet')

# outlet
sub_faces = GetShapesOnPlaneWithLocation(mem, ShapeType['FACE'], dx, p1, GEOM.ST_ON)
g_outlet = CreateGroup(mem, ShapeType['FACE'])
UnionList(g_outlet, sub_faces)
DifferenceList(g_sym, sub_faces)
addToStudyInFather(mem, g_outlet, 'outlet')

# bottom
sub_faces = GetShapesOnPlane(mem, ShapeType['FACE'], dy, GEOM.ST_ON)

g_bottom = CreateGroup(mem, ShapeType['FACE'])
UnionList(g_bottom, sub_faces)
DifferenceList(g_sym, sub_faces)
addToStudyInFather(mem, g_bottom, 'bottom')
# top
sub_faces = GetShapesOnPlaneWithLocation(mem, ShapeType['FACE'], dy, p2, GEOM.ST_ON)
g_top = CreateGroup(mem, ShapeType['FACE'])
UnionList(g_top, sub_faces)
DifferenceList(g_sym, sub_faces)
addToStudyInFather(mem, g_top, 'top')
# front
sub_faces = GetShapesOnPlaneWithLocation(mem, ShapeType['FACE'], dz, p3, GEOM.ST_ON)
front = CreateGroup(mem, ShapeType['FACE'])
UnionList(front, sub_faces)
DifferenceList(g_sym, sub_faces)
addToStudyInFather(mem, front, 'front')
# back
sub_faces = GetShapesOnPlane(mem, ShapeType['FACE'], dz, GEOM.ST_ON)
back = CreateGroup(mem, ShapeType['FACE'])
UnionList(back, sub_faces)
DifferenceList(g_sym, sub_faces)
addToStudyInFather(mem, back, 'back')

# flakes is finally obtained

```

```

addToStudyInFather(mem, g_sym, 'flakes')
sub_edges = SubShapeAllSorted(mem, ShapeType['EDGE'])
e_sym = CreateGroup(mem, ShapeType['EDGE'])
UnionList(e_sym, sub_edges)

sub_edges = GetShapesOnPlane(mem, ShapeType['EDGE'], dx, GEOM.ST_ON)
e_inlet = CreateGroup(mem, ShapeType['EDGE'])
UnionList(e_inlet, sub_edges)
DifferenceList(e_sym, sub_edges)
addToStudyInFather(mem, e_inlet, 'e_inlet')

sub_edges = GetShapesOnPlaneWithLocation(mem, ShapeType['EDGE'], dx, p1, GEOM.ST_ON)
e_outlet = CreateGroup(mem, ShapeType['EDGE'])
UnionList(e_outlet, sub_edges)
DifferenceList(e_sym, sub_edges)
addToStudyInFather(mem, e_outlet, 'e_outlet')

sub_edges = GetShapesOnPlane(mem, ShapeType['EDGE'], dy, GEOM.ST_ON)
e_bottom = CreateGroup(mem, ShapeType['EDGE'])
UnionList(e_bottom, sub_edges)
DifferenceList(e_sym, sub_edges)
addToStudyInFather(mem, e_bottom, 'e_bottom')

sub_edges = GetShapesOnPlaneWithLocation(mem, ShapeType['EDGE'], dy, p2, GEOM.ST_ON)
e_top = CreateGroup(mem, ShapeType['EDGE'])
UnionList(e_top, sub_edges)
DifferenceList(e_sym, sub_edges)
addToStudyInFather(mem, e_top, 'e_top')

sub_edges = GetShapesOnPlane(mem, ShapeType['EDGE'], dz, GEOM.ST_ON)
e_back = CreateGroup(mem, ShapeType['EDGE'])
UnionList(e_back, sub_edges)
DifferenceList(e_sym, sub_edges)
addToStudyInFather(mem, e_back, 'e_back')

sub_edges = GetShapesOnPlaneWithLocation(mem, ShapeType['EDGE'], dz, p3, GEOM.ST_ON)
e_front = CreateGroup(mem, ShapeType['EDGE'])
UnionList(e_front, sub_edges)
DifferenceList(e_sym, sub_edges)
addToStudyInFather(mem, e_front, 'e_front')

# sym is finally obtained
addToStudyInFather(mem, e_sym, 'flakes')
sub_fl = SubShapeAllSorted(e_front, ShapeType['EDGE'])
sub_bl = SubShapeAllSorted(e_back, ShapeType['EDGE'])
sub_all = SubShapeAllSorted(mem, ShapeType['EDGE'])
e_edge = CreateGroup(mem, ShapeType['EDGE'])
UnionList(e_edge, sub_all)
DifferenceList(e_edge, sub_bl)
DifferenceList(e_edge, sub_fl)
addToStudyInFather(mem, e_edge, 'e_edgeId')
e_int = CreateGroup(front, ShapeType['EDGE'])
UnionList(e_int, sub_fl)
DifferenceList(e_int, [e_top, e_bottom, e_inlet, e_outlet])
addToStudyInFather(mem, e_int, 'e_internal')
e_per = CreateGroup(front, ShapeType['EDGE'])
UnionList(e_per, sub_fl)
e_perim = CutGroups(e_per, e_int)
addToStudyInFather(mem, e_perim, 'e_perimeter')
e_intb = CreateGroup(back, ShapeType['EDGE'])
UnionList(e_intb, sub_bl)
DifferenceList(e_intb, [e_top, e_bottom, e_inlet, e_outlet])
addToStudyInFather(mem, e_intb, 'e_internalback')
e_perb = CreateGroup(back, ShapeType['EDGE'])
UnionList(e_perb, sub_bl)
e_perimb = CutGroups(e_perb, e_intb)
addToStudyInFather(mem, e_perimb, 'e_perimeterback')
small_edges_front = GetEdgesByLength(e_int, 0.0, 0.0505000007525086, 1,1)
addToStudyInFather(mem, small_edges_front, 'small_edges_front')
big_edges_front = GetEdgesByLength(e_int, 0.0505000007525086, 5.05, 0,1)
addToStudyInFather(mem, big_edges_front, 'big_edges_front')
big_edges_back = GetEdgesByLength(e_intb, 0.0505000007525086, 5.05, 0,1)
addToStudyInFather(mem, big_edges_back, 'big_edges_back')
small_edges_back = GetEdgesByLength(e_intb, 0.0, 0.0505000007525086, 1,1)
addToStudyInFather(mem, small_edges_back, 'small_edges_back')
sub_vx = SubShapeAllSorted(e_front, ShapeType['VERTEX'])
e_vx = CreateGroup(mem, ShapeType['VERTEX'])
UnionList(e_vx, sub_vx)
addToStudyInFather(mem, e_vx, 'front_vertices')

```



```

###
### SMESH component
###

import SMESH, SALOMEDS
from salome.smesh import smeshBuilder

smesh = smeshBuilder.New(theStudy)
membrane_1 = smesh.Mesh(mem)
Regular_1D_1 = membrane_1.Segment()
NumberOfSegments_1_0 = Regular_1D_1.NumberOfSegments(1, None, [])
NumberOfSegments_1_0.SetDistrType( 0 )
Prism_3D_2 = membrane_1.Prism()
NETGEN_2D_3 = membrane_1.Triangle(algo=smeshBuilder.NETGEN_1D2D, geom=front)
NETGEN_2D = NETGEN_2D_3.GetSubMesh()
NETGEN_Parameters_2D = NETGEN_2D_3.Parameters()
NETGEN_Parameters_2D.SetMaxSize( 0.5 )
NETGEN_Parameters_2D.SetSecondOrder( 0 )
NETGEN_Parameters_2D.SetOptimize( 1 )
NETGEN_Parameters_2D.SetFineness( 2 )
NETGEN_Parameters_2D.SetMinSize( 0.2 )
NETGEN_Parameters_2D.SetUseSurfaceCurvature( 1 )
NETGEN_Parameters_2D.SetFuseEdges( 1 )
NETGEN_Parameters_2D.SetQuadAllowed( 0 )
NETGEN_Parameters_2D.SetLocalSizeOnShape(e_vx, 0.2)
SegmentAroundVertex_0D_4 = smesh.CreateHypothesis('SegmentAroundVertex_0D_4')
status = membrane_1.AddHypothesis(SegmentAroundVertex_0D_4, e_perim)
#status = membrane_1.AddHypothesis(SegmentAroundVertex_0D_4, Vertex_243)
#SegmentLengthAroundVertex_0_004472 = Regular_1D_1.LengthNearVertex(0.2)
Regular_1D_1_1 = membrane_1.Segment(geom=e_perim)
Sub_mesh_2 = Regular_1D_1_1.GetSubMesh()
MaxLength_3 = Regular_1D_1_1.MaxSize(0.1)
isDone = membrane_1.SetMeshOrder( [ [ Sub_mesh_2, NETGEN_2D ] ] )
status = membrane_1.AddHypothesis(SegmentAroundVertex_0D_4, big_edges_front)
#status = membrane_1.AddHypothesis(SegmentAroundVertex_0D_4, Vertex_243_1)
#SegmentLengthAroundVertex_0_004472_1 = Regular_1D_1.LengthNearVertex(0.2)
Regular_1D_1_2 = membrane_1.Segment(geom=big_edges_front)
Sub_mesh_3 = Regular_1D_1_2.GetSubMesh()
MaxLength_5 = Regular_1D_1_2.MaxSize(0.2 * 20.0 )
Length_Near_Vertex_1 = Regular_1D_1.LengthNearVertex(0.2)
status = membrane_1.AddHypothesis(Length_Near_Vertex_1, big_edges_front)
isDone = membrane_1.SetMeshOrder( [ [ Sub_mesh_2, Sub_mesh_3, NETGEN_2D ] ] )
isDone = membrane_1.Compute()
left = membrane_1.GroupOnGeom(g_inlet, 'inlet', SMESH.FACE)
right = membrane_1.GroupOnGeom(g_outlet, 'outlet', SMESH.FACE)
bottom_1 = membrane_1.GroupOnGeom(g_bottom, 'bottom', SMESH.FACE)
top_1 = membrane_1.GroupOnGeom(g_top, 'top', SMESH.FACE)
front_1 = membrane_1.GroupOnGeom(front, 'front', SMESH.FACE)
back_1 = membrane_1.GroupOnGeom(back, 'back', SMESH.FACE)
internal = membrane_1.GroupOnGeom(g_sym, 'flakes', SMESH.FACE)
left.SetName( 'left' )
right.SetName( 'right' )
internal.SetName( 'internal' )

membrane_1.ExportUNV( r'/test_r/test_r.unv' )

## Set names of Mesh objects
smesh.SetName(Regular_1D_1.GetAlgorithm(), 'Regular_1D_1')
smesh.SetName(NETGEN_2D_3.GetAlgorithm(), 'NETGEN_2D_3')
smesh.SetName(Prism_3D_2.GetAlgorithm(), 'Prism_3D_2')
smesh.SetName(NETGEN_Parameters_2D, 'NETGEN_Parameters_2D')
smesh.SetName(MaxLength_3, 'MaxLength_3')
smesh.SetName(SegmentAroundVertex_0D_4, 'SegmentAroundVertex_0D_4')
smesh.SetName(NumberOfSegments_1_0, 'NumberOfSegments=1, [], 0:1:1:14')
#smesh.SetName(SegmentLengthAroundVertex_0_004472_1, 'SegmentLengthAroundVertex=0.004472')
smesh.SetName(Length_Near_Vertex_1, 'Length_Near_Vertex_1')
#smesh.SetName(SegmentLengthAroundVertex_0_004472, 'SegmentLengthAroundVertex=0.004472')
smesh.SetName(MaxLength_5, 'MaxLength_5')
smesh.SetName(NETGEN_2D, 'NETGEN_2D')
smesh.SetName(membrane_1.GetMesh(), 'membrane')
smesh.SetName(Sub_mesh_3, 'Sub-mesh_3')
smesh.SetName(Sub_mesh_2, 'Sub-mesh_2')

print 'ended'
salome.myStudyManager.Close(theStudy)

```



#### 14.14 Salome Script

Παρατίθεται το script (*FullSalome.sh*) που εκτελείται στον κεντρικό κόμβο του cluster και καλεί τα υπο-script για την κατασκευή των πλεγμάτων στο cluster:

```
#!/bin/bash
chmod +x p_salome_00.sh
chmod +x p_salome_01.sh
chmod +x p_salome_02.sh
chmod +x p_salome_03.sh
chmod +x p_salome_04.sh
chmod +x p_salome_05.sh
chmod +x p_salome_06.sh
chmod +x p_salome_07.sh

eval "nohup ./p_salome_00.sh >> s_00.txt &"
eval "ssh mpiuser@n1 'sh' < /home/Common/andrew/runs/n1000/0_00001x/cases/p_salome_01.sh >> s_01.txt &"
eval "ssh mpiuser@n2 'sh' < /home/Common/andrew/runs/n1000/0_00001x/cases/p_salome_02.sh >> s_02.txt &"
eval "ssh mpiuser@n3 'sh' < /home/Common/andrew/runs/n1000/0_00001x/cases/p_salome_03.sh >> s_03.txt &"
eval "ssh mpiuser@n4 'sh' < /home/Common/andrew/runs/n1000/0_00001x/cases/p_salome_04.sh >> s_04.txt &"
eval "ssh mpiuser@n5 'sh' < /home/Common/andrew/runs/n1000/0_00001x/cases/p_salome_05.sh >> s_05.txt &"
eval "ssh mpiuser@n6 'sh' < /home/Common/andrew/runs/n1000/0_00001x/cases/p_salome_06.sh >> s_06.txt &"
eval "ssh mpiuser@n7 'sh' < /home/Common/andrew/runs/n1000/0_00001x/cases/p_salome_07.sh >> s_07.txt &"
```

Παρατίθεται ένα script (*p\_salome\_xx.sh*) που τρέχει στον κόμβο *xx* του cluster:

```
#!/bin/bash
f="/home/Common/andrew/runs/n1000/0_00001x/cases"
k "~/salome/appli_v7_7_1/salome killall"
d "~/salome/appli_v7_7_1/runAppli -t"
$f/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e00_00_n0500_r05/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e00_00_n0500_r05.py
$f/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e05_73_n0500_r02/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e05_73_n0500_r02.py
$f/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e11_46_n0500_r04/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e11_46_n0500_r04.py
$f/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e17_19_n0500_r06/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e17_19_n0500_r06.py
$f/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e28_65_n0500_r01/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e28_65_n0500_r01.py
$f/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e34_38_n0500_r03/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e34_38_n0500_r03.py
$f/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e40_11_n0500_r05/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e40_11_n0500_r05.py
$f/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e45_84_n0500_r07/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e45_84_n0500_r07.py
$f/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e57_30_n0500_r02/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e57_30_n0500_r02.py
$f/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e68_75_n0500_r04/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e68_75_n0500_r04.py
$f/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e80_21_n0500_r06/pm_a1000_f0_00001_L0_447_e80_21_n0500_r06.py"
eval "$d"
eval "$k"
```

### 14.15 OpenFOAM v.3.0.1

Παρατίθεται το script (*s1.sh*) με το οποίο γίνεται η μετατροπή των πλεγμάτων με το βοηθητικό πρόγραμμα *ideasUnvToFoam*:

```
#!/bin/bash
cd pm_al000_f0_00001_L0_447_e00_00_n0500_r01
ideasUnvToFoam pm_al000_f0_00001_L0_447_e00_00_n0500_r01.unv
cd ..

cd pm_al000_f0_00001_L0_447_e00_00_n0500_r02
ideasUnvToFoam pm_al000_f0_00001_L0_447_e00_00_n0500_r02.unv
cd ..

cd pm_al000_f0_00001_L0_447_e00_00_n0500_r03
ideasUnvToFoam pm_al000_f0_00001_L0_447_e00_00_n0500_r03.unv
cd ..

cd pm_al000_f0_00001_L0_447_e00_00_n0500_r04
ideasUnvToFoam pm_al000_f0_00001_L0_447_e00_00_n0500_r04.unv
cd ..
```

...

Επίσης παρατίθεται το script (*mp\_xx.sh*) με το οποίο γίνεται ο υπολογισμός στο υπολογιστικό cluster όπου *xx* ο αριθμός των υπολογιστικών πυρήνων:

```
#!/bin/bash
cd pm_al000_f0_00001_L0_447_e00_00_n0500_r01
decomposePar -force
mpirun -hostfile ../m.txt -np 36 laplacianFoam -parallel
reconstructPar
cd ..

cd pm_al000_f0_00001_L0_447_e00_00_n0500_r02
decomposePar -force
mpirun -hostfile ../m.txt -np 36 laplacianFoam -parallel
reconstructPar
cd ..

cd pm_al000_f0_00001_L0_447_e00_00_n0500_r03
decomposePar -force
mpirun -hostfile ../m.txt -np 36 laplacianFoam -parallel
reconstructPar
cd ..

cd pm_al000_f0_00001_L0_447_e00_00_n0500_r04
decomposePar -force
mpirun -hostfile ../m.txt -np 36 laplacianFoam -parallel
reconstructPar
cd ..
```

...



## 14.16 Paraview v4.4.0

Παρατίθεται τμήμα της μακροεντολής με την οποία γίνεται η επεξεργασία των δεδομένων από το υπολογιστικό μοντέλο του OpenFOAM. Το συγκεκριμένο τμήμα αφορά την επεξεργασία των δεδομένων για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος *gradTy* από ένα αρχείο:

```
#### AUTO SCRIPT FOR PARAVIEW RESAMPLING
from paraview.simple import *
paraview.simple._DisableFirstRenderCameraReset()
renderView1 = GetActiveViewOrCreate('RenderView')
Delete(renderView1)
del renderView1
#### import the simple module from the paraview

# create a new 'OpenFOAMReader'
pm_al000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r01_foam =
OpenFOAMReader(FileName='/home/Common/andrew/runs/n1000/0_0002/cases/pm_al000_f0_00020_L2_000_
e90_00_n0500_r01/pm_al000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r01.foam')
pm_al000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r01_foam.MeshRegions = ['internalMesh']
pm_al000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r01_foam.CellArrays = ['T', 'gradTx', 'gradTy',
'gradTz']

# get animation scene
animationScene1 = GetAnimationScene()

# update animation scene based on data timesteps
animationScene1.UpdateAnimationUsingDataTimeSteps()

animationScene1.GoToLast()

# Properties modified on pm_al000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r01_foam
pm_al000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r01_foam.MeshRegions = ['top']

# Create a new 'Render View'
renderView1 = CreateView('RenderView')
renderView1.ViewSize = [1000, 546]
renderView1.AxesGrid = 'GridAxes3DActor'
renderView1.StereoType = 0
renderView1.Background = [0.32, 0.34, 0.43]

# get layout
viewLayout1 = GetLayout()

# place view in the layout
viewLayout1.AssignView(0, renderView1)

# show data in view
pm_al000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r01_foamDisplay =
Show(pm_al000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r01_foam, renderView1)
# trace defaults for the display properties.
pm_al000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r01_foamDisplay.ColorArrayName = [None, '']

# reset view to fit data
renderView1.ResetCamera()

#changing interaction mode based on data extents
renderView1.InteractionMode = '2D'
renderView1.CameraPosition = [50.0, 10100.0, 0.25]
renderView1.CameraFocalPoint = [50.0, 100.0, 0.25]
renderView1.CameraViewUp = [1.0, 0.0, 0.0]

# set scalar coloring
ColorBy(pm_al000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r01_foamDisplay, ('FIELD', 'vtkBlockColors'))

# show color bar/color legend
pm_al000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r01_foamDisplay.SetScalarBarVisibility(renderView1,
True)

# get color transfer function/color map for 'vtkBlockColors'
vtkBlockColorsLUT = GetColorTransferFunction('vtkBlockColors')

# get opacity transfer function/opacity map for 'vtkBlockColors'
vtkBlockColorsPWF = GetOpacityTransferFunction('vtkBlockColors')

# create a new 'Plot Over Line'
```

```

plotOverLine1 = PlotOverLine(Input=pm_a1000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r01_foam,
    Source='High Resolution Line Source')

# init the 'High Resolution Line Source' selected for 'Source'
plotOverLine1.Source.Point1 = [0.0, 100.0, 0.0]
plotOverLine1.Source.Point2 = [100.0, 100.0, 0.5]

# Properties modified on plotOverLine1
plotOverLine1.Tolerance = 2.22044604925031e-16

# Properties modified on plotOverLine1.Source
plotOverLine1.Source.Point1 = [0.0, 100, 0.0125]
plotOverLine1.Source.Point2 = [100, 100, 0.0125]
plotOverLine1.Source.Resolution = 40000
plotOverLine1.PassPartialArrays = 0

# Create a new 'Line Chart View'
lineChartView1 = CreateView('XYChartView')
lineChartView1.ViewSize = [495, 546]

# place view in the layout
viewLayout1.AssignView(2, lineChartView1)

# show data in view
plotOverLine1Display = Show(plotOverLine1, lineChartView1)
# trace defaults for the display properties.
plotOverLine1Display.CompositeDataSetIndex = [0]
plotOverLine1Display.UseIndexForXAxis = 0
plotOverLine1Display.XArrayName = 'arc_length'
plotOverLine1Display.SeriesVisibility = ['gradTx', 'gradTy', 'gradTz', 'T']
plotOverLine1Display.SeriesLabel = ['arc_length', 'arc_length', 'gradTx', 'gradTx', 'gradTy',
'gradTy', 'gradTz', 'gradTz', 'T', 'T']
plotOverLine1Display.SeriesColor = ['arc_length', '0', '0', '0', 'gradTx', '0.89', '0.1',
'0.11', 'gradTy', '0.22', '0.49', '0.72', 'gradTz', '0.3', '0.69', '0.29', 'T', '0.6', '0.31',
'0.64']
plotOverLine1Display.SeriesPlotCorner = ['arc_length', '0', 'gradTx', '0', 'gradTy', '0',
'gradTz', '0', 'T', '0']
plotOverLine1Display.SeriesLineStyle = ['arc_length', '1', 'gradTx', '1', 'gradTy', '1',
'gradTz', '1', 'T', '1']
plotOverLine1Display.SeriesLineThickness = ['arc_length', '2', 'gradTx', '2', 'gradTy', '2',
'gradTz', '2', 'T', '2']
plotOverLine1Display.SeriesMarkerStyle = ['arc_length', '0', 'gradTx', '0', 'gradTy', '0',
'gradTz', '0', 'T', '0']

# create a new 'Integrate Variables'
integrateVariables1 = IntegrateVariables(Input=plotOverLine1)

# Create a new 'SpreadSheet View'
spreadSheetView1 = CreateView('SpreadSheetView')
spreadSheetView1.BlockSize = 1024L
# uncomment following to set a specific view size
# spreadSheetView1.ViewSize = [400, 400]

# place view in the layout
viewLayout1.AssignView(6, spreadSheetView1)

# show data in view
integrateVariables1Display = Show(integrateVariables1, spreadSheetView1)

# set active source
SetActiveSource(integrateVariables1)

# save data
SaveData('/home/Common/andrew/runs/n1000/0_0002/cases/pm_a1000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r0
1/pvTy.csv', proxy=integrateVariables1, Precision=9)

# set active source
SetActiveSource(integrateVariables1)

# set active source
SetActiveSource(plotOverLine1)

# hide data in view
Hide(integrateVariables1, spreadSheetView1)

# destroy integrateVariables1
Delete(integrateVariables1)
del integrateVariables1

```

```

# set active source
SetActiveSource(pm_a1000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r01_foam)

# hide data in view
Hide(plotOverLine1, lineChartView1)

# destroy plotOverLine1
Delete(plotOverLine1)
del plotOverLine1

# destroy pm_a1000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r01_foam
Delete(pm_a1000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r01_foam)
del pm_a1000_f0_00020_L2_000_e90_00_n0500_r01_foam

# update animation scene based on data timesteps
animationScene1.UpdateAnimationUsingDataTimeSteps()

# destroy spreadSheetView1
Delete(spreadSheetView1)
del spreadSheetView1

# close an empty frame
viewLayout1.Collapse(6)

# set active view
SetActiveView(lineChartView1)

# destroy lineChartView1
Delete(lineChartView1)
del lineChartView1

# close an empty frame
viewLayout1.Collapse(2)

# set active view
SetActiveView(renderView1)

# destroy renderView1
Delete(renderView1)
del renderView1

```