

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΩΝ



Επίβλεπων : Καθ. ΕΜΠ, Δ. Μανωλάκος

**ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ
ΣΤΗ ΜΟΡΦΟΠΟΙΗΣΗ
ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ ΥΛΙΚΩΝ**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ ΤΟΥ
ΜΙΧΑΛΟΠΟΥΛΟΥ ΧΑΡΗ

ΑΘΗΝΑ, ΣΕΠΤΕΜΒΡΙΟΣ 2009

Αφιερώνεται στους γονείς μου
για την αμέριμνη συμπαράσταση
τους κατά τη διάρκεια
των σπουδών μου στο Ε.Μ.Π.

Περιεχόμενα

1	ΧΗΜΕΙΑ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ.	1
1.1	ΠΛΑΣΤΙΚΑ ΚΑΙ ΠΟΛΥΜΕΡΗ.	1
1.2	ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΝΝΟΙΕΣ.	6
1.2.1	ΟΝΟΜΑΤΟΛΟΓΙΑ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ.	7
1.2.2	ΤΑΞΙΝΟΜΗΣΗ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ.	10
1.3	ΔΕΣΜΙΚΕΣ ΔΥΝΑΜΕΙΣ.	17
1.4	ΜΙΚΡΟΔΟΜΗ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ.	18
1.5	ΜΟΡΙΑΚΑ ΒΑΡΗ ΚΑΙ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ.	24
2	ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ.	26
2.1	ΔΙΕΠΟΥΣΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ.	27
2.1.1	ΕΞΙΣΩΣΗ ΣΥΝΕΧΕΙΑΣ.	27
2.1.2	ΕΞΙΣΩΣΗ ΚΙΝΗΣΗΣ.	28
2.1.3	ΘΕΡΜΙΚΗ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΗ ΕΞΙΣΩΣΗ.	29
2.1.4	ΔΟΜΙΚΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΣΥΝΕΧΕΙΑΣ.	30
2.2	ΚΑΤΗΓΟΡΙΟΠΟΙΗΣΗ ΤΩΝ ΧΡΟΝΟΑΝΕΞΑΡΤΗΤΩΝ ΑΝΕΛΑΣΤΙΚΩΝ ΡΕΥΣΤΩΝ.	30
2.2.1	ΝΕΥΤΩΝΕΙΑ ΡΕΥΣΤΑ.	31
2.2.2	ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΗ ΜΟΡΦΗ ΝΕΥΤΩΝΕΙΩΝ ΡΕΥΣΤΩΝ.	31
2.3	ΧΡΟΝΟΕΞΑΡΤΗΜΕΝΑ ΑΝΕΛΑΣΤΙΚΑ ΡΕΥΣΤΑ.	36
2.4	ΙΞΩΔΟΕΛΑΣΤΙΚΑ ΡΕΥΣΤΑ.	36

2.4.1	ΜΕΤΑΒΛΗΤΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΔΙΑΤΗΡΗΣΗΣ ΤΩΝ ΙΞΩΔΟΕΛΑΣΤΙΚΩΝ ΡΕΥΣΤΩΝ.	37
2.4.2	ΔΙΑΦΟΡΙΚΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΔΙΑΤΗΡΗΣΗΣ ΙΞΩΔΟΕΛΑΣΤΙΚΩΝ ΡΕΥΣΤΩΝ.	39
2.4.3	ΟΛΟΚΛΗΡΩΤΙΚΗ ΜΟΡΦΗ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΔΙΑΤΗΡΗΣΗΣ ΙΞΩΔΟΕΛΑΣΤΙΚΩΝ ΡΕΥΣΤΩΝ.	41
2.5	ΙΞΩΔΟΜΕΤΡΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ (ΤΟ ΠΡΩΤΥΠΟ CEF).	43
3	ΣΤΑΘΜΙΣΜΕΝΑ ΥΠΟΛΟΙΠΟΜΕΝΑ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ.	45
3.1	ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΜΕΣΩ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ.	47
3.1.1	ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΑΡΕΜΒΟΛΗΣ.	49
3.1.2	ΣΧΗΜΑΤΙΚΕΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ ΚΟΙΝΟΤΥΠΩΝ ΠΑΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ.	53
3.1.3	ΜΗ ΚΑΝΟΝΟΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ.	59
3.1.4	ΜΕΘΟΔΟΣ STREAMLINE UPWIND PETROV - GALERKIN	61
3.2	ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΗΣ UPWINDING (ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ).	63
3.2.1	ΜΕΘΟΔΟΣ ΕΛΑΧΙΣΤΩΝ ΤΕΤΡΑΓΩΝΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ.	72
3.3	ΕΠΙΛΥΣΗ ΧΡΟΝΟΒΞΑΡΤΗΜΕΝΩΝ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΩΝ.	73
4	ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΠΟΛΥΜΕΡΟΥΣ ΡΟΗΣ.	78
4.1	ΕΠΙΛΥΣΗ ΤΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΣΥΝΕΧΕΙΑΣ ΚΑΙ ΚΙΝΗΣΗΣ.	78
4.1.1	ΜΕΘΟΔΟΣ UVP.	79
4.2	ΜΕΘΟΔΟΣ UVP ΒΑΣΙΣΜΕΝΗ ΣΤΗΝ ΕΞΙΣΩΣΗ ΣΥΝΕΧΕΙΑΣ ΤΩΝ ΣΥΜΠΙΕΣΤΩΝ ΡΕΥΣΤΩΝ.	82
4.2.1	ΜΕΘΟΔΟΣ PENALTY.	82
4.2.2	ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΩΝ ΕΛΑΧΙΣΤΩΝ ΤΕΤΡΑΓΩΝΩΝ.	85
4.2.3	Η ΜΕΘΟΔΟΣ VOF ΣΕ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ EULER.	86
4.2.4	ΜΕΘΟΔΟΣ VOF ΣΕ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΑΥΘΑΙΡΕΤΑ EULER ΚΑΙ LAGRANGE.	87
4.2.5	ΜΕΘΟΔΟΣ VOF ΣΕ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ LAGRANGE.	88

5 ΤΡΙΣΔΙΑΣΤΑΤΗ ΔΙΑΜΟΡΦΩΣΗ ΡΟΗΣ.	94
5.1 ΠΕΡΙΛΗΨΗ.	94
5.2 ΕΙΣΑΓΩΓΗ.	95
5.3 ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ.	96
5.3.1 ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΤΟΥ ΥΛΙΚΟΥ.	98
5.4 ΑΝΑΛΥΤΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ.	102
5.4.1 ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΤΗΣ ΕΞΩΘΕΡΜΗΣ ΜΗΤΡΑΣ ΓΙΑ ΒΕΛΤΙΣΤΟ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟ.	102
5.5 ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ.	104
5.5.1 ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΤΗΣ ΜΗΤΡΑΣ ΜΕ ΑΡΙ- ΘΜΗΤΙΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ.	104
5.6 ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΠΙΕΣΗΣ ΤΩΝ ΤΑΣΕΩΝ ΣΤΑ ΠΟΔΙΑ ΤΗΣ ΑΡΑΧΝΗΣ.	108
5.7 ΣΥΝΟΨΗ ΚΑΙ ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.	109
Βιβλιογραφία	110

Ευχαριστίες

Η παρούσα διπλωματική εργασία εκπονήθηκε στο εργαστήριο του Τομέα Τεχνολογίας των Κατεργασιών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου υπό την επίβλεψη του Καθηγητή Ε.Μ.Π. κ. Δημητρίου Μανωλάκου. Στο σημείο αυτό θα ήθελα να εκφράσω τις ειλικρινείς ευχαριστίες μου προς το πρόσωπο του καθηγητή Ε.Μ.Π. κ. Δημήτριο Μανωλάκο για την απεριόριστη συμπαράσταση του κατά τη διάρκεια εκτέλεσης του πειράματος. Οι υποδείξεις του οποίου με καθοδήγησαν περί τη συνέχιση εκτύλιξης του μίτου της Αριάδνης ή τομής του γόρδιου δεσμού. Επίσης θα ήθελα να εκφράσω τις ευχαριστίες μου προς τον υποψήφιο Διδάκτορα του τμήματος Μηχανολόγων Μηχανικών κ. Κούζιλο Γεώργιο για το χρόνο και τις γνώσεις που μου προσέφερε σ' όλη τη διάρκεια πραγμάτωσης της διπλωματικής μου εργασίας, χωρίς τη συνεχή καθοδήγηση του οποίου θα ήταν αδύνατη η εκπόνηση της. Οφείλω να ευχαριστήσω τους συνάδελφους και φίλους από το Εργαστήριο του Τομέα Τεχνολογίας των Κατεργασιών του Τμήματος Μηχανολόγων Μηχανικών του Ε.Μ.Π., καθώς και τους προσωπικούς μου φίλους, για τη βοήθεια και συνεργασία τους κατά την πορεία της διπλωματικής μου εργασίας. Τέλος θα ήθελα να εκφράσω τις ευχαριστίες μου προς τους γονείς και τα αδέρφια μου για την ανοχή που υπέδειξαν όλο αυτό το διάστημα.

Έποψη

Μια σύντομη αλλά περιεκτική αναδρομή στη χημική σύσταση και τη χρήση των Πολυμερών (Κεφάλαιο 1) είναι αρκετή για να κατανοήσουμε την αλματώδη εξέλιξη της βιομαχανίας των Πλαστικών και την επίδραση της σε όλους τους τομείς της ανθρώπινης δραστηριότητας, όπως π.χ. την κατασκευή κτιρίων, μηχανημάτων, τη συσκευασία τροφίμων κ.λπ.

Ωστόσο, η σύγχρονη βιομηχανία απαιτεί τη χρήση υπολογιστικών μεθόδων για τη μοντελοποίηση της πολυμερούς ροής. Εξαιτίας της εξέχουσας σημασίας των εξισώσεων των μη-Νευτώνειων Ρευστών στην πολυμερή επεξεργασία, είναι σημαντική η κατανόηση της θεωρητικής θεμελίωσης αυτών των εξισώσεων (Κεφάλαιο 2). Μετά τη σύντομη περιγραφή των βασικών εξισώσεων της μηχανικής των μη-Νευτώνειων Ρευστών επιχειρήθηκε η κατηγοριοποίηση των ανελαστικών ρευστών με βάση τη χρονική εξάρτησή τους. Η σημαντικότερη κατηγορία των ανελαστικών ρευστών που ξερτώνται από το χρόνο είναι τα ιζωδοελαστικά ρευστά, όπου δόθηκαν οι εξισώσεις τους σε διαφορική και ολοκληρωτική μορφή.

Στο τρίτο Κεφάλαιο πραγματοποιήθηκε μια γενική προσέγγιση της μεθόδου των Σταθμισμένων Υπολοίπων των Πεπερασμένων Στοιχείων που αποτελεί την αποτελεσματικότερη και πιο σύγχρονη μέθοδο Αριθμητικής Προσέγγισης για τις πολυμερείς ροές. Αναφερθήκαμε στις μεθόδους Παρεμβολής για κοινότυπα Πεπερασμένα Στοιχεία. Εν συνεχεία αναφερθήκαμε σε ‘μη κανονικά’ πεπερασμένα στοιχεία όπως τα στοιχεία Taylor-Hood και Crouzeix-Raviart τα οποία χρησιμοποιούνται ευρέως για να μοντελοποιήσουν περιοχές πολυμερούς ροής. Ο περιορισμός του σφάλματος, της μεθόδου προσέγγισης της ροής μέσω των Σταθμισμένων Υπολοίπων των Πεπερασμένων Στοιχείων, πραγματοποιήθηκε μέσω της εφαρμογής της μεθόδου Streamline Upwind.

Το τέταρτο Κεφάλαιο περιλαμβάνει τις μεθόδους μοντελοποίησης προβλημάτων ασυμπίεστης ροής και συγκεκριμένα, τη μέθοδο UVP, τη συνεχή και τη διακριτοποιημένη μέθοδο Penalty, τη μέθοδο V.O.F. σε συστήματα Euler και Lagrange καθώς και τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων οι οποίες μοντελοποιούν τη ροή με τη χρήση Πεπερασμένων Στοιχείων.

Στο Πειραματικό μέρος της παρούσας Διπλωματικής (Κεφάλαιο 5) αναπτύχθηκε μια τρισδιάστατη αριθμητική μέθοδος για να εξετάσει τη μη-ισόθερμη, μη-Νευτώνεια πολυμερή ροή διαμέσου μίας μήτρας εξώθησης, η οποία χρησιμοποιείται για την παραγωγή υψηλής πυκνότητας πολυαιθυλενικών (High-Density Polyethylene) σωλήνων. Το αριθμητικό μοντέλο βασίστηκε στον κώδικά CFD του COMSOL 3.4 (FEM) και χρησιμοποιήθηκε για να υπολογίσει την πίεση της ροής και την κατανομή της θερμοκρασίας σε μία μήτρα

τύπου 'αράχνης'. Η εκτίμηση των μέγιστων πιέσεων που αναπτύχθηκαν στη μήτρα κατά τη διάρκεια της διαδικασίας εξώθησης πιστοποιεί ότι, ακόμα και τα πόδια της αράχνης, τα οποία είναι τα αδύνατα μέρη της μήτρας, μπορούν να αντισταθούν στις πιέσεις κατά τη διάρκεια λειτουργίας της. Το αριθμητικό μοντέλο επίσης υπολόγισε το ποσό της ιξώδους θερμότητας. Επίσης τα δεδομένα της πίεσης και της θερμοκρασίας προέκυψαν χρησιμοποιώντας και μία αναλυτική προσέγγιση. Η αριθμητική προσέγγιση συμφωνεί αρκετά με τα πειραματικά δεδομένα που προέκυψαν κατά τη διάρκεια εξώθησης του υλικού.

Αθήνα, Σεπτέμβριος 2009

Κεφάλαιο 1

ΧΗΜΕΙΑ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ.

1.1 ΠΛΑΣΤΙΚΑ ΚΑΙ ΠΟΛΥΜΕΡΗ.

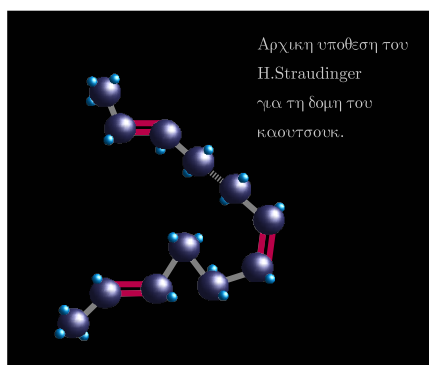
Ορισμένες εποχές ονομάστηκαν από τα υλικά που έφεραν επανάσταση στην καθημερινή ζωή των ανθρώπων. Έτσι π.χ. έχουμε την εποχή του σιδήρου , την εποχή του ορείχαλκου κ.λ.π. Αν κανείς σήμερα ήθελε να δώσει όνομα στην εποχή μας θα την έλεγε αναμφισβήτητα «εποχή των πλαστικών». Πραγματικά , η ανάπτυξη της επιστήμης των πολυμερών ήταν εκθετική συνάρτηση του χρόνου , με καταπληκτική ένταση στα τελευταία είκοσι χρόνια. Θα ήταν σκόπιμη μία σύντομη αναδρομή από τα πρώτα αβέβαια βήματα της «μη στηριζόμενης επί επιστημονικής βάσεως βιομηχανίας πλαστικών» ως την μοντέρνα «μακρομοριακή μηχανική» η οποία πέτυχε να παρασκευάσει πολυμερή με εντελώς προκαθορισμένες ιδιότητες. Πριν από εκατό περίπου χρόνια , οι χημικοί αναγνώρισαν ότι οι ιδιάζουσες ιδιότητες των πολυμερών , όπως π.χ. η ελαστικότητα του καουτσούκ και η πλαστικότητα του κελουλοίτη ήταν αποτέλεσμα του μεγάλου μεγέθους του μορίου τους. Στην αρχή πίστεψαν ότι τα πολυμερή είναι συσσωματώματα μικρών μορίων και τα ονόμασαν «κολλοειδή» για να τα διακρίνουν από τα χυσταλλικά σώματα. Για το καουτσούκ π.χ. πίστευαν ότι αποτελείται από συσσωματώματα διμεθυλοκυκλοοκταδιενίου.



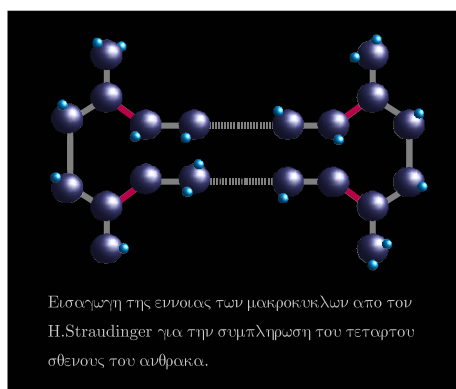
Ενώ για την κυτταρίνη πίστευαν ότι αποτελείται από συσσωματώματα της παρακάτω κυκλικής ένωσης:



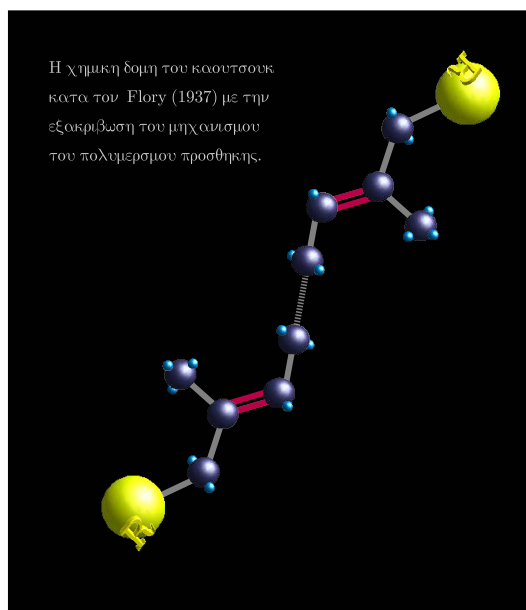
Την υπόθεση των «κολλοειδών» απέκρουσε πρώτος ο H.Straudinger το 1920 με την εισαγωγή της έννοιας των μακρομορίων. Η έννοια του μακρομορίου δεν έγινε αμέσως παραδεκτή κυρίως γιατί δεν μπορούσε να γίνει αντιληπτός ο τρόπος κορεσμού των ακραίων ατόμων του άνθρακα του μακρομορίου. Ο ίδιος ο H.Straudinger, στην περίπτωση του καουτσούκ, πίστευε ότι οι δύο ακραίοι άνθρακες του μακρομορίου (α) και (ω) είχαν μόνο 3 σθένη αντί των τεσσάρων. Την εξασθένιση του 4ου σθένους την απέδιδε στο μεγάλο μέγεθος του μορίου.



Αργότερα ο H. Straudinger, για να εξηγήσει τον τρόπο κορεσμού των ακραίων ατόμων του άνθρακα, εισήγαγε την έννοια των μακροκύκλων. Στην περίπτωση αυτή οι ακραίοι άνθρακες ενώνονται μεταξύ τους και έτσι συμπληρώνεται το τέταρτο σθένος τους.



Η απορία του τρόπου κορεσμού των ακραίων ανθράκων υπήρχε μέχρι το 1937 που ο Flory απέδειξε, ότι οι ακραίοι άνθρακες έχουν κανονικά τέσσερα σθένη, με την εξακρίβωση του μηχανισμού του πολυμερισμού προσθήκης. Ο Flory απέδειξε ότι το τέταρτο σθένος των ακραίων ανθράκων συμπληρώνεται με ομάδες -R. Στην περίπτωση π.χ. του καουτσούκ το μακρομόριο του έχει την εξής δομή:



Οι Στραυδινγερ και Flory θεωρούνται οι πατέρες της επιστήμης των πολυμερών και για την όλη τους συμβολή στα πολυμερή τιμήθηκαν με το βραβείο Nobel Χημείας ,ο πρώτος το 1954 και ο δεύτερος το 1974. Αν και η χημική φύση των πολυμερών άρχισε να γίνεται αντιληπτή από το 1920 η βιομηχανία των πλαστικών άρχισε πολύ νωρίτερα , το 1829 , με τη χρησιμοποίηση του καουτσούκ στην παρασκευή ελαστικών σβυστήρων. Το 1839 , ο Charles Goodyear στο Akron του Ohio ανακαλύπτει τελείως τυχαία του βουλκανισμό του καουτσούκ και το 1851 αρχίζει η βιομηχανία του σκληρού καουτσούκ , του εβονίτη για την Παρασκευή διαφόρων συμπαγών , και όχι μόνο ελαστικών προϊόντων. Το 1920 παράγεται ο πολύ (οξικός βινυλεστέρας) , το 1927 το πολύ (βινυλοχλωρίδιο) , το 1931 τα πολυακρυλικά πολυμερή , το 1937 το πολυστυρένιο και το 1938 το Nylon -6,6 από τον Carothers. Από τότε η εξέλιξη της βιομηχανίας των πλαστικών είναι καταπληκτική και τα πλαστικά τείνουν να αντικαταστήσουν όλα σχεδόν τα συμβατικά υλικά π.χ. γυαλί (πολυακρυλικά πολυμερή) , μέταλλα (πολυαιθυλένιο, πολυπροπένιο, Teflon κ.λ.π.) ξύλο (πολυβινυλοχλωρίδιο) κ.λ.π. σε όλους τους τομείς της ανθρώπινης δραστηριότητας , όπως π.χ. κατασκευή κτηρίων , μηχανημάτων , συσκευασία τροφίμων κ.λ.π. Αυτό οφείλεται στο ότι τα πλαστικά παρουσιάζουν πολλά πλεονεκτήματα όπως π.χ. αντοχή , μικρό βάρος , χαμηλό κόστος , αντοχή στην θραύση κ.λ.π. Βέβαια εκτός από τα πλεονεκτήματα τα πλαστικά έχουν και

ορισμένα μειονεκτήματα:

(Α) Αναφλέγονται εύκολα με σύγχρονη παραγωγή αερίων όπως π.χ. HCN (πολυουρεθάνες), HCl (πολυβινυλοχλωρίδιο), SO₂ (βουλκανισμένο καουτσούκ). Ο λόγος αυτός έκανε μερικά κράτη να βάλουν όρια στη χρησιμοποίηση πλαστικών στις κατασκευές κτηρίων.

(Β) Παράγονται από ουσίες τοξικές π.χ. το πολυβινυλοχλωρίδιο παράγεται από το καρκινογόνο αέριο βινυλοχλωρίδιο. Αν μετά την παρασκευή του πολυμερούς δεν γίνει επιμελής απομάκρυνση του εγκλωβισμένου καρκινογόνου βινυλοχλωριδίου, αυτό μπορεί να μεταφερθεί στις συσκευασίες (π.χ. πλαστικά μπουκάλια λαδιού) και από εκεί στο τρόφιμο. Ο λόγος αυτός ώθησε ορισμένα κράτη να απαγορεύσουν τη χρησιμοποίηση του πολυβινυλοχλωριδίου για την κατασκευή δοχείων συσκευασίας τροφίμων.

(Γ) Είναι προβληματική η διάθεσή τους γιατί δεν καταστρέφονται εύκολα (ρύπανση περιβάλλοντος).

Τα διάφορα πλαστικά που κυκλοφορούν στο εμπόριο, είναι πολύπλοκα μίγματα πολυμερών και άλλων υλικών, που σκοπό έχουν να βελτιώσουν τις βασικές ιδιότητες και να μειώσουν το κόστος των πολυμερών. Η τυπική σύνθεση π.χ. ενός πλαστικού με βασικό υλικό το τυχαίο συμπολυμερές πολύ (βινυλοχλωρίδιο-co-οξικός βινυλεστέρας), που χρησιμοποιείται για επικάλυψη πατωμάτων, είναι η παρακάτω:

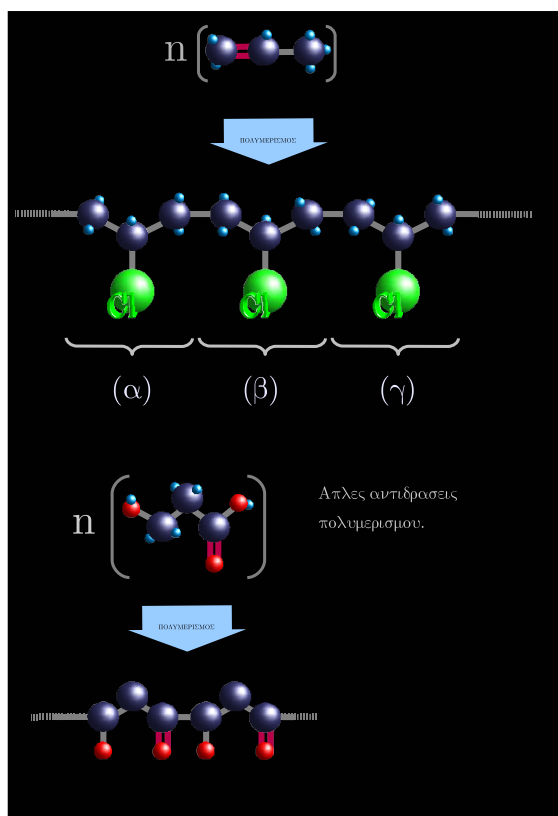
ΣΥΜΠΟΛΥΜΕΡΕΣ (ΒΑΣΙΚΟ ΥΛΙΚΟ)	:	100 ΜΕΡΗ ΒΑΡ
ΦΘΑΛΙΚΟΣ ΔΙΟΘΥΛΕΣΤΕΡΑΣ (ΠΛΑΣΤΙΚΟΠΟΙΗΤΕΣ)	:	30 ΜΕΡΗ ΒΑΡ
ΧΛΩΡΙΩΜΕΝΟΣ ΗC (ΔΕΥΤΕΡ. ΠΛΑΣΤ.)	:	15 ΜΕΡΗ ΒΑΡ
ΑΝΘΡΑΚΙΚΟ ΑΣΒΕΣΤΙΟ (ΠΛΗΡΩΤΙΚΟ ΥΛΙΚΟ)	:	150 ΜΕΡΗ ΒΑΡ
ΤΑΛΚΗΣ (ΠΛΗΡΩΤΙΚΟ ΥΛΙΚΟ)	:	150 ΜΕΡΗ ΒΑΡ
ΟΡΓΑΝΙΚΑ ΑΛΑΤΑ Cd/Ba (ΣΤΑΘΕΡΟΠΟΙΗΤΗΣ)	:	3 ΜΕΡΗ ΒΑΡ
ΣΤΕΑΤΙΚΟ ΑΣΒΕΣΤΙΟ (ΛΙΠΑΝΤΙΚΟ - ΣΤΑΘΕΡ)	:	1 ΜΕΡΗ ΒΑΡ
ΧΡΩΜΑ	:	ΑΝΑΛΟΓΑ ΜΕ ΤΙΣ ΑΠΑΙΤΗΣΕΙΣ

(1.1)

Οι πλαστικοποιητές αυξάνουν την ευκαμψία και την αντοχή σε χρούση του πολυμερούς. Τα υλικά πληρώσεως ελαττώνουν το κόστος του συμπολυμερούς. Οι σταθεροποιητές προστατεύουν το μακρομόριο από την αποικοδόμηση (στην προκείμενη περίπτωση την απόσπαση Η⁺λ και το σπάσιμο των δημιουργουμένων διπλών δεσμών). Το λιπαντικό βοηθάει στην ελάττωση της τριβής μεταξύ συμπολυμερούς και μηχανών κατεργασίας. Τέλος το χρώμα χρησιμοποιείται για να δώσει τον κατάλληλο χρωματισμό στο άχρωμο πολυμερές. **Επομένως το πολυμερές (πολλές φορές στην βιομηχανία ονομάζεται και ρητίνη -resin) είναι μια καθαρή χημική ένωση (μακρομόριο) , ενώ το πλαστικό είναι συνήθως μίγμα πολυμερούς (ή συμπολυμερούς) και άλλων υλικών.**

1.2 ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΝΝΟΙΕΣ.

Ένα πολυμερές (polymer) ή ένα μακρομόριο (mac molecule) είναι ένα μεγάλο μόριο κατασκευασμένο από την επανάληψη μικρών δομικών μονάδων οι οποίες συνδέονται μεταξύ τους με ομοιοπολικούς δεσμούς. Συνήθως ο όρος «μακρομόριο» ή «πολυμερές» δίνεται σε μόρια με περισσότερες από δέκα δομικές μονάδες. Τα μόρια με λιγότερες από δέκα δομικές μονάδες ονομάζονται ολιγομερή (oligomers). Οι ενώσεις από τις οποίες προέρχονται τα πολυμερή λέγονται μονομερή (monomers). Τα μονομερή και οι δομικές μονάδες (repeating units) ή μονομερικά στοιχεία (monomeric units) διαφέρουν είτε στον τρόπο συνδέσεως , είτε στον αριθμό των ατόμων τους π.χ.



Ο αριθμός των μονομερικών στοιχείων του μακρομορίου ονομάζεται βαθμός πολυμερισμού και δίνεται από την εξίσωση:

$$X = \frac{\text{μοριακο βαρος πολυμερους}}{\text{μοριακο βαρος μονομερικού στοιχείου}} = \frac{M}{M_0}$$

Συνήθως ο βαθμός πολυμερισμού των συνθετικών πολυμερών βρίσκεται μεταξύ 100 και 10.000.

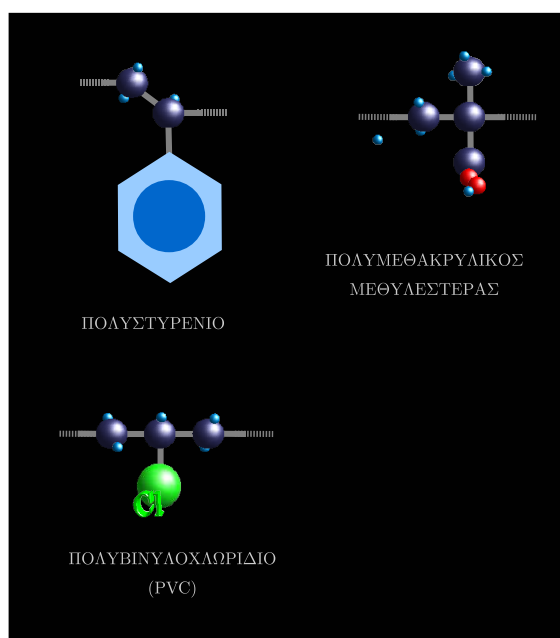
1.2.1 ΟΝΟΜΑΤΟΛΟΓΙΑ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ.

Υπάρχουν τρία συστήματα ονοματολογίας των πολυμερών.

(A) Το πρώτο σύστημα βασίζεται στα εμπορικά ονόματα (trade names) των πολυμερών

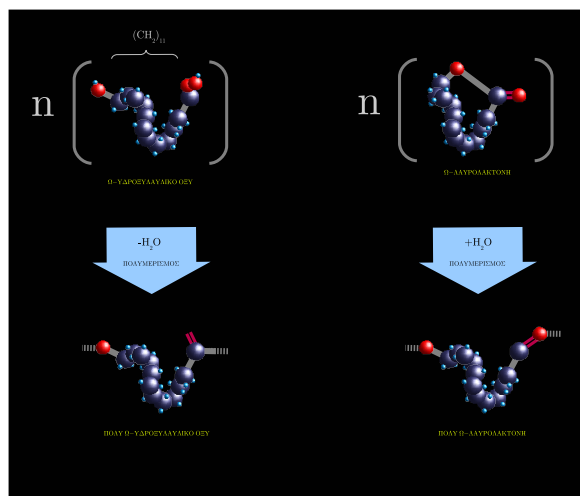
, π.χ. το πολυμερές που παράγεται από τereφθαλικό οξύ και αιθυλενογλυκόλη ονομάζεται terylene, το πολυμερές που προέρχεται από το πολυμερισμό του στυρενίου ονομάζεται δψλενε, διλετε, φοσταρενε και το πολυμερές που προέρχεται από το πολυμερισμό του μεθακρυλικού μεθυλεστέρα ονομάζεται plexiglass, diacon κλπ. Το σύστημα αυτό δεν είναι ευκολόχρηστο γιατί δεν έχει καμία επιστημονική βάση. Σε ορισμένες περιπτώσεις μία εμπορική ονομασία έγινε γεννεσιουργός όρος για την ονομασία μιας ολόκληρης τάξης πολυμερών πχ. το nylon, για τα αλειφατικά πολυαμίδια. Έτσι τα αλειφατικά πολυαμίδια ονομάζονται nylon-m,n όπου m και n ο αριθμός των ατόμων άνθρακα της διαμίνης και του διοξέος αντίστοιχα πχ. το πολυαμίδιο που προέρχεται από την εξαμεθυλενοδιαμίνη και το αδιπικό οξύ, ονομάζεται nylon-6.6. Στα άλλα δυο συστήματα το όνομα του πολυμερούς σχηματίζεται από το πολυ- και το όνομα του πολυμερούς.

(B) Το δεύτερο σύστημα, που βασίζεται σε εμπειρικούς κανόνες χημική ονοματολογίας είναι και το πιο διαδεδομένο

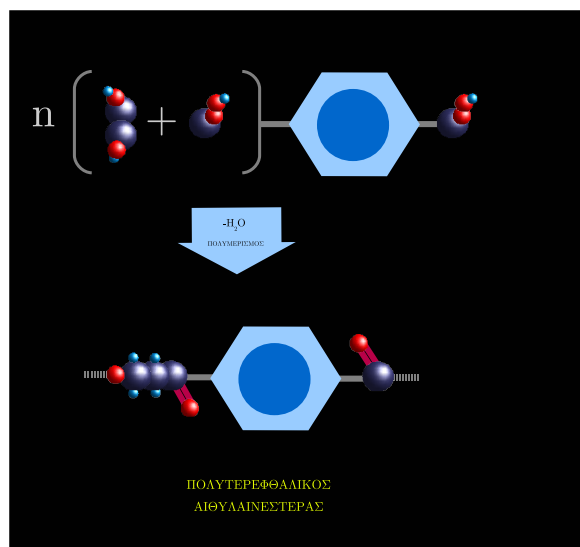


Τα πολυμερή που προέρχονται από μονομερή με δραστικές ομάδες (πχ. -COOH, -NH₂, -OH, -NCO κλπ) ονομάζονται με τον ίδιο τρόπο πχ. το πολυμερές που προέρχεται από το

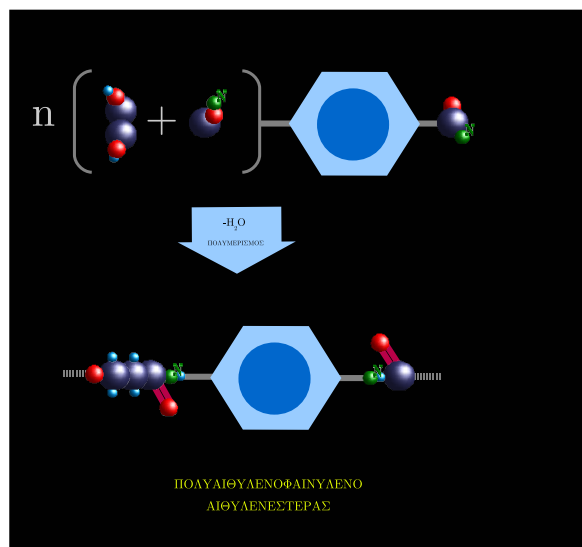
ω-υδροξυλαυρικό οξύ ονομάζεται πολύ (ω-υδροξυλαυρικό οξύ). Επειδή όμως το πολυμερές αυτό μπορεί να προέλθει και από τον πολυμερισμό της ω-λαυρολακτόνης, ονομάζεται και πολύ (ω-λαυρολακτόνη).



Ο πολυεστέρας που προέρχεται από τereφθαλικό οξύ και αιθυλενογλυκόλη ονομάζεται πολύ (τερεφθαλικός αιθυλενεστέρας).



Το πολυμερές που προέρχεται από αιθυλενογλυκόλη και φαινυλενοδισοκυανικό εστέρα ονομάζεται πολύ (αιθυλενο-φαινυλενο-ουρεθάνη).



(Γ) Το τρίτο σύστημα βασίζεται σε αυστηρούς κανόνες χημικής ονοματολογίας κατά IUPAC. Σύμφωνα με το σύστημα αυτό ο πολύ (μεθακρυλικός μεθυλεστέρας) ονομάζεται πολύ (1-οξυμεθυλοκαρβονυλο-1-μεθυλενοαιθυλένιο) και το πολύ (βινυλοχλωρίδιο) ονομάζεται πολύ (1- χλωροαιθυλένιο).

1.2.2 ΤΑΞΙΝΟΜΗΣΗ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ.

Γενικά τα πολυμερή ταξινομούνται σε δύο μεγάλες κατηγορίες.

- 1) Στα φυσικά πολυμερή και τα παράγωγά τους π.χ. πρωτεΐνες, κυτταρίνη, οξική και νιτρική κυτταρίνη κλπ και
- 2) Στα συνθετικά πολυμερή π.χ. πολυαιθυλένιο, πολυστυρένιο, πολυαμίδια, πολυεστέρες κλπ

Τα συνθετικά πολυμερή μπορούν να διαιρεθούν με τη σειρά τους:

- A) Ανάλογα με τη χημική τους δομή

- B) Ανάλογα με τη συμπεριφορά τους στη θέρμανση και
Γ) Ανάλογα με την ιδιότητα που κυριαρχεί στη χρησιμοποίησή τους

A) Διαίρεση των συνθετικών πολυμερών ανάλογα με τη χημική τους δομή

Σύμφωνα με αυτή τη διαίρεση τα πολυμερή διαίρονται σε δύο μεγάλες κατηγορίες:

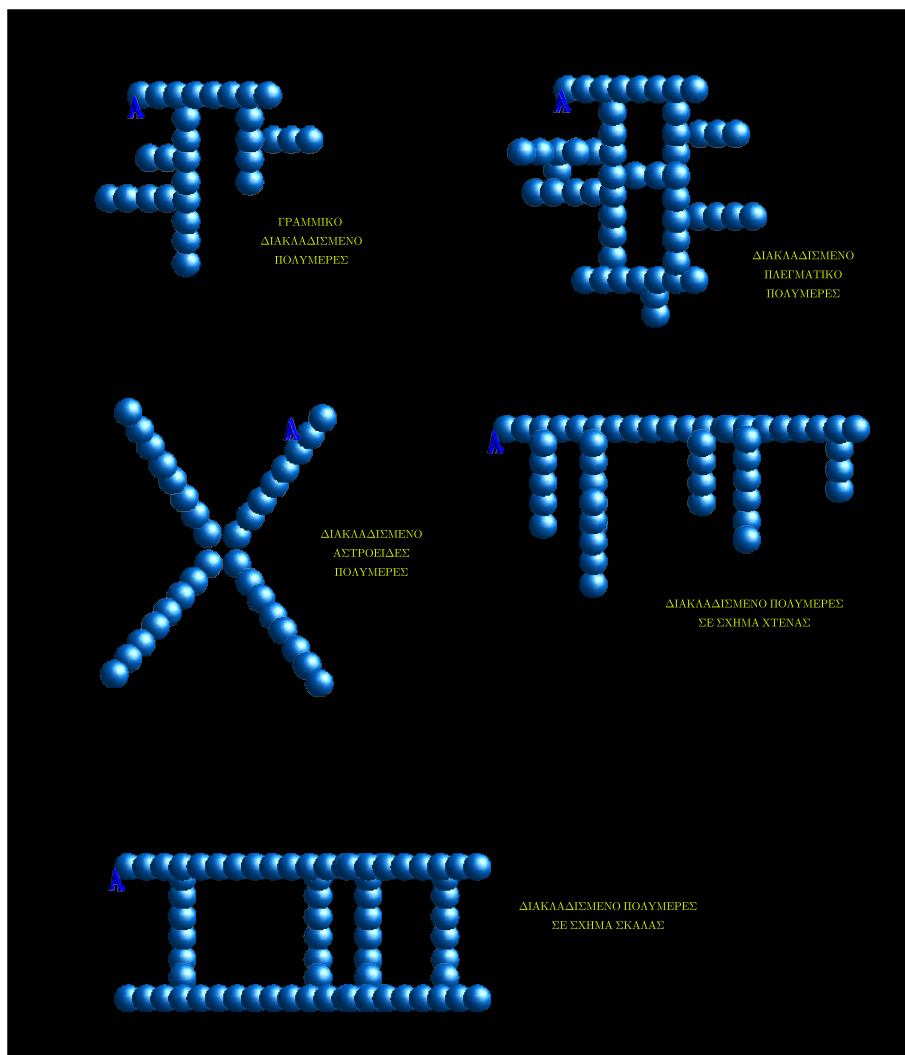
- 1) Στα ομοπολυμερή ή απλώς πολυμερή
- 2) Στα συμπολυμερή

Ομοπολυμερή είναι τα πολυμερή που προέρχονται από μία δομική μονάδα (A). Τα συμπολυμερή προέρχονται από την επανάληψη δυο (A,B) ή περισσότερων δομικών μονάδων. Τα ομοπολυμερή υποδιαιρούνται:

- i) Στα γραμμικά ομοπολυμερή (linear homopolymers)



- ii) Στα διακλαδισμένα ομοπολυμερή (branched homopolymers)



iii) Κυκλικά ομοπολυμερή

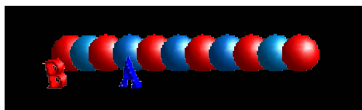


Τα συμπολυμερή που προέρχονται από δύο μονομερή πχ. στυρένιο (A) και ισοπρένιο (B) υποδιαιρούνται:

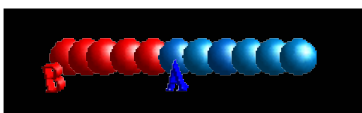
i) Στα τυχαία (random) ή στατιστικά συμπολυμερή, όταν η επανάληψη των δομικών μονάδων A και B είναι τυχαία



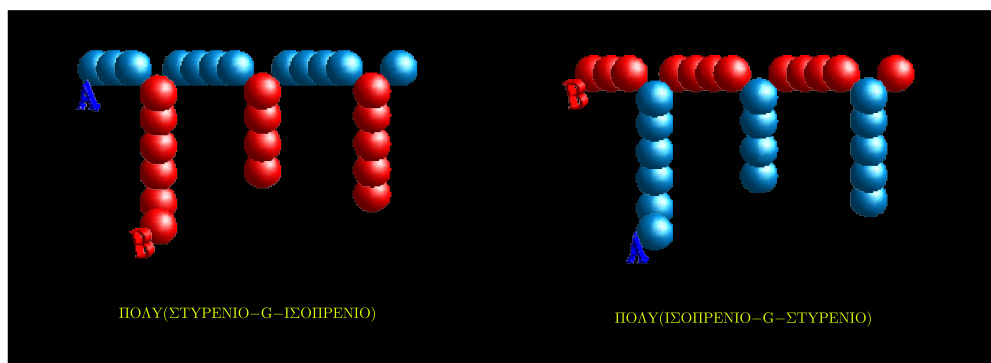
ii) Στα εναλλασσόμενα συμπολυμερή όταν τα A και B εναλλάσσονται διαδοχικά



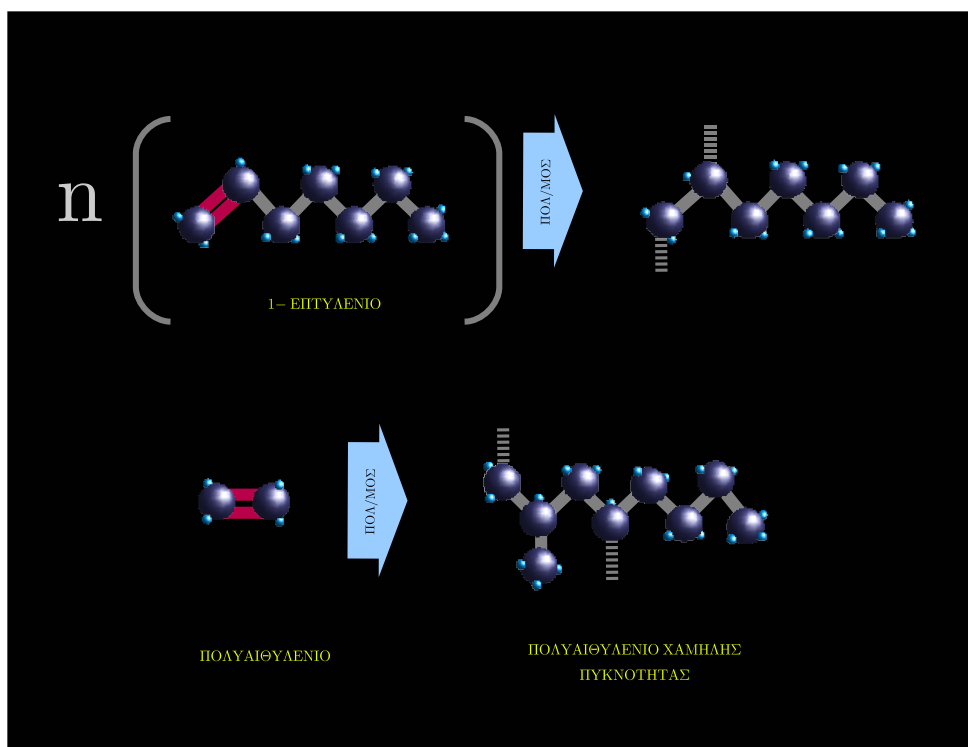
iii) Στα κατά συστάδες συμπολυμερή, όταν αποτελούνται από δύο, τρεις ή και περισσότερες συστάδες δομικών μονάδων



iv) Στα εμβολιασμένα συμπολυμερή, όταν η κύρια αλυσίδα αποτελείται από τη μία δομική μονάδα και οι κλάδοι από την άλλη δομική μονάδα.

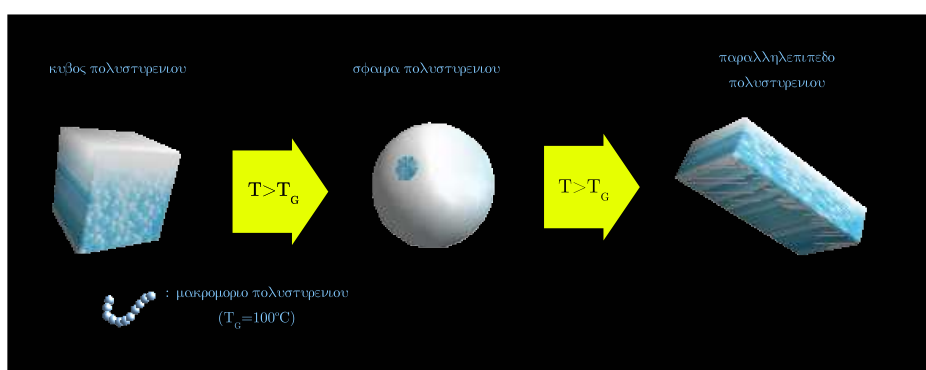


Οι ομάδες των πολυμερών που προυπάρχουν στα αντίστοιχα μονομερή δεν θεωρούνται διακλαδώσεις αλλά πλευρικές ομάδες. Πχ. η ομάδα πεντύλιο στο πολύ (1- επτυλένιο) είναι πλευρική ομάδα και όχι διακλάδωση. Αντίθετα οι ομάδες -CH₃ και βουτύλιο που υπάρχουν στα μακρομόρια του πολυαιθυλενίου χαμηλής πυκνότητας ή υψηλής πίεσης, θεωρούνται διακλαδώσεις, γιατί δεν βρίσκονται στο μονομερές αιθυλένιο.

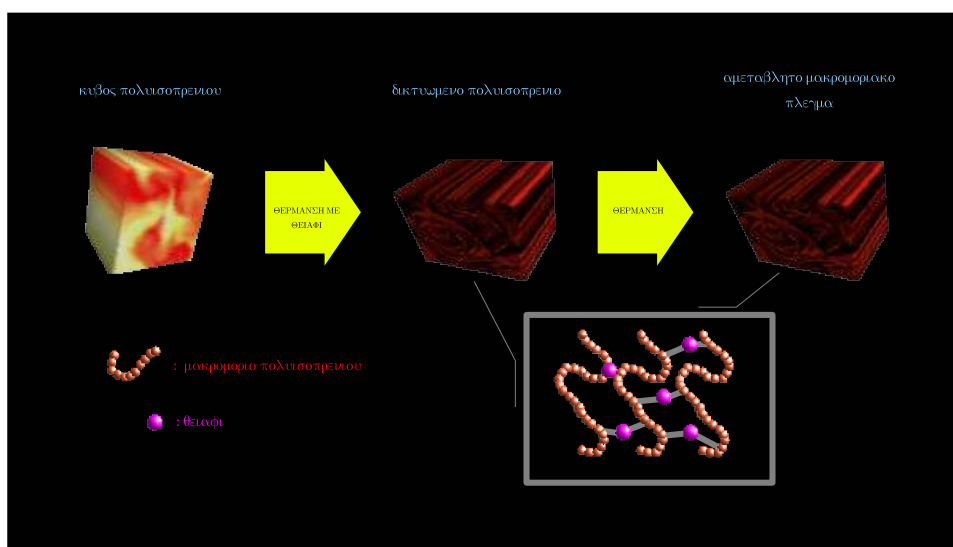


(B) Διάρθρωση των συνθετικών πολυμερών ανάλογα με τη συμπεριφορά τους στη θέρμανση

Σύμφωνα με αυτή τη διάρθρωση τα συνθετικά πολυμερή διαιρούνται σε θερμοπλαστικά σε θερμοσκληρυνόμενα πολυμερή και σε ελαστομερή. Θερμοπλαστικά είναι τα πολυμερή που μαλακώνουν (και επομένως μπορούν να μορφοποιηθούν) με θέρμανση πάνω από μία ορισμένη, για κάθε πολυμερές, θερμοκρασία, τη θερμοκρασία υαλώδους μεταπτώσεως T_G (glass transition temperature). Όταν ψυχθούν τα θερμοπλαστικά ανακτούν τις αρχικές τους ιδιότητες. Θεωρητικά τα θερμοπλαστικά μπορούν να μορφοποιηθούν, με θέρμανση, άπειρες φορές γιατί δεν μεταβάλλεται (με θέρμανση) η χημική τους δομή. Τα θερμοπλαστικά πολυμερή αποτελούνται κυρίως από γραμμικά μακρομόρια πχ. πολυστενένιο, πολυβυνιλοχλωρίδιο, πολυαιθυλένιο κλπ



Όπως φαίνεται στο σχήμα, κατά τη θέρμανση μεταβάλλεται μόνο η σχετική θέση των μακρομορίων και όχι η χημική δομή τους. Θερμοσκληρυνόμενα είναι τα πολυμερή που μεταβάλλουν, όχι αντιστρέφεται, τις αρχικές τους ιδιότητες με θέρμανση πάνω από μία ορισμένη θερμοκρασία, παρουσία συνήθως ορισμένων χημικών ενώσεων. Τα μακρομόρια των πολυμερών αυτών με θέρμανση ενώνονται μεταξύ τους και σχηματίζουν μακρομοριακά πλέγματα. Έτσι δεν ανακτούν ποτέ πια τις αρχικές τους ιδιότητες και δεν ξαναμορφοποιούνται με θέρμανση.



Όπως φαίνεται από το προηγούμενο σχήμα, κατά την αρχική θέρμανση δεν μεταβάλλεται μόνο η σχετική θέση των μακρομορίων αλλά και η χημική τους δομή. Θερμοσκληρυνόμενα πολυμερή είναι πχ. ο βακελίτης, το βουλκανισμένο καουτσούκ, οι εποξειδικές ρητίνες κλπ.

(Γ) Διαίρεση των συνθετικών πολυμερών ανάλογα με την ιδιότητα που κυριαρχεί στη χρησιμοποίησή τους.

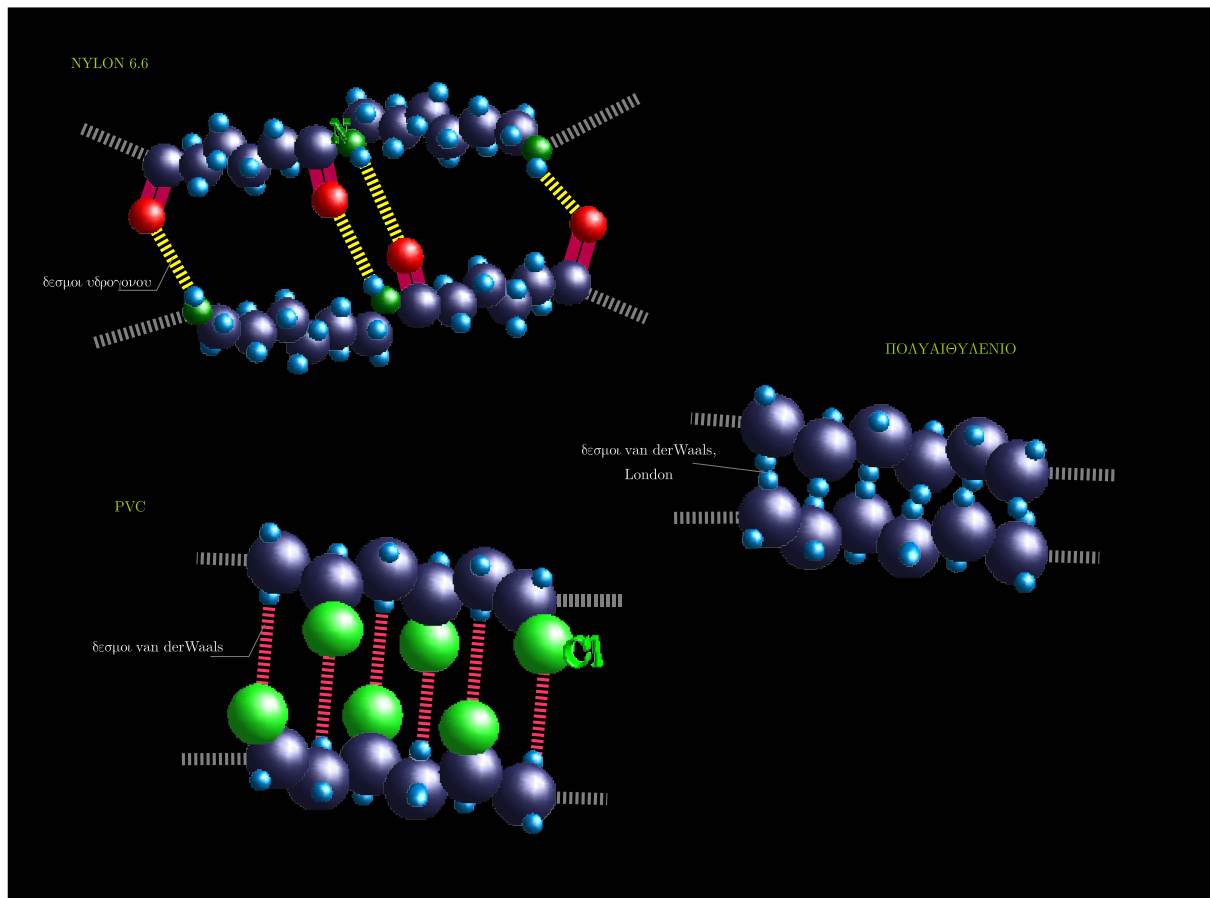
Χωρίς να υπάρχει σαφής διάκριση, τα πολυμερή που κυκλοφορούν στο εμπόριο διακρίνονται σε συνθετικές ίνες, σε ελαστομερή και σε πλαστικά. Στη κατηγορία των συνθετικών ινών ανήκουν τα πολυμερή που έχουν την ικανότητα να σχηματίζουν ίνες μεγάλης αντοχής πχ. πολυαμίδια, πολυεστέρες, πολυπροπυλένιο κλπ. Ελαστομερή είναι τα πολυμερή που όταν υποστούν βουλκανισμό μπορούν να αυξήσουν τις διαστάσεις τους, τουλάχιστον 100/100, με την επίδραση εξωτερικής δύναμης και να επανέλθουν στις αρχικές τους διαστάσεις μετά την απομάκρυνση της εξωτερικής δύναμης. Στη κατηγορία των ελαστομερών ανήκουν το πολυισοπροπένιο, το πολυισοβουτυλένιο, το πολυβουταδιένιο κλπ. Πλαστικά πολυμερή είναι εκείνα που χρησιμοποιούνται για τη παρασκευή φιλμ, επιχρισμάτων κλπ. Οι διάφορες κατηγορίες πολυμερών έχουν διαφορετικές μηχανικές ιδιότητες. Τα σκληρά πλαστικά και οι συνθετικές ίνες χαρακτηρίζονται από μεγάλο μέτρο ελαστικότητας και μικρές επιμηκύνσεις, ενώ τα ελαστομερή χαρακτηρίζονται από μικρό μέτρο ελαστικότητας και μεγάλες επιμηκύν-

σεις. Τα εύκαμπτα πλαστικά χαρακτηρίζονται από ενδιάμεσες τιμές μέτρου ελαστικότητας και επιμήκυνσης. Επίσης οι διάφορες κατηγορίες συνθετικών πολυμερών παρουσιάζουν διαφορές στη θερμοκρασία τήξεως (T_m) και στη θερμοκρασία υαλώδους μεταπτώσεως (T_g). Οι συνθετικές ίνες και τα σκληρά πλαστικά έχουν μεγάλο T_m και σχετικά μεγάλο T_g πχ. nylon 6 (T_m : 223°C και T_g : 50°C), nylon 6,6 (T_m : 265°C και T_g : 57°C), ισοστακτικό πολυστερένιο (T_m : 240°C και T_g : 100°C). Τα ελαστομερή έχουν πολύ μικρό T_m και T_g πχ πολύ (cis-1,4-βουταδιένιο) (T_m : 6°C και T_g : -108°C), πολύ (cis-1,4-ισοπρένιο) (φυσικό καουτσούκ) (T_g : -73°C). Οι τιμές T_m και T_g για τα εύκαμπτα πλαστικά ποικίλουν πχ. πολυαιθυλένιο υψηλής πυκνότητας γραμμικό (T_m : 135°C και T_g : -125°C), πολυβυτιλοχλωρίδιο (T_m : 273°C και T_g : 81°C), πολύ (μεθακρυλικός μεθυλεστέρας) (T_m : 200°C και T_g : 100°C)

1.3 ΔΕΣΜΙΚΕΣ ΔΥΝΑΜΕΙΣ.

Οι δεσμικές δυνάμεις μεταξύ των ατόμων και των μορίων διαιρούνται σε πρωτοταγείς (ενέργεια διασπάσεως μεγαλύτερη από 50 Kcal/mol) και σε δευτεροταγείς (ενέργεια διασπάσεως μικρότερη από 10 Kcal/mol). Στις πρωτοταγείς δεσμικές δυνάμεις ανήκουν οι ιοντικοί, μεταλλικοί, ημιπολικοί και ομοιοπολικοί δεσμοί, με δεσμικό μήκος που κυμαίνεται μεταξύ 0.9 και 2 Å περίπου. Οι δευτεροταγείς δεσμικές δυνάμεις, που συνήθως ονομάζονται δυνάμεις Van der Waals γιατί σ' αυτές οφείλεται η διόρθωση που γίνεται στην εξίσωση των τελείων αερίων, έχουν δεσμικό μήκος μεταξύ 2.5 και 5 Å περίπου. Στη κατηγορία αυτή ανήκουν οι δεσμοί υδρογόνου και οι δεσμικές δυνάμεις που αναπτύσσονται μεταξύ: α) διπόλων, β) διπόλων- μη διπόλων εξ' επαγωγής και γ) μη διπόλων λόγω διακυμάνσεων της πυκνότητας του ηλεκτρονιακού νέφους (δυνάμεις ΗΛονδον ή δυνάμεις διασποράς) Τα άτομα ενός μακρομορίου συγκρατώνται συνήθως με ομοιοπολικούς δεσμούς, ενώ μεταξύ των μακρομορίων ή μεταξύ τμημάτων ενός μακρομορίου αναπτύσσονται δυνάμεις Van der Waals. Στις δυνάμεις αυτές οφείλονται κατά κύριο λόγο, οι ιδιαίτσες ιδιότητες των πολυμερών. Πολλές ιδιότητες πολυμερών (πχ. θερμοκρασία τήξεως T_m , διαλυτότητα, ακαμψία κλπ) εξαρτώνται από το «πακετάρισμα» των μακρομορίων τους, επομένως ισχυρές ενδομοριακές δυνάμεις θα επιδρούν ευνοϊκά στις ιδιότητες αυτές. Το υψηλό T_m του nylon 6,6 οφείλεται στις ισχυρές δυνάμεις Van der Waals (δεσμοί υδρογόνου, δεσμοί διπόλων, London). Επίσης το μεγαλύτερο T_m και η μεγαλύτερη ακαμψία του πολύ (τερεφθαλικού αιθυλεστέρα) οφείλεται στις ισχυρότερες δυνάμεις που αναπτύσσονται μεταξύ των αρωματικών δακτυλίων απ' ότι μεταξύ των $-\text{CH}_2-$. Ομοίως το μεγαλύτερο T_m και T_g του

πολυβινυλοχλωριδίου από το πολυαιθυλένιο οφείλεται στις ισχυρότερες δυνάμεις μεταξύ των μακρομορίων του PVC απ' ότι μεταξύ των μακρομορίων του πολυαιθυλενίου.



1.4 ΜΙΚΡΟΔΟΜΗ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ.

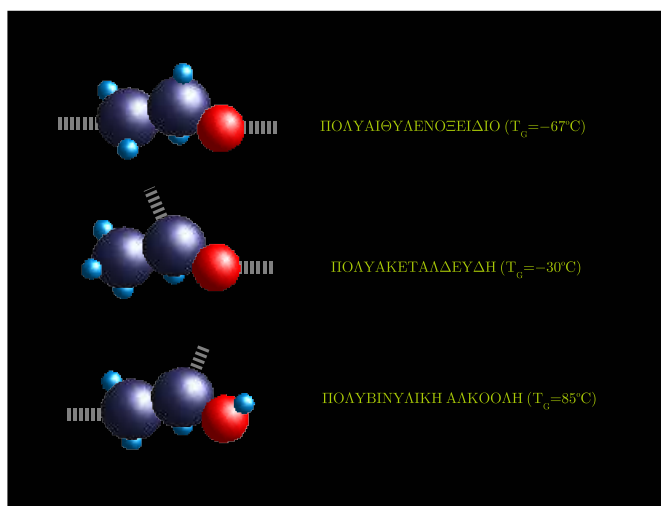
Οι ιδιότητες των πολυμερών δεν εξαρτώνται μόνο από τη χημική τους δομή αλλά και από τη μικροδομή τους. Οι διαφορές στη μικροδομή των πολυμερών οφείλονται:

- A) στη διαφορετική αρχιτεκτονική
- B) στο διαφορετικό προσανατολισμό
- Γ) στη διαφορετική διαμόρφωση

Δ) στη διαφορετική γεωμετρική ισομέρεια των δομικών μονάδων της μακρομοριακής αλυσίδας.

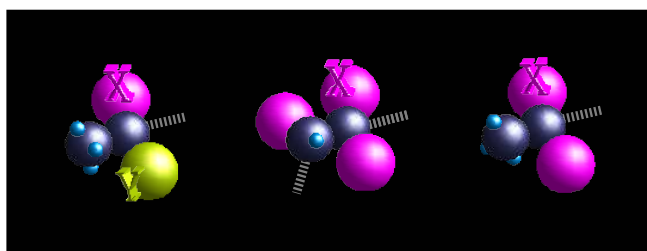
A) Αρχιτεκτονική δομικών μονάδων

Στην περίπτωση αυτή ανήκουν πολυμερή που οι δομικές τους μονάδες έχουν την ίδια χημική σύσταση αλλά διαφορετική μοριακή αρχιτεκτονική, με αποτέλεσμα να παρουσιάζουν σημαντικές διαφορές στις φυσικές τους ιδιότητες.

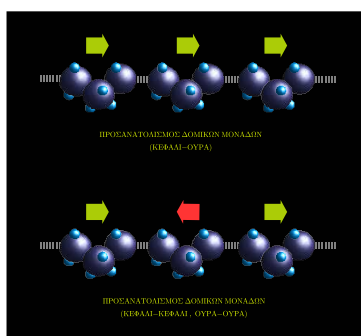


B) Προσανατολισμός δομικών μονάδων

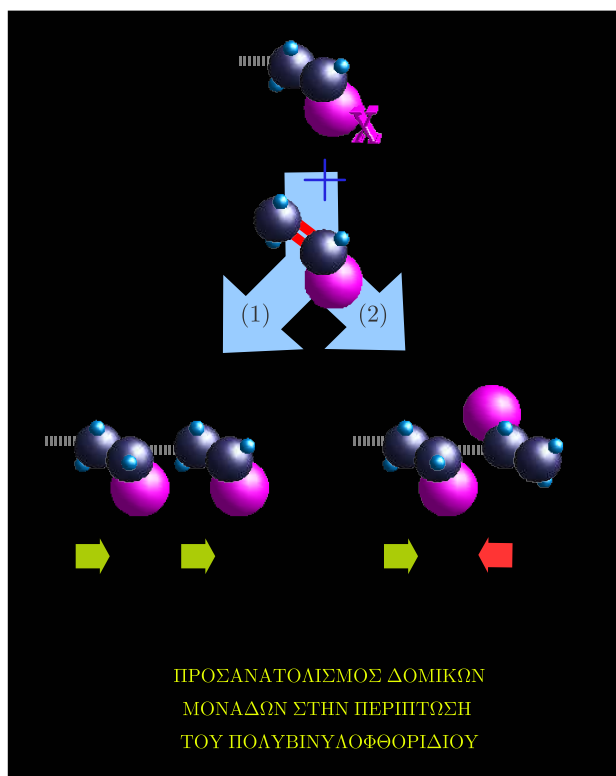
Ενώ στη περίπτωση του πολυαιθυλενίου υπάρχει μία μόνο πιθανότητα προσανατολισμού των δομικών μονάδων, στη περίπτωση του πολυπροπυλενίου και άλλων πολυμερών με ασύμμετρη δομική μονάδα πχ.



ο προσανατολισμός των δομικών μονάδων μπορεί να γίνει με δύο τρόπους:

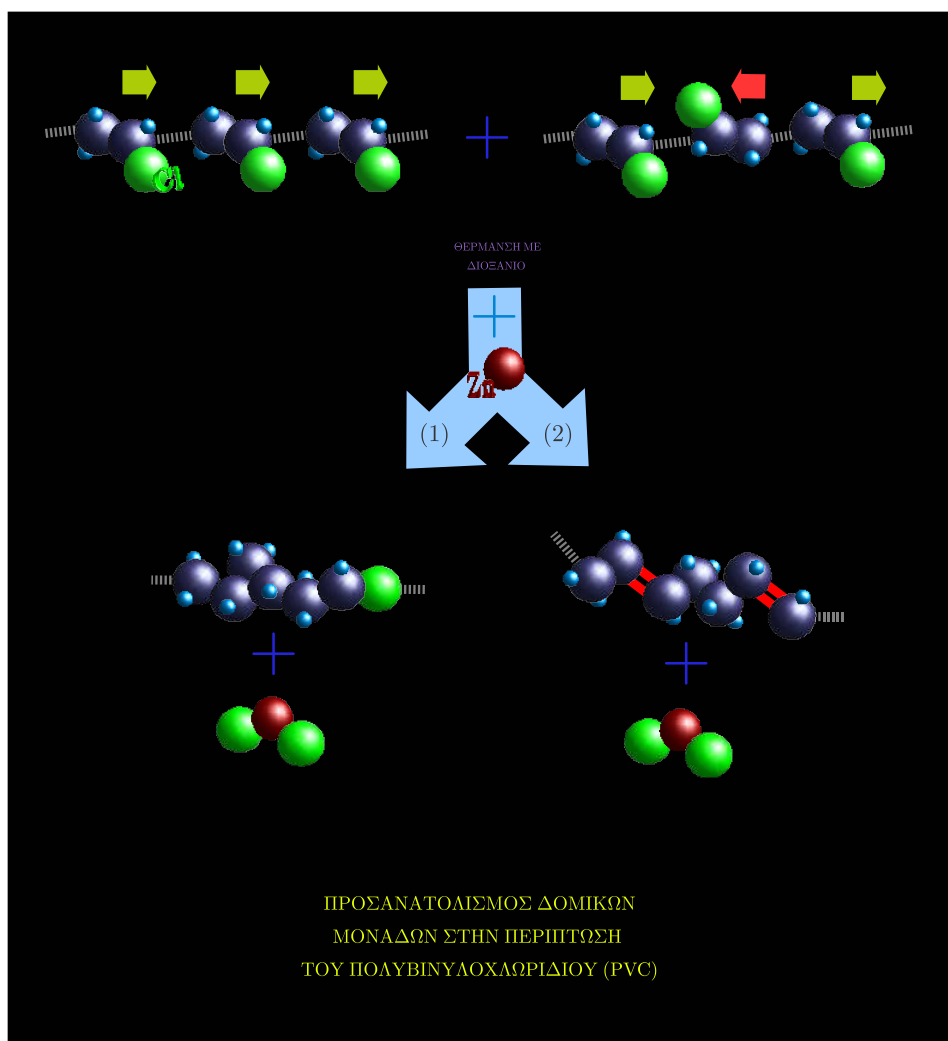


τα συνθετικά πολυμερή παρουσιάζουν κυρίως τον τρόπο συνδέσεως των δομικών μονάδων κεφαλή - ουρά. Αυτό οφείλεται στο ότι το μονομερές που προστίθεται στην αναπτυσσόμενη πχ. μακρόριζα προτιμά τον τρόπο κεφαλή - ουρά (1) για λόγους μικρότερης στερεοχημική παρεμπόδισης και μεγαλύτερης σταθερότητας της μακρόριζας, λόγω της παρουσίας του υποκαταστάτη X.



Στη περίπτωση του πολύ (βινυλοφθοριδίου) το ποσοστό των δύο δομών βρίσκεται με τη βοήθεια του μαγνητικού πυρηνικού συντονισμού (NMR). Το -H της ομάδας -CHF- συντονίζεται σε διαφορετική συχνότητα στις δύο δομές, επειδή η γεωμετρία του και επομένως οι μαγνητικές του ιδιότητες είναι διαφορετικές. Έτσι εμφανίζονται δύο κορυφές, μία για κάθε δομή, εμβαδομέτρηση των οποίων δίνει το ποσοστό των δύο δομών. Στη περίπτωση του πολυβινυλοχλωριδίου εκτός από NMR το ποσοστό των δύο δομών προσδιορίζεται με τη παρακάτω διαδικασία.

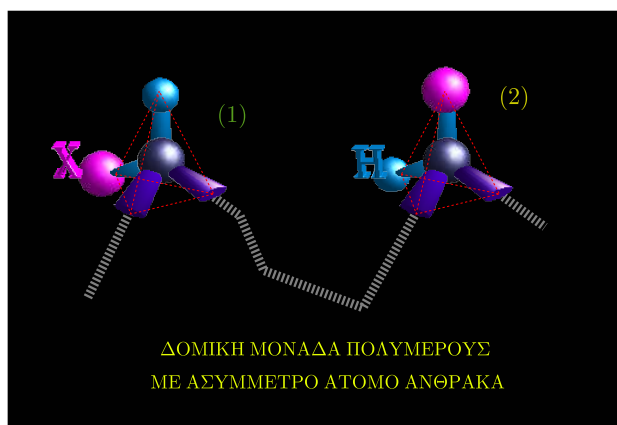
Διάλυμα πολυβινυλοχλωριδίου σε διοξάνιο θερμαίνεται με Zn. Αν υπάρχουν και οι δύο δομές στα μακρομόρια του PVC θα γίνουν οι παρακάτω αντιδράσεις:



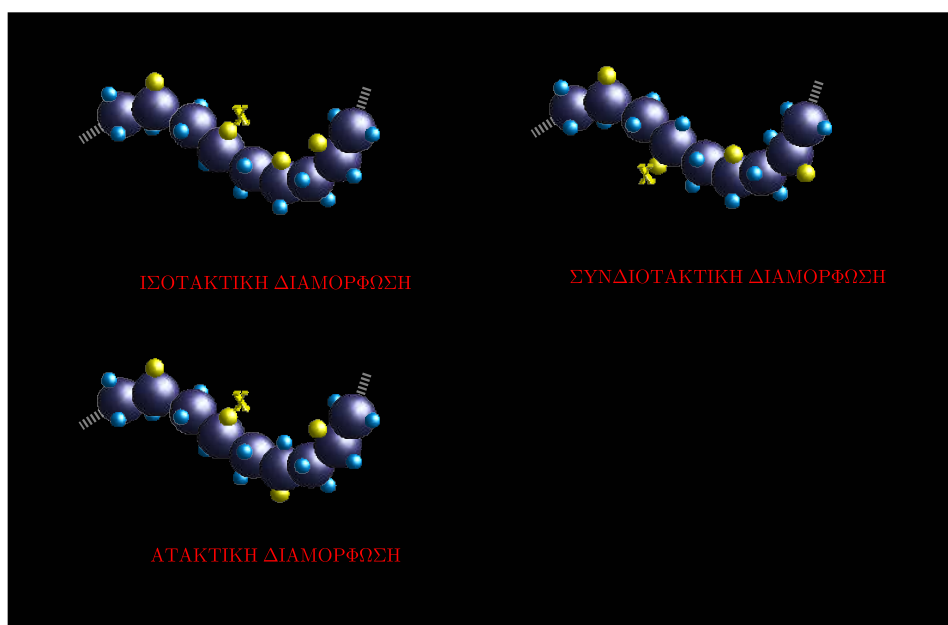
Από στατιστική ανάλυση αποδεικνύεται ότι σύμφωνα με την (1) μόνο το 86,4/100 του χλωρίου αντιδρά γιατί η αντίδραση είναι τυχαία. Το 13,6/100 του χλωρίου απομονώνεται, δεν αντιδρά με το Zn και έτσι παραμένει στο μακρομόριο. Σύμφωνα με τη (2) το χλώριο απομακρύνεται πλήρως. Επειδή η παρατεταμένη θέρμανση του PVC σε διάλυμα διοξάνιου με Zn απομακρύνει 84/100•86/100 του χλωρίου συμπεραίνεται ότι στο PVC έχουμε 100/100 τη δομή κεφαλή - ουρά .

Γ) Διαμόρφωση δομικών μονάδων Αν η δομική μονάδα ενός πολυμερούς έχει

ασύμμετρο άτομο άνθρακα, τότε μπορεί να πάρει τις παρακάτω διαμορφώσεις



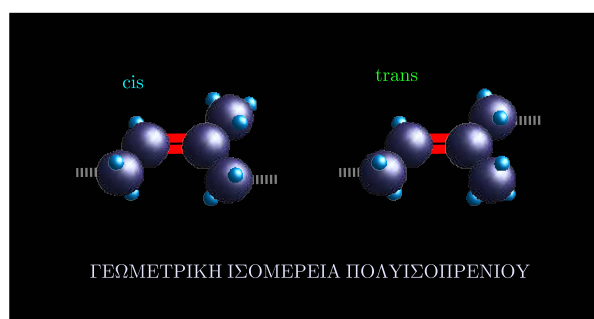
Το στερεοϊσομερές (1) δεν μπορεί να περάσει στο στερεοϊσομερές (2) παρά μόνο με σπάσιμο ομοιοπολικού δεσμού της κύριας αλυσίδας. Ένα μακρομόριο λοιπόν μπορεί να εμφανιστεί με τρεις διαφορετικές διαμορφώσεις:



Στη πράξη είναι αδύνατον να παρασκευαστούν πολυμερή 100/100 ισοτακτικά ή 100/100 συνδιοτακτικά. Τα συνθετικά πολυμερή χαρακτηρίζονται από μια κατανομή ισοτακτικών, συνδιοτακτικών και ατακτικών διαμορφώσεων. Η τακτικότητα των πολυμερών συνήθως δίνεται σε τριάδες 100H τακτικότητα επηρεάζει σημαντικά τις ιδιότητες των πολυμερών πχ. το πολυπροπυλένιο του εμπορίου που έχει μεγάλο ποσοστό ισοτακτικών τριάδων έχει μεγάλο βαθμό κρυσταλλικότητας, μεγάλο σημείο τήξεως ($T_m = 160^\circ\text{C}$), και καλές μηχανικές ιδιότητες, ενώ το ατακτικό πολυπροπυλένιο είναι άμορφο, έχει μικρό σημείο τήξεως ($T_m = 75^\circ\text{C}$) και κακές μηχανικές ιδιότητες (βιομηχανικά άχρηστο υλικό).

Δ) Γεωμετρική ισομέρεια δομικών μονάδων

Όταν η δομική μονάδα ενός πολυμερούς έχει διπλό δεσμό, όπως πχ. στη περίπτωση του πολυισοπρενίου, τότε αυτή μπορεί να πάρει τις παρακάτω δυο ισομερείς μορφές:



Το cis πολυισοπρένιο (καουτσούκ) είναι ελαστομερές, ενώ το trans είναι ημικρυσταλλικό πλαστικό (γουταπέρκα). Τα συνθετικά πολυμερή που εμφανίζουν το φαινόμενο της γεωμετρικής ισομέρειας χαρακτηρίζονται από μια κατανομή cis και trans δομικών μονάδων. Η κατανομή αυτή μπορεί να προσδιοριστεί με υπέρυθη φασματοσκοπία (IR) ή καλύτερη με NMR.

1.5 ΜΟΡΙΑΚΑ ΒΑΡΗ ΚΑΙ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ.

Η σπουδαιότερη ίσως διαφορά μεταξύ των απλών ενώσεων και των πολυμερών είναι ότι τα πολυμερή αποτελούνται από μακρομόρια διαφορετικού μοριακού βάρους ενώ οι απλές ενώσεις από μόρια με το αυτό μοριακό βάρος. Επομένως στη περίπτωση των πολυμερών

μιλάμε πάντα για μέσα μοριακά βάρη. Όταν προσδιορίζεται πχ. το μοριακό βάρος ενός πολυμερούς με μέθοδο που βασίζεται στον αριθμό των μακρομορίων πχ. ωσμωμετρία, τότε το μοριακό βάρος που προκύπτει ονομάζεται μεσομοριακό βάρος κατ' αριθμόν και δίνεται από την εξίσωση :

$$\langle M \rangle_n = \left\{ \sum_i N_i \right\}^{-1} \sum_i N_i M_i$$

Όπου N_i είναι ο αριθμός των moles των μακρομορίων i με μοριακό βάρος M_i

Από μετρήσεις σχεδάσεως φωτός, μέθοδος η οποία βασίζεται στο βάρος των μακρομορίων, λαμβάνεται το μέσο μοριακό βάρος κατά βάρος που δίνεται από την εξίσωση:

$$\langle M \rangle_w = \left\{ \sum_i w_i \right\}^{-1} \sum_i w_i M_i$$

Όπου w_i το βάρος των μακρομορίων i . Ένα μέτρο της κατανομής μοριακών βαρών ενός πολυμερούς είναι ο συντελεστής πολυμοριακότητας ή κατανομής μοριακών βαρών I ο οποίος δίνεται από την εξίσωση

$$I = \frac{\langle M \rangle_w}{\langle M \rangle_n}$$

όσο $I \rightarrow 1$ τόσο το πολυμερές έχει μικρότερη μοριακή διασπορά. Όλες οι ενδιαφέρουσες ιδιότητες των πολυμερών πχ. αντοχή στον εφελκυσμό και στην κάμψη, ελαστικότητα, T_G κλπ εξαρτώνται από το μοριακό βάρος τους. Κάτω από ένα κρίσιμο μοριακό βάρος ή βαθμό πολυμερισμού X_c , τα πολυμερή δεν παρουσιάζουν καμιά μηχανική αντοχή. Πάνω από ένα ορισμένο βαθμό πολυμερισμού 600, η μηχανική αντοχή των πολυμερών μένει σχεδόν αμετάβλητη. Ακόμα και αν έχουμε ένα μικρό κέρδος στην αντοχή όταν το X περνάει την τιμή 600, εντούτοις το ιξώδες γίνεται τόσο μεγάλο, ώστε η κατεργασία των πολυμερών στις διάφορες μηχανές μορφοποίησης είναι σχεδόν αδύνατη. Τα συνήθη πολυμερή του εμπορίου έχουν βαθμό πολυμερισμού 200 έως 600.

Κεφάλαιο 2

ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ.

Η επεξεργασία υπολογιστικών μοντέλων με τη βοήθεια ηλεκτρονικού υπολογιστή αποτελεί ένα άκρως αποτελεσματικό και εύχρηστο εργαλείο για την ποσοτική ανάλυση τόσο της μηχανικής των ρευστών όσο και της μεταφοράς θερμότητας σε μη-νευτώνεια πολυμερή συστήματα ροής. Συνεπώς, αυτού του είδους οι υπολογιστικές μέθοδοι, χρησιμοποιούνται κατά κόρον στη σύγχρονη βιομηχανία για το σχεδιασμό και την ανάπτυξη αποτελεσματικότερων και πιο εξελιγμένων πολυμερών υλικών τα οποία θα χρησιμοποιηθούν για την παράγωγη βιομηχανικού εξοπλισμού.

Τα κύρια βήματα για την ανάπτυξη ενός υπολογιστικού συστήματος για μια απλή διαδικασία ροής, όπως η παραμόρφωση ενός πολυμερούς υλικού, συνοψίζονται στα εξής:

- Διατύπωση μιας σειράς βασικών εξισώσεων οι οποίες, σε συνδυασμό με τις οριακές συνθήκες, παρέχουν ένα μαθηματικό μοντέλο προς επίλυση.
- Αριθμητική επίλυση των διατυπωμένων εξισώσεων από ένα υπολογιστικό σύστημα.

Οι βιομηχανικές εφαρμογές των μορφοποιημένων πολυμερών υλικών βασίζονται συνήθως στο συνδυασμό διαφόρων τύπων ατομικών διαδικασιών. Συνεπώς, για το σχεδιασμό αυτών των εφαρμογών, με τη βοήθεια ηλεκτρονικού υπολογιστή, μπορεί να υιοθετηθεί μια κατά τομέα προσέγγιση, στην οποία κάθε τομέας της ευρύτερης διαδικασίας, δύναται να εξεταστεί χωριστά. Μια σημαντική προϋπόθεση, αυτής της προσέγγισης, είναι η επιβολή

οριακών συνθηκών στα όρια ενός υποτομέα της πολύπλοκης διαδικασίας. Συνεπώς, η δι-αμέλιση της πολύπλοκης εφαρμογής σε απλούστερους τομείς θα πρέπει να βασιστεί σε μια συστηματική διαδικασία η οποία θα μπορεί ορίσει τις απαραίτητες οριακές συνθήκες στα ό-ρια των υπο-διαδικασιών. Η λογική μέθοδος για τον προσδιορισμό των υπο-διαδικασιών των μορφοποιημένων πολυμερών υλικών περιγράφεται από τους Taylor και Gogos (1979). Η ροή των μη-Νευτώνειων ρευστών παίζει πολύ σημαντικό ρόλο σε πολλές εφαρμογές των πολ-υμερών υλικών στη βιομηχανία. Από δω και στο εξής, η διατύπωση μαθηματικών μοντέλων γι' αυτές τις διαδικασίες μπορεί να βασιστεί στη μηχανική των μη-Νευτώνειων ρευστών. Οι βασικές εξισώσεις της μηχανικής των μη-Νευτώνειων ρευστών, για ένα καθορισμένο πεδίο ροής παρέχουν εκφράσεις όσον αφορά την ταχύτητα, την πίεση, την τάση, το ρυθμό κατ-απόνησης και τη θερμοκρασία. Αυτές οι εξισώσεις απορρέουν από τους βασικούς φυσικούς νόμους καθώς και από τη διενέργεια πειραμάτων.

Λόγω της εξέχουσας σημασίας των εξισώσεων των μη-Νευτώνειων ρευστών στην επεξ-εργασία πολυμερών υλικών είναι σημαντικό να κατανοήσουμε τη θεωρητική θεμελίωση αυτών των εξισώσεων. Εντούτοις, λεπτομερής, θεωρητική θεμελίωση της μηχανικής των μη-Νευτώνειων ρευστών είναι εκτός του σκοπού αυτής της διπλωματικής. Το αντικείμενο καλύπτεται από μεγάλη βιβλιογραφία αφιερωμένη στο θέμα. Για παράδειγμα ο ενδιαφερ-όμενος μπορεί να βρει λεπτομερείς αναφορές στις βασικές εξισώσεις της μηχανικής των μη-Νευτώνειων ρευστών Bird et al. (1960) και Aris (1989) και ειδικότερα για πολυμερή ρευστά Middleman (1977) και Bird et al. (1977).

Σ' αυτήν την ενότητα, παρουσιάζονται οι γενικές εξισώσεις της ελασματικής, μη-ισόθερμης, ασυμπίεστης ροής των μη-Νευτώνειων ρευστών, οι οποίες χρησιμοποιούνται για να μοντελοποιήσουν τις διαδικασίες της πολυμερούς επεξεργασίας. Καθ' όλη τη διάρκεια της ενότητας, για την απλοποίηση της παρουσίασης, χρησιμοποιούνται διανυσματικά σύμ-βολα και όλες οι εξισώσεις δίνονται σ' ένα δομημένο (σταθερό ή Euler) σύστημα συντεταγ-μένων.

2.1 ΔΙΕΠΟΥΣΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ.

2.1.1 ΕΞΙΣΩΣΗ ΣΥΝΕΧΕΙΑΣ.

Η εξίσωση συνέχειας είναι μια έκφραση του νόμου διατήρησης μάζας και δίνεται ως

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \quad (2.1)$$

Όπου το σύμβολο¹ $\text{div} := \nabla$ είναι το ανάδελτα (δείκτης κλίσης) και \mathbf{v} είναι το διάνυσμα της ταχύτητας. Η εξίσωση είναι γνωστή και ως περιορισμένη ασυμπίεστότητα. Η απουσία του παράγοντα της πίεσης στην πιο πάνω εξίσωση δυσκολεύει την αριθμητική προσομοίωση των ασυμπίεστων ρευστών.

2.1.2 ΕΞΙΣΩΣΗ ΚΙΝΗΣΗΣ.

Η εξίσωση της κίνησης βασίζεται στο νόμο της διατήρησης ορμής (2ος νόμος της κίνησης του Νεύτωνα) και δίνεται ως

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \text{div} \mathbf{v} = \text{div} \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g} \quad (2.2)$$

όπου ρ : πυκνότητα ροής του ρευστού

\mathbf{v} : ταχύτητα ρευστού

$\boldsymbol{\sigma}$: δείκτης πίεσης Cauchy

\mathbf{g} : επιτάχυνση της βαρύτητας ανα μονάδα όγκου

Σε πολυμερή συστήματα ροής, η σημασία του συμβόλου ανάδελτα στην εξίσωση (1.2) είναι συνήθως μικρή και μπορεί να παραληφθεί. Αυτό, είναι ένα χαρακτηριστικό, για ροές με πολύ μικρό αριθμό Reynolds και για ρευστά με πολύ υψηλό ιξώδες. Στην πλειονότητα των πολυμερών συστημάτων ροής, η επιτάχυνση της βαρύτητας, σε σύγκριση με την πίεση είναι πολύ μικρή και συνεπώς, μπορεί να παραληφθεί από την εξίσωση της κίνησης.

$$\boldsymbol{\sigma} = -\delta p + \boldsymbol{\tau} \quad : \text{δείκτης πίεσης Cauchy} \quad (2.3)$$

Όπου p είναι η υδροστατική πίεση, δ ο δευτεροβάθμιος δείκτης (το δέλτα του Kronecker) και $\boldsymbol{\tau}$ είναι η διατμητική τάση. Συνεπώς, η εξίσωση της κίνησης μπορεί να γραφτεί ως

¹Το σύμβολο ∇ όταν δρά σε ένα διανυσματικό μέγεθος, όπως η ταχύτητα στην παρούσα περίπτωση ($\nabla \cdot \mathbf{v}$), λέγεται και απόκλιση (divergence) του διανυσματικού πεδίου \mathbf{v} , για αυτό και εμείς γράψαμε εναλλακτικά $\text{div} \mathbf{v}$. Το ίδιο σύμβολο όταν δρά σε ένα βαθμωτό μέγεθος μπορεί εναλλακτικά να γραφτεί και ως grad και σημαίνει βαθμίδα (gradient), δηλαδή παράγωγος μιας συνάρτησης πολλών μεταβλητών.

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \operatorname{div} \mathbf{v} = -\delta \operatorname{grad} p + \operatorname{div} \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad (2.4)$$

2.1.3 ΘΕΡΜΙΚΗ ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΗ ΕΞΙΣΩΣΗ.

Αυτή η εξίσωση αποτελεί την έκφραση της διατήρησης της θερμικής ενέργειας (1ο θερμοδυναμικό αξίωμα) και δίνεται ως

$$\rho c \dot{T} = k \Delta T + \tau \operatorname{div} \mathbf{v} + \dot{S} \quad (2.5)$$

όπου $\dot{} := d/dt$ ολική χρονική παράγωγος

$\Delta := \operatorname{div} \operatorname{grad} := \nabla^2$: ο βαθμωτός τελεστής Laplace

c : ειδική θερμότητα

k : θερμική αγωγιμότητα

T : θερμοκρασία

Όσον αφορά το δεξί μέρος της εξίσωσης (1.5) εκφράζει τη διαφορά θερμοκρασίας λόγω αγωγιμότητας, την απώλεια θερμότητας του ιζώδους και μια πηγή θερμότητας (π.χ η θερμότητα παράγεται από χημικές αντιδράσεις κ.λπ), αντιστοίχως. Οι μεταβολές της θερμικής ενέργειας που σχετίζονται με τις παραλλαγές της πυκνότητας του ρευστού παραλείπονται σ' αυτήν την εξίσωση. Σε διαδικασίες που περιλαμβάνουν στερεοποίηση ή ρευστοποίηση πολυμερών, η ειδική θερμότητα διαφέρει ουσιαστικά με τη θερμοκρασία και θα μπορούσε να παραμείνει αμετάβλητη στην εξίσωση (1.5). Η θερμική αγωγιμότητα των πολυμερών είναι πιθανό να εξαρτάται από τη θερμοκρασία και την ανισοτροπία και, ιδανικά, θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί σαν μεταβλητή της ενεργειακής εξίσωσης. Πρακτικά, ωστόσο η έλλειψη πειραματικών δεδομένων εμποδίζει τη χρησιμότητα της σταθεράς k σε πρότυπα πολυμερούς ροής.

2.1.4 ΔΟΜΙΚΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΣΥΝΕΧΕΙΑΣ.

Μια εξίσωση διατήρησης εκφράζει τη σχέση μεταξύ της διατμητικής τάσης (τ) και του βαθμού παραμόρφωσης του ρευστού καθώς ρέει. Ωστόσο, η εξίσωση διατήρησης του ρευστού χαρακτηρίζεται από τη μακροσκοπική του παραμορφωτική συμπεριφορά κάτω από διαφορετικές συνθήκες ροής. Είναι λογικό να συμπεράνουμε ότι η μακροσκοπική συμπεριφορά ενός ρευστού κατά κύριο λόγο εξαρτάται από τη μικροσκοπική του δομή. Ωστόσο, είναι εξαιρετικά δύσκολο, αν όχι αδύνατο, να θεμελιώσουμε ακριβείς ποσοτικές σχέσεις μεταξύ της μικροσκοπικής δομής ενός μη-Νευτώνειου ρευστού και των μακροσκοπικών του ιδιοτήτων. Ωστόσο, η θεμελίωση και η καθολική εφαρμογή των προτύπων διατήρησης στα μη-Νευτώνεια ρευστά είναι, γενικά, μη αποδεκτή. Αντ' αυτού, θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν ημι-εμπειρικές σχέσεις οι οποίες να δίνουν μια αιτιολογημένη πρόβλεψη για τη συμπεριφορά καθορισμένων κατηγοριών μη-Νευτώνειων ρευστών, κάτω από καθορισμένες συνθήκες. Τα πολυμερή ρευστά μπορούν να κατηγοριοποιηθούν σε:

- Ανελαστικά ανεξάρτητα από το χρόνο
- Ανελαστικά εξαρτώμενα από το χρόνο
- Ϊξωδοελαστικά

μη-Νευτώνεια ρευστά .

2.2 ΚΑΤΗΓΟΡΙΟΠΟΙΗΣΗ ΤΩΝ ΧΡΟΝΟΑΝΕΞΑΡΤΗΤΩΝ ΑΝΕΛΑΣΤΙΚΩΝ ΡΕΥΣΤΩΝ.

Σ' ένα ανελαστικό, ανεξάρτητο από το χρόνο (Stokesian) ρευστό η διατμητική τάση θα μπορούσε να θεωρηθεί σαν μια συνάρτηση του στιγμιαίου βαθμού παραμόρφωσης. Σ' αυτήν την περίπτωση το ρευστό δε συγκρατεί στη "μνήμη" του την παραμόρφωση την οποία υπέστη στα προηγούμενα στάδια της ροής του.

2.2.1 ΝΕΥΤΩΝΕΙΑ ΡΕΥΣΤΑ.

Στην απλούστερη περίπτωση των Νευτώνειων ρευστών (γραμμικά Stokesian ρευστά) ο συντελεστής της διατμητικής τάσης εκφράζεται, με τη βοήθεια της κινηματικής συνεκτικότητας των ρευστών μ , ως

$$\tau = 2\mu\mathbf{D} \quad (2.6)$$

Όπου \mathbf{D} είναι ο δείκτης που δίνει το μέγεθος της παραμόρφωσης (ρυθμό της πίεσης) και παριστάνει το συμμετρικό κομμάτι του δείκτη μεταβολής της ταχύτητας. Οι συνιστώσες του βαθμού της παραμόρφωσης θα από 'δω και στο εξής, όσον αφορά τη βαθμωτή μεταβολή της ταχύτητας ως

$$D_{ij} = \frac{1}{2}(v_{ij} + v_{ji}) \quad (2.7)$$

Οι εξισώσεις (1.6) και (1.7) χρησιμοποιούνται για να διατυπώσουν τη ρητή σχέση μεταξύ της διατμητικής τάσης και της μεταβολής της ταχύτητας. Χρησιμοποιώντας αυτές τις σχέσεις, η διατμητική τάση τ μπορεί να παραληφθεί από τις διέπουσες εξισώσεις. Αυτή είναι η θεωρητική θεμελίωση των πολύ γνωστών εξισώσεων Navier-Stokes οι οποίες περιγράφουν τα Νευτώνεια ρευστά. (Aris, 1989).

2.2.2 ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΗ ΜΟΡΦΗ ΝΕΥΤΩΝΕΙΩΝ ΡΕΥΣΤΩΝ.

Πειραματικά δεδομένα έδειξαν ότι το ιξώδες των πολυμερών ρευστών μεταβάλλεται καθώς το ρευστό ρέει. Ωστόσο, κάτω από κανονικές συνθήκες, οι μεταβολές στην ελαστικότητα του ρευστού μπορούν να αμεληθούν. Σ' αυτές τις περιπτώσεις, η διατμητική τάση μπορεί να εκφραστεί, ρητά, όσον αφορά το βαθμό της παραμόρφωσης ως

$$\tau = 2\eta\mathbf{D} \quad (2.8)$$

Όπου η είναι το φαινόμενο ιξώδες, το οποίο είναι μια συνάρτηση του βαθμού παραμόρφωσης και της θερμοκρασίας. Η εξίσωση (1.8) παριστάνει μια γενικευμένη περιγραφή της συμπεριφοράς των Νευτώνειων Ρευστών. *Ανάλογα με το σταθερό ιξώδες των Νευτώνειων ρευστών, η εξίσωση αυτή χρησιμοποιήθηκε για να αποφέρει τις γενικευμένες εξισώσεις των Navier-Stokes μέσω της αντικατάστασης της διατμητικής τάσης στην εξίσωση της κίνησης.* Από 'δω και στο εξής, η μοναδική απαίτηση για την επίλυση αυτών των εξισώσεων είναι ο καθορισμός του φαινομένου ιξώδους του ρευστού. Θεωρητικά, το φαινόμενο ιξώδες των

γενικευμένων Νευτώνειων ρευστών μπορεί να υπολογισθεί χρησιμοποιώντας μια αποκομμένη ροή (δηλ. σταθερή κατάσταση, μονοδιάστατη, συνεχής διατμητική τάση). Ο βαθμός της παραμόρφωσης σε μια αποκομμένη ροή δίνεται από

$$\mathbf{D} = \frac{\dot{\gamma}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Όπου $\dot{\gamma}$ είναι βαθμωτό μέγεθος και ονομάζεται βαθμός διάτμησης. Συνεπώς, σάυτην την περίπτωση μια πειραματική καμπύλη ροής η οποία συσχετίζει τη διατμητική τάση και το βαθμός διάτμησης (ονομάζεται ρεόγραμμα) και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να υπολογίσει το ιξώδες του ρευστού ως

$$\eta = \frac{\tau_{12}}{\dot{\gamma}} \quad (2.10)$$

Όπου τ_{12} είναι η διατμητική τάση. Πρακτικά, είναι πολύ δύσκολο να υιοθετήσουμε την έννοια της αποκομμένης ροής και αντ' αυτού χρησιμοποιούμε 'περιοχές προσδιορισμού ιξώδους' για τον καθορισμό παραμέτρων όπως το ιξώδες. Σε μια ροή μέσω της οποίας θα προσδιορίσουμε το ιξώδες, μια παρατηρούμενη παραμόρφωση ενός στοιχείου ρευστού, σ' ένα πλαίσιο αναφοράς, το οποίο μετασχηματίζεται και περιστρέφεται μαζί με το στοιχείο του ρευστού, θα είναι πανομοιότυπη όπως σ' ένα απλό διατμητικό σύστημα. Επιπλέον με το φαινόμενο ιξώδες, δύο άλλες παράμετροι μπορούν να υπολογισθούν χρησιμοποιώντας μια απλή μέθοδο μέτρησης ιξώδους μέσω αποκομμένης ροής. Είναι οι πρωτεύοντες και δευτερεύοντες συντελεστές φυσικής πίεσης οι οποίοι εκφράζονται αντίστοιχα ως

$$\Psi_{12} = \frac{\tau_{11} - \tau_{22}}{\dot{\gamma}^2} \quad (2.11)$$

$$\Psi_{23} = \frac{\tau_{22} - \tau_{33}}{\dot{\gamma}^2} \quad (2.12)$$

Οι φυσικοί συντελεστές που ορίζονται από τις εξισώσεις (1.11) και (1.12) δημιουργούνται από την ανισοτροπία (δηλ. την εξάρτηση της κατεύθυνσης) της μικροδομής μιας μακράς πολυμερούς αλυσίδας η οποία υποβάλλεται σε μεγάλες διατμητικές παραμορφώσεις. Οι εξισώσεις διατήρησης των γενικευμένων Νευτώνειων ρευστών δεν μπορούν να προβλέψουν φυσικές τάσεις σε όλο το μήκος της κάθετης διεύθυνσης στη διατμητική επιφάνεια μιας ροής μέσω της οποίας θα υπολογισθεί το ιξώδες. Έτσι οι πρωτεύοντες και δευτερεύοντες συντελεστές φυσικής τάσης είναι οι μοναδικοί που χρησιμοποιούνται σε συνδυασμό με τα ιξωδοελαστικά μοντέλα διατήρησης.

Αναρίθμητα παραδείγματα μοντέλων πολυμερούς ροής που βασίζονται στη συμπεριφορά των γενικευμένων Νευτώνειων ρευστών απαντώνται στη βιβλιογραφία των μη-Νευτώνειων ρευστών. Χρησιμοποιώντας πειραματικά δεδομένα, τα γενικευμένα Νευτώνεια ρευστά που δεν εξαρτώνται από το χρόνο, διαχωρίζονται σε τρεις κατηγορίες. Τα Bingham plastics ρευστά, τα ψευδοπλαστικά ρευστά και τα διασταλτικά ρευστά.

Bingham plastics ρευστά.

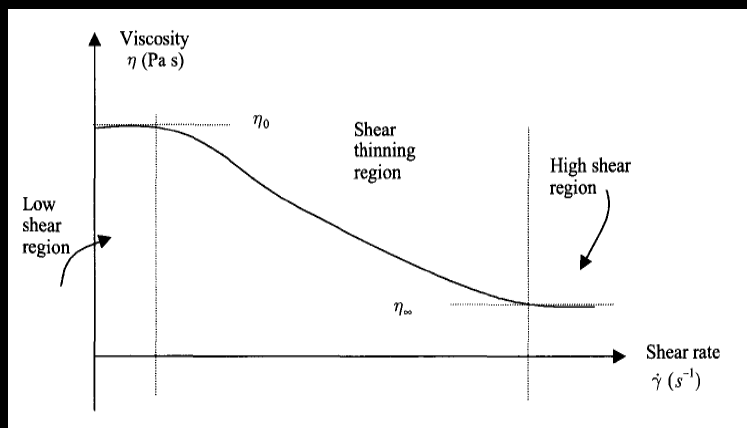
Τα πλαστικά Bingham είναι ρευστά τα οποία παραμένουν άκαμπτα κάτω από τη εφαρμογή διατμητικών τάσεων μικρότερων από μία καμπτική τάση, T_y , αλλά η ροή όπως σ'ένα απλό Νευτώνειο ρευστό, άμα τη εμφάνισι της διατμητικής τάσης, υπερβαίνει την τιμή αυτή. Διάφορες εξισώσεις διατήρησης που διαπραγματεύονται αυτού του είδους τα ρευστά αναπτύχθηκαν από τους Herschel και Bulkley (1926), Oldroyd (1947) και Casson (1959).

Ψευδοπλαστικά ρευστά.

Τα ψευδοπλαστικά ρευστά δεν υπόκεινται σε καμπτική τάση στην αρχή και σ' αυτά τα ρευστά η αναλογία της διατμητικής τάσης προς το βαθμό της διάτμησης πέφτει συνεχώς και ραγδαία με παράλληλη αύξηση του βαθμού διάτμησης. Εξαιρέσεις αποτελούν, πολύ χαμηλές και πολύ υψηλές περιοχές διάτμησης, όπου η καμπύλη του ρευστού είναι σχεδόν οριζόντια (Σχήμα 1.1). Μια κοινώς χρησιμοποιούμενη συναρτησιακή σχέση μεταξύ του διατμητικού ιξώδους και του βαθμού διάτμησης που συνήθως δίνει μια καλή πρόβλεψη για την περιοχή που δεν υπόκειται σε διάτμηση στα ψευδοπλαστικά ρευστά είναι το πρότυπο, προτεινόμενο από τους de Waele (1923) και Ostwald (1925). Το πρότυπο αυτό περιγράφεται από την κάτωθι εξίσωση

$$\eta = \eta_0 \dot{\gamma}^{n-1} \quad (2.13)$$

Όπου οι παράμετροι η_0 και n ονομάζονται συντελεστής ευστάθειας και δείκτης δυναμικού νόμου αντίστοιχα. Είναι ξεκάθαρο ότι ένα ρευστό που έχει δείκτη δυναμικού νόμου μονάδα θα μπορούσε να είναι ένα καθαρά Νευτώνειο ρευστό. Είναι επίσης κοινά αποδεκτό ότι η συμπεριφορά των μη Νευτώνειων ρευστών γίνεται περισσότερο σαφής καθώς ο δείκτης του δυναμικού νόμου έχει μεγαλύτερη απόκλιση από τη μονάδα.



Διαγραμμα διατμητικής συμπεριφοράς ψευδοπλαστικών ρευστών.

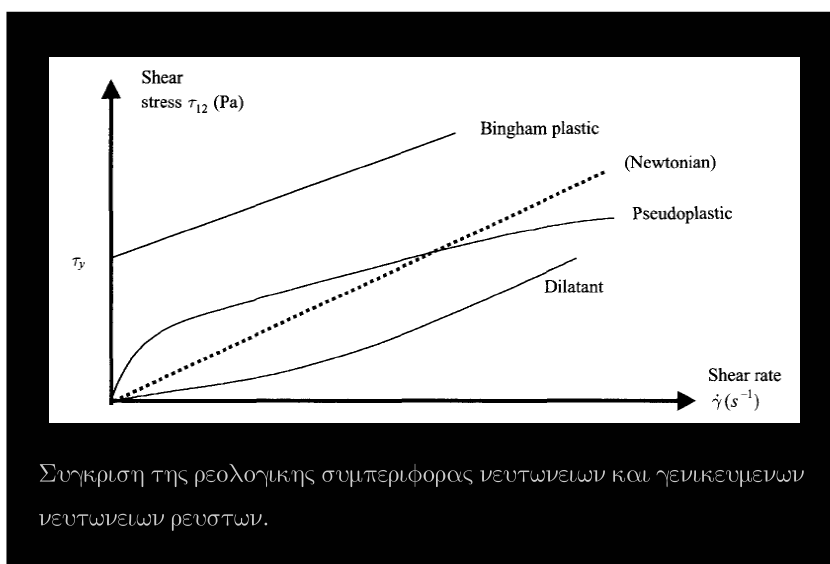
Ο συντελεστής ευστάθειας εξαρτάται από το ιξώδες του ρευστού για την περιοχή της μηδενικής διάτμησης και λαμβάνει μεγαλύτερη τιμή για ρευστά με μεγαλύτερο ιξώδες. Μια τροποποιημένη μορφή του μοντέλου δυναμικού νόμου που θα μπορούσε να εκφράσει πολύ μικρότερες διατμητικές περιοχές προτάθηκε από τον Middleman (1977). Σε μερικές περιπτώσεις, θα μπορούσε να ήταν πιο ρεαλιστικό, να εφαρμοζόταν μια τμηματική μορφή αυτού του μοντέλου, στην οποία θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν διαφορετικές τιμές των παραμέτρων σε συνάρτηση διαφορετικών τιμών διάτμησης. Η ακόλουθη μορφή της εξίσωσης του μοντέλου power law, η οποία εξαρτάται από τη θερμοκρασία, Arrhenius για τις θερμικές επιδράσεις, είναι η πιο συχνά χρησιμοποιούμενη σε μοντέλα πολυμερούς ροής. (Pittman και Nakazawa, 1984)

$$\eta = \eta_0 \dot{\gamma}^{n-1} \exp \left\{ -b(T - T_{\text{ref}}) \right\} \quad (2.14)$$

Όπου b είναι ο συντελεστής θερμοκρασιακής εξάρτησης και T_{ref} είναι η θερμοκρασία αναφοράς. Επιπλέον με το μοντέλο του δυναμικού νόμου, μια πληθώρα άλλων σχέσεων, που μελετούν τη συμπεριφορά των ψευδοπλαστικών ρευστών, μπορεί να απαντηθεί στη βιβλιογραφία. Για παράδειγμα, η ακόλουθη εξίσωση που προτάθηκε από τον Carreau (1968) έγινε ευρέως αποδεκτή στην ανάλυση των πολυμερών εφαρμογών

$$\frac{\eta - \eta_{\infty}}{\eta_0 - \eta_{\infty}} = \left[1 + (\lambda|\dot{\gamma}|)^2 \right]^{(n-1)/2} \quad (2.15)$$

Όπου η_0 και η_{∞} είναι μηδενική και απείρως μεγάλη διατμητική τάση, συνεχούς ιξώδους, λ είναι η σταθερά του υλικού και n είναι δείκτης του δυναμικού νόμου.



Διασταλτικά Ρευστά.

Τα διασταλτικά ρευστά (γνωστά και ως ρευστά με πυκνωμένης διάτμησης) δείχνουν μια αύξηση στο ιξώδες συνοδευόμενη από μια αύξηση του βαθμού διάτμησης. Μια τέτοια αύξηση του ιξώδους θα μπορούσε, ίσως και όχι, να συνοδεύεται από μια μετρήσιμη αύξηση του όγκου του ρευστού (Metzner και Whitlock, 1958). Ο τύπος των ρεολογικών εξισώσεων, του power law, με $n > 1$ χρησιμοποιείται συνήθως για να περιγράψει αυτού του είδους τα ρευστά. Τα τυπικά ρεογράμματα δείχνουν τη συμπεριφορά διαφορετικών τύπων γενικευμένων Νευτώνειων ρευστών όπως φαίνεται και στο προηγούμενο σχήμα.

2.3 ΧΡΟΝΟΕΞΑΡΤΗΜΕΝΑ ΑΝΕΛΑΣΤΙΚΑ ΡΕΥΣΤΑ.

Μετά την εφαρμογή σταθερής διάτμησης, το ιξώδες μερικών τύπων μη-Νευτώνειων ρευστών μεταβάλλεται σε συνάρτηση με το χρόνο. Τα ρευστά που εξαρτώνται από το χρόνο και παρουσιάζουν αύξηση στο ιξώδες τους με την πάροδο του χρόνου, ονομάζονται ‘ρεοπεκτικά’. Τα ρευστά τα οποία έχουν ακριβώς αντίθετη συμπεριφορά δηλαδή παρουσιάζουν μείωση του ιξώδους τους ονομάζονται ‘θιξοτροπικά’. Η ρεοπηξία και η θιξοτροπία είναι περίπλοκα φαινόμενα που προκύπτουν από παροδικές αλλαγές της μοριακής δομής των εξαρτώμενων από το χρόνο ρευστών κάτω από την εφαρμογή διατμητικής τάσης. Γενικά, είναι εξαιρετικά δύσκολο να εισάγουμε τις μοριακές επιδράσεις, αυτού του είδους, στις εξισώσεις διατήρησης των μη Νευτώνειων ρευστών. Έτσι, τα προτεινόμενα μοντέλα διατήρησης γι’ αυτά τα ρευστά βασίζονται σε πολλές απλοποιημένες υποθέσεις (Slibar και Paslay, 1959). Σε περίπτωση που, οι ελαστικές επιδράσεις, από ένα χρονικά εξαρτώμενο ρευστό είναι μηδαμινές, τότε, ένα μαθηματικό μοντέλο, παρόμοιο με το μοντέλο των γενικευμένων Νευτώνειων ρευστών, μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να περιγράψει τη ροή τους. Η εξίσωση διατήρησης σ’ ένα τέτοιο μοντέλο πρέπει ωστόσο, να αντικατοπτρίζει την εξάρτηση από το χρόνο του ιξώδους του ρευστού. Η “κατασκευή” ροών για τα εξαρτώμενα από το χρόνο ρευστά συχνά απαιτεί τη χρήση κινητικών σχέσεων. Αυτές οι σχέσεις παρουσιάζουν το μοριακό φαινόμενο, όπως μια πολυμερή διάσπαση, σαν συνάρτηση του χρόνου. (Kemblowski και Pereta, 1981).

2.4 ΙΞΩΔΟΕΛΑΣΤΙΚΑ ΡΕΥΣΤΑ.

Εκτός από την πρόβλεψη του ιξώδους, τα γενικευμένα Νευτώνεια μοντέλα διατήρησης δεν μπορούν να εξηγήσουν φαινόμενα, όπως η αναπήδηση, η χαλάρωση, η πίεση διαρροής και τη διόγκωση του πολυμερούς κατά την εκβολή τα οποία συχνά παρατηρούνται σε μοντέλα πολυμερούς ροής. Αυτά τα φαινόμενα έχουν μια σημαντική επίδραση στην ποιότητα του προϊόντος της πολυμερούς επεξεργασίας και γι’ αυτό δεν θα πρέπει να αγνοηθούν. Θεωρητικά, όλα αυτά τα φαινόμενα μπορεί να θεωρηθούν ως το αποτέλεσμα του υλικού, έχοντας υποστεί ένα συνδυασμό των ιδιοτήτων του ελαστικού στερεού και του ιξώδους του ρευστού. Ωστόσο, μαθηματική μοντελοποίηση της πολυμερούς ροής θα μπορούσε να βασιστεί στη χρήση εξισώσεων διατήρησης για τα ιξωδοελαστικά ρευστά. Η διατύπωση των εξισώσεων διατήρησης για τα ιξωδοελαστικά ρευστά είναι αντικείμενο μεγάλου όγκου θεωρητικής έρε-

υνας πολλών δεκαετιών. Λεπτομέρειες για τη διατύπωση των εξισώσεων διατήρησης για τα ιξωδοελαστικά ρευστά και την κατηγοριοποίηση τους καλύπτεται σε πολλά εγχειρίδια και αναθεωρημένες δημοσιεύσεις (βλ. Tanner, 1985; Bird et al. 1977; Mistoulis, 1990). Παρ' όλες τις προσπάθειες και την εξάπλωση των προτεινόμενων εξισώσεων διατήρησης τα τελευταία χρόνια, το πρόβλημα της επιλογής μίας εξίσωσης που θα μπορούσε να αποδώσει τα επαληθεύσιμα αποτελέσματα για ένα ρευστό, υπό όλες αυτές τις συνθήκες, είναι ακόμα άλυτο (Pearson, 1994). Πρακτικά, ωστόσο, η εναπομείνασα επιλογή είναι να επιλέξουμε ένα δομημένο μοντέλο για τα ιξωδοελαστικά ρευστά το οποίο θα μπορεί να προβλέψει τα βασικά χαρακτηριστικά της συμπεριφοράς του ρευστού για μια καθορισμένη κατάσταση. Θα πρέπει ωστόσο να αναφερθεί, ότι η χρήση περίπλοκων υπολογιστικών μοντέλων για αυτά τα ρευστά, σε περιπτώσεις που είναι διαφορετικά, από αυτά που θεωρήθηκαν στην αρχική διατύπωση του μοντέλου, θα αποφέρουν αναξιόπιστες προβλέψεις, και θα πρέπει να αποφευχθούν.

2.4.1 ΜΕΤΑΒΛΗΤΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΔΙΑΤΗΡΗΣΗΣ ΤΩΝ ΙΞΩΔΟΕΛΑΣΤΙΚΩΝ ΡΕΥΣΤΩΝ.

Ιδιότητες των υλικών, όπως η χαλάρωση, η επιμήκυνση του ιξώδους και οι φυσικοί συντελεστές πίεσης, ουσιαστικά χρησιμοποιούνται ως κατάλληλες έννοιες για την επεξήγηση της διαφορετικής συμπεριφοράς ενός ιξωδοελαστικού ρευστού σε μία εξίσωση διατήρησης. Υπό κανονικές συνθήκες ο ακριβής καθορισμός αυτών των παραμέτρων είναι δύσκολο να πραγματοποιηθεί και γι' αυτό το λόγο θα θεωρούνται ως εμπειρικοί παράμετροι στα μοντέλα των ελαστικών ρευστών. Αυτές οι ιδιότητες μπορούν, ωστόσο, να θεωρηθούν συμβατές με καλά καθορισμένες φυσικές συναρτήσεις κάτω από απλές συνθήκες ροής. Συνεπώς, σ' ένα ιξωδοελαστικό μοντέλο Νευτώνειων ρευστών, οι ιδιότητες αυτές, ανάλογα με το ιξώδες, υπολογίζονται μέσω διεξαγωγής ρεομετρικών πειραμάτων χρησιμοποιώντας απλά συστήματα ροής.

Ο χρόνος χαλάρωσης της έντασης, που προέκυψε από τα ρεογράμματα, βασιζόμενη στη μέτρηση του ιξώδους του ρευστού χρησιμοποιήθηκε για να ορίσει μια αδιάστατη παράμετρο που ονομάζεται 'αριθμός Deborah', η οποία ποσοτικοποιεί την ελαστικότητα ενός ρευστού

$$De = \frac{\lambda}{\theta} = \lambda \dot{\gamma} \quad (2.16)$$

που λ είναι ο χρόνος χαλάρωσης (χαρακτηριστικό της χαλάρωσης της πολυμερούς αλυσίδας) και θ είναι η διάρκεια του χρόνου παραμόρφωσης. Το μέγεθος του αριθμού

Deborah χρησιμοποιείται ως μέτρο για να αποφασίσουμε πότε οι ελαστικές και κολλώδεις επιδράσεις σ' ένα κύριο πρόβλημα ροής είναι σημαντικές ή όχι. Χρησιμοποιείται επίσης, ένας εναλλακτικός καθορισμός, βασισμένος στον αδιάστατο αριθμό Weisseberg, για να παράσχει ένα ποσοτικοποιημένο μέτρο της ιξωδοελαστικότητας στα Νευτώνεια ρευστά. Ο αριθμός Weisseberg ορίζεται ως

$$W_s = \lambda \frac{V}{H} \quad (2.17)$$

Όπου V και H είναι οι χαρακτηριστική ταχύτητα και η χαρακτηριστική επιμήκυνση αντιστοίχως. Ο δείκτης του βαθμού παραμόρφωσης σε μια καθαρή ροή επιμήκυνσης έχει την ακόλουθη μορφή

$$\mathbf{D} = -\frac{\dot{\epsilon}}{2} \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Όπου $\dot{\epsilon}$ είναι ένα καθαρά βαθμωτό μέγεθος και ονομάζεται κύριος βαθμός διεύρυνσης. Βασισμένο σε μία ροή επιμήκυνσης, η ιξώδες επιμήκυνση ενός ρευστού ορίζεται ως

$$\eta_e = \frac{\tau_{11} - \tau_{22}}{\dot{\epsilon}} \quad (2.19)$$

Όπου τ_{11} και τ_{22} είναι οι κανονικές συνιστώσες της πίεσης. Πρακτικά, είναι πολύ δύσκολο να δημιουργήσουμε μία ελεγχόμενη ροή επιμήκυνσης αν και η μέτρηση της επιμήκυνσης του ιξώδους αποτελεί ένα σημαντικό γεγονός. Για ένα Νευτώνιο ρευστό η επιμήκυνση του ιξώδους είναι τριπλάσια της τιμής του μ (Stevenson 1972). Στα ελαστικά και κολλώδη ρευστά η αναλογία της επίμηχες ιξώδες ως προς το διατμητικό ιξώδες μπορεί να γίνει πολύ μεγαλύτερη από τρία. Η επιμήκυνση του ιξώδους όπως ορίστηκε στην εξίσωση (1.19) παριστάνει μια μονοσήμαντη διεύρυνση. Οι ροές επιμήκυνσης μπορεί να θεωρηθεί ότι βασίζονται σε διαξονικές διευρύνσεις. Σε κάθε ισοαξονική διεύρυνση ο δείκτης της παραμόρφωσης ορίζεται ως

$$\mathbf{D} = \dot{\epsilon}_B \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

Όπου $\dot{\epsilon}_B$ είναι ένα θετικό βαθμωτό μέγεθος και ονομάζεται διαξονικός βαθμός επιμήκυνσης. Το διαξονικό ιξώδες διαξονικό ιξώδες ορίζεται ως

$$\eta_B = \frac{\tau_{11} - \tau_{33}}{\dot{\epsilon}_B} = \frac{\tau_{22} - \tau_{33}}{\dot{\epsilon}_B} \quad (2.21)$$

2.4.2 ΔΙΑΦΟΡΙΚΕΣ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ ΔΙΑΤΗΡΗΣΗΣ ΙΞΩΔΟΕΛΑΣΤΙΚΩΝ ΡΕΥΣΤΩΝ.

Βασισμένα στη μέθοδο της μαθηματικής ανάλυσης, τα μοντέλα διατήρησης των ιξωδοελαστικών ρευστών μπορεί να διατυπωθούν ως διαφορικές ή ολοκληρωτικές εξισώσεις. Στα διαφορικά μοντέλα οι συνιστώσες της πίεσης, και τα παράγωγα της, είναι συναφή με τις συνιστώσες του βαθμού καταπόνησης και των παράγωγων της. Ο τύπος του Oldroyd διαφορικών δομικών εξισώσεων για τα ασυμπίεστα ελαστικά και κολλώδη ρευστά μπορεί γενικά να γραφτεί ως (Oldroyd, 1950)

$$\lambda \frac{\Delta_{abc}}{\Delta t} \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} = 2\eta \left(\mathbf{D} + \Lambda \frac{\Delta_{abc}}{\Delta t} \mathbf{D} \right) \quad (2.22)$$

Όπου λ, η και Λ είναι material (κύριοι) παράμετροι και χρονική παράγωγος του δείκτη \mathbf{U} ορίζεται ως

$$\frac{\Delta_{abc}}{\Delta t} \mathbf{Y} := \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial t} + \mathbf{v} \operatorname{div} \mathbf{Y} + [\boldsymbol{\omega}, \mathbf{Y}]_- + [\mathbf{D}, \mathbf{Y}]_+ + b \mathbf{I} \operatorname{Tr}\{\mathbf{D}\mathbf{Y}\} + c \mathbf{D} \operatorname{Tr}\{\mathbf{Y}\} \quad (2.23)$$

Όπου $[A, B]_{\pm} := A \pm B$ είναι ο μεταθέτης (-) και ο αντιμεταθέτης (+) δύο τελεστών, \mathbf{I} είναι το μοναδιαίο διάνυσμα και

$$D = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{div} \mathbf{v} + [\operatorname{div} \mathbf{v}]^T \right\} \quad \text{και} \quad \boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{div} \mathbf{v} - [\operatorname{div} \mathbf{v}]^T \right\}$$

είναι τα συμμετρικά και αντισυμμετρικά μέρη του δείκτη μεταβολής της ταχύτητας (velocity gradient). Η εξίσωση (1.23) παρέχει έναν γενικό καθορισμό του χρονικού παραγώγου για κάθε δευτεροβάθμιο παράγοντα και εμπεριέχει την τοπική μετάδοση θερμότητας, περιστροφικές και συναφή καταπονήσεις, σε απόλυτη αρμονία, αναφορικά με το συντελεστή του χρόνου. Πρακτικά, μπορούν να θεωρηθούν ειδικές περιπτώσεις. Ο Jaumann ή συστρεφόμενα χρονικά παράγωγα καθορίζονται σαν μια περίπτωση όπου οι παράμετροι a, b, c είναι μηδέν. Στην ανώτερη μετάδοση θερμότητας, (ή co-παραμορφωμένο) αποδιαμόρφωσης στο παράγωγο του Oldroyd, η παράμετρος a είναι μονάδα ενώ οι παράμετροι b και c είναι μηδενικοί. Η κατηγοριοποίηση κατά Maxwell των εξισώσεων διατήρησης των ιξωδοελαστικών ρευστών περιγράφεται από μια απλούστερη μορφή της εξίσωσης (1.22) στην

οποία η παράμετρος Λ είναι μηδενική. Για παράδειγμα, η ανώτερη μετάδοση θερμότητας, στο μοντέλο του Maxwell (UCM) εκφράζεται ως

$$\lambda \frac{\Delta_{-100}}{\Delta t} \tau + \tau = 2\eta \mathbf{D} \quad (2.24)$$

Άλλοι συνδυασμοί χρονικών παραγώγων ανώτερης ή κατώτερης μετάδοσης θερμότητας του δείκτη της πίεσης χρησιμοποιούνται επίσης για την θέσπιση των εξισώσεων διατήρησης των ιξωδοελαστικών ρευστών. Για παράδειγμα, οι Johnson και Segalman (1977) πρότειναν την ακόλουθη εξίσωση

$$\lambda \left\{ \left(1 - \frac{\zeta}{2}\right) \frac{\Delta_{-100}}{\Delta t} \tau + \frac{\zeta}{2} \frac{\Delta_{100}}{\Delta t} \tau \right\} = 2\eta \mathbf{D} \quad (2.25)$$

οπου ζ είναι η παράμετροι μεταξύ μηδέν και δύο.

Ένα συχνά χρησιμοποιούμενο παράδειγμα του τύπου του Oldroyd για τις εξισώσεις διατήρησης είναι του το μοντέλο-B του Oldroyd. Το μοντέλο-B του Oldroyd μπορεί να θεωρηθεί σαν μια περιγραφή της συμπεριφοράς ενός ρευστού προερχόμενου από τη διάλυση ενός (UCM) ρευστού σε ένα Νευτώνιο διαλύτη. Εδώ, η παράμετρος Λ , ονομάζεται ‘επιβράδυνση χρόνου’ και ορίζεται ως

$$\Lambda = \lambda \frac{\eta_s}{\eta + \eta_s}$$

, όπου η_s είναι το ιξώδες του διαλύτη. Από ‘δω και στο εξής, ο δείκτης της διατμητικής τάσης σ' ένα μοντέλο-B του Oldroyd δημιουργείται από τον Maxwell με τη συμβολή του διαλύτη. Η εξίσωση διατήρησης του μοντέλου-B του Oldroyd γράφεται ως

$$\tau - \lambda \frac{\Delta_{-100}}{\Delta t} \tau = 2(\eta + \eta_s) \left(\mathbf{D} + \frac{\lambda \eta_s}{\eta + \eta_s} \frac{\Delta_{-100}}{\Delta t} \mathbf{D} \right) \quad (2.26)$$

Γενικά, τα πρότυπα του Maxwell ή του Oldroyd δε δίνουν ρεαλιστικές προβλέψεις για τη ροή και την παραμορφωτική συμπεριφορά των πολυμερών ρευστών. Ειδικά, σε περιπτώσεις που οι περιοχές του ρευστού χαρακτηρίζονται από παραμορφώσεις επιμήκυνσης αυτά τα πρότυπα αποδείχθηκε ότι δίνουν πολύ φτωχές προβλέψεις. Έγιναν πολλές προσπάθειες για τη δημιουργία προτύπων που να ενσωματώνουν και τη διατμητική και την συμπεριφορά στα ελαστικά και κολλώδη ρευστά. Phan-Thien και Tanner (1977) διατύπωσαν ένα ιξωδοελαστικότητα πρότυπο βασισμένο στη θεωρία δικτύων των μακρομορίων. Αυτό το πρότυπο

φάνηκε να δίνει σχετικά καλά αποτελέσματα για τις ροές επιμήκυνσης (Tanner, 1985). Η εξίσωση Phan-Thien/Tanner εκφράζεται ως

$$\exp\left(\epsilon \frac{\lambda}{\eta} \text{Tr}\tau\right) \lambda \left\{ \left(1 - \frac{\zeta}{2}\right) \frac{\Delta_{-100}}{\Delta t} \tau + \frac{\zeta}{2} \frac{\Delta_{100}}{\Delta t} \tau \right\} = 2\eta \mathbf{D} \quad (2.27)$$

Όπου ϵ ορίζεται ως η χαρακτηριστική παράμετρος επιμήκυνσης. Στην εξίσωση (1.27) οι παράμετροι ϵ και $s \in [0, 2]$ είναι αντιπροσωπευτικοί του διμήκης και της διατμητικής συμπεριφοράς του ρευστού αντιστοίχως. Όπως, μπορεί να δειχθεί, η καταχώρηση $\epsilon = 0$ υποβιβάζει την εξίσωση Phan-Thien/Tanner σ' ένα μοντέλο Johnson/Segalman. Όλες αυτές οι περιγραφόμενες διαφορικές εξισώσεις των ελαστικών και κολλώδη ρευστών είναι αναμφίβολα σχέσεις μεταξύ των δεικτών της διατμητικής τάσης και του ρυθμού παραμόρφωσης. Συνεπώς, εν αντιθέσει με τις γενικευμένες Νευτώνειες ροές, αυτές οι εξισώσεις δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να ελαχιστοποιήσουν τη διατμητική τάση στην εξίσωση της κίνησης και θα πρέπει να λυθούν ταυτόχρονα με τις διέπουσες εξισώσεις ροών.

2.4.3 ΟΛΟΚΛΗΡΩΤΙΚΗ ΜΟΡΦΗ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΔΙΑΤΗΡΗΣΗΣ ΙΞΩΔΟΕΛΑΣΤΙΚΩΝ ΡΕΥΣΤΩΝ.

Στα ολοκληρωτικά μοντέλα, οι συνιστώσες της πίεσης που προέκυψαν από την ολοκλήρωση κατάλληλων εξισώσεων, παριστάνουν το μέγεθος της παραμόρφωσης, μέσα από τη διάτμηση του ρευστού. Το απλούστερο ολοκληρωτικό πρότυπο για τα ρευστά που μοιάζουν με λάστιχο προτάθηκε από τον Lodge (1964). Άλλες εξισώσεις, οι οποίες ανήκουν σ' αυτή την κατηγορία, δημιουργήθηκαν από τους Johnson και Segalman (1977) και Doi και Edwards (1978, 1979). Ωστόσο, τα πιο συχνά χρησιμοποιούμενα απλής ολοκλήρωσης για τα ιξωδοελαστικά ρευστά είναι η KBKZ εξίσωση ανεξάρτητα προτεινόμενη από τους Kaye (1962) Bernstein, Kearsley και Zapas (1963). Η γενική μορφή των ολοκληρωμένων εξισώσεων διατήρησης για τα ισότροπα ρευστά γράφεται ως

$$\tau(t) = \int_{-\infty}^t M(t-t') \left\{ \Phi_1(I_1, I_2) \left(F_t(t-t') - I \right) + \Phi_2(I_1, I_2) \left(C_t(t-t') - I \right) \right\} dt' \quad (2.28)$$

Εδώ $\tau(t)$ είναι η πίεση σ' ένα μόριο του ρευστού που προκύπτει από την ολοκλήρωση κατά μήκος της τροχιάς ενός μορίου του παραμορφωμένου σχηματισμού μεταξύ του χρόνου t και του τρέχοντος χρόνου t' . Στην εξίσωση (1.28) η συνάρτηση $M(t-t')$ είναι η

εξαρτώμενη από το χρόνο συνάρτηση μνήμης της γραμμικής ιξωδοελαστικότητας, αδιάστατων ποσοτήτων Φ_1 και Φ_2 όπου είναι οι συναρτήσεις της πρώτης σταθεράς των και , οι οποίες είναι, αντίστοιχα, οι δεξιοί δείκτες Cauchy-Green και τα αντίστροφα τους. Η συνάρτηση μνήμης συνήθως εκφράζεται ως

$$M(t-t') = \sum_k \frac{n_k}{\lambda_k^2} \exp \left\{ -\frac{t-t'}{\lambda_k} \right\}, \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (2.29)$$

Όπου n_k είναι οι συντελεστές του ιξώδους και λ_k είναι οι φορές χαλάρωσης. Η γενική εξίσωση (1.27) μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να προκύψουν διάφορα ολοκληρωτικά μοντέλα διατήρησης ιξωδοελαστικών ρευστών για τα ασυμπίεστα ρευστά. Για παράδειγμα, βάζοντας τιμές $\Phi_1 = 1$ και $\Phi_2 = 0$ προκύπτει το μοντέλο που προτάθηκε από τον Lodge (1964). Αυτό το μοντέλο μπορεί ναδειχθεί ότι είναι ισάξιο με την εξίσωση ανώτερης μετάδοσης θερμότητας του Maxwell που περιγράφηκε στην προηγούμενη ενότητα. Για να προκύψει το μοντέλο KBKZ οι βαθμωτές συναρτήσεις της καταπόνησης Kernel της ολοκλήρωσης στην εξίσωση (1.27) επιλέγονται ως

$$\Phi_\nu = -\frac{\partial}{\partial I_\nu} W(I_1, I_2), \quad \nu = 1, 2 \quad (2.30)$$

Όπου I_1 και $\text{Tr}\{\mathbf{F}\}$ και $I_2 = \text{Tr}\{\mathbf{C}\}$ και $W(I_1, I_2)$ ένα ενδεχόμενο για τις συναρτήσεις Φ_ν . Όπως μπορεί ναδειχθεί το μοντέλο του Lodge είναι μια ειδική περίπτωση του μοντέλου KBKZ στο οποίο. Μια απλοποιημένη μορφή του μοντέλου KBKZ προτάθηκε από τον Wagner (1979) και βρήκε ευρεία εφαρμογή στην μοντελοποίηση των ελαστικών και κολλώδη ρευστών (βλ. Olley και Coates, 1997). Τα ολοκληρωτικά μοντέλα έχουν το προφανές πλεονέκτημα να υπολογίζουν το δείκτη της διατμητικής τάσης με ακρίβεια και συνεπώς μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον υπολογισμό της διάτμησης ανεξάρτητα από άλλους άγνωστους συντελεστές. Ωστόσο, τα ολοκληρωτικά μοντέλα είναι δύσκολο να επιλυθούν με μαθηματικό τρόπο, και γενικά πρέπει να επιλυθούν με τρόπο επίλυσης κατά Lagrange. Το μεγάλο υπολογιστικό σφάλμα των προβλημάτων που προκύπτουν στα συστήματα Lagrange και των προβλημάτων που προκύπτουν από τον υπολογισμό των συναρτήσεων, οι οποίες εξαρτώνται από την καταπόνηση, θεωρούνται ως τα οπισθια σύνολα αυτών των μοντέλων. Μερικές από τις ολοκληρωτικές ή διαφορικές εξισώσεις που παρουσιάστηκαν σ' αυτήν ή την προηγούμενη ενότητα έχουν πλήρη ομοιότητα με το άλλο σύνολο. Υπάρχουν, ωστόσο, εξισώσεις και στα δύο σύνολα που δεν έχουν καμία σχέση με την άλλη κατηγορία.

2.5 ΙΞΩΔΟΜΕΤΡΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ (ΤΟ ΠΡΩΤΥΠΟ CEF).

Οι πρακτικές και οι υπολογιστικές επιπλοκές που αντιμετωπίστηκαν για την επίλυση των περιγραφόμενων διαφορικών ή ολοκληρωτικών εξισώσεων για τα ελαστικά και κολλώδη ρευστά, μερικές φορές, δικαιολογούν τη χρήση μιας ευρηματικής προσέγγισης βασισμένης στην εξίσωση που προτάθηκε από τον Criminale, Ericksen και Fibley (1958) για να μοντελοποιήσει τις πολυμερείς ροές. Παρόμοια με τη γενικευμένη Νευτώνική προσέγγιση, κάτω από τις σταθερές συνθήκες της ιξωδομετρικής ροής, οι συνιστώσες της διατμητικής τάσης στο πρότυπο (CEF) δίνουν σαφείς σχέσεις αναφορικά με τις συνιστώσες του βαθμού παραμόρφωσης. Ωστόσο, στο πρότυπο (CEF) οι συνιστώσες των τάσεων λαμβάνουν υπ' όψιν και την επίδραση των φυσικών πιέσεων στη μη-Νευτώνεια ροή. Για παράδειγμα, σ' ένα δισδιάστατο σύστημα συντεταγμένων, οι συνιστώσες της διατμητικής τάσης στο πρότυπο (CEF) γράφονται ως

$$\begin{aligned}\tau_{xx} &= \eta D_{xx} + (\Psi_{12} + \Psi_{23}) D_{xy}^2 \\ \tau_{yy} &= \eta D_{yy} + \Psi_{23} D_{xy} \\ \tau_{xy} &= \eta D_{xy}\end{aligned}\tag{2.31}$$

Όπου D_{ij} είναι συνιστώσες του βαθμού παραμόρφωσης (καταπονήσεις) και Ψ_{12} και Ψ_{23} είναι οι πρωτεύον και δευτερεύον συνιστώσα φυσικής τάσης, αντίστοιχα. Ένα ανάλογο σύνολο σχέσεων το οποίο αντανακλά πλήρως την συμπεριφορά επιμήκυνσης των πολυμερών ρευστών έχει επίσης προταθεί από τον (Mitsoulis, 1990) ως

$$\begin{aligned}\tau_{xx} &= \eta_e D_{xx} + (\Psi_{12} + \Psi_{23}) D_{xy}^2 \\ \tau_{yy} &= \eta_c D_{yy} + \Psi_{23} D_{xy} \\ \tau_{xy} &= \eta_s D_{xy}\end{aligned}\tag{2.32}$$

Όπου η_e και η_s είναι το ιξώδες επιμήκυνση και το διατμητικό ιξώδες αντίστοιχα. Εξαιτίας του μικρού υπολογιστικού σφάλματος του προτύπου (CEF), αυτή η προσέγγιση, θεωρήθηκε, σαν μια καλή εναλλακτική για τις περισσότερες εξισώσεις των ελαστικών και κολλώδη ρευστών στη μοντελοποίηση συστημάτων πολυμερούς ροής τα οποία δεν αποκλίνουν σημαντικά από τις ιξωδομετρικές συνθήκες (Mitsoulis, 1986).

Κεφάλαιο 3

ΣΤΑΘΜΙΣΜΕΝΑ ΥΠΟΛΟΙΠΟΜΕΝΑ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ.

Όπως περιγράφηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο, τα μαθηματικά μοντέλα που περιγράφουν τα συστήματα πολυμερούς ροής είναι βασισμένα σε μη-γραμμικές μερικές διαφορικές εξισώσεις και δεν μπορούν να λυθούν από αναλυτικές μεθόδους. Συνεπώς, αυτές οι εξισώσεις λύνονται χρησιμοποιώντας αριθμητικές μεθόδους. Οι αριθμητικές επιλύσεις των διαφορικών εξισώσεων που εμφανίζονται στα προβλήματα μηχανικού, συνήθως βασίζονται σε διαφορές πεπερασμένων στοιχείων που έχουν όρια ή πεπερασμένα διαγράμματα έντασης. Άλλες αριθμητικές μέθοδοι όπως οι φασματικές επεκτάσεις ή άλλες μέθοδοι που εμφανίζονται στο προσκήνιο, ανεξάρτητες από τις δικτυακές μεθόδους θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν για να λύσουν τις διέπουσες εξισώσεις των ιδιαίτερων προβλημάτων μηχανικού. Πολυάριθμα παραδείγματα επιτυχούς εφαρμογής αυτών των μεθόδων για την επίλυση ρεαλιστικών προβλημάτων με τη βοήθεια ηλεκτρονικού υπολογιστή μπορούν να απαντηθούν στη βιβλιογραφία. Όλες αυτές οι μέθοδοι έχουν πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα και ένας μαντικός αριθμός παραγόντων θα πρέπει να ληφθεί υπ' όψιν πριν αποφασιστεί η εφαρμογή της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων στη μοντελοποίηση μιας διαδικασίας. Οι πιο

σημαντικοί παράγοντες αυτής της μεθόδου είναι: τύπος των διεπουσών εξισώσεων της διαδικασίας, γεωμετρία της περιοχής που θα πραγματοποιηθεί η διαδικασία, θέσπιση οριακών συνθηκών, απαιτούμενη ακρίβεια των υπολογισμών και υπολογιστικό σφάλμα.

Γενικά, η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων έχει μεγαλύτερη γεωμετρική ευελιξία από άλλες σύγχρονες αριθμητικές μεθόδους. Μπορεί επίσης να εφαρμοστεί πολύ αποτελεσματικά, με διάφορους τύπους οριακών συνθηκών. Το πιο σημαντικό μειονέκτημα αυτής της μεθόδου είναι το μεγάλο υπολογιστικό σφάλμα των τρισδιάστατων πεπερασμένων στοιχείων. Πρακτικά, συχνά χρησιμοποιούνται λογικές προσεγγίσεις για να προκύψουν χρήσιμες προσομοιώσεις για τα ρεαλιστικά προβλήματα μηχανικού χωρίς την πλήρη ανάλυση των τριών διαστάσεων. Στη μοντελοποίηση των πολυμερών ροών μέσω της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων, πρέπει να γίνουν προσεγγιστικές παραδοχές για την ελαχιστοποίηση του σφάλματος.

- Τα δισδιάστατα μοντέλα μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να παράσχουν αποτελεσματικές προσεγγίσεις στη μοντελοποίηση πολυμερών διαδικασιών εάν οι συντελεστές του πεδίου ροής στην εναπομείνουσα (τρίτη) διάσταση είναι μικροί. Ειδικότερα, στα αξονοσυμμετρικά, για τη μετάβαση του αριθμητικού μοντέλου σε ένα δισδιάστατο, είναι δυνατόν να αγνοηθούν οι περιφερειακοί συντελεστές των άγνωστων πεδίων και να ενσωματωθούν στις εξισώσεις ροής.

- Τα χαρακτηριστικά της διαδικασίας ίσως δικαιολογούν την απλοποίηση των υποθέσεων όπως ο κατ'επίτημα υπολογισμός της λίπανσης' η οποία θα μπορούσε να εφαρμοστεί για να παραστήσει τον ερπυσμό σε στενές οπές.

- Τα χαρακτηριστικά της διαδικασίας ίσως δικαιολογούν την απλοποίηση των υποθέσεων όπως ο κατ'επίτημα υπολογισμός της λίπανσης' η οποία θα μπορούσε να εφαρμοστεί για να παραστήσει τον ερπυσμό σε στενές οπές.

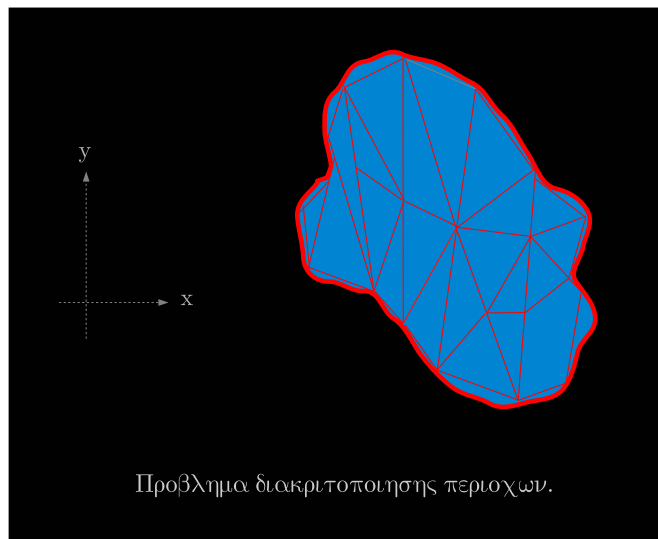
Η μοντελοποίηση της ροής μέσω της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων για την επίλυση προβλημάτων μηχανικού μπορεί να βασιστεί σε διαφορετικές μεθοδολογίες. Για παράδειγμα, η προτεινόμενη μέθοδος για τις κατασκευαστικές αναλύσεις είναι η 'μέθοδος της αντικατάστασης' η οποία βασίζεται στην ελαχιστοποίηση της αποκλίνουσας κατάστασης η οποία αντιπροσωπεύει την κατάσταση της ισορροπίας σε μια κατασκευή (Zienkiewicz και Taylor, 1994). Η μηχανική των ρευστών, απ' την άλλη πλευρά, δεν μπορεί να εκφραστεί με βάση τις αρχές της φυσικής. Ωστόσο, το μαθηματικό μοντέλο των δυναμικών προβλημάτων ροής κυρίως εξαρτάται από την επίλυση των μερικών διαφορικών εξισώσεων που απορρέουν

από τους νόμους της διατήρησης μάζας, ορμής, ενέργειας και τις εξισώσεις διατήρησης. Οι μέθοδοι των σταθμισμένων υπολοίπων, όπως του Galerkin, οι μέθοδοι ελαχίστων τετραγώνων και συγκριτικής παράθεσης παρέχουν τη θεωρητική βάση για την αριθμητική επίλυση των μερικών διαφορικών εξισώσεων. Ωστόσο, η ακριβής εφαρμογή αυτών των μεθόδων στα προβλήματα μηχανικού συνήθως δεν είναι πρακτική και χρειάζεται να συνδυαστούν με διαδικασίες προσεγγίσεις μέσω της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων για την ανάπτυξη σθεναρών πρακτικών διατάξεων. Από 'δω και στο εξής, η κοινώς αποδεκτή προσέγγιση στη μοντελοποίηση της πολυμερούς ροής, με τη βοήθεια υπολογιστή, είναι η εφαρμογή της μεθόδου των σταθμισμένων υπολοίπων των πεπερασμένων στοιχείων. Η κύρια έννοια της προσέγγισης μέσω πεπερασμένων στοιχείων και το γενικό συμπέρασμα των μεθόδων των σταθμισμένων υπολοίπων επεξηγείται εν συντομία σ' αυτό το κεφάλαιο. Αυτές οι έννοιες παρέχουν το απαραίτητο υπόβαθρο για την επίλυση των εξισώσεων που προέκυψαν από τις αριθμητικές μεθόδους που χρησιμοποιήθηκαν για να προσομοιώσουν τις πολυμερείς ροές. Μια βαθύτερη ανάλυση των μαθηματικών θεωρημάτων, θεμέλιο των προσεγγίσεων μέσω πεπερασμένων στοιχείων και των μεθόδων υπολοίπου βαρους, είναι εκτός του σκοπού της διπλωματικής εργασίας. Ωστόσο, σ' αυτό το κεφάλαιο, αποδόθηκαν τα κύρια σημεία αυτών των μαθηματικών θεωρημάτων. Λεπτομερείς επεξηγήσεις της θεωρητικής βάσης για την επίλυση των μερικών διαφορικών εξισώσεων από τις μεθόδους υπολοίπου βαρους των πεπερασμένων στοιχείων μπορεί να βρεθούν σε πολλά βιβλία αφιερωμένα σ' αυτά τα αντικείμενα. Για παράδειγμα, βλ. Mitchell και Wait (1977), Johnson (1987), Brenner και Scott (1994) και ειδικότερα, για την επίλυση των εξισώσεων των ασυμπίεστων ρευστών Navier • Stokes βλ. Girault και Raviart (1986) και Pironneau (1989). Οι μαθηματικές derivations πηγές που παρουσιάστηκαν στα ακόλουθα κεφάλαια είναι, περιστασιακά, δοσμένες σε περιβάλλον μονοδιάστατου ή διδιάστατου καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων. Ωστόσο, αυτές οι πηγές, έχουν ήδη γενικευτεί η υιοθετημένη πρακτική είναι η απλοποίηση των μαθηματικών θεωρημάτων.

3.1 ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ ΜΕΣΩ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ.

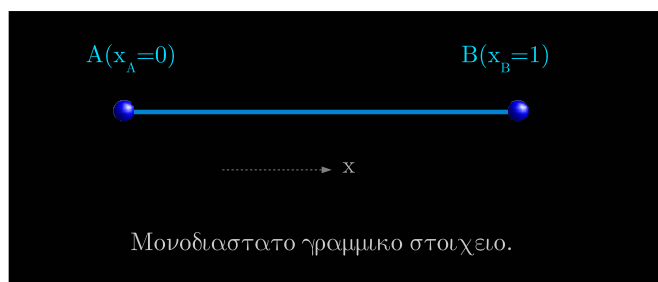
Το πρώτο βήμα, για τη διατύπωση της προσέγγισης μέσω πεπερασμένων στοιχείων, σε ένα πεδιακό πρόβλημα είναι να διαιρέσουμε την περιοχή σ' ένα αριθμό μικρότερων υποπεριοχών χωρίς την ύπαρξη κενών μεταξύ τους και χωρίς να υπερπηδήσουμε μεταξύ αυτών. Αυτή η διαδικασία ονομάζεται διακριτοποίηση περιοχής. Μια ατομική υπό-περιοχή σ' έ-

να διακριτό πρόβλημα ονομάζεται ‘πεπερασμένο στοιχείο’ και συλλογικά, τα πεπερασμένα στοιχεία παρέχουν ‘το πλέγμα των πεπερασμένων στοιχείων’ για τα διακριτές περιοχές. Γενικά, τα στοιχεία πλέγματος των πεπερασμένων στοιχείων ίσως έχουν διαφορετικά μεγέθη αλλά όλα αυτά συνήθως έχουν ένα κοινό βασικό σχήμα (π.χ. είναι όλα τριγωνικά ή τετράπλευρα) και ένα ίσο αριθμό δεσμών. Οι δεσμοί είναι επιλεγμένα σημεία σ’ ένα στοιχείο όπου πρέπει να υπολογιστούν οι αριθμητικές τιμές των αγνώστων. Όλοι οι τύποι των πεπερασμένων στοιχείων θα πρέπει να έχουν μερικούς δεσμούς εγκατεστημένους στις συνοριακές τους γραμμές. Μερικά από τα πεπερασμένα στοιχεία που χρησιμοποιούνται συχνά επίσης έχουν εσωτερικούς δεσμούς. Οι συνοριακοί δεσμοί των ατομικών πεπερασμένων στοιχείων εμφανίζονται ως σημεία τομής των στοιχείων σ’ ένα πλέγμα πεπερασμένων στοιχείων. Σε μια διαδικασία προσέγγισης ροής, μέσω πεπερασμένων στοιχείων, τα στοιχεία του υπολογιστικού πλέγματος είναι υπό-περιοχές της ροής και δεν παριστάνουν μέρη του σώματος του ρευστού. Στα περισσότερα προβλήματα μηχανικού, τα σύνορα του πεδιακού προβλήματος αποτελούνται από καμπυλωτά τμήματα. Η διακριτοποίηση των περιοχών με τα καμπυλωτά σύνορα, χρησιμοποιώντας πλέγματα τα οποία αποτελούνται από στοιχεία με ευθείες πλευρές, αναπόφευκτα εμπεριέχει κάποιο σφάλμα. Αυτό το είδος σφάλματος, που αφορά τη διακριτοποίηση, μπορεί προφανώς να μειωθεί με ραφινάρισμα των δικτυωτών πλεγμάτων. Ωστόσο, δεν μπορεί εξ ολόκληρου να ελαχιστοποιηθεί εκτός αν χρησιμοποιηθούν πεπερασμένα στοιχεία τα οποία έχουν καμπυλωτές πλευρές. Η διακριτοποίηση ενός πεδιακού προβλήματος σ’ ένα πλέγμα πεπερασμένων στοιχείων αποτελούμενο από τυχαία, τριγωνικού μεγέθους, στοιχεία που φαίνονται στο σχήμα. Σε ένα δικτυωτό πλέγμα με μεγάλα κομμάτια φαίνεται ότι υπάρχουν σχετικά μεγάλα κενά μεταξύ του πραγματικού συνόρου της περιοχής και του συνόρου του πλέγματος και συνεπώς το συνολικό σφάλμα αναμένεται να είναι μεγάλο. Το κύριο συμπέρασμα της διακριτοποίησης ενός πεδιακού προβλήματος μέσω πεπερασμένων στοιχείων είναι ότι, εντός κάθε στοιχείου, μπορούν να προσεγγιστούν άγνωστες συναρτήσεις χρησιμοποιώντας διαδικασίες παρεμβολής.



3.1.1 ΜΕΘΟΔΟΙ ΠΑΡΕΜΒΟΛΗΣ.

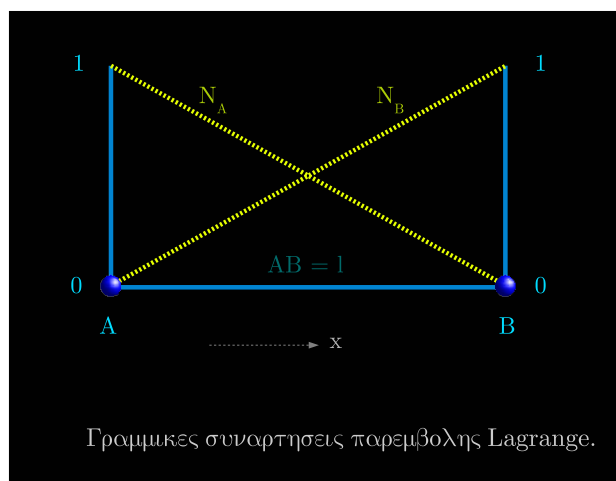
Θεωρούμε ότι το Ω_e να είναι ένα καλά καθορισμένο πεπερασμένο στοιχείο, δηλαδή, είναι καθορισμένο το σχήμα του καθώς και ο αριθμός και η τοποθεσία των κόμβων του.. Θα προσπαθήσουμε να καθορίσουμε τις παραλλαγές μιας συνεχής συνάρτησης, όπως η F , πέρα από αυτό το στοιχείο, όσον αφορά κατάλληλες γεωμετρικές συναρτήσεις. Αν μπορεί να υποθεθεί ότι οι τιμές της F , στους κομβους της Ω_e , είναι γνωστές, τότε σε κάθε άλλο σημείο εντός αυτού του στοιχείου μπορούμε να προσδιοριστεί η κατάλληλη τιμή για την F , χρησιμοποιώντας μεθόδους παρεμβολής. Για παράδειγμα, θεωρώντας μια μονοδιάστατη γραμμή ενός στοιχείου, με δυο κομβους, μήκους l και τους κομβους τοποθετημένους στα σημεία $A(QA = 0)$ και $B(QB = L)$ όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα



Χρησιμοποιώντας μια απλή διαδικασία παρεμβολής, η παραλλαγή μιας συνεχής συνάρτησης, όπως η F κατά μήκος του στοιχείου μπορεί να δειχτεί, προσεγγιστικά, ως

$$\bar{f}(x) = \underbrace{\frac{l-x}{l}}_{N_A} f_A + \underbrace{\frac{x}{l}}_{N_B} f_B \quad (3.1)$$

Η εξίσωση (2.1) δίνει μια προσεγγιστική τιμή για την F στη θέση x όσον αφορά τις τιμές των κομβών της και δύο γεωμετρικές συναρτήσεις. Οι γεωμετρικές συναρτήσεις στην εξίσωση (2.1) ονομάζονται 'σχηματικές' συναρτήσεις. Μια απλή υπόθεση δείχνει ότι : (α) κάθε συνάρτηση είναι ίση με τη μονάδα στον αντίστοιχο κόμβο της και μηδέν στον άλλο δεσμό (β) το σύνολο των σχηματικών συναρτήσεων είναι ίσο με τη μονάδα. Αυτές οι συναρτήσεις, που φαίνονται στο σχήμα που ακολουθεί είναι γραμμένες σύμφωνα με τους αντίστοιχους κομβους τους όπως N_A και N_B .



Ανάλογες διαδικασίες παρεμβολής, που περιλαμβάνουν μεγαλύτερο αριθμό σημείων, σε σχέση με τα δύο ακραία σημεία του παραπάνω παραδείγματος, δίνουν μεγαλύτερη ακρίβεια για άγνωστες μονοδιάστατες συναρτήσεις στοιχείων. Η μέθοδος μπορεί επίσης να επεκταθεί σε δισδιάστατα και τρισδιάστατα στοιχεία. Γενικά, μια συνάρτηση παρεμβολής ενός πολυδιάστατου στοιχείου Ω_e εκφράζεται ως

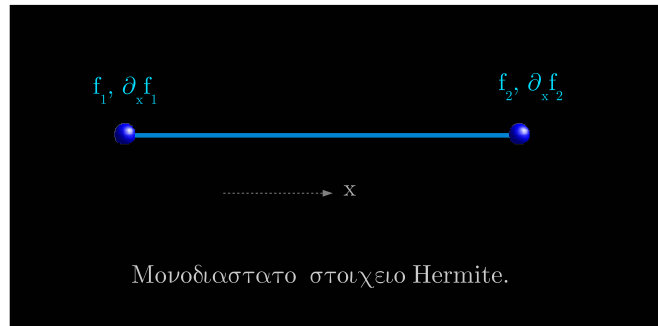
$$\bar{f}(\bar{x}) \simeq \bar{f}(\bar{x}) = \sum_i N_j(\bar{x}_i) f_i \quad , i = 1, 2, \dots, p \quad (3.2)$$

Όπου \bar{x} αντιστοιχεί στο ζεύγος συντεταγμένων του σημείου στο Ω_e , για το οποίο θέλουμε να βρούμε μια κατάλληλη τιμή παρεμβολής για την συνάρτηση F , i είναι δείκτης του κόμβου, p είναι ο μέγιστος αριθμός των κόμβων στο Ω_e και είναι η συνάρτηση σχήματος αντίστοιχη με το βρόχο i . Παρόμοια με το μονοδιάστατο παράδειγμα, οι συναρτήσεις σχήματος πολυδιάστατων στοιχείων πρέπει ακόμα να ικανοποιούν τις ακόλουθες συνθήκες

$$N_i(\bar{x}_j) = \delta_{ij} \Rightarrow \sum_i N_i(\bar{x}_j) = 1 \quad , i = 1, 2, \dots, p \quad (3.3)$$

Όπου F_i , είναι οι τιμές των δεσμών της συνάρτησης F (ονομάζονται κομβικοί βαθμοί ελευθερίας). Οι κομβικοί βαθμοί ελευθερίας που εμφανίζονται στις προσεγγίσεις του στοιχείου είναι τα άγνωστα πεδία που θα βρεθούν κατά τη διάρκεια της προσέγγισης μέσω πεπερασμένων στοιχείων. Ο γενικός τύπος των συναρτήσεων σχήματος, αντίστοιχων με τα πεπερασμένα στοιχεία, εξαρτάται από το σχήμα και τον αριθμό των βρόχων του. Στους περισσότερους τύπους πεπερασμένων στοιχείων είναι πολυωνυμικές μικρού βαθμού. Γενικά, αν οι βαθμοί ελευθερίας, σ' ένα πεπερασμένο στοιχείο, δίνονται σαν τιμές δεσμών αγνώστων συναρτήσεων (π.χ. τα παράγωγα των συναρτήσεων δεν συμπεριλαμβάνονται) τότε το στοιχείο λέγεται ότι ανήκει στη οικογένεια στοιχείων Lagrange. Ωστόσο, μερικοί συγγραφείς χρησιμοποιούν τον όρο 'στοιχείο Lagrange' αποκλειστικά για εκείνα τα στοιχεία των οποίων οι αντίστοιχες σχηματικές συναρτήσεις είναι ειδικά βασισμένες στις πολυωνυμικές παρεμβολές Lagrange ή στα παράγωγα τους (Gerald και Wheatley, 1984). Τα μοντέλα παρεμβολής Hermite συμπεριλαμβανομένων των συντελεστών των παραγώγων του πεδίου field (Ciarlet, 1978; Lapidus και Pinder, 1982) μπορούν επίσης να χρησιμοποιηθούν για την κατασκευή προσεγγιστικών συναρτήσεων μέσω πεπερασμένων στοιχείων. Θεωρώντας ένα μονοδιάστατο στοιχείο, δύο βρόχων, όπως φαίνεται στο σχήμα 2.4, στο οποίο οι βαθμοί ελευθερίας είναι κομβικές τιμές κλίσεις αγνώστων συναρτήσεων. Επομένως, η καθορισ-

μένη έκφραση της προσεγγιστικής τιμής μιας συνάρτησης F , σ' ένα εσωτερικό σημείο του στοιχείου πρέπει να περιλαμβάνει και τις δεσμικές τιμές και τις κλίσεις. Αυτό, μπορεί να γραφτεί ως

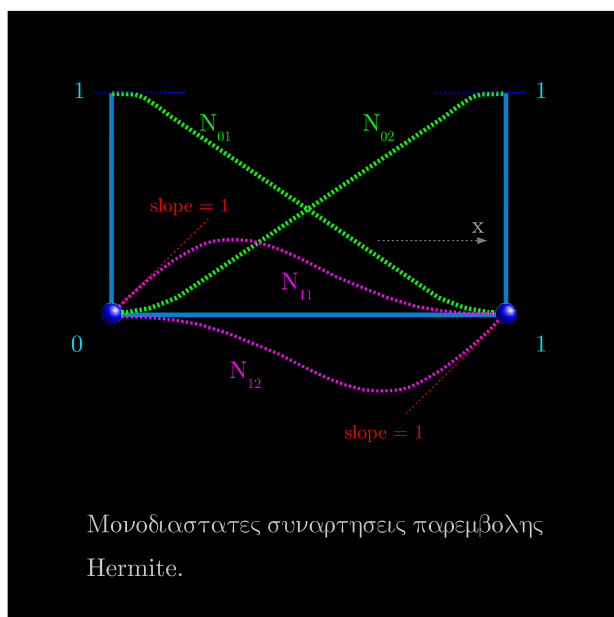


$$\bar{f} = \sum_{I=1}^2 N_{0I}(x)f_I + N_{1I}(x)\partial_x f_I \quad (3.4)$$

Όπου N_{0I} και N_{1I} είναι πολυωνυμικές συναρτήσεις ίδιου βαθμού. Όπως μπορεί αν δείχτεί σ' αυτήν την περίπτωση, κάθε κόμβος αντιστοιχεί σε δύο σχηματικές συναρτήσεις. Στις άκρες της γραμμής του στοιχείου η εξίσωση (2.4) πρέπει να δίνει τις τιμές της συνάρτησης και τις κλίσεις που φαίνονται στο προηγούμενο σχήμα, συνεπώς:

- $N_{0I}(x)$ πρέπει να είναι μονάδα στο δεσμό με αριθμό I και μηδέν στον άλλο δεσμό, $N'_{0I}(x)$ πρέπει να είναι μηδέν και στους δύο δεσμούς, και
- $N_{1I}(x)$ πρέπει να είναι μηδέν και στους δύο δεσμούς και $N'_{1I}(x)$ πρέπει να είναι μονάδα στο δεσμό I και μηδέν στον άλλο δεσμό.

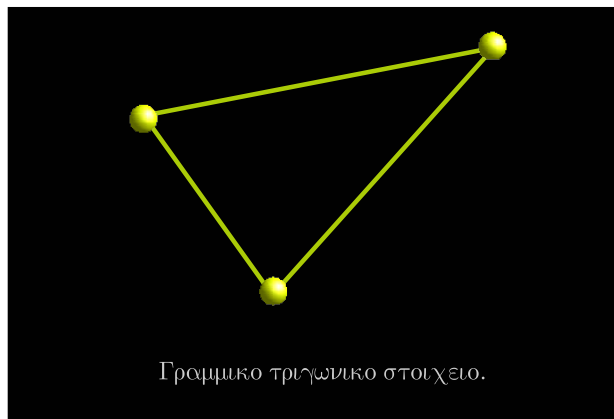
Ένας απλός έλεγχος δείχνει ότι οι τριτοβάθμιες συναρτήσεις (splines) που παριστάνονται γραφικά στο σχήμα 2.5 ικανοποιούν τις άνω συνθήκες.



Παράλληλα με την ανάπτυξη των προσεγγίσεων από τα περιγραφόμενα μοντέλα παρεμβολής είναι και ο προσδιορισμός πολυωνυμικών παραλλαγών για συναρτήσεις πεπερασμένων στοιχείων. Επομένως, οι σχηματικές συναρτήσεις σ' ένα δοσμένο πεπερασμένο στοιχείο αντιστοιχούν σ' ένα ειδικό προσεγγιστικό πολυώνυμο. Ωστόσο, οι προσεγγίσεις μέσω πεπερασμένων στοιχείων, ίσως δεν παριστάνουν πλήρη πολυώνυμα κάθε δοσμένου βαθμού.

3.1.2 ΣΧΗΜΑΤΙΚΕΣ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ ΚΟΙΝΟΤΥΠΩΝ ΠΑΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ.

Πρότυπες διαδικασίες για τη δημιουργία των σχηματικών συναρτήσεων κοινότυπων πεπερασμένων στοιχείων μπορούν να επεξηγηθούν σ' ένα πλαίσιο διδιάστατων τριγωνικών και τετραγωνικών στοιχείων. Θεωρούμε πρώτα, ένα τριγωνικό στοιχείο το οποίο έχει τρεις δεσμούς τοποθετημένους στις κορυφές του, όπως φαίνεται στο επόμενο σχήμα



Παραλλαγές των συνεχών συναρτήσεων γι' αυτό το στοιχείο μπορούν να εκφραστούν μέσω ενός γραμμικού πολυωνύμου πρώτου βαθμού

$$f(x, y) \simeq \bar{f}(x, y) = a_1 + a_2x + a_3y \quad (3.5)$$

Από την εισαγωγή των συντεταγμένων των κόμβων στην εξίσωση (2.5) μπορεί να βρεθούν οι τιμές των κόμβων της συνάρτησης. Αυτό παριστάνεται ως

Όπου $X_i, Y_i, i = 1, 2, 3$ είναι οι συντεταγμένες των κόμβων και $F, i = 1, 2, 3$ είναι οι βαθμοί ελευθερίας των κόμβων (π.χ. τιμές συνάρτησης). Χρησιμοποιώντας συμβολισμούς πινάκων η εξίσωση (2.6) γράφεται ως

$$\mathbf{f}^e = \mathbf{C}\mathbf{a} \quad (3.6)$$

και συνεπώς

$$\mathbf{a} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{f}^e \quad (3.7)$$

Η εξίσωση (2.5) μπορεί να γραφτεί ως

$$\bar{f} = \mathbf{P}\mathbf{a} = \mathbf{P}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{f}^e \quad (3.8)$$

όπου $\mathbf{P} = (1, x, y)$. Συγκρίνοντας τις εξισώσεις (2.2) και (2.9) έχουμε

$$\bar{f} = \mathbf{N}\mathbf{f}^e \quad (3.9)$$

οπου \mathbf{N} είναι ένα σύνολο σχηματικών συναρτήσεων γραμμένες ως

$$\mathbf{N} = \mathbf{P}\mathbf{C}^{-1} \quad (3.10)$$

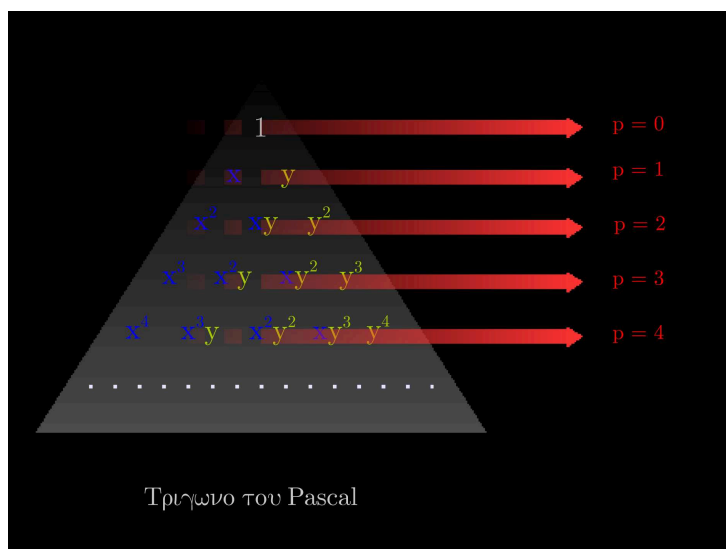
Σαν εξαγωγικό συμπέρασμα της διαδικασίας, η παραγωγή των σχηματικών συναρτήσεων σ' ένα (γραμμικό) τριγωνικό στοιχείο, με τρεις κόμβους, απαιτεί την επίλυση ενός συνόλου αλγεβρικών εξισώσεων, όπως φαίνεται στην εξίσωση (2.11) ως

$$N_1 = \frac{1}{A} \left[(y_2 - y_3)x + (x_3 - x_2)y + (x_2y_3 - x_3y_2) \right] \quad (3.11)$$

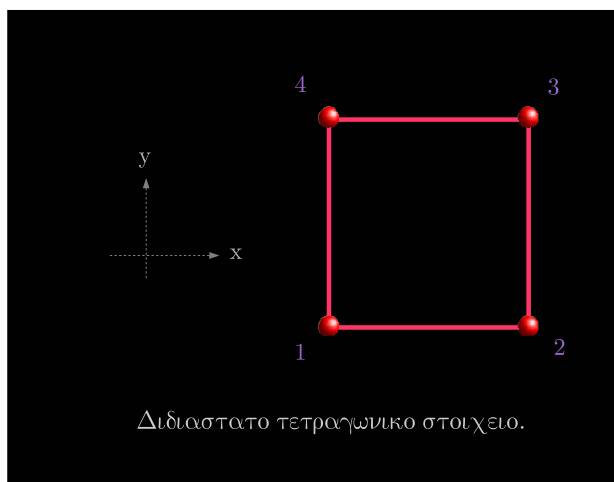
$$N_2 = \frac{1}{A} \left[(y_3 - y_1)x + (x_1 - x_3)y + (x_3y_1 - x_1y_3) \right] \quad (3.12)$$

$$N_3 = \frac{1}{A} \left[(y_1 - y_2)x + (x_2 - x_1)y + (x_1y_2 - x_2y_1) \right] \quad (3.13)$$

οπου έχουμε ορίσει για ευκολία την ποσότητα $A := x_1y_2 + x_2y_3 + x_3y_1 - x_1y_3 - x_2y_1 - x_3y_2$. Μπορεί τάχιστα ναδειχτεί ότι αυτές οι γεωμετρικές εξισώσεις ικανοποιούν τις συνθήκες που περιγράφησαν από την εξίσωση (2.3). Οι σχηματικές συναρτήσεις ενός τριγωνικού στοιχείου, δευτέρου βαθμού, με έξι συνδεδεμένους κόμβους, τοποθετημένους στις κορυφές και στα μέσα των πλευρών του, μπορούν να προέλθουν από μια παρόμοια διαδικασία χρησιμοποιώντας ένα πλήρες πολυώνυμο δευτέρου βαθμού. Παρομοίως, μπορεί ναδειχτεί ότι ένα πλήρες πολυώνυμο τρίτου βαθμού αντιστοιχεί σ' ένα τριγωνικό στοιχείο με δέκα κόμβους και ούτω καθεξής. Η διάταξη που φαίνεται στο παρακάτω σχήμα (ονομάζεται και τρίγωνο του Pascal) παριστάνει τους όρους που απαιτούνται για την κατασκευή ενός πλήρους πολυωνύμου κάθε δοσμένου βαθμού, p , σε δύο μεταβλητές x και y . Ο αριθμός των όρων ενός πλήρους πολυωνύμου, κάθε δοσμένου βαθμού, από 'δω και στο εξής θα αντιστοιχεί στον αριθμό των κόμβων σ' ένα τριγωνικό στοιχείο, το οποίο ανήκει σ' αυτήν την οικογένεια. Μια ανάλογη τετραεδρική οικογένεια πεπερασμένων στοιχείων, τα οποία αντιστοιχούν σε πλήρη πολυώνυμα, αναφορικά με τρεις μεταβλητές του χώρου, μπορούν επίσης να κατασκευαστούν για τρισδιάστατη ανάλυση.



Η περιγραφόμενη άμεση προέλευση των σχηματικών συναρτήσεων από τη διατύπωση και επίλυση των αλγεβρικών εξισώσεων αναφορικά με τις κομβικές συντεταγμένες και τους βαθμούς ελευθερίας είναι ανέφικτη για στοιχεία μεγαλύτερου βαθμού. Επιπροσθέτως, η ύπαρξη λύσης γι' αυτές τις εξισώσεις (δηλ. ύπαρξη ενός αντιστρόφου πίνακα) υπάρχει μόνο αν οι παρεμβολές βασίζονται σε πολυωνυμικά αναπτύγματα. Σημαντικές οικογένειες, χρήσιμων πεπερασμένων στοιχείων, δεν παρέχουν μοντέλα παρεμβολής τα οποία αντιστοιχούν σε πλήρη πολυωνυμικά αναπτύγματα. Συνεπώς, πρακτικά, εφαρμόζονται έμμεσες μέθοδοι για την δημιουργία σχηματικών συναρτήσεων συσχετιζόμενες με στοιχεία τα οποία ανήκουν σ' αυτές τις οικογένειες. Μια πολύ βολική 'έμμεση' διαδικασία για την παραγωγή σχηματικών συναρτήσεων σε τετραγωνικά στοιχεία είναι η χρησιμοποίηση των 'τανυστικών γινομένων' μιας μονοδιάστατης συνάρτησης παρεμβολής. Αυτό μπορεί άμεσα να εξηγηθεί θεωρώντας ένα τετραγωνικό στοιχείο τεσσάρων κόμβων όπως φαίνεται στο σχήμα που ακολουθεί



Το μοντέλο παρεμβολής σ' αυτό το στοιχείο εκφράζεται ως

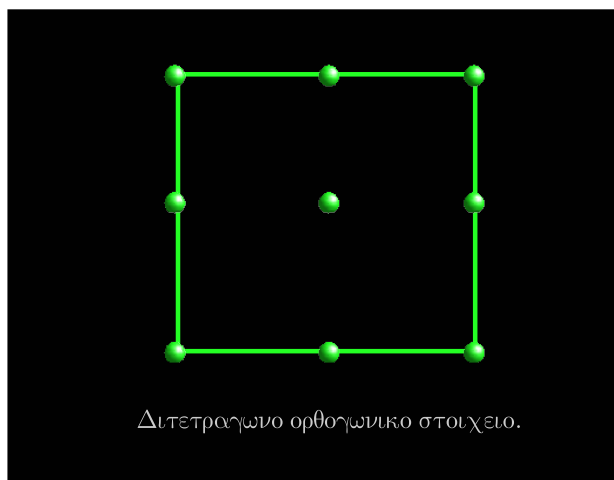
$$\bar{f}(x, y) = a_1 + a_2x + a_3y + a_4xy \quad (3.14)$$

Το πολυωνυμικό ανάπτυγμα που χρησιμοποιήθηκε σ' αυτήν την εξίσωση δεν περιλαμβάνει όλους τους όρους ενός πλήρους αναπτύγματος δευτέρου βαθμού (δηλ. έξι όροι αντιστοιχούν σε $p = 2$ στο τρίγωνο του Pascal) και, συνεπώς, το ορθογώνιο στοιχείο των τεσσάρων κόμβων που φαίνεται στο σχήμα 2.8 δεν είναι ένα τετραγωνικό στοιχείο. Το δεξί μέρος της εξίσωσης (2.15) μπορεί, ωστόσο, να γραφτεί ως το παράγωγο δύο πρώτοβάθμιων πολυωνύμων όσον αφορά τις μεταβλητές x και y ως

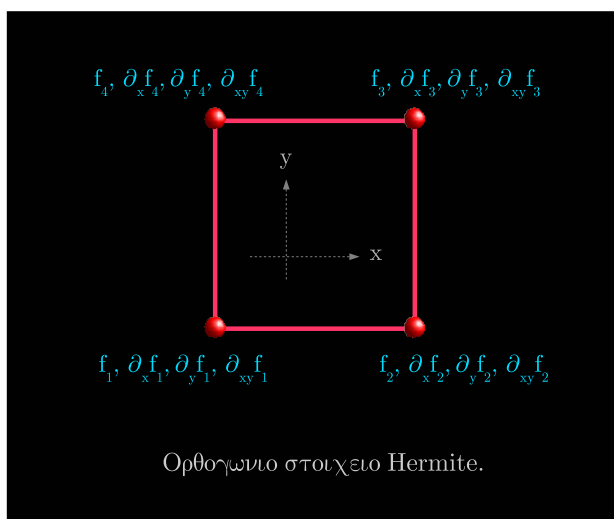
$$\bar{f}(x, y) = (b_1x + b_2)(b_3y + b_4) \quad (3.15)$$

Συνεπώς, μια προφανής διαδικασία για τη δημιουργία των σχηματικών συναρτήσεων του στοιχείου που φαίνεται στο σχήμα 2.8 είναι η εύρεση των στοιχείων της γραμμικής συνάρτησης παρεμβολής στις x και y διαστάσεις. Το ορθογωνικό στοιχείο των τεσσάρων κόμβων που κατασκευάστηκε μ' αυτόν τον τρόπο ονομάζεται δι-γραμμικό στοιχείο. Τα μεγαλύτερου βαθμού μέλη αυτής της οικογένειας προέρχονται άμεσα από τη χρησιμοποίηση τελεστών που απορρέουν από μεγαλύτερου βαθμού συναρτήσεις παρεμβολής μονοδιάστατης ανάλυσης. Για παράδειγμα, το δεύτερο μέλος αυτής της οικογένειας είναι το δι-τετράγωνο ορθογώνιο στοιχείο εννέα κόμβων που φαίνεται στο σχήμα 2.9, του οποίου οι σχηματικές συναρτήσεις διατυπώνονται όπως τα μέλη ενός δευτεροβάθμιου πολυωνύμου Lagrange στις διαστάσεις x και y . Μια παρόμοια διαδικασία χρησιμοποιήθηκε για τη δημιουργία του

‘τανυστικών γινόμενων’ τρισδιάστατων στοιχείων, όπως ένα τρι-τετράγωνο στοιχείο είκοσι επτά κόμβων. Οι σχηματικές συναρτήσεις σε ένα δισδιάστατο ή τρισδιάστατο τανυστικό γινόμενο είναι πάντα ημιτελή πολυώνυμα.

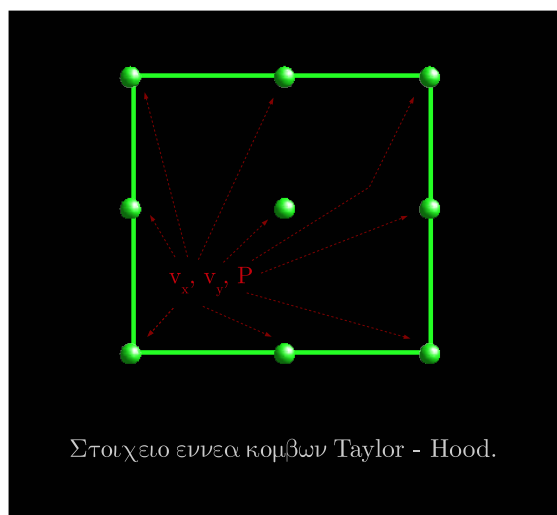


Ανάλογα με τον τανυστικό γινόμενο των στοιχείων Lagrange, μπορεί επίσης να δημιουργηθεί και ο τανυστικό γινόμενο των στοιχείων Hermite. Το τετραγωνικό στοιχείο που αναπτύχθηκε από τον Bogner et al. (1965) είναι ένα παράδειγμα αυτού του συνόλου. Αυτό το στοιχείο φαίνεται στο σχήμα παρακάτω και περιλαμβάνει μέγιστο αριθμό 16 βαθμών ελευθερίας για κάθε μεταβλητή. Οι αντίστοιχες σχηματικές συναρτήσεις αυτού του στοιχείου βρίσκονται όπως ο τανυστικό γινόμενο των τριτοβάθμιων πολυωνύμων στις διαστάσεις x και y . Ένα άλλο σημαντικό σύνολο πεπερασμένων στοιχείων των οποίων οι σχηματικές συναρτήσεις δεν είναι πλήρη πολυώνυμα είναι η οικογένεια των τυχαίων πεπερασμένων στοιχείων. Ένα ορθογωνικό στοιχείο, το οποίο έχει τέσσερις κόμβους στις γωνίες και τέσσερις στα άκρα του είναι ένα παράδειγμα αυτής της οικογένειας. Οι σχηματικές συναρτήσεις αυτών των στοιχείων δεν μπορούν να προκύψουν από τον τανυστικό γινόμενο μιας μονοδιάστατης συνάρτησης παρεμβολής (εξαιρουμένου για τους τέσσερις κόμβους ορθογωνικό στοιχείο το οποίο είναι ίδιο και για τις δύο οικογένειες). Από δω και στο εξής, αυτές οι συναρτήσεις προσδιορίζονται από μια εναλλακτική μέθοδο βασισμένη στη χρησιμοποίηση στοιχείων των επιλεγμένων πολυωνύμων τα οποία δίνουν τις επιθυμητές συναρτήσεις στα άκρα του στοιχείου (Reddy, 1993).

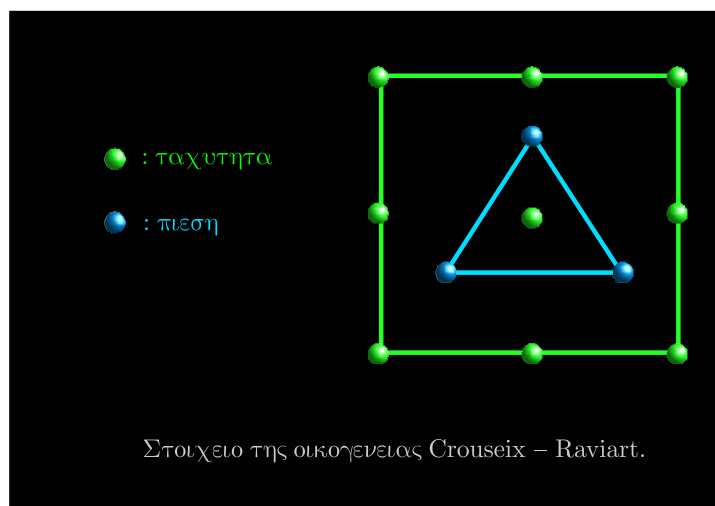


3.1.3 ΜΗ ΚΑΝΟΝΟΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ.

Οι οικογένειες των πεπερασμένων στοιχείων που περιγράφησαν στην προηγούμενη ενότητα χρησιμοποιούνται για τη δημιουργία του μοντέλου διακριτοποίησης σ' ένα μεγάλο εύρος προβλημάτων μηχανικού. Επιπλέον με αυτές τις οικογένειες, έχουν επίσης αναπτυχθεί και άλλα σύνολα στοιχείων τα οποία παρέχουν ειδικούς τύπους προσεγγίσεων. Σ' αυτήν την ενότητα περιγράφησαν ένας αριθμός 'μη-κανονικών' στοιχείων τα οποία χρησιμοποιούνται ευρέως για τη μοντελοποίηση περιοχών πολυμερούς ροής. Τα στοιχεία Taylor • Hood είναι μεταξύ των πιο πρόσφατων παραδειγμάτων αυτού του συνόλου τα οποία έχουν ειδικά σχεδιαστεί για την επίλυση προβλημάτων ασυμπιεστής ροής. Στα στοιχεία Taylor • Hood η παρεμβολή της πίεσης βασίζεται πάντα σε μικρού βαθμού πολυώνυμα σε σχέση με τα πολυώνυμα που χρησιμοποιήθηκαν για να παρεμβάλουμε τις συνιστώσες της ταχύτητας. (Taylor - Hood, 1973). Το ορθογωνικό στοιχείο που φαίνεται στο σχήμα που ακολουθεί, είναι ένα παράδειγμα αυτής της οικογένειας.



Σ' αυτό το στοιχείο, τα πεδία της πίεσης και της ταχύτητας προσεγγίζονται χρησιμοποιώντας δι-τετράγωνα και δι-γραμμικές σχηματικές συναρτήσεις αντιστοίχως. Αυτό αντιστοιχεί σ' ένα μέγιστο αριθμό 22 βαθμών ελευθερίας αποτελούμενου από 18 δεσμούς για τις συνιστώσες της ταχύτητας (γωνιακούς, μέσους και κεντρικούς κόμβους) και τέσσερις κόμβους πίεσης (γωνιακοί κόμβοι). Τα στοιχεία Crouzeix - Raviart είναι ένα άλλο σύνολο πεπερασμένων στοιχείων τα οποία παρέχουν διαφορετικές παρεμβολές για την πίεση και την ταχύτητα σε μία περιοχή ροής (Crouzeix - Raviart, 1973). Το κύριο χαρακτηριστικό αυτών των στοιχείων είναι ότι κάνουν την πίεση στα όρια του στοιχείου ασυνεχή. Για παράδειγμα, μπορεί να θεωρηθεί ο συνδυασμός των σχηματικών δευτεροβάθμιων συναρτήσεων για την προσέγγιση της ταχύτητας (που αντιστοιχεί σε ένα τρίγωνο έξι κόμβων) με συνεχή πίεση, (δοσμένη σ' ένα κόμβο μέσα στο τρίγωνο). Ένα άλλο μέλος αυτής της οικογένειας είναι το ορθογωνικό στοιχείο που φαίνεται στο σχήμα 2.12, στο οποίο η προσέγγιση της ταχύτητας βασίζεται σε δι-τετράγωνα σχηματικές συναρτήσεις, ενώ η πίεση προσεγγίζεται γραμμικά χρησιμοποιώντας τρεις εσωτερικούς κόμβους. Αυτό το στοιχείο συνήθως παρέχει μεγαλύτερη ευελιξία από το στοιχείο Taylor - Hood, που φαίνεται στο προηγούμενο σχήμα, στη διαμόρφωση προβλημάτων ασυμπίεστης ροής.



3.1.4 ΜΕΘΟΔΟΣ STREAMLINE UPWIND PETROV - GALERKIN

Η μέθοδος Galerkin αποτελεί μία αποτελεσματική μέθοδο για την επίλυση προβλημάτων σε τομείς όπως η μηχανική των στερεών και η μετάδοση θερμότητας όπου το μοντέλο των εξισώσεων είναι ελλειπτικού ή παραβολοειδούς τύπου. Μπορεί επίσης να χρησιμοποιηθεί για την ανάπτυξη σταθερών πινάκων για την επίλυση των διεπύσων εξισώσεων συνέχειας μη τυρβώδους (πολύ μικρών αριθμών Reynolds) ασυμπίεστης ροής που αντιμετωπίζονται σε πολλά συστήματα πολυμερούς ροής. Ωστόσο, οι μερικές διαφορικές εξισώσεις που περιγράφουν φαινόμενα μετάδοσης θερμότητας όπως ο μεγάλος αριθμός Peclet ή η συμπεριφορά των ιξωδοελαστικών ρευστών είναι υπερβολικού τύπου και δεν μπορούν να λυθούν με αυτή τη μέθοδο. Η εφαρμογή της μεθόδου Galerkin σε αυτού του είδους τα προβλήματα δίνει ασταθή και ευμετάβλητα αποτελέσματα εκτός και αν εφαρμοστούν κατάλληλες διαδικασίες για την σταθεροποίηση των αποτελεσμάτων. Η ανάπτυξη των σταθμισμένων υπολοίπων των πεπερασμένων στοιχείων που μπορεί να αποφέρει σταθερές λύσεις για τις υπερβολικού τύπου μερικές διαφορικές εξισώσεις αποτελεί επιστημονικό αντικείμενο ενδεδειγμένου και αξιοσημείωτου όγκου έρευνας. Το πιο επιτυχές συμπέρασμα αυτών των προσπαθειών είναι η ανάπτυξη της βελτιστοποίησης της ροής από τους Brooks και Hughes (1982). Η βασική αρχή της **streamline upwinding** είναι η τροποποίηση της σταθμικής εξίσωσης στη μέθοδο Galerkin ως

$$W_I = N_I + \alpha N_{Ii} \frac{\bar{v}_i}{|\mathbf{v}|^2} \quad (3.16)$$

όπου N_I και N_{Ii} είναι οι σχηματικές συναρτήσεις και τα παράγωγα τους, αντιστοίχως, \mathbf{v} είναι το διάνυσμα της ταχύτητας και α είναι συντελεστής που ονομάζεται παράμετρος **upwinding** (στην εξίσωση (2.79) θεωρείται ως συνολικός συντελεστής του επαναλαμβανόμενου δείκτη i). Ο προσδιορισμός της κατάλληλης παραμέτρου **upwinding** σε πολυδιάστατα προβλήματα δεν είναι ακριβής. Γενικά, η ανάλυση που περιγράφηκε από τους Brooks και Hughes (1982) χρησιμοποιείται για την εξαγωγή των βέλτιστων παραμέτρων αεροδυναμικής βελτιστοποίησης σε μονοδιάστατα προβλήματα και για τον καθορισμό των παραμέτρων αεροδυναμικής βελτιστοποίησης σε πολυδιάστατα προβλήματα (Pittman και Nakazawa, 1984). Πρακτικά, οι αριθμητικές μέθοδοι οι οποίες βασίζονται σε δοκιμαστικές τιμές ίσως χρειαστούν για τον προσδιορισμό της κατάλληλης τιμής της παραμέτρου **streamline upwind** σ' ένα πρόβλημα. Σε νεότερες μελέτες της έρευνας της **streamline upwind** η τροποποιημένη συνάρτηση βάρους εφαρμόστηκε μόνο στο πεδίο της μετάδοσης θερμότητας (δηλ. πρώτου βαθμού παράγωγα των υπερβολικών εξισώσεων) ενώ όλοι οι άλλοι όροι με το συνηθισμένο τρόπο. Αυτό καλείται 'επιλεκτική' ή 'ευμετάβλητη' μέθοδος **streamline upwind**. Η επιλεκτική μέθοδος **streamline upwind** μπορεί να ερμηνευτεί ως η εισαγωγή μιας 'τεχνητής διάχυσης' της κατάστασης σταθμισμένου υπολοίπου της κατάστασης της διαφορικής εξίσωσης. Αυτό βελτιώνει τη σταθερότητα του πλάνου αλλά η ακρίβεια της λύσης αποκλίνει. Τα πλάνα **streamline upwind** μπορεί επίσης να συγκριθούν με τις μεθόδους Petrov • Galerkin. Οι μέθοδοι Petrov • Galerkin είναι απόρροια της μεθόδου των υπολοίπων βαρών του Galerkin στις οποίες οι συναρτήσεις βάρους δεν είναι ταυτόσημες με τις βασικές συναρτήσεις (δηλ. σχηματικές συναρτήσεις σ' ένα πλαίσιο πεπερασμένων στοιχείων). Αυτά τα πλάνα παρέχουν μεγαλύτερη ευελιξία από τις συνηθισμένες μεθόδους Galerkin όσον αφορά την αντιμετώπιση προβλημάτων όπως η επίλυση των υπερβολικών μερικών διαφορικών εξισώσεων. Συνεπώς, είναι λογικό να θεωρούμε ότι τα πλάνα **streamline upwind** Galerkin ως ένα είδος της μεθόδου Petrov • Galerkin. Ωστόσο, εν αντιθέσει με την επιλεκτική μέθοδο **streamline upwind**, στη μέθοδο Petrov • Galerkin η τροποποιημένη συνάρτηση (εδώ φαίνεται ως η εξίσωση (2.79) εφαρμόζεται με συνέπεια σε όλους τους όρους της κατάστασης σταθμισμένου υπολοίπου. Για να επεξηγήσουμε τις βασικές έννοιες που περιγράφησαν σ' αυτήν την ενότητα ας θεωρήσουμε το ακόλουθο παράδειγμα.

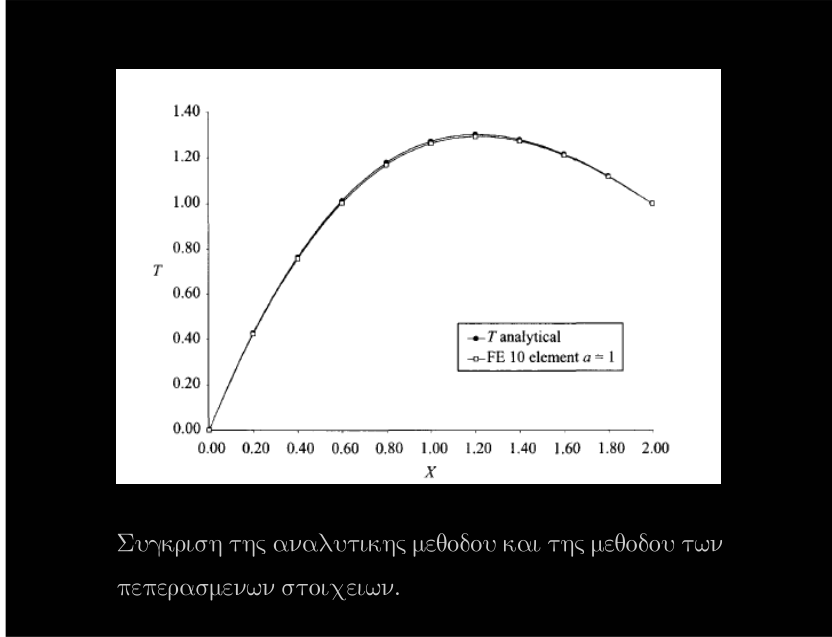
3.2 ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΗΣ ΥΡWINDING (ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ).

Θεωρούμε τη λύση του πεπερασμένου στοιχείου της ακόλουθης διαφορικής εξίσωσης στην περιοχή Ω , όπως φαίνεται στο σχήμα (χρησιμοποιείται ένα πανομοιότυπο πρόβλημα περιοχής όπως του παραδείγματος 2.2.2)



$$\left\{ \frac{d^2}{dx^2} + \alpha \frac{d}{dx} + 1 \right\} T(x) = 0 \quad , \quad \text{με } T(x_A) = 0, T(x_B) = 1 \quad (3.17)$$

Ας θεωρήσουμε πρώτα, την πρότυπη επίλυση Galerkin της εξίσωσης (2.80) που προέκυψε από την περιγραφή των προηγούμενων βημάτων. Ακολουθώντας τη διακριτοποίηση της επιλύουσας περιοχής Ω (δηλ. γραμμή AB) σε δύο κόμβους στοιχείων Lagrange, και την αναπαράσταση του T_A ως όσον αφορά τις σχηματικές συναρτήσεις $N_i(x), i = 1, 2$ εντός του διαστήματος του πεπερασμένου στοιχείου Ω_e της κατάστασης Galerkin, της διαφορικής εξίσωσης, δίνεται ως



$$\int_{\Omega_e} N_j \left\{ \frac{d^2}{dx^2} \sum_i N_i(x) T_i + \frac{d}{dx} \sum_i N_i(x) T_i + \sum_i N_i(x) T_i \right\} dx = 0 \quad (3.18)$$

Μετά την εφαρμογή του θεωρήματος Green στη δευτεροβάθμια εξίσωση (2.81) λαμβάνουμε τον αδύναμο τύπο της κατάστασης υπολοίπου ως

$$-\int_{\Omega_e} \left\{ \frac{d}{dx} \sum_i N_i(x) T_i \cdot \frac{dN_j}{dx} + \alpha N_j \frac{d}{dx} \sum_i N_i(x) T_i + N_j \sum_i N_i(x) T_i \right\} dx + N_j \frac{d}{dx} \sum_i N_i(x) T_i \Big|_{\Gamma_e} = 0 \quad (3.19)$$

Όπου Γ_e παριστάνει το όριο του στοιχείου. Βασισμένη στην εξίσωση (2.82) η εξίσωση σκληρότητας (stiffness) του στοιχείου διατυπώνεται ως

$$\int_{\Omega_e} - \left\{ \frac{d}{dx} (N_I T_I + N_H T_H) \frac{dN_I}{dx} + \alpha \frac{d}{dx} (N_I T_I + N_H T_H) N_I + (N_I T_I + N_H T_H) N_I \right\} dx + N_I \Phi \Big|_{\Gamma_e} = 0$$

$$\int_{\Omega_e} \left\{ - \frac{d}{dx} (N_I T_I + N_H T_H) \frac{dN_H}{dx} + \alpha \frac{d}{dx} (N_I T_I + N_H T_H) N_H + (N_I T_I + N_H T_H) N_H \right\} dx + N_H \Phi \Big|_{\Gamma_e} = 0 \quad (3.20)$$

Όπου Φ παριστάνει την οριακή γραμμή. Χρησιμοποιώντας συμβολισμό πινάκων οι δυο τελευταίες εξισώσεις μπορούν να γραφούν ως σύστημα σε πινακοποιημένη μορφή

$$\begin{pmatrix} A_{II} & A_{IH} \\ A_{HI} & A_{HH} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_I \\ T_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -N_I \Phi(\Gamma_e) \\ N_H \Phi(\Gamma_e) \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

όπου θέσαμε για οικονομία χώρου

$$A_{\mu\nu} := - \int_{\Omega_e} \left\{ \frac{dN_\mu}{dx} \frac{dN_\nu}{dx} - \alpha \frac{dN_\mu}{dx} N_\nu + N_\mu N_\nu \right\} dx \quad , \mu, \nu = I, H$$

Να σημειωθεί ότι εν αντιθέσει με το παράδειγμα της προηγούμενης ενότητας η εξίσωση σκληρότητας του στοιχείου που προέκυψε από αυτό το πρόβλημα δεν είναι συμμετρική. Μετά των σχηματικών συναρτήσεων και την εφαρμογή αλγεβρικών μεθόδων

$$\begin{pmatrix} \Lambda_{II} & \Lambda_{IH} \\ \Lambda_{HI} & \Lambda_{HH} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_I \\ T_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_I \\ -q_H \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

όπου

$$\Lambda_{II} := -\frac{1}{l_p^2} \int_0^{l_p} \left\{ 1 + \alpha(l_e - x) - (l_e - x)^2 \right\} dx = \frac{l_e}{3} - \frac{\alpha}{2} - \frac{1}{l_e}$$

$$\Lambda_{IH} := -\frac{1}{l_p^2} \int_0^{l_p} \left\{ 1 - \alpha(l_e - x) - x(l_e - x) \right\} dx = \frac{l_e}{6} + \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{l_e}$$

$$\Lambda_{HI} := -\frac{1}{l_p^2} \int_0^{l_p} \left\{ -1 + \alpha x - x(l_e - x) \right\} dx = \frac{l_e}{6} - \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{l_e}$$

$$\Lambda_{HH} := -\frac{1}{l_p^2} \int_0^{l_p} \left\{ 1 - \alpha x - x^2 \right\} dx = \frac{l_e}{3} + \frac{\alpha}{2} - \frac{1}{l_e}$$

Επιλέγοντας μια διακριτοποίηση της περιοχής βασισμένη σε 10 στοιχεία ίσου μεγέθους $l_e = 0.2$ έχουμε

$$\begin{pmatrix} -4.934 - \alpha/2 & 5.033 + \alpha/2 \\ 5.033 - \alpha/2 & -4.934 + \alpha/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_I \\ T_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_I \\ -q_H \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

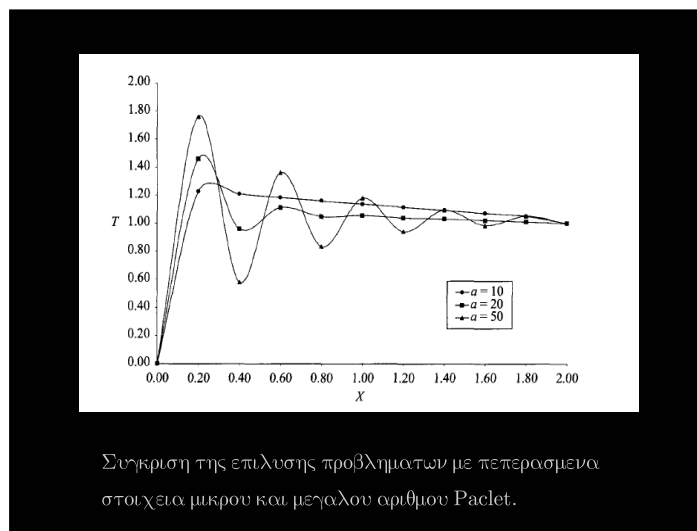
Μετά την εισαγωγή των οριακών συνθηκών το ακόλουθο σύνολο των γενικών εξισώσεων σκληρότητας προκύπτει

$$\begin{pmatrix} d & c & & & & & & & & & \\ s & d & c & & & & & & & & \\ & s & d & c & & & & & & & \\ & & s & d & c & & & & & & \\ & & & s & d & c & & & & & \\ & & & & s & d & c & & & & \\ & & & & & s & d & c & & & \\ & & & & & & s & d & c & & \\ & & & & & & & s & d & c & \\ & & & & & & & & s & d & \\ & & & & & & & & & s & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \\ T_7 \\ T_8 \\ T_9 \\ T_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ -c \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

στις θέσεις όπου δεν υπάρχουν στοιχεία θεωρούνται μηδενικά, ενώ $d = -9.868$, $c = 5.033 + a/2$ και $s = 5.033 - a/2$. Μπορούμε τώρα να υπολογίσουμε τη λύση γι' αυτό το πρόβλημα και να τη συγκρίνουμε με το αναλυτικό αποτέλεσμα. Η αναλυτική λύση της εξίσωσης (2.17) με δοσμένες τις οριακές συνθήκες για $a = 1$ είναι

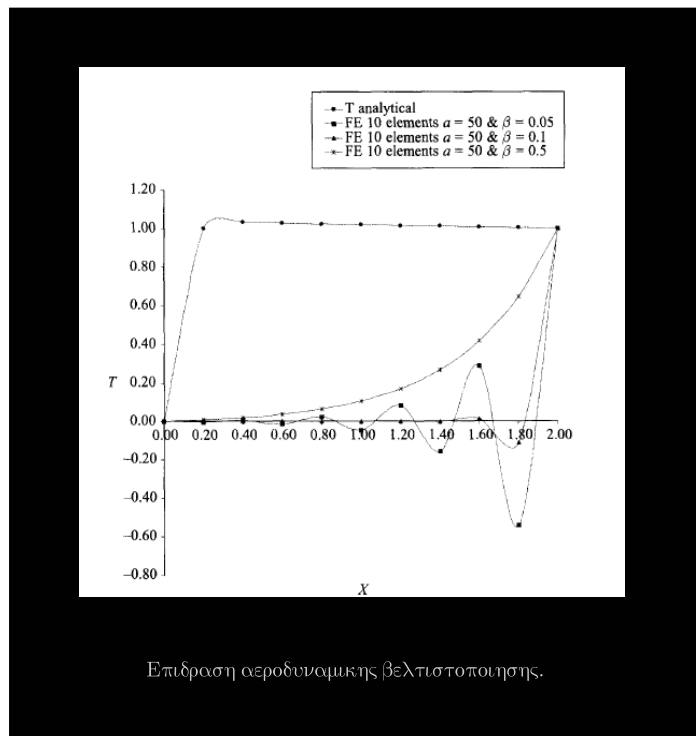
$$T(x) = \frac{2.754}{\sqrt{c^x}} \sin\left(x \frac{\sqrt{3}}{2}\right) \quad (3.25)$$

Η σύγκριση μεταξύ της λύσης μέσω πεπερασμένων στοιχείων και της αναλυτικής προσέγγισης για ένα σχετικά μικρό αριθμό του συντελεστή $a = 1$ φαίνεται στο σχήμα που ακολουθεί. Μπορεί επίσης ναδειχτεί ότι η πρότυπη μέθοδος Galerkin μας απέφερε μια ακριβή και σταθερή λύση για τη διαφορική εξίσωση (2.17). Η ακρίβεια αυτής της λύσης αναμένεται να βελτιωθεί ακόμα περισσότερο με το ραφινάρισμα του πλέγματος. Όπως παριστάνει και το σχήμα παρακάτω για $a = 1$ μπορεί να προκύψει ένα σταθερό αποτέλεσμα, ωστόσο χρησιμοποιώντας το παρόν πλέγμα των 10 στοιχείων, για μεγαλύτερες τιμές αυτού του συντελεστή, η αριθμητική λύση που προκύπτει από την πρότυπη μέθοδο Galerkin γίνεται ανακριβής. Αυτές οι ταλαντώσεις γίνονται περισσότερο έντονες καθώς ο a γίνεται μεγαλύτερος (να σημειωθεί ότι ο παράγων που επηρεάζει τη σταθερότητα είναι το μέγεθος του a και οι λύσεις των ταλαντώσεων θα αποφέρουν επίσης αρνητικούς συντελεστές).



Ο πρώτος όρος της εξίσωσης (2.17) αντιστοιχεί στη μετάδοση θερμότητας σ' ένα πρόβλημα πεδίου και τα παραδείγματα που φαίνονται στο παρακάτω σχήμα παριστάνουν την ανικανότητα της πρότυπης μεθόδου Galerkin να επιφέρει εποικοδομητικά αποτελέσματα για των εξισώσεων. Όπως περιγράφηκε στην προηγούμενη ενότητα για να παρακάμψουμε αυτή τη δυσκολία, στην επίλυση των υπερβολικών εξισώσεων, εφαρμόζουμε μια εκ των μεθόδων streamline upwind Petrov - Galerkin. Για την απόδειξη της εφαρμογής της μεθόδου **streamline upwind**, θεωρούμε την περίπτωση όπου μόνο η σταθμική συνάρτηση εφαρμόζεται στο πρωτοβάθμιο παράγωγο του αδύναμου τύπου της κατάστασης του προβλήματος, και αυτό παριστάνεται από την τροποποιημένη εξίσωση (2.19). Η κατάσταση που αντιστοιχεί στην εξίσωση (2.17) από 'δω και στο εξής γράφεται ως

$$\int_{\Omega_e} \left\{ N_j \left[\frac{d^2}{dx^2} \sum_i N_i(x) T_i + \sum_i N_i(x) T_i \right] + \alpha N_j^* \frac{d}{dx} \sum_i N_i(x) T_i \right\} dx = 0 \quad (3.26)$$



Ολοκλήρωση κατά παράγοντες (Θεώρημα Green) του δεύτερου όρου της εξίσωσης (2.26) δίνει τον αδύναμο τύπο του προβλήματος ως

$$-\int_{\Omega_e} \left\{ \frac{d}{dx} \sum_i N_i(x) T_i \cdot \frac{dN_j}{dx} + \alpha N_j \frac{d}{dx} \sum_i N_i(x) T_i + N_j \sum_i N_i(x) T_i \right\} dx + N_j \frac{d}{dx} \sum_i N_i(x) T_i \Big|_{\Gamma_e} = 0 \quad (3.27)$$

Χρησιμοποιώντας στοιχεία Lagrange δύο κόμβων οι σχηματικές συναρτήσεις δίνονται ως

$$N_I = 1 - \frac{x}{l_e}, \quad N_H = \frac{x}{l_e} \quad \Rightarrow$$

$$\frac{dN_I}{dx} = -\frac{1}{l_e}, \quad \frac{dN_H}{dx} = \frac{1}{l_e}$$

Στο απλό μονοδιάστατο παράδειγμα θεωρήθηκε ότι η συνάρτηση που βρέθηκε από την εξίσωση (2.25) μειώνεται σε $W = N + \beta dN/dx$. Συνεπώς, οι τροποποιημένες συναρτήσεις βάρους που εφαρμόστηκαν στο πρώτο παράγωγο της εξίσωσης (2.27) γράφονται ως

$$\begin{aligned} N_I^* &= N_I + \beta \frac{dN_I}{dx} = \frac{l_e - x - \beta}{l_e} \\ N_H^* &= N_H + \beta \frac{dN_H}{dx} = \frac{x + \beta}{l_e} \end{aligned} \quad (3.28)$$

Η γενική εξίσωση σκληρότητας μπορεί να γραφτεί ως

$$\begin{pmatrix} A_{II} & A_{IH} \\ A_{HI} & A_{HH} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_I \\ T_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -N_I \Phi(\Gamma_e) \\ -N_H \Phi(\Gamma_e) \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

όπου θέσαμε για οικονομία χώρου

$$A_{\mu\nu} := - \int_{\Omega_e} \left\{ \frac{dN_\mu}{dx} \frac{dN_\nu}{dx} - \alpha \frac{dN_\mu}{dx} N_\nu^* + N_\mu N_\nu \right\} dx \quad , \mu, \nu = I, H$$

Υστερα από την αντικατάσταση των σχηματικών συναρτήσεων, προκύπτει

$$\begin{pmatrix} \Lambda_{II} & \Lambda_{IH} \\ \Lambda_{HI} & \Lambda_{HH} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_I \\ T_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_I \\ -q_H \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

όπου

$$\Lambda_{II} := -\frac{1}{l_p^2} \int_0^{l_p} \left\{ 1 + \alpha(l_e - x - \beta) - (l_e - x)^2 \right\} dx = \frac{l_e}{3} - \frac{\alpha}{2} - \frac{1}{l_e} + \frac{\alpha\beta}{l_e}$$

$$\Lambda_{IH} := -\frac{1}{l_p^2} \int_0^{l_p} \left\{ -1 - \alpha(l_e - x - \beta) - x(l_e - x) \right\} dx = \frac{l_e}{6} + \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{l_e} - \frac{\alpha\beta}{l_e}$$

$$\Lambda_{HI} := -\frac{1}{l_p^2} \int_0^{l_p} \left\{ -1 + \alpha(x + \beta) - x(l_e - x) \right\} dx = \frac{l_e}{6} - \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{l_e} - \frac{\alpha\beta}{l_e}$$

$$\Lambda_{HH} := -\frac{1}{l_p^2} \int_0^{l_p} \left\{ 1 - \alpha(x + \beta) - x^2 \right\} dx = \frac{l_e}{3} + \frac{\alpha}{2} - \frac{1}{l_e} - \frac{\alpha\beta}{l_e}$$

Επιλέγοντας μια διχριστοποίηση της περιοχής βασισμένη σε 10 στοιχεία ίσου μεγέθους $l_e = 0.2$ έχουμε

$$\begin{pmatrix} -4.934 - \alpha/2 + 5\alpha\beta & 5.033 + \alpha/2 - 5\alpha\beta \\ 5.033 - \alpha/2 - 5\alpha\beta & -4.934 + \alpha/2 + 5\alpha\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_I \\ T_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_I \\ -q_H \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

Ως παράδειγμα θεωρούμε την επίλυση της εξίσωσης (2.17) με τιμή για το $a = 50$, σ' αυτή την περίπτωση ο γενικός τύπος της εξίσωσης που περιγράφει την σκληρότητα του στοιχείου γράφεται ως

$$\begin{pmatrix} -29.933 + 25\beta & 30.033 - 25\beta \\ -19.967 - 25\beta & 20.067 + 25\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_I \\ T_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_I \\ -q_H \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

Μετά τη συγκέντρωση των εξισώσεων των στοιχείων σ' ένα γενικό σύνολο και την επιβολή των οριακών συνθηκών, μπορεί να υπολογιστεί η τελική λύση της αυθεντικής διαφορικής εξίσωσης, με συνυπολογισμό διάφορων τιμών της **upwinding** β . Η αναλυτική λύση της εξίσωσης (2.17) για $a = 50$ βρίσκεται ως

$$T(x) = 1.0408(e^{-0.02x} - e^{-49.98}) \quad (3.33)$$

Τα αποτελέσματα της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων για τις διάφορες τιμές του β συγκρίνονται με την αναλυτική λύση. Όπως μπορεί να δειχτεί χρησιμοποιώντας για τιμή της παραμέτρου $\beta = 0.5$ προκύπτει μια σταθερή αριθμητική λύση. Ωστόσο το αποτέλεσμα αυτής της λύσης είναι ανακριβές. Ωστόσο, το κύριο πρόβλημα είναι η εύρεση μιας τιμής της παραμέτρου της **streamline upwind** που να ελαχιστοποιεί τις ταλαντώσεις χωρίς τη δημιουργία άστοχων αποτελεσμάτων. Για να επεξηγήσουμε αυτήν την έννοια ας θεωρήσουμε την ακόλουθη εξίσωση μετάδοσης θερμότητας-διάχυσης

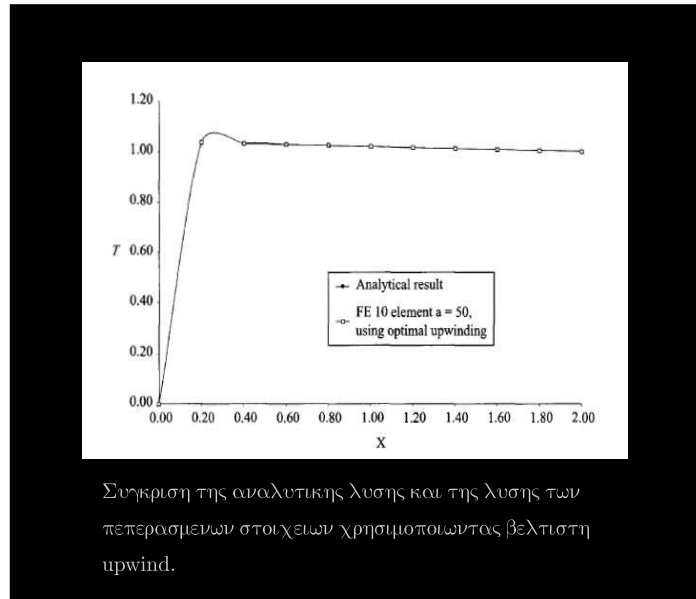
$$\left\{ \alpha \frac{d^2}{dx^2} - \nu \frac{d}{dx} \right\} T(x) = 0 \quad , \text{ με } T(0) = T_0, T(L) = T_L \quad (3.34)$$

Οπου οι σταθερές α και ν παριστάνουν διαχυτικότητα και ταχύτητα, αντίστοιχα. Να σημειωθεί ότι η επιλογή μιας 'σκληρής' προς τα κάτω οριακής συνθήκης είναι εννοιολογική, για να κάνει την αριθμητική λύση επιρρεπή στις ταλαντώσεις, με τη χρησιμοποίηση μιας 'ήπιας' οριακής συνθήκης, όπως $x = L, dT/dx = 0$ τα σταθερά αποτελέσματα της οποίας ίσως προκύψουν χωρίς δυσκολία. Στις περισσότερες βασικές περιπτώσεις της μεθόδου **streamline upwind** μπορεί να αντιμετωπιστεί με την εισαγωγή μιας κύριας ποσότητας τεχνητής διάχυσης στο πρόβλημα, έτσι ώστε, αντί της εξίσωσης (2.99), να λυθεί η ακόλουθη εξίσωση

$$\left\{ (\alpha + \gamma) \frac{d^2}{dx^2} - \nu \frac{d}{dx} \right\} T(x) = 0 \quad , \text{ με } T(0) = T_0, T(L) = T_L \quad (3.35)$$

Θεωρητική ανάλυση από τους Hughes και Brooks (1979) έδειξε ότι για τιμή της παραμέτρου

$$\gamma = \frac{h\nu}{2} \left(\coth \frac{P_e}{2} - \frac{2}{P_e} \right) \quad (3.36)$$



Όπου $P_e = h\mu/\alpha$ είναι το μήκος του ατομικού γραμμικού στοιχείου στο υπολογιστικό πλέγμα και είναι ο αριθμός πλέγματος Peclet (ένas αδιάστατος αριθμός αντιπροσωπευτικός της σχετικής επικράτησης της μετάδοσης θερμότητας επί της διάχυσης στην ενεργειακή συναλλαγή), η πρότυπη λύση της εξίσωσης (2.35) θα είναι ακριβώς ίδια όπως της αναλυτικής λύσης της εξίσωσης (2.34). Επεκτείνοντας αυτήν την προσέγγιση στη λύση της προσεγγιστικής λύσης εξίσωσης (2.17), με τον συντελεστή του πρώτου όρου $a = 50$, υπολογίζεται ο αριθμός πλέγματος Peclet που αντιστοιχεί σε μία discretization ενός προβλήματος περιοχής δέκα γραμμικών στοιχείων ίσου μεγέθους. Η εισαγωγή αυτού του αριθμού στην εξίσωση (2.36) αποφέρει την τεχνητή διάχυση, $\gamma = 4.0$. Μετά την προσθήκη αυτής της τιμής στο συντελεστή του δεύτερου όρου μπορεί να βρεθεί η λύση της εξίσωσης (2.17) της πρότυπης μεθόδου Galerkin. Ωστόσο, η μέθοδος **streamline upwind** η υπολογισθείσα τιμή του γ ,

λογίζεται ως παράμετρος της **streamline upwind**. Αυτό δίνει την ‘κατάλληλη τιμή’ του συντελεστή **streamline upwind** στην τροποποιημένη συνάρτηση $W = N + \beta dN/dx$ ως $\beta = -0.08$. Επαναλαμβάνοντας τα συμπεράσματα της διαδικασίας της εξίσωσης (2.27) στην εξίσωση (2.32) μπορεί να βρεθεί η λύση της **streamline upwind** της εξίσωσης (2.80). Σαν σύγκριση αυτής της λύσης με το αναλυτικό αποτέλεσμα, δοσμένου από το σχήμα παρακάτω δείχνει ότι η αριθμητική λύση δεν επηρεάζεται από οποιαδήποτε διάχυση και από ’δω και στο εξής η **streamline upwind** έχει δημιουργήσει μια ‘εκπληκτικά’ συγκλίνουσα λύση η οποία συμπίπτει με το αναλυτικό αποτέλεσμα. Οι Hughes και Brooks (1979) επέκτειναν την προσέγγιση σε πολυδιάστατα προβλήματα και ανέπτυξαν την τεχνική **streamline upwind** στην οποία οι τροποποιημένες συναρτήσεις προσαρμόζονται για να παράσχουν την απαραίτητη έκλυση θερμότητας μόνο κατά μήκος των γραμμών ροής σ’ ένα πεδίο ροής και να αποφευχθεί υπερβολική απόσβεση από την εγκάρσια διάχυση. Σε πολυδιάστατα προβλήματα, ωστόσο, είναι αδύνατο να αναπτύξουμε μια θεωρητική ανάλυση η οποία μπορεί να αποφέρει μια ακριβή τιμή για την απαιτούμενη τεχνητή διαχυτικότητα ανάλογα με το γ που προκύπτει από την εξίσωση (2.36) για ένα μονοδιάστατο πρόβλημα. Βασισμένο στην έννοια του **streamline upwind** τροποποιημένες συναρτήσεις βάρους όπως

$$N^* = N + \gamma_c \frac{|h_1 u_1 + h_2 v_2|}{2|\mathbf{v}|^2} \left(v_1 \frac{\partial N}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial N}{\partial x_2} \right) \quad (3.37)$$

Όπου $0 < \gamma_c \leq 1$ είναι μια σταθερά, v_1 και v_2 είναι συντελεστές ταχύτητας και h_1 και h_2 χαρακτηριστικά μήκη των στοιχείων, μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την απόκτηση σταθερών λύσεων για διδιάστατα προβλήματα. Γενικά, ωστόσο, εξαιτίας της αδυναμίας επιλογής μιας βέλτιστης τιμής για τη σταθερά γ_c η οποία θα μπορούσε να εγγυηθεί την ελαχιστοποίηση της ψευδούς εγκάρσιας διάχυσης και πράγματι η αβεβαιότητα του καθορισμού του μήκους του στοιχείου σε μία διδιάστατη περιοχή η αριθμητική λύση αναμένεται να περικλείει κάποιο σφάλμα.

3.2.1 ΜΕΘΟΔΟΣ ΕΛΑΧΙΣΤΩΝ ΤΕΤΡΑΓΩΝΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ.

Η πρότυπη προσέγγιση μέσω ελαχίστων τετραγώνων αποτελεί μια εναλλακτική της μεθόδου Galerkin στην επίλυση διαφορικών εξισώσεων μέσω πεπερασμένων στοιχείων. Ωστόσο, μπορεί επίσης να δειχτεί ότι ανήκει στην τάξη των υπολοιπόμενων βαρών τεχνικών (Zienkiewicz και Morgan, 1983). Στη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων των πεπερασμένων στοιχείων το σύνολο των τετραγώνων των υπολοιπών, δημιουργήθηκε μέσω της

αντικατάστασης των άγνωστων συναρτήσεων από προσεγγίσεις πεπερασμένων στοιχείων, σχηματίζεται και ακολούθως ελαχιστοποιείται για τη λύση των εξισώσεων του πλάνου. Η διαδικασία μπορεί να επεξηγηθεί από το ακόλουθο παράδειγμα, θεωρούμε

$$\mathfrak{J}u - g = 0 \quad , \text{ στο } \Omega \quad (3.38)$$

Για απλοποίηση, θεωρούμε ότι $\mathfrak{J} := d^2/dx + \alpha d/dx$, όπου α είναι μία σταθερά. Τα βασικά βήματα για την επίλυση με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων είναι:

(α) Διατύπωση μιας συνάρτησης χρησιμοποιώντας τα τετράγωνα του υπολοίπου που προκύπτουν από τους αγνώστους ως

$$u \simeq \bar{u} = \sum_i N_i u_i$$

στην αυθεντική original εξίσωση, συνεπώς

$$I = \int_{\Omega_e} \left\{ \mathfrak{J} \sum_i N_i u_i - g \right\}^2 d\Omega_e = \int_{\Omega_e} \left\{ \left(\frac{d^2}{dx} + \alpha \frac{d}{dx} \right) \sum_i N_i u_i - g \right\}^2 d\Omega_e \quad (3.39)$$

Και (β) ελαχιστοποιώντας την προκύπτουσα συνάρτηση ως

$$\frac{\partial I}{\partial u_1} = 2 \int_{\Omega_e} \left\{ \mathfrak{J} \sum_i N_i u_i - g \right\} \left(\frac{d^2 N_i}{dx} + \alpha \frac{d N_i}{dx} \right) d\Omega_e = 0 \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (3.40)$$

όπου m είναι ο μέγιστος αριθμός των αγνώστων στο πρόβλημα. Η εξίσωση (2.40) μπορεί να θεωρηθεί ως η κατάσταση στην οποία η συνάρτηση βάρους είναι, όσον αφορά τα παράγωγα των σχηματικών συναρτήσεων, σε μια φόρμα, η οποία ανακλα την αυθεντική διαφορική εξίσωση. Συνδυασμός αυτής της εξίσωσης με την κατάσταση προκύπτει μια διατύπωση Petrov - Galerkin για την αυθεντική εξίσωση.

3.3 ΕΠΙΛΥΣΗ ΧΡΟΝΟΕΞΑΡΤΗΜΕΝΩΝ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΩΝ.

Σημαντικές τάξεις πολυμερούς ροής περιγράφονται από τις διαφορικές εξισώσεις με παράμετρο το χρόνο. Η πιο βολική μέθοδος για την επίλυση των διαφορικών εξισώσεων που

εξαρτώνται από το χρόνο μέσω των πεπερασμένων στοιχείων είναι η τεχνική της ‘μερικής διακριτοποίησης’. Σ’ αυτήν την μέθοδο, το διάστημα του χρόνου δεν διακριτοποιείται ολόκληρο και αντιθέτως, τα παράγωγα του χρόνου θεωρούνται χωριστά. Επιπλέον, η διακριτοποίηση των πεπερασμένων στοιχείων των χρονικών παραγώγων συνήθως αποφεύγεται και αντιθέτως χρησιμοποιούνται πιο ακριβείς μέθοδοι. Η τεχνική του χρονικού βήματος θ και η μέθοδος Taylor-Galerkin είναι οι πιο συχνά χρησιμοποιούμενες διαδικασίες μερικής διακριτοποίησης για την επίλυση των προσωρινών προβλημάτων πεπερασμένων στοιχείων.

Μέθοδος Χρονικού Βήματος θ .

Σ’ αυτήν τη μέθοδο, αρχικά, τα παράγωγα του χρόνου σε μία διαφορική εξίσωση διατηρούνται अपαράλλακτα και η μερική διακριτοποίηση εφαρμόζεται για τη μορφοποίηση της κατάστασης με το συνηθισμένο τρόπο. Συνεπώς, μετά τη μερική διακριτοποίηση, εν αντιθέσει από ένα σύνολο αλγεβρικών εξισώσεων που προκύπτουν φυσιολογικά από προβλήματα σταθερής κατάστασης, δημιουργείται ένα σύνολο συνήθων διαφορικών εξισώσεων όσον αφορά τις χρονικές παραγώγους. Γενικά, για την τάξη των μεθόδων μονού βήματος θ αυτό το σύστημα παριστάνεται με συμβολισμούς πινάκων ως

$$[M]_{\theta}\{\dot{X}\}_{\theta} + [K]_{\theta}\{X\}_{\theta} = [F]_{\theta} \quad (3.41)$$

που ο δείκτης θ δηλώνει ότι η κατάσταση των σταθμισμένων υπολοίπων προκύπτει από το χρονικό διάστημα $\theta \in [0, 1]$, όπως φαίνεται από το σχήμα. Το χρονικά παράγωγα στην εξίσωση (2.41) προσεγγίζονται από μία προπορευόμενη διαφορά

$$\{\dot{X}\}_{\theta} := \frac{\{X\}_{n+\theta\Delta t} - \{X\}_n}{\theta\Delta t} = \frac{\{X\}_{n+1} - \{X\}_n}{\Delta t} \quad (3.42)$$

Οι εναπομείναντες όροι στην εξίσωση (2.41) προσεγγίζονται χρησιμοποιώντας γραμμική παρεμβολή ως

$$\{A\}_{\theta} = (1 - \theta)\{A\}_n + \theta\{A\}_{n+1} \quad (3.43)$$

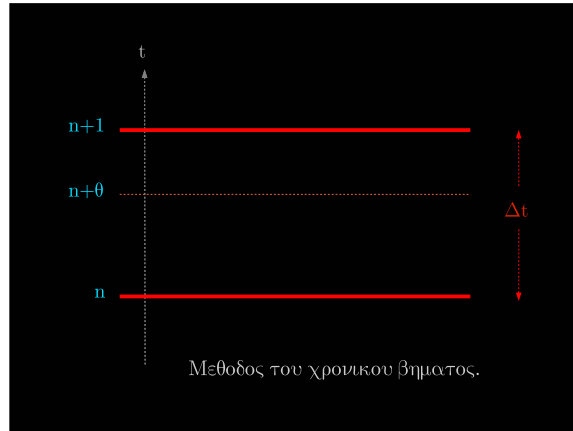
Συνεπώς

$$[K]_{\theta}\{X\}_{\theta} = (1 - \theta)[K]_n\{X\}_n + \theta[K]_{n+1}\{X\}_{n+1} \quad (3.44)$$

$$\theta\{F\}_{\theta} = (1 - \theta)[F]_n + \theta[F]_{n+1} \quad (3.45)$$

Αντικατάσταση και μετά την εκτέλεση αλγεβρικών πράξεων δίνει

$$([M]_{\theta} + \theta \Delta t [K]_{n+1}) \{X\}_{n+1} = ([M]_{\theta} - (1 - \theta) \Delta t [K]_n) \{X\}_n + ((1 - \theta) [F]_n + \theta [F]_{n+1}) \Delta t \quad (3.46)$$



Το αλγεβρικό σύστημα δοσμένο όπως στην εξίσωση (3.46) παριστάνει την επεξεργασμένη εξίσωση της μεθόδου θ . Η εξίσωση (3.46) αποφέρει ένα σύνολο εξισώσεων με τη λύση των οποίων θα προκύψουν οι άγνωστες τιμές του επιπέδου $n + 1$ χρησιμοποιώντας τις γνωστές τιμές του χρονικού επιπέδου n .

Η περιγραφόμενη μέθοδος μπορεί να εξάγει μία πρωτοβάθμια προηγούμενη ή μία πρωτοβάθμια επόμενη εξίσωση εξαρτώμενη είτε από $\theta = 0$ είτε από $\theta = 1$. Για $\theta = 0.5$, η μέθοδος αποφέρει μία δευτεροβάθμια εξίσωση. Ωστόσο θα πρέπει να ληφθούν υπ' όψιν και άλλες μελέτες όπως η σταθερότητα των αριθμητικών υπολογισμών. Η σταθερότητα της ανάλυσης της μεθόδου του χρονικού βήματος μπορεί μόνο να διεξαχθεί για απλές περιπτώσεις όπου ο πίνακας της εξίσωσης (2.41) είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος (δηλ. μητρικά προβλήματα: Zienkiewicz και Taylor, 1994). Προφανώς, δεν θα είναι αυτή η περίπτωση στους περισσότερους τύπους προβλημάτων ροής που αντιμετωπίζει ο μηχανικός. Πρακτικά, ωστόσο, η επιλογή των κατάλληλων τιμών του θ και του χρονικού δείκτη Δt βασίζεται συνήθως στη δοκιμή και στο λάθος (δοκιμαστικές τιμές). Παράγοντες όπως η μη γραμμικότητα των φυσικών παραμέτρων και ο τύπος των στοιχείων που χρησιμοποιήθηκαν στη μερική διακριτοποίηση συνήθως επηρεάζει την επιλογή των τιμών του θ και Δt σ' ένα πρόβλημα. Η εξίσωση (2.41) αυξάνει το βαθμό μιας πεπλεγμένης συνάρτησης εκτός από $\theta = 0$. Η εφαρμογή των πλαισίων για τα προσωρινά προβλήματα αποφέρει ένα σύνολο ταυτόσημων εξισώσεων για το άγνωστο πεδίο στη νέα τιμή του χρονικού επιπέδου

$n + 1$. Όπως μπορεί ναδειχθεί από την εξίσωση (2.46) μερικοί όροι του συντελεστή πίνακα μπορούν επίσης να υπολογισθούν στο νέο χρονικό επίπεδο. Ωστόσο, η εφαρμογή του περιγραφόμενου πλάνου απαιτεί τη χρήση επαναληπτικών αλγορίθμων. Διάφορες τεχνικές για την αύξηση της ταχύτητας της σύγκλισης σ' αυτούς τους αλγορίθμους μπορεί να απαντηθεί στη βιβλιογραφία (Pittman, 1989).

Μέθοδος Taylor-Galerkin.

Θεωρώντας μία μερική διαφορική εξίσωση, που παριστάνει ένα πρόβλημα ροής που εξαρτάται από το χρόνο δοσμένης ως

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x, t) + \mathfrak{J}u(x, t) - g = 0 \quad (3.47)$$

Όπου \mathfrak{J} είναι ένας γραμμικός διαφορικός τελεστής με εναρμόνιση ως προς τις χωρικές μεταβλητές \mathbf{x} . Το ανάπτυγμα της σειράς Taylor του άγνωστου πεδίου, $u(x, t)$, στην εξίσωση (2.47) με εναρμόνιση στη χρονική αύξηση, δίνει

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|^n + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \left. \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right|^n + \dots \quad (3.48)$$

Τα χρονικά παράγωγα στο ανάπτυγμα (2.48) μπορούν τώρα να αντικατασταθούν χρησιμοποιώντας τη διαφορική εξίσωση (2.48) (Donea, 1984). Η χρονική παράγωγος στο ανάπτυγμα (2.48) αντικαθίσταται χρησιμοποιώντας την εξίσωση (2.47) ως

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x, t) = g - \mathfrak{J}u(x, t) \quad (3.49)$$

Επαναλαμβανόμενη παραγωγή της εξίσωσης (2.49) με εναρμόνιση στη χρονική μεταβλητή δίνει υψηλότερης τάξης άγνωστους χρονικούς παραγώγους, για παράδειγμα

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} \left[g - \mathfrak{J}u(x, t) \right] \quad (3.50)$$

Κάθε χρονικό παράγωγο της $u(x, t)$ που εμφανίζεται στο δεξί μέρος της εξίσωσης (2.50) μπορεί ξανά να αντικατασταθεί από την εξίσωση (2.49). Όλα τα χρονικά παράγωγα στην επέκταση (2.48) μπορούν σε γενικές γραμμές να βρεθούν χρησιμοποιώντας την αυθεντική διαφορική εξίσωση. Αυτό παρέχει μια διαφορική εξίσωση η οποία είναι αποκλειστική όσον αφορά τις χωρικές μεταβλητές. Αυτή η εξίσωση μπορεί να διακριτοποιηθεί και να λυθεί από τη μέθοδο Galerkin με το σύνηθες τρόπο. Πρακτικά, η σειρά Taylor της μεταβλητής του πεδίου είναι 'κουτσουρεμένη' του αναπτύγματος και συνήθως μόνο οι λίγοι πρώτοι

όροι διατηρούνται. Συνεπώς η ακρίβεια του χρονικού βήματος στη μέθοδο Taylor-Galerkin εξαρτάται από το παράγωγο του μεγαλύτερου βαθμού που μένει μετά το ‘κουτσούρεμα’ στο ανάπτυγμα. Για παράδειγμα, μία εξίσωση δευτέρου βαθμού θα πρέπει να περιλαμβάνει τη δεύτερη χρονική παράγωγο του άγνωστου πεδίου. Ωστόσο, η επαναλαμβανόμενη παραγωγή και αντικατάσταση των χρονικών παραγώγων, χρησιμοποιώντας τις διεπουσες διαφορικές εξισώσεις περίπλοκων προβλημάτων πεδίου, ίσως αποδειχτεί δύσκολη. Ένας πιο αποτελεσματικός υπολογιστικός τύπος της δεύτερης τάξης, βασισμένος σε χρονικά χωρισμένη διαδικασία, αναπτύχθηκε από τους Townsend και Webster (1987) η οποία μπορεί να ανταπεξέλθει αυτή τη δυσκολία.

Κεφάλαιο 4

ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΠΟΛΥΜΕΡΟΥΣ ΡΟΗΣ.

Οι μέθοδοι σταθμισμένων υπολοίπων των πεπερασμένων στοιχείων που περιγράφησαν στο κεφάλαιο 3 παρείχαν αποτελεσματικές εξισώσεις για τα προβλήματα ασυμπίεστης ροής. Τα κύρια χαρακτηριστικά αυτών των εξισώσεων καθώς και η εφαρμογή τους σε μοντέλα πολυμερούς ροής θα περιγραφούν στο παρόν κεφάλαιο. Όπως έχει ήδη σχολιαστεί, τα μοντέλα πολυμερούς ροής περιγράφονται από τις εξισώσεις συνέχειας, κίνησης, διατήρησης και ενέργειας. Η εξίσωση διατήρησης στα γενικευμένα Νευτώνεια μοντέλα ενσωματώνεται στην εξίσωση της κίνησης και μόνο το μοντέλο των ιξωδοελαστικών ρευστών αποτελεί μία ξεχωριστή εξίσωση που απαιτείται η λύση του. Οι εξισώσεις συνέχειας και κίνησης σ' ένα μοντέλο ροής είναι αλληλένδετα συνδεδεμένες μεταξύ τους και απαιτείται η ταυτόχρονη επίλυση τους. Η λύση των εξισώσεων ενέργειας και διατήρησης των ιξωδοελαστικών ρευστών μπορεί να πραγματοποιηθεί ανεξάρτητα.

4.1 ΕΠΙΛΥΣΗ ΤΩΝ ΕΞΙΣΩΣΕΩΝ ΣΥΝΕΧΕΙΑΣ ΚΑΙ ΚΙΝΗΣΗΣ.

Η μέθοδος των σταθμισμένων υπολοίπων στην επίλυση των εξισώσεων των μη-Νευτώνειων ασυμπίεστων ρευστών μπορεί να εφαρμοστεί σε διαφορετικές εξισώσεις. Θα πραγματοποιηθεί η πλήρης διατύπωση των επεξεργασμένων εξισώσεων και θα επεξηγηθούν τα σημεία που ακολουθούν τις γενικές κατευθύνσεις. Σ' αυτές τις διατυπώσεις της εξίσωσης της κίνησης

Cauchy, η οποία περιλαμβάνει τα παράγωγα της διατμητικής τάσης, χρησιμοποιείται για να διατηρήσει τη γενίκευση των παραγώγων. Ωστόσο, η ταχύτητα και η πίεση είναι τα μόνα άγνωστα πεδία τα οποία προκύπτουν από την επίλυση των εξισώσεων συνέχειας και κίνησης. Η διατμητική τάση στην εξίσωση της κίνησης Cauchy είτε αντικαθίσταται από τις μεταβολές της ταχύτητας είτε υπολογίζεται μέσω της εξίσωσης συνέχειας των ελαστικών και κολλώδη ρευστών σαν ξεχωριστή περίπτωση. Ο όρος της μετάδοσης θερμότητας στην εξίσωση της κίνησης διατηρείται για την πληρότητα των παραγώγων. Στην πλειονότητα των πολυμερών ρευστών με μικρό αριθμό Reynolds αυτός ο όρος μπορεί να παραληφθεί.

4.1.1 ΜΕΘΟΔΟΣ UVP.

Η μέθοδος UVP ανήκει στη γενική κατηγορία των μεθόδων των μεικτών πεπερασμένων στοιχείων (Zienkiewicz και Taylor, 1994). Σ' αυτές τις μεθόδους και η ταχύτητα και η πίεση στις εξισώσεις των ασυμπίεστων ρευστών θεωρούνται ως αρχέγονες μεταβλητές και διακριτοποιηση σαν άγνωστες. Το αρχικό U της μεθόδου προκύπτει μετά τη χρησιμοποίηση του σε δισδιάστατες καρτεσιανές εκδοχές, το V προκύπτει από το ταχύτητα, και το P από την πίεση, αντίστοιχα. Για την περιγραφή αυτής θεωρούμε τις εξισώσεις των ασυμπίεστων μη-Νευτώνειων ρευστών (Εξισώσεις (1.1) και (1.4), κεφαλαίου 1) εκφραζόμενες ως

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{v} &= 0 \\ \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \operatorname{div} \mathbf{v} &= \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g} \end{aligned} \quad (4.1)$$

Όπου \mathbf{v} , ρ , τ , \mathbf{g} παριστάνουν την ταχύτητα, την πυκνότητα του ρευστού, την πίεση, τη διατμητική τάση και την βαρύτητα, αντίστοιχα, και δ το δέλτα του Kronecker. Στη μέθοδο UVP, τα σταθμισμένα υπόλοιπα των παραπάνω εξισώσεων ενός στοιχείου Ω_e , στη διακριτοποίηση περιοχή διατυπώνονται ως

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} M_L \operatorname{div} \bar{\mathbf{v}} d\Omega_e &= 0 \\ \int_{\Omega_e} \rho N_j \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{v}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{v}}^0 \operatorname{div} \mathbf{v} \right) d\Omega_e &= \int_{\Omega_e} N_j (\rho \mathbf{g} - \delta \operatorname{grad} \bar{p}) d\Omega_e \end{aligned} \quad (4.2)$$

Όπου ένας επιπλέον περιορισμός δηλώνει ότι οι κατά προσέγγιση μεταβλητές M_L και N_j (δηλ. αυτές που υπεστήσαν μια μικρή παρεμβολή) είναι κατάλληλες συναρτήσεις $\bar{\mathbf{v}}^0$, θεωρεί-

ται ότι παριστάνει την ταχύτητα υπολογισμένη σε προηγούμενο επαναληπτικό βήμα για να γραμμικοποιήσει τον όρο της μεταφοράς του ρευστού στην discretized εξίσωση της κίνησης. Το σύνολο των εξισώσεων (3.2) βασίζεται στη γενική εξίσωση (2.46) παριστάνοντας μια κατάσταση πεπερασμένων στοιχείων πεπερασμένου στοιχείου. Η πιο άμεση απαίτηση στην εφαρμογή της UVP στη μοντελοποίηση των περιοχών της ασυμπέστης ροής είναι η ικανοποίηση της σταθερής κατάστασης γνωστής και ως Babuska-Brezzi ή κριτήριο BB (Babuska, 1971; Brezzi, 1974). Χρησιμοποιώντας μια απλή (και μαθηματικά μη-ακριβής) εξήγηση, μπορεί να λεχθεί ότι, αυτή η απαίτηση αυξάνει από την απουσία του όρου της πίεσης στην εξίσωση συνέχειας της ασυμπέστης ροής. Στην εφαρμογή της τεχνικής των πεπερασμένων στοιχείων βρέθηκε ότι η μέθοδος UVP σε συνδυασμό με τα στοιχεία που προκύπτουν από πανομοιότυπες παρεμβολές για την ταχύτητα και την πίεση αποφέρουν ανακριβή και ταλαντωτικά αποτελέσματα. Αυτές οι ταλαντώσεις φαίνεται να εξαφανίζονται όταν τα στοιχεία ανήκουν είτε στην οικογένεια του Taylor- Hood είτε του Crouzeix - Raviart, χρησιμοποιούνται για να παράσχουν ανόμοιες παρεμβολές για τις ταχύτητες και την πίεση (Zienkiewicz et al., 1986). Συνεπώς η διακριτοποιημένη ταχύτητα και πίεση της εξίσωσης (3.2) εκφράζονται ως

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{v}} &= \sum_I N_I(\mathbf{x}) \mathbf{v}_I \\ \bar{p} &= \sum_L M_L(\mathbf{x}) p_L\end{aligned}\quad (4.3)$$

Περισσότερες λεπτομέρειες για το κριτήριο BB, μερικές φορές αναφέρεται και ως συνθήκη Ladyzhenskaya • Babuska • Brezi (LBB), και τη σημασία του στην αριθμητική επίλυση των εξισώσεων της ασυμπέστης ροής μπορεί να βρεθεί στη βιβλιογραφία βασισμένη στη θεωρία της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων (βλ. Reddy, 1986). Πρακτικά, η αστάθεια της πίεσης στη μέθοδο UVP μπορεί να αποφευχθεί χρησιμοποιώντας κάποιες τεχνικές.

Οι βασικές μέθοδοι για την απόκτηση σταθερών αποτελεσμάτων από τη μέθοδο UVP για τα ασυμπέστα είναι οι ακόλουθες:

- Η χρησιμοποίηση μη καθορισμένων στοιχείων που ανήκουν είτε στην οικογένεια των Taylor • Hood είτε στην οικογένεια Crouzeix • Raviart που ικανοποιούν τις συνθήκες του κριτηρίου BB. Παραδείγματα χρήσιμων στοιχείων σ' αυτήν την κατηγορία δίνονται από τον πίνακα, για περισσότερες εξηγήσεις σχετικά με την κυριότητα αυτών των στοιχείων βλ. Pittman (1986)

- Η χρησιμοποίηση ενός στοιχείου το οποίο παρ' όλο που δεν ικανοποιεί τις συνθήκες του κριτηρίου BB, είναι ικανό να διώξει τις παρασιτικές ταλαντώσεις (Lee et al.,1979)
- Η χρησιμοποίηση μιας τεχνικής η οποία θα καταστρατηγεί την αναγκαϊότητα της ικανοποίησης της συνθήκης BB.

ΣΤΟΙΧΕΙΟ	ΠΑΡΕΜΒΟΛΗ		ΚΟΜΒΟΙ ΟΡΟΣ ΣΥΝΕΧΕΙΑΣ
ΠΙΕΣΗ	ΤΑΧΥΤΗΤΑ	ΠΙΕΣΗ	ΤΑΧΥΤΗΤΑ
τριγωνικό Taylor-Hood κορυφές	τετραγωνική	τριγωνική	6 κορυφές 3 και πλευρές C C 9 4
τετραγωνικό Taylor-Hood γωνίες	διτετραγωνική	διτριγωνική	7 γωνίες πλευρές και κεντρο C C 6 1
τριγωνικό Crouseix-Raviart κεντρο	τετραγωνική	συνεχείς	κορυφές και πλευρές C C 9 1
τετραγωνικό Crouseix-Raviart κεντρο	διτετραγωνική	τριγωνική	7 γωνίες πλευρές και κεντρο C C 6 1

Οι αλγόριθμοι που βασίζονται στην τελευταία προσέγγιση παρέχουν πιο ευέλικτες σχεδιασεις από τις άλλες δύο μεθόδους και εδώ θα γίνει μια σύντομη αναφορά. Ο Hughes et al. και ο de Sampaio (1991) ανέπτυξαν τα πλανα των Petrov - Galerkin που βασίζονται σε ίσου βαθμού παρεμβολές, των μεταβλητών του πεδίου, και θα χρησιμοποιηθούν, για να τροποποιήσουν τις συναρτήσεις βάρους, και να δημιουργήσουν σταθερούς υπολογισμούς μέσω πεπερασμένων στοιχείων, σε ασυμπιεστή ροή. Αυτές δημιουργήθηκαν από τους Zienkiwicz και Wu (1991) και είναι ειδικές περιπτώσεις της μεθόδου που περιγράφηκε.

4.2 ΜΕΘΟΔΟΣ UVP ΒΑΣΙΣΜΕΝΗ ΣΤΗΝ ΕΞΙΣΩΣΗ ΣΥΝΕΧΕΙΑΣ ΤΩΝ ΣΥΜΠΙΕΣΤΩΝ ΡΕΥΣΤΩΝ.

Όπως έχει ήδη αναλυθεί, η αναγκαιότητα της ικανοποίησης της συνθήκης σταθερότητας BB περιορίζει τους τύπους των διαθέσιμων στοιχείων στη μοντελοποίηση των προβλημάτων ασυμπίεστης ροής με τη μέθοδο UVP. Για να ελαχιστοποιήσουμε αυτόν τον περιορισμό, η εξίσωση συνέχειας που παριστάνει την ασυμπίεστη ροή αντικαθίσταται από μια εξίσωση που αντιστοιχεί σε ελαφρώς συμπιεστά ρευστά, δοσμένης ως

$$\frac{1}{\rho c^2} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \quad (4.4)$$

Όπου c είναι η ταχύτητα του ήχου του ρευστού. Σ' αυτήν την περίπτωση η διακριτή μορφή των εξισώσεων ροής διατυπώνονται ως

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} M_L \operatorname{div} \bar{\mathbf{v}} d\Omega_e &= 0 \\ \int_{\Omega_e} \rho N_j \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{v}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{v}}^0 \operatorname{div} \mathbf{v} \right) d\Omega_e &= \int_{\Omega_e} N_j (\rho \mathbf{g} - \delta \operatorname{grad} \bar{p}) d\Omega_e \end{aligned} \quad (4.5)$$

Χρησιμοποιώντας διαφορετικούς τύπους χρονικού βήματος, οι μέθοδοι των Zienkiewicz και Wu (1991) έδειξαν ότι το σύνολο των εξισώσεων (3.5) δημιουργεί σταθερές διαμορφώσεις για τα ασυμπίεστα ρευστά. Αυτό λύνει το πρόβλημα των μεικτών παρεμβολών στις διατυπώσεις UVP και μπορεί να αναπτύξει τις διαμορφώσεις που αξιοποιούν ίδιου βαθμού σχηματικές συναρτήσεις για τις συνιστώσες της πίεσης και της ταχύτητας. Μπορεί επίσης να προκύψουν σταθερές λύσεις από αυτήν την εξίσωση χρησιμοποιώντας επαναληπτικές μεθόδους. Αυτό, ωστόσο, αυξάνει το υπολογιστικό σφάλμα των λύσεων σε σύγκριση με τον απευθείας υπολογισμό των προβλημάτων σταθερής κατάστασης.

4.2.1 ΜΕΘΟΔΟΣ PENALTY.

Η μέθοδος του penalty βασίζεται στην έκφραση της πίεσης όσον αφορά τις συνθήκες ασυμπίεστότητας (δηλ. την εξίσωση συνέχειας) ως

$$p = -\lambda \operatorname{div} \mathbf{v} \quad (4.6)$$

Όπου λ είναι ένας πολύ μεγάλος αριθμός που ονομάζεται παράμετρος penalty. Η εξίσωση (3.6), η οποία παριστάνει μια διαφορετική μορφή της εξίσωσης συνέχειας, χρησιμοποιείται για να αντικαταστήσει την πίεση με τη μεταβολή της ταχύτητας στην εξίσωση της κίνησης. Η αντικατάσταση αυτή πραγματοποιήθηκε για την ευκολία υπολογισμού της περιορισμένης ασυμπίεστότητας στην ελαφρώς συμπίεσμένη περιοχή του ρευστού. Ανάλογα με το πότε διεξάγεται η αντικατάσταση της πίεσης, δηλαδή πριν ή μετά τη διακριτοποίηση των διεπουσών εξισώσεων, αναπτύσσονται δύο διαφορετικοί τύποι της μεθόδου penalty. Ανεξάρτητα από το ποια διατύπωση χρησιμοποιήθηκε για την ελαχιστοποίηση της πίεσης, ως ένας πρώτος άγνωστος απέφερε ένα πιο συμπαγές σύνολο εξισώσεων και από τούδε το μέγιστο υπολογιστικό σφάλμα της μεθόδου penalty είναι μικρότερος σε σύγκριση των UVP. Το κύριο μειονέκτημα της μεθόδου penalty είναι η δημιουργία των κακοκαθορισμένων εξισώσεων που προέκυψαν από την πολυπλοκότητα μερικών από τους όρων του πίνακα από έναν μεγάλο αριθμό. Ίσως χρειαστούν επαναληπτικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται για να λύσουν τις κακοκαθορισμένες εξισώσεις για τη βελτίωση της χρήσης των penalty (Zienkiewicz et al., 1985). Γενικά, στην εφαρμογή των μεθόδων penalty στα προβλήματα πολυμερούς ροής πρέπει να ακολουθούνται τα ακόλουθα σημεία :

- Το επίπεδο της επιβολής των συνθηκών ασυμπίεστότητας εξαρτάται από το μέγεθος της παραμέτρου penalty. Αν αυτή η παράμετρος επιλεγεί να είναι υπερβολικά μεγάλη, ίσως φανεί ασυνήθιστο, αλλά τότε οι εξισώσεις της μεθόδου θα κυριαρχήσουν λόγω της περιορισμένης ασυμπίεστότητας. Απ' την άλλη πλευρά, αν η επιλεγμένη παράμετρος του penalty είναι αρκετά μικρή τότε η διατήρηση μάζας δεν μπορεί να διασφαλιστεί. Στα προβλήματα μη-Νευτώνειας ροής, όπου η διάτμηση του ιξώδους διαφέρει τοπικά, για να διατηρήσουμε την εξίσωση συνέχειας στο σωστό επίπεδο, είναι απαραίτητο να διατηρήσουμε μια ισορροπία μεταξύ του ιξώδους και της παραμέτρου penalty. Για να το κατορθώσουμε, η παράμετρος penalty θα πρέπει να σχετίζεται με το ιξώδες ως $\lambda = \lambda_0 \eta$ (Nakazawa et al., 1982) όπου λ_0 είναι μία μεγάλη αδιάστατη παράμετρος και η είναι το τοπικό ιξώδες. Η συνιστώμενη τιμή για την παράμετρο λ_0 σε συνήθη προβλήματα ροής είναι περίπου .

- Χρησιμοποιώντας μια μεταβλητή για την παράμετρο του penalty αντίστοιχη με μέγεθος του στοιχείου, μπορεί να μειωθεί η στρωγγυλοποίηση του σφάλματος στην επίλυση του κακοκαθορισμένου πεπερασμένου στοιχείου που προέκυψε από τη μέθοδο penalty (Kheshgi και Scriven, 1985).

- Ελαχιστοποίηση του όρου της πίεσης, στην εξίσωση της κίνησης, δεν αποφέρει αυτό-

ματα μια σταθερή εξίσωση για την ασυμπίεστη ροή και είναι ακόμα απαραίτητο, να ικανοποιηθεί η συνθήκη σταθερότητας BB, μέσω της κατάλληλης, από τις δύο εκφράσεις, μεθόδου penalty.

Συνεχής Μέθοδος penalty.

Στη συνεχή μέθοδο penalty, πριν από τη διακριτοποίηση των διεπουσών εξισώσεων, η πίεση, στην εξίσωση της κίνησης, αντικαθίσταται από την εξίσωση (3.6) για να προκύψει

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \operatorname{div} \mathbf{v} \right) = -\operatorname{grad}(-\lambda \operatorname{div} \mathbf{v}) \delta + \operatorname{div} \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad (4.7)$$

Η διακριτοποίηση της εξίσωσης (3.7) δίνει

$$\int_{\Omega_e} N_j \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \operatorname{div} \bar{\mathbf{v}} \right) d\Omega_e = \int_{\Omega_e} N_j \left\{ \operatorname{grad}(\lambda \operatorname{div} \bar{\mathbf{v}}) \delta + \operatorname{div} \bar{\boldsymbol{\tau}} + \rho \mathbf{g} \right\} d\Omega_e \quad (4.8)$$

Η εξίσωση (3.8) είναι η βασική εξίσωση της συνεχούς μεθόδου penalty. Όπως έχει ήδη εξηγηθεί, για να ενισχύσουμε την ασυμπίεστοτητα μερικοί όροι στην εξίσωση της σκληρότητας, της μεθόδου penalty, πολλαπλασιάζονται από μια πολύ μεγάλη παράμετρο. Γενικά, αυτό αποφέρει μια εξίσωση η οποία είναι από τους όρους του penalty του και μπορεί μόνο να δημιουργήσει μια τετριμμένη λύση. Για να λύσουμε αυτό το πρόβλημα, ο υπο-πίνακας του penalty στον συντελεστή του πίνακα του στοιχείου αναγκάζεται να είναι μοναδικός. Πρακτικά, οι όροι του penalty στο συντελεστή του πίνακα του στοιχείου υπολογίζονται χρησιμοποιώντας ‘μικρή ολοκλήρωση’ για την επίτευξη της απαιτούμενης μοναδικότητας (Zienkiewicz και Taylor, 1994). Για παράδειγμα, σ’ ένα δισδιάστατο πρόβλημα όλοι οι όροι του πίνακα σκληρότητας του στοιχείου μπορεί να υπολογιστούν χρησιμοποιώντας έναν τετραγωνισμένο σύστημα 3×3 Gauss-Legendre. Οι όροι του penalty μπορούν να υπολογιστούν από ένα σύστημα 2×2 . Μπορεί να ειπωθεί, ότι είναι ανάλογη περίπτωση, με τη χρησιμοποίηση μιας μικρής παρεμβολής για την εύρεση της πίεσης, από αυτή που χρησιμοποιήθηκε για την εύρεση της ταχύτητας.

Διακριτοποιημένη Μέθοδος penalty.

Η χρήση των επιλεγμένων μικρών παρεμβολών για να προκύψουν ακριβείς και μη-τετριμμένες λύσεις για τα προβλήματα ασυμπίεστης ροής από τη συνεχή μέθοδο penalty δεν είναι σταθερή και ίσως προκύψει κάποιο σφάλμα. Επομένως αναπτύχθηκε μια εναλλακτική μέθοδος που ονομάζεται διακριτοποιημένη μέθοδος penalty. Σ’ αυτήν τη μέθοδο, πρώτα προκύπτουν ξεχωριστές διακριτοποιήσεις για την εξίσωση της κίνησης και της εξίσωσης του penalty (3.6) και μετά αντικαθίσταται η πίεση στην εξίσωση της κίνησης, χρησιμοποιώντας

αυτές τις διακριτοποιημένες εξισώσεις. Η χρήση των πεπερασμένων στοιχείων σε συνδυασμό με την διακριτοποιημένη εξίσωση penalty πρέπει να παρέχουν κατάλληλες παρεμβολές για την ταχύτητα και την πίεση για την ικανοποίηση της συνθήκης BB. Αυτό έρχεται σε αντίθεση με τη συνεχή μέθοδο penalty στην οποία η ικανοποίηση της σταθερής συνθήκης BB επιτυγχάνεται έμμεσα, μέσω της ‘μικρής ολοκλήρωσης’ των όρων της μεθόδου penalty. Η διακριτοποιημένη μέθοδος penalty συνδυάζει τα πλεονεκτήματα της ελαχιστοποίησης του υπολογιστικού σφάλματος με τη σταθερότητα της αριθμητικής μεθόδου στην οποία ικανοποιείται πλήρως η συνθήκη BB.

4.2.2 ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΩΝ ΕΛΑΧΙΣΤΩΝ ΤΕΤΡΑΓΩΝΩΝ.

Οι εξισώσεις των ελαχίστων τετραγώνων των πεπερασμένων στοιχείων για μια ασυμπίεστη ροή προκύπτουν ως ακολούθως:

Τα άγνωστα πεδία, στις διέπουσες εξισώσεις ροής, αντικαθίστανται, χρησιμοποιώντας προσεγγίσεις μέσω πεπερασμένων στοιχείων με το σύνηθες τρόπο. Αυτές οι αντικαταστάσεις απέφεραν τη διατύπωση μιας συνάρτησης ως

$$[F(\bar{\mathbf{v}}, \bar{p})] = \int_{\Omega_e} \left\{ \left[\rho \frac{\partial \bar{\mathbf{v}}}{\partial t} + \rho \bar{\mathbf{v}}^0 \operatorname{div} \bar{\mathbf{v}} + \delta \operatorname{grad} \bar{p} - \operatorname{div} \bar{\boldsymbol{\tau}} - \rho \mathbf{g} \right]^2 + k(\operatorname{div} \bar{\mathbf{v}})^2 \right\} d\Omega_e \quad (4.9)$$

Όπου τα μεγέθη που σημειώνονται με άνω παύλα παριστάνουν τις προσεγγίσεις ενός στοιχείου Ω_e . Η σταθερά χρησιμοποιείται για να κάνει τη συνάρτηση διαστατικά σταθερή. Η ελαχιστοποίηση της συνάρτησης (3.16), με εναρμόνιση στις μεταβλητές του πεδίου (δηλ. συνιστώσες ταχύτητας κλπ) οδηγεί στη δημιουργία των εξισώσεων της μεθόδου των ελαχίστων τετραγώνων. Μπορεί να διαπιστωθεί από τη συνάρτηση (3.16) αν οι εξισώσεις αυτής της μεθόδου αναπόφευκτα θα περιλαμβάνουν παράγωγα δευτέρου βαθμού. Συνεπώς μόνο τα πεπερασμένα στοιχεία τα οποία μπορούν να δημιουργήσουν μια επαρκή διακριτοποίηση για να ανταπεξέλθει με τα παράγωγα δευτέρου βαθμού, μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε συνδυασμό με αυτή τη μέθοδο. Αυτή είναι μια αυστηρή βάση αυτής της μεθόδου και μπορεί να υιοθετηθεί η γενική εφαρμοσιμότητα της στη μοντελοποίηση μιας ροής. Ωστόσο, η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων έχει θεωρηθεί σαν μια δυναμική τεχνική η οποία παρέχει καλύτερη αριθμητική σταθερότητα και από την UVP και από την μέθοδο penalty σ’ ένα μεγάλο εύρος δυναμικών προβλημάτων ρευστών (Bell και Surana, 1994).

4.2.3 Η ΜΕΘΟΔΟΣ VOF ΣΕ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ EULER.

Σ' ένα διδιάστατο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων, η εξίσωση συνέχειας για ένα ελεύθερο όριο εκφράζεται ως

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + v_x \frac{\partial}{\partial x} + v_y \frac{\partial}{\partial y} \right\} F(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (4.10)$$

Οπου v_x και v_y είναι οι συνιστώσες τις ταχύτητας της ροής και η F ορίζεται ως υλική συνάρτηση της πυκνότητας. Αυτή η συνάρτηση έχει την τιμή της μονάδας σε ένα πλήρες τμήμα της περιοχής του ρευστού και μηδενική τιμή έξω από τα ελεύθερα όρια. Εντός της περιοχής των ελεύθερων ορίων παίρνει τιμές μεταξύ μηδέν και μονάδας, (συνήθως 0.4-0.5· Petera και Nassehi, 1996). Η μερική διαφορική εξίσωση (3.10) περιγράφει τη μεταφορά του ρευστού ενός πεδίου ροής με ελεύθερα όρια. Σε μοντέλα σταθερών καταστάσεων Euler, η λύση της εξίσωσης συνήθως απαιτεί **streamline upwinding**. Η απευθείας εφαρμογή της μεθόδου VOF σε περιοχές που περιλαμβάνουν ακανόνιστα και καμπυλωτά σύνορα είναι πιο περίπλοκη. Για την επίλυση αυτού του προβλήματος αναπτύχθηκε από τους Thompson (1986) μια πιο ευέλικτη έκδοση της αυθεντικής μεθόδου. Σ' αυτήν την τεχνική, τα ελεύθερα όρια της περιοχής του ρευστού αντιμετωπίζεται σ' ένα σύστημα δύο φάσεων. Θεωρούμε ότι οι φάσεις αποτελούνται από το γεμάτες και τις κενές περιοχές, αντιστοίχως. Θεωρούμε ότι τα ελεύθερα όρια αλληλεπιδρούν ξεχωριστά σ' αυτές τις φάσεις. Για να μοντελοποιήσουμε το πεδίο ροής κατά αυτόν τον τρόπο δράσης, θεωρούμε ότι οι κενές περιοχές περιέχουν ένα εικονικό ρευστό αποτελούμενο από ένα σύνολο εικονικών φυσικών ιδιοτήτων. Επομένως, η τεχνική αναφέρεται και ως μέθοδος της ψευδο-πυκνότητας. Πρακτικά, οι φυσικοί συντελεστές των εξισώσεων της ροής εκφράζονται ως

$$\chi = \chi_f F + \chi_v (1 - F) \quad (4.11)$$

Οπου χ είναι μια δοσμένη φυσική παράμετρος (π.χ. πυκνότητα) και χ_f και χ_v είναι οι τιμές αυτής της παραμέτρου στις γεμάτες και τις άδειες περιοχές του ρευστού, αντιστοίχως. Η ελεύθερη περιοχή της συνάρτησης της πυκνότητας είναι μονάδα στις γεμάτες περιοχές του ρευστού μηδέν στις κενές περιοχές. Από 'δω και στο εξής χρησιμοποιώντας την εξίσωση (3.70), αυτόματα εισάγονται κατάλληλοι συντελεστές στις εξισώσεις και έχει ήδη υπολογισθεί η λύση ολόκληρης της περιοχής. Η εξίσωση (3.70) αποφέρει τις τιμές παρεμβολής των φυσικών συντελεστών στα ελεύθερα όρια. Η λύση ξεκινάει από μια γνωστή κατανομή των τιμών των επιφανειακών συναρτήσεων. Στο τέλος κάθε χρονικού βήματος βρίσκονται νέες τιμές της F και προσδιορίζεται η θέση της αλληλεπίδρασης μεταξύ των φάσεων (δηλ.

των ελεύθερων ορίων). Παρ' όλη την ευκολία της, η αποτελεσματικότητα της μεθόδου της 'ψευδοπυκνότητας' περιορίζεται από την ανάγκη χρήσης των φυσικών παραμέτρων σε κομμάτια της περιοχής της ροής.

4.2.4 ΜΕΘΟΔΟΣ VOF ΣΕ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΑΥΘΑΙΡΕΤΑ EULER ΚΑΙ LAGRANGE.

Η ευελιξία της VOF μπορεί να αναπτυχθεί σημαντικά εάν η διατύπωση της, αντί να χρησιμοποιεί σταθεράσυστήματα, υιοθετεί μια προσέγγιση από ένα συνδυασμό συστημάτων Euler και Lagrange. Η πιο συνήθης προσέγγιση για την ανάπτυξη ενός συνδυασμένου συστήματος στην εφαρμογή των αυθαίρετων μεθόδων Lagrange-Euler (ALE). Στην τεχνική ALE το πλέγμα των πεπερασμένων στοιχείων που χρησιμοποιήθηκε στην προσομοίωση μετακινείται σε κάθε βήμα, σύμφωνα με το προαποφασισμένο σχήμα. Σ' αυτή τη διαδικασία τα στοιχεία, ο αριθμός των κόμβων και η συνδετικότητα τους παραμένουν σταθερά αλλά το σχήμα και/ή η θέση των στοιχείων αλλάζει από το ένα χρονικό βήμα στο επόμενο. Συνεπώς το πλέγμα της λύσης δείχνει να μετακινείται με την ταχύτητα η οποία είναι διαφορετική από την ταχύτητα του ρευστού. Οι συνιστώσες της πλεγματικής ταχύτητας και τα χρονικά παράγωγα των μετατοπισμένων συντεταγμένων των κόμβων εκφράζονται σ' ένα δισδιάστατο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων ως

$$\frac{\partial x}{\partial t} = v_{mx} \quad , \quad \frac{\partial y}{\partial t} = v_{my} \quad (4.12)$$

Οι διεπουσες εξισώσεις της ροής, γραμμένες σε ένα σύστημα Euler, θα πρέπει από 'δω και στο εξής να τροποποιηθούν και να λαμβάνουν υπ' όψιν του και τη μετακίνηση του πλέγματος. Το χρονικό παράγωγο της μεταβλητής της f σ' ένα μετακινούμενο σύστημα βρίσκειται ως

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_M = v_{mx} \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_M + v_{my} \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_M + \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_M \quad (4.13)$$

Όπου οι δείκτες M και E αναφέρονται στην κίνηση και την ακινησίας των συστημάτων, αντιστοίχως. Η αντικατάσταση των χρονικών παραγώγων του Euler μέσω των σχέσεων που βασίζονται στην εξίσωση (3.72) δίνει την τροποποιημένη μορφή των διεπουσων εξισώσεων που απαιτούνται στο ALE. Συνεπώς, η εξίσωση των ελεύθερων ορίων εκφράζεται ως

$$\frac{\partial F}{\partial t} + (v_x - v_{mx}) \frac{\partial F}{\partial x} + (v_y - v_{my}) \frac{\partial F}{\partial y} = 0 \quad (4.14)$$

Η μέθοδος **streamline upwinding** συνήθως χρησιμοποιείται για τη απόκτηση του διακριτής μορφής της εξίσωσης (3.14). Η αλγόριθμος της λύσης στην ALE τεχνική είναι παρόμοιος με τη διαδικασία που χρησιμοποιήθηκε για τη μέθοδο VOF. Σ' αυτήν την τεχνική, ωστόσο, η λύση που βρέθηκε στο τέλος του n -ιστού χρονικού βήματος, βασισμένη στον πλεγματοειδή αριθμό n , χρησιμοποιείται ως η αρχική συνθήκη σ' ένα καινούριο πλέγμα (δηλ. αριθμός πλέγματος $n + 1$). Για να μειώσουμε το σφάλμα που εισήχθη από αυτήν την προσέγγιση η διαφορά μεταξύ των σχηματισμών του πλέγματος στους ακριβείς υπολογισμούς πρέπει να είναι όσο το δυνατόν μικρότερη. Συνεπώς η αύξηση του χρόνου πρέπει να είναι μικρή. Γενικά, προσαρμοσμένοι ή επανα-πλεγματοειδικοί αλγόριθμοι χρησιμοποιούνται για να κατασκευάσουν το απαιτούμενο πλέγμα του πεπερασμένου στοιχείου με καθορισμένα βήματα της μεθόδου ALE (Donea, 1992). Σε ορισμένες περιπτώσεις είναι δυνατόν να δημιουργηθεί εκ των προτέρων το απαιτούμενο πλέγμα του πεπερασμένου στοιχείου σε κάθε υπολογιστικό βήμα και εν συνεχεία η αποθήκευση του σ' ένα προσβάσιμο αρχείο στη μνήμη του υπολογιστή. Αυτό μπορεί να μειώσει σημαντικά το χρόνο που απαιτεί η κεντρική μονάδα επεξεργασίας για την προσομοίωση (Nassehi και Ghoreishy, 1998).

4.2.5 ΜΕΘΟΔΟΣ VOF ΣΕ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ LAGRANGE.

Σ' ένα σύστημα Lagrange, το σύστημα των συντεταγμένων, στο οποίο έχουν διατυπωθεί οι διέπουσες εξισώσεις του ρευστού, κινείται με τη ροή του πεδίου. Συνεπώς οι εξισώσεις της ροής σ' ένα τέτοιο σύστημα δεν συμπεριλαμβάνουν καθόλου όρους μεταφοράς του ρευστού. Ειδικότερα, η εξίσωση συνέχειας της ελεύθερης επιφάνειας (εξίσωση (3.69) μειώνεται σε ένα απλό χρονικό παράγωγο εκφραζόμενο ως $\partial F/\partial t = 0$. Ωστόσο, η ολοκλήρωση αυτού του παραγώγου δεν είναι συνηθισμένη επειδή σ' ένα ελεύθερο σύνορο περιοχής πρέπει να υπολογίζεται μεταξύ των μεταβλητών (δηλ. των χρονικά εξαρτημένων) ορίων. Επομένως, θα πρέπει να υιοθετηθεί μία μέθοδος για να μειώσει το υπολογιστικό σφάλμα των διαστρεβλώσεων του πλέγματος που θα συμβούν σε ένα σύστημα Lagrange. Διάφορες μέθοδοι βασισμένες σε προσαρμοσμένα πλέγματα χρησιμοποιήθηκαν για να επιτύχουν αυτόν τον σκοπό (π.χ. βλ. Morton, 1996). Ωστόσο, μερικές από αυτές τις τεχνικές υστερούν γεωμετρικής ευελιξίας (π.χ. είναι κατάλληλες μόνο για περιοχές που δεν περιλαμβάνουν καμπυλωτά όρια) ή απαιτούν μεγάλο χρόνο επεξεργασίας από την κεντρική μονάδα. Μια σθεναρή και γεωμετρικά ευέλικτη μέθοδος με υλοποίηση που απαιτεί σχετικά λογικούς χρόνους επεξεργασίας από την κεντρική μονάδα περιγράφεται σ' αυτήν την ενότητα. Αυτή η μέθοδος βασίζεται στην εύρεση των τροχιών των μορίων του ρευστού που διαπερνούν κάθε κόμβο στην περιοχή υπολογισμού και παρέχει μία αποτελεσματική τεχνική για την

ανάπλαση του πλέγματος στο τέλος κάθε χρονικού βήματος (Peters και Nassehi, 1996). Οι ελεύθερες επιφάνειες της εξίσωσης της συνέχειας μπορούν πλέον να ολοκληρωθούν χρησιμοποιώντας αυτήν την προσέγγιση. Θεωρώντας τη θέση ενός υλικού σημείου σ' ένα πεδίο ροής περιγραφόμενη από τον ακόλουθο διάνυσμα θέσης

$$\mathbf{X} = \mathbf{f}(p, t) \quad (4.15)$$

Όπου p είναι η θέση στον τρέχον χρόνο t . Σ' ένα δοσμένο χρόνο αναφοράς t^r , το μόριο καταλαμβάνει μία ειδική θέση οριζόμενη ως

$$\mathbf{x} = \mathbf{f}(p, t^r) \quad (4.16)$$

Κάθε δοσμένο υλικό σημείο μπορεί μόνο να καταλάβει μία μοναδική θέση σ' ένα χρόνο και από 'δω και στο εξής η εξίσωση (3.16) μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εύρεση της θέσης του σημείου ως

$$p = \mathbf{f}^{-1}(\mathbf{x}, t^r) \quad (4.17)$$

Αντικατάσταση του p από την εξίσωση (3.17) στην εξίσωση (3.15) δίνει

$$\mathbf{x} = \mathbf{f}[\mathbf{f}^{-1}(p, t), t] = \mathbf{X}(\mathbf{x}, t^r; t) \quad (4.18)$$

Αν ο αναφερόμενος χρόνος και ο τρέχων χρόνος συμπίπτουν τότε οι αναφερόμενες και οι τρέχουσες θέσεις θα συμπίπτουν επίσης και το δεξί μέρος της εξίσωσης (3.18) μπορεί να αντικατασταθεί από την αναφερόμενη θέση στην εξίσωση (3.17). Σ' ένα πεδίο ταχύτητας δοσμένο ως η κίνηση ενός υλικού σημείου μπορεί να περιγραφεί ως

$$\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{x}, t^r; t) = \mathbf{u}[\mathbf{X}(\mathbf{x}, t^r; t), t] \quad (4.19)$$

Η απόσταση που καλύπτεται από ένα μόριο του ρευστού στο πεδίο της ροής σ' ένα διάστημα του χρόνου $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$ μπορεί να βρεθεί ολοκληρώνοντας την εξίσωση (3.19) ως

$$\mathbf{x} - \mathbf{X}^n = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{u}[\mathbf{X}(t), t] dt \quad (4.20)$$

Χρησιμοποιώντας το θεώρημα μέσης τιμής για τα ορισμένα ολοκληρώματα

$$\mathbf{x} - \mathbf{X}^n = \mathbf{u}[\mathbf{X}(t_\theta), t_\theta] \Delta t_n \quad (4.21)$$

Όπου θ είναι μία παράμετρος μεταξύ μηδέν και του ένα. Χρησιμοποιώντας τις σειρές Taylor η συνάρτηση της ταχύτητας στην περιοχή του σημείου (\mathbf{x}, t_n) δίνεται ως

$$\mathbf{u}[\mathbf{X}(t_\theta), t_\theta] = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_n) + (t_\theta - t_n) \partial_t \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_n) + \mathbf{X}(t_\theta - \mathbf{x}) \operatorname{div} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_n) \quad (4.22)$$

Ο δεύτερος και τρίτος όρος στο δεξί μέρος της εξίσωσης (3.22) προσεγγίζονται χρησιμοποιώντας γνωστές τιμές από προηγούμενα χρονικά βήματα ως

$$\partial_t \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_n) = \frac{\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_n) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t_{n-1})}{\Delta t_{n-1}} \quad (4.23)$$

$$t_\theta - t_n \simeq \frac{1}{2} \Delta t_n \quad (4.24)$$

$$\mathbf{X}(t_\theta) - \mathbf{x} \simeq \frac{1}{2} \mathbf{X}(t_n) - \mathbf{x} \quad (4.25)$$

Μετά την αντικατάσταση των εξισώσεων (3.23), (3.24) και (3.25) στην εξίσωση (3.22) και στη συνέχεια αντικατάσταση από την προκύπτουσα σχέση στην εξίσωση (3.23) και επανακαθορίζοντας την ακόλουθη εξίσωση που περιγράφει την τροχιά των μορίων βρίσκεται

$$\mathbf{x} - \mathbf{X} = \frac{\Delta t_n}{2\delta + \Delta t_n \operatorname{div} \mathbf{u}_n} \left[\mathbf{u}_n + \frac{1}{2} \frac{\Delta t_n}{\Delta t_{n-1}} (\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_{n-1}) \right] \quad (4.26)$$

Όπου δ είναι το δέλτα του Kronecker. Ο αλγόριθμος λύσης βασισμένος στην εξίσωση (3.26) αποτελείται από τα ακόλουθα βήματα:

ΒΗΜΑ 1: Επιλέχτηκε μια περιοχή που θα μπορούσε με ασφάλεια να θεωρηθεί ότι παριστάνει ολόκληρο το πεδίο ροής και διακριτοποιήθηκε σ' ένα σταθερό πλέγμα πεπερασμένων στοιχείων. Το κομμάτι αυτής της περιοχής «γυμνάζει» από ένα ρευστό που ονομάζεται 'τρέχων' πλέγμα. Οι κόμβοι, εντός του τρέχοντος πλέγματος, θεωρούνται ως 'ενεργοί' κόμβοι. Στους ενεργούς κόμβους που τοποθετούνται εντός του τρέχοντος πλέγματος, η επιφανειακή συνάρτηση πυκνότητας είναι $F = 1$. Αυτή η συνάρτηση για τους κόμβους στο ελεύθερο όριο δίνονται ως $F = 0.5$.

ΒΗΜΑ 2: Προσδιορίζονται οι πίνακες που δίνουν τους αριθμούς των στοιχείων και περιέχουν κάθε δοσμένο κόμβο στο σταθερό πλέγμα. Τα σύνορα του και αποθηκεύονται σ' ένα αρχείο.

ΒΗΜΑ 3: Δίνονται κατάλληλες αρχικές συνθήκες όλων των κόμβων.

ΒΗΜΑ 4: Αυξάνεται η μεταβλητή του χρόνου.

ΒΗΜΑ 5: Λύνονται οι διεπουσες εξισώσεις με εναρμόνιση στην τρέχουσα περιοχή.

ΒΗΜΑ 6: Χρησιμοποιώντας:

- Συντεταγμένες των κόμβων στην τρέχουσα περιοχή (δηλ. \mathbf{x}),
- Το πεδίο της ταχύτητας βρίσκεται στο βήμα 5 (δηλ. \mathbf{u}_n), και
- Τιμές ταχύτητας προηγούμενων χρονικών βημάτων (δηλ. \mathbf{u}_{n-1}).

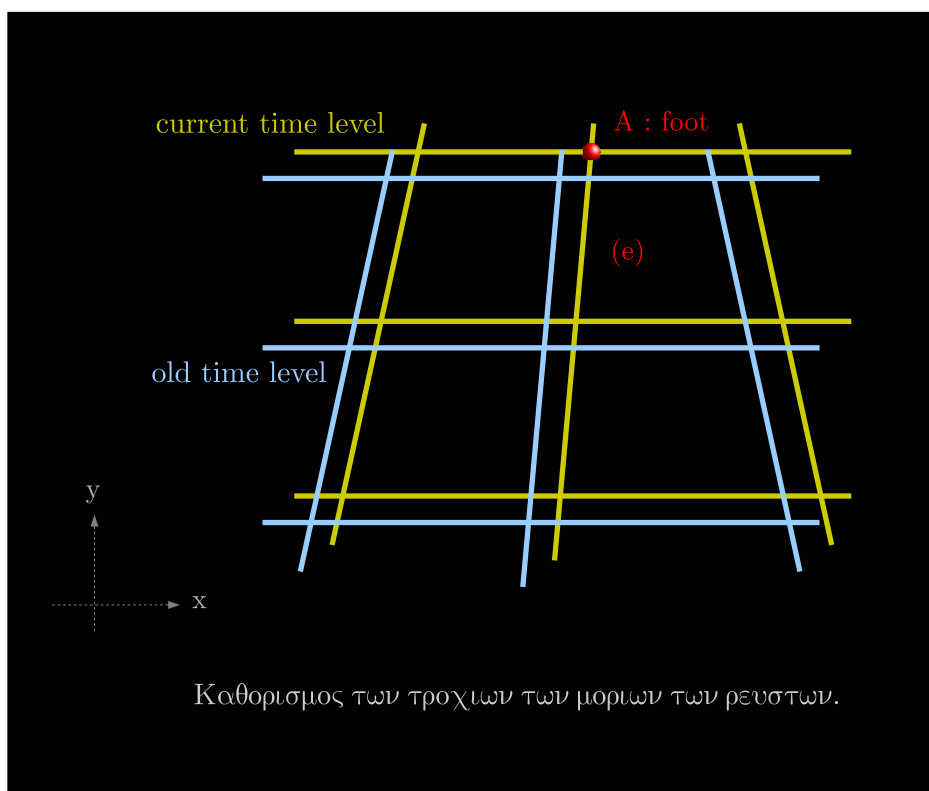
Βρίσκονται, μέσω της εξίσωσης (3.85), οι συντεταγμένες των ποδιών της τροχιάς των μορίων των ρευστών (δηλ. \mathbf{X}), που διαπερνά τα σημεία των κόμβων.

ΒΗΜΑ 7: Για κάθε ενεργό κόμβο, στο τρέχων πλέγμα, ο αντίστοιχος πίνακας ερευνά εντός ποιου στοιχείου, η τροχιά περνάει μέσα από τον τοποθετημένο κόμβο τη δεδομένη χρονική στιγμή. Αυτή η έρευνα βασίζεται στην επίλυση του ακόλουθου συνόλου μη γραμμικών αλγεβρικών εξισώσεων

$$\mathbf{X} = \sum_I N_I(\xi, \eta) \mathbf{x}_I \quad (4.27)$$

Οι άγνωστοι όποι αυτής της εξίσωσης οι τοπικές συντεταγμένες του ποδιού (δηλ. ξ και η). Μετά την εισαγωγή των πολικών συντεταγμένων του πεδίου που βρέθηκαν στο βήμα 6, στο αριστερό μέρος, και των πολικών συντεταγμένων των κομβικών σημείων για ένα δοσμένο στοιχείο, στο δεξί μέρος, η εξίσωση επιλύεται χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Newton-Raphson. Εάν το πόδι είναι όντως του επιλεγμένου στοιχείου, τότε για ένα τετράπλευρο στοιχείο, οι τοπικές του συντεταγμένες πρέπει να είναι μεταξύ του -1 και του +1 (πρέπει να χρησιμοποιηθεί ένα κατάλληλο κριτήριο και για άλλους τύπους στοιχείων). Αν η αναζήτηση δεν είναι επιτυχής τότε ένα άλλο στοιχείο επιλέγεται και η διαδικασία επαναλαμβάνεται.

Στο παράδειγμα που φαίνεται στο σχήμα 3.6, η τροχιά που περνάει από το σημείο A την τρέχουσα στιγμή προέρχεται από το εσωτερικό του στοιχείου (e) του προηγούμενου χρονικού βήματος.



ΒΗΜΑ 8: Μετά την ταυτοποίηση των στοιχείων που περιέχουν τις τροχιές των μορίων, οι τιμές των παλιών βημάτων της F προκύπτουν, παρεμβάλλοντας (ή παρεκτένοντας για τους συνοριακούς κόμβους) τις κομβικές τιμές των παλιών βημάτων. Στο παράδειγμα που φαίνεται στο σχήμα παρακάτω η παλιά τιμή της F , της τροχιάς που περνάει μέσα από το A, προκύπτει παρεμβάλλοντας τις παλιές τιμές των κόμβων εντός του στοιχείου (e).

ΒΗΜΑ 9: Οι συναρτήσεις της ελεύθερης επιφάνειας πυκνότητας που υπολογίστηκαν στο βήμα 8 χρησιμοποιείται σαν αρχικές συνθήκες για την αναπροσαρμογή της τρέχουσας θέσης της επιφάνειας χρησιμοποιώντας την ακόλουθη ολοκλήρωση

$$I = \frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} N_I F d\Omega \quad (4.28)$$

Όπου Ω_t είναι η λύση της μετακινούμενη περιοχής. Χρησιμοποιώντας το θεώρημα μεταφοράς Reynolds η εξίσωση (3.28) εκφράζεται ως

$$I = \int_{\Omega_t} \left[\frac{DN_I}{Dt} F + N_I \frac{DF}{Dt} + N_I F \operatorname{div} \mathbf{u} \right] d\Omega = 0 \quad (4.29)$$

Το δεξί μέρος της εξίσωσης (3.29) τίθεται στο μηδέν θεωρώντας ότι DN_I/Dt και DF/Dt η απόκλιση του πεδίου ταχύτητας σε ασυμπίεστα ρευστά, είναι μηδέν. Συνεπώς, μετά την ολοκλήρωση της εξίσωσης (3.87) προκύπτει

$$\int_{\Omega_{n+1}} (N_I F)^{n-1} d\Omega_{n+1} = \int_{\Omega_n} (N_I F)^n d\Omega_n \quad (4.30)$$

Τα βήματα 4 και 9 επαναλαμβάνονται ως το τέλος του απαιτούμενου χρόνου προσομοίωσης.

Κεφάλαιο 5

ΤΡΙΣΔΙΑΣΤΑΤΗ ΔΙΑΜΟΡΦΩΣΗ ΡΟΗΣ.

5.1 ΠΕΡΙΛΗΨΗ.

Αναπτύχθηκε μια τρισδιάστατη αριθμητική μέθοδος για να εξετάσει τη μη-ισόθερμη, μη-Νευτώνεια πολυμερή ροή διαμέσου μίας κωνικής κυλινδρικής μήτρας εξώθησης, η οποία χρησιμοποιείται για την παραγωγή υψηλής πυκνότητας πολυαιθυλενικών (High-Density Polyethylene) ράβδων. Το αριθμητικό μοντέλο βασίστηκε στον κώδικα CFD του COMSOL 3.4 (FEM) και χρησιμοποιήθηκε για να υπολογίσει την πίεση της ροής και την κατανομή της θερμοκρασίας σε μία κωνική κυλινδρική μήτρα. Η εκτίμηση των μέγιστων πιέσεων που αναπτύχθηκαν στη μήτρα κατά τη διάρκεια τη διαδικασία εξώθησης πιστοποιεί ότι, ακόμα και τα πόδια της αράχνης, τα οποία είναι τα αδύνατα μέρη της μήτρας, μπορούν να αντισταθούν στις πιέσεις κατά τη διάρκεια λειτουργίας της μήτρας. Το αριθμητικό μοντέλο επίσης υπολόγισε τη θέρμανση του ιξώδους. Επίσης τα δεδομένα της πίεσης και της θερμοκρασίας προέκυψαν χρησιμοποιώντας και μία αναλυτική προσέγγιση. Η αριθμητική προσέγγιση συμφωνεί αρκετά με τα πειραματικά δεδομένα που προέκυψαν κατά τη διάρκεια εξώθησης του υλικού.

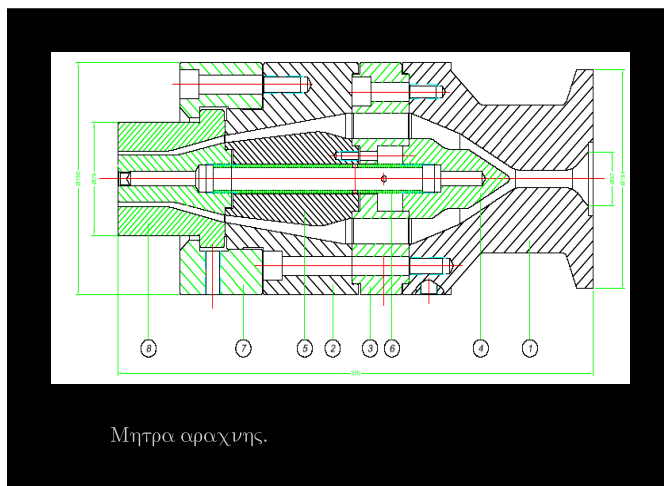
5.2 ΕΙΣΑΓΩΓΗ.

Η παραγωγή των πολυαιθυλενικών μεμβρανών, ράβδων, σωλήνων και αγωγών είναι μια συντηθισμένη διαδικασία μεγάλης ερευνητικής μελέτης πολλών ετών. Η πλειονότητα των πλαστικών αγωγών και των συστατικών για τη μεταφορά των ρευστών και άλλων βιομηχανικών εφαρμογών κατασκευάζονται από τη διαδικασία πολυμερούς εξώθησης χρησιμοποιώντας μια δακτυλιοειδή εσωτερική ή ευθύγραμμη μήτρα. Το πιο σημαντικό, στο σχεδιασμό μιας τέτοιας μήτρας είναι το να εξασφαλίσουμε ακέραιο το εξωτερικό περίβλημα του εσωτερικού άξονα της μήτρας με τη βοήθεια των δεσμών (πόδια της αράχνης).

Η επεξεργασία που περιγράφεται εδώ, προσπαθεί να αναπτύξει ένα βέλτιστο σχεδιασμό για τη μήτρα της αράχνης χρησιμοποιώντας για την εξώθηση υψηλής πυκνότητας σωλήνες πολυαιθυλενίου (HDPE). Για αυτόν το σκοπό αυτό, υιοθετήθηκε ένα υπολογιστικό μοντέλο της μηχανικής των μη-Νευτώνειων ρευστών (CFD), για τη διερεύνηση της πτώσης πίεσης, την ομοιομορφία της ροής και της θερμοκρασίας στη μήτρα. Οι βασικές προσεγγίσεις του (CFD) αναπτύχθηκαν προηγουμένως από άλλους ερευνητές που μελετούσαν διάφορες πτυχές της εξώθησης της μήτρας χρησιμοποιώντας μεθόδους όπως διαφορές πεπερασμένων στοιχείων (FDM), τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων (FEM), τη μέθοδο πεπερασμένου όγκου ([FVM) και τη μέθοδο οριακών στοιχείων (BEM). Ανάμεσα σε αυτές η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων (FEM) είναι η πιο διαδεδομένη για τη διερεύνηση περίπλοκων προβλημάτων ροής εξαιτίας της εκπληκτικής της προσαρμοστικότητας σε περίπλοκα γεωμετρικά σύνορα. Είναι επίσης γνωστό ότι μια ακριβής και σταθερή μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων (FEM) για τον υπολογισμό μη-Νευτώνειων ροών με διαφορικές εξισώσεις διατήρησης απαιτεί προσεγγιστικές μεθόδους που αριθμητικά διατηρούν την ελλειπτικότητα του προβλήματος που τροποποιείται από τις εξισώσεις κίνησης και συνέχειας και δίδει σταθερές και ακριβείς λύσεις για την υπερβολική εξίσωση διατήρησης.

Η διεξαγωγή του πειράματος κατόρθωσε να αναπτύξει και να χρησιμοποιήσει το μοντέλο της Μηχανικής των μη-Νευτώνειων ρευστών (CFD) χρησιμοποιώντας τα γενικευμένα Νευτώνεια ρευστά και να υπολογίσει την πτώση της πίεσης, την ομοιομορφία της ροής και της θερμοκρασίας στη μήτρα για την εξώθηση της ράβδου υψηλής πυκνότητας (HDPE).

Επί προσθέτως, πραγματοποιήθηκε μια αριθμητική ανάλυση των πιέσεων που δημιουργήθηκαν στα πόδια της αράχνης της μήτρας, χρησιμοποιώντας την τεχνική Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE), για τον καθορισμό της συμπεριφοράς της μήτρας κάτω από την πίεση των δυνάμεων ιξώδους που εφαρμόστηκαν στα πόδια της μήτρας από την πολυμερή ροή.



5.3 ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ.

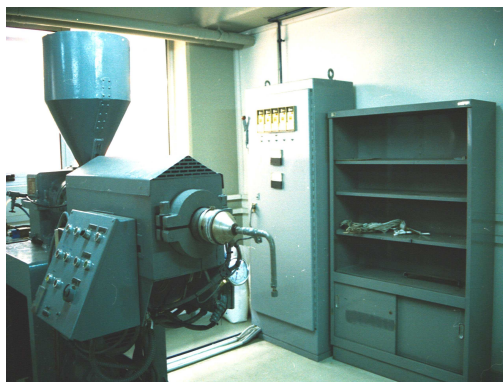
Η μήτρα της αράχνης κατασκευάστηκε χρησιμοποιώντας εργαλεία IMPAX. Οι πιο σημαντικές μηχανικές και φυσικές ιδιότητες αυτού του υλικού όπως δόθηκαν από τον κατασκευαστή παρατίθενται στον παρακάτω πίνακα:

ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ ΕΛΑΣΤΙΚΟΤΗΤΑΣ	$2 \cdot 10^{11} \text{ Nm}^{-2}$
ΑΝΑΛΟΓΙΑ POISSON	0.33
ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ ΔΙΑΤΜΗΣΗΣ	$(7.3) \cdot 10^{10} \text{ Nm}^{-2}$
ΠΥΚΝΟΤΗΤΑ ΜΑΖΑΣ	$(7.8) \cdot 10^3 \text{ kgm}^{-3}$
ΑΝΤΟΧΗ ΣΕ ΕΦΕΚΥΣΜΟ	$(9.3) \cdot 10^8 \text{ Nm}^{-2}$
ΑΝΤΟΧΗ ΣΕ ΘΑΪΨΗ	$8 \cdot 10^8 \text{ Nm}^{-2}$
ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ ΘΕΡΜ. ΕΠΕΚΤΑΣΗΣ	$(1.3) \cdot 10^{-3} \text{ JK}^{-1}$
ΘΕΡΜΙΚΗ ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑ	43 W(mK)^{-1}
ΕΙΔΙΚΗ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑ	440 J(KgK)^{-1}

Ιδιότητες του εργαλείου IMPAX.

Από τη στιγμή που σκοπός είναι η χρησιμοποίηση της μήτρας αράχνης για την παραγωγή

σωλήνων, τοποθετήθηκε μία βίδα με χαρακτηριστικά:



Μήκος/διάμετρος αναλογία 24.1, διάμετρος βίδας 38 mm και αναλογία πίεσης 2.75. Σωλήνες Πολυαιθυλενίου υψηλής πυκνότητας με εξωτερική διάμετρο 32 mm και πάχος τοίχου 24 mm δημιουργήθηκε χρησιμοποιώντας τον ανωτέρω εξοπλισμό. Το πολυμερές υλικό που χρησιμοποιήθηκε ήταν SABIC B 5823 και τα χαρακτηριστικά του υλικού παρουσιάζονται στους πίνακες που ακολουθούν:

ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΟΥ ΠΟΛΥΜΕΡΟΥΣ (MELT FLOW RATE (MFR))	UNITS / SI	B5823	ΔΟΚΙΜΑΣΤΙΚΗ ΜΕΘΟΔΟΣ (ISSO 1183)
γ ₁₀ 190°C, 2.16kg	dg.min ⁻¹	0.16	-
γ ₁₀ 190°C, 5kg	dg.min ⁻¹	0.89	-
γ ₁₀ 190°C, 21.6kg	dg.min ⁻¹	23	-
πυκνότητα	kg.m ⁻³	958	ISSO 1183

ΠΥΚΝΟΤΗΤΑ ΚΑΙ ΠΟΣΟΣΤΟ ΛΙΩΜΕΝΟΥ ΤΗΓΜΑΤΟΣ ΤΟΥ HDPE

Ρυθμός Διάτμησης (s ⁻¹) (100°C)	Ιξώδες (Pa.s)
12	4770
23	3426
58	1991
115	1301
2305	836
65	443
1135	224

Ρυθμος διατμησης και ιξώδες του HDPE.

5.3.1 ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΤΟΥ ΥΛΙΚΟΥ.

Το υλικό που χρησιμοποιήθηκε κατά τη διάρκεια του πειράματος εξώθησης, είναι ένα υψηλής πυκνότητας πολυαιθυλενικό υλικό SABIC B 5823. Από τη στιγμή που οι ιδιότητες του υλικού επηρεάζουν σημαντικά ολόκληρη την ανάλυση της διαδικασίας, η χρήση ρεαλιστικών προτύπων είναι αναγκαία. Ωστόσο σε πολλές πολυμερείς διαδικασίες, οι επιδράσεις της ελαστικής μνήμης δεν είναι τόσο σημαντικές από τη στιγμή που τα τήγματα υπόκεινται σε μεγάλους βαθμούς παραμόρφωσης για μία σχετικά μεγάλη περίοδο. Από τη στιγμή που αυτή η δουλειά επικεντρώνεται σε μια ποιοτική ανάλυση των περιοχών της ροής, επιλέχτηκε το ανελαστικό μοντέλο. Τα πολυμερή τήγματα δεν είναι Νευτώνεια ρευστά. Η εξάρτηση του ρυθμού διάτμησης του ιξώδους των μη-Νευτώνειων ρευστών παρουσιάζεται ως ένα από τα αρκετά πρότυπα του ιξώδους και αναφέρεται ως ιξώδες.

Υπάρχουν διάφορα πρότυπα για την περιγραφή της εξάρτησης του ιξώδους από τη διατμητική τάση και τη θερμοκρασία. Μια αρκετά καλή προσέγγιση προτείνεται από το πρότυπο Carreau • Yasuda και από το πρότυπό του Power Law.

$$n = a_T n_0 (T_R) \left[1 + (a_T \dot{\gamma} \lambda (T_R))^\alpha \right]^{(n-1)/a} \quad : \text{Carreau-Yasuda πρότυπο} \quad (5.1)$$

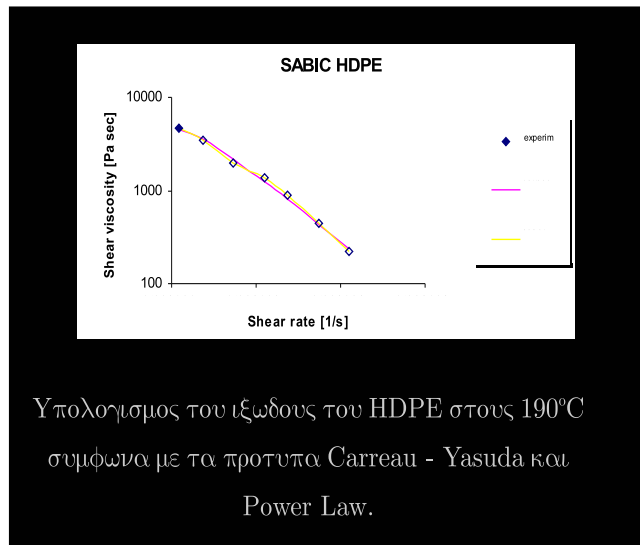
$$a_T = \exp \left\{ \frac{E_0}{R} \left(\frac{1}{T_R} - \frac{1}{T} \right) \right\} : \text{παράγοντας μετατόπισης} \quad (5.2)$$

$$n = n_0 \dot{\gamma}^{n-1} \frac{E_0}{R} \left(\frac{1}{T_R} - \frac{1}{T} \right) : \text{power law} \quad (5.3)$$

Όπου στο πρότυπο Carreau • Yasuda οι n_0 , λ , α και n είναι παράμετροι. Συγκεκριμένα, το n_0 παριστάνει το μηδενικό ρυθμό διάτμησης του ιξώδους, λ είναι η χρονική σταθερά η οποία αμοιβαία παριστάνει το ρυθμό διάτμησης κατά τη μεταφορά από τη Νευτώνεια στην ελάττωση του ιξώδους, ένας καθορισμός του εύρους της περιοχής μεταφοράς, και n είναι ο δείκτης του power-law που περιγράφει την κλίση της καμπύλης του ιξώδους με εναρμόνιση του ρυθμού διάτμησης στην περιοχή της ελάττωσης της διάτμησης. Η εξάρτηση της θερμοκρασίας στο πρότυπο Carreau • Yasuda εισάγεται στην εξίσωση (2) μέσω του παράγοντα μετατόπισης, a_T , όπου E_0 είναι η ενεργοποίηση της ενέργειας, R είναι η παγκόσμια σταθερά των αερίων, n_0 είναι το μηδενικό φαινόμενο ιξώδες στο πρότυπο του power law, n είναι ο δείκτης του power law και T είναι η απόλυτη θερμοκρασία. Η καλύτερη εφαρμογή των προτύπων Carreau • Yasuda και Power • Law, επιτυγχάνεται από τον καθορισμό των τιμών των παραμέτρων με τέτοιο τρόπο ώστε να ελαχιστοποιούν την τυπική μέση τετραγωνική τιμή (rms) που καθορίζεται ως

$$\text{rms deviation} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(1 - \frac{n_f^i}{n_m^i} \right)^2} \quad (5.4)$$

Όπου n_m και n_f είναι οι καταγεγραμμένες παρακάτω και το εφαρμοσμένο ιξώδες αντίστοιχα, και N είναι ο αριθμός των πειραματικών δεδομένων. Η ελαχιστοποίηση της εξίσωσης (4) πραγματοποιήθηκε χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο αναζήτησης Newton και τη ρουτίνα λύσης του Microsoft Excel. Το διατμητικό ιξώδες (shear viscosity) και η εξάρτηση του ρυθμού διάτμησης (shear rate) του πολυμερούς παρουσιάζονται στο σχήμα



Οι παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν στα πρότυπα Carreau - Yasuda and Power δίνονται στον πίνακα

	ΠΡΟΤΥΠΟ	
ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΙ	CARREAU - YASUDA	POWER LAW
n	0.2723	0.336
η_0 (Pa.sec)	$(5.43)10^3$	27523
λ (sec)	0.063	–
E_0 (kcal/mol)	6.5	6.5
T_R (°C)	190	190
rms%	6	9.6

Η εξάρτηση της θερμοκρασίας των φυσικών ιδιοτήτων του HDPE δίνονται στον πίνακα 5 ως πολυώνυμο της μορφής $A + BT + CT^2$ όπου T είναι η θερμοκρασία σε μία εκατονταβάθμια κλίμακα

ΠΑΡΑΜΕΤΡΟ	ΠΡΟΤΥΠΟ	
	GAUSSIAN TABLE	POWER LAW
n	0.2723	0.336
η_0 (Pa.sec)	$(5.43)10^3$	27523
λ (sec)	0.063	–
E_0 (kcal/mol)	6.5	6.5
T_R (°C)	190	190
rms%	6	9.6

Η εξάρτηση της θερμοκρασίας των φυσικών ιδιοτήτων του ΗΔΠΕ δίνονται στον παρακάτω πίνακα ως πολυώνυμο της μορφής $A + BT + CT^2$ όπου T είναι η θερμοκρασία σε μία εκατονταβάθμια κλίμακα.

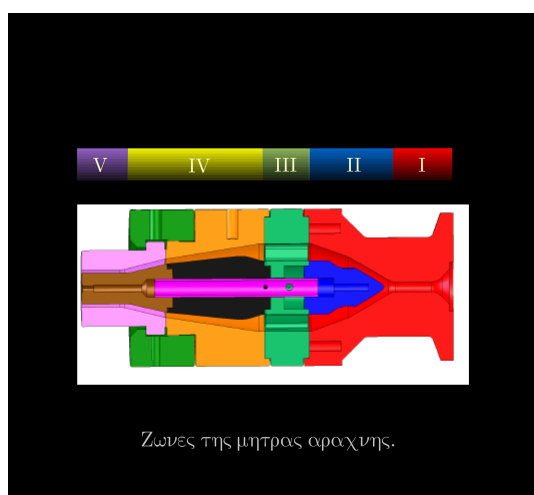
ΦΥΣΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ	ΤΥΠΟΣ ΠΟΛΥΜΕΡΟΥΣ	ΘΕΡΜ/ΣΙΑ (°C)	A	B
k (W/m ² K)	HDPE	143 - 200	0.26	-
C_p (KJ/kg ² K)	HDPE	133 - 200	1.984	$(3.88)10^{-2}$
ρ^0 (m ³ /gr)	HDPE	133 - 200	1.158	$(8.09)10^{-2}$

ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΗ ΕΞΑΡΤΗΣΗ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΟΥ ΗΔΠΕ

5.4 ΑΝΑΛΥΤΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ.

5.4.1 ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΤΗΣ ΕΞΩΘΕΡΜΗΣ ΜΗΤΡΑΣ ΓΙΑ ΒΕΛΤΙΣΤΟ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟ.

Όπως φαίνεται παρακάτω, η μήτρα αράχνης αποτελείται από 5 ζώνες:



ΖΩΝΗ I,II: Η ζώνη εισόδου του τήγματος στη μήτρα και ζώνη εκτροπής του από τον άξονα εχβολής και διανομή μέσω του κώνου του πυρήνα (αρσενικού κεφαλής) σε μια δακτυλιοειδή διατομή.

ΖΩΝΗ III: Η ζώνη της αράχνης, στην οποία το αρσενικό της μήτρας συγκρατείται από τα πόδια της αράχνης.

ΖΩΝΗ IV: Η ζώνη χαλάρωσης, όπου τα σημάδια ροής που δημιουργήθηκαν από τα πόδια της αράχνης μπορούν να εξαλειφθούν και η ροή γίνεται ομοιόμορφη κατά μήκος του καναλιού ροής

ΖΩΝΗ V: Η παράλληλη ζώνη της μήτρας, όπου το εκβαλλόμενο προϊόν διαμορφώνεται στις επιθυμητές διαστάσεις.

Η εκθετική συνάρτηση του δυναμικού νομού χρησιμοποιήθηκε για να καθορίσει την πτώση πίεσης στην εξωθημένη μήτρα. Σύμφωνα με αυτό το πρότυπο, η ογκομετρική παροχή από μια διατομή ενός μη-Νευτώνειου ρευστού υπολογίζεται από τον γενικό τύπο:

$$\dot{V} = K\phi\Delta P^m \quad (5.5)$$

Όπου, K είναι η σταθερά της γεωμετρίας του αγωγού για το εκθετικό μοντέλο, ΔP είναι η μεταβολή της πίεσης, $\phi = 1/\kappa^m$ είναι η ρευστότητα και $m = 1/n$ είναι ο εκθέτης του ρευστού και όπου κ είναι ο δείκτης συνοχής και n ο δείκτης ρεολογικής συμπεριφοράς του εκθετικού νόμου. Από αυτήν την εξίσωση η μέγιστη ογκομετρική παροχή του Johnson Plastics προκύπτει ως

$$\max \dot{V} = (8.0)10^{-6}m^3s^{-1} \quad (5.6)$$

Η πτώση πίεσης για τις διάφορους διατομές της μήτρας υπολογίζεται χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις που παρατίθενται στον πίνακα που ακολουθεί.

ΣΩΛΗΝΑΣ:	$\Delta P = L \frac{2^m(m+3)\dot{V}}{\lambda^m\phi\pi R^{m+3}}$
ΔΑΚΤΥΛΙΟΣ:	$\Delta P = L \frac{2^{m+1}(m+2)\dot{V}}{\lambda^m\phi\pi DH^{m+2}}$
ΜΗ ΤΥΠΟΠΟΙΗΜΕΝΗ ΔΙΑΤΟΜΗ:	$\Delta P = L \frac{U^{m+1}(m+3)\dot{V}}{2\lambda^m\phi A^{m+2}}$
ΤΕΤΡΑΓΩΝΙΚΗ ΔΙΑΤΟΜΗ:	$\Delta P = L \frac{2^{m+1}(m+2)\dot{V}}{\lambda^m\phi BH^{m+2}}$
ΠΤΩΣΗ ΠΙΕΣΗΣ ΣΕ ΔΙΑΦΟΡΕΣ ΔΙΑΤΟΜΕΣ ΤΗΣ ΜΗΤΡΑΣ	

Αντικαθιστώντας, η μέγιστη πτώση πίεσης εντός των ζωνών της μήτρας είναι

$$\Delta P_{tot} = \sum_i \Delta P_i = 9.3\text{MPa} \quad , i = I, II, III, IV, V \quad (5.7)$$

Η αναλυτική προσέγγιση για τον καθορισμό της αύξησης της θερμοκρασίας στην έξοδο της μήτρας βασίζεται στην υπόθεση ότι οι αδιαβατικές συνθήκες υπάρχουν εντός όλης της

διαδικασίας. Αυτό σημαίνει ότι δεν υπάρχει συναλλαγή θερμότητας μεταξύ των τοιχωμάτων της μήτρας και του υλικού και, συνεπώς, η ολική μηχανική ενέργεια μετατρέπεται σε θερμότητα. Η μέγιστη της αύξησης της θερμοκρασίας υπολογίζεται αναλυτικά από τη σχέση

$$\Delta T_{anal} = 4.72K \quad (5.8)$$

Όπου ΔP είναι η μέγιστη πτώση πίεσης στη μήτρα, ρ είναι η πυκνότητα και C_P είναι η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση.

5.5 ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ.

5.5.1 ΚΑΤΑΝΟΜΗ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΤΗΣ ΜΗΤΡΑΣ ΜΕ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ.

Ένα τρισδιάστατο συζευγμένο πρότυπο μεταφοράς θερμότητας αναπτύχθηκε για τα μη-Νευτώνεια ρευστά που υποβάλλονται σε επεξεργασία στην εξωθνημένη μήτρα. Η αριθμητική λύση υποθέτει ότι, ένα ομογενοποιημένο και ισότροπο HDPE λιωμένο μέταλλο με μια ομοιόμορφη θερμοκρασία των $T = 496K$ ρέει εντός της μήτρας αράχνης. Η θερμοκρασία στα τοιχώματα της μήτρας διατηρείται σε σταθερή τιμή $T_w = 479K$ και η τιμή της ογκομετρικής ροής του πολυμερούς λιωμένου μετάλλου μετράται σε $\max \dot{V} = (8.0)10^{-6}m^3s^{-1}$. Από τη στιγμή που οι ιδιότητες του υλικού επηρεάζουν την ανάλυση ολόκληρης της διαδικασίας, τότε είναι απαραίτητα αξιόπιστα ποσοτικά μοντέλα. Ωστόσο, σε πολλές πολυμερείς διαδικασίες, οι ελαστικές επιδράσεις δεν είναι πολύ σημαντικές, επειδή τα λιωμένα μέταλλα υποβάλλονται σε σταθερά μεγάλους βαθμούς παραμόρφωσης για ένα σχετικά μεγάλο χρονικό διάστημα. Δεδομένου ότι η εργασία επικεντρώνεται σε μια ποιοτική ανάλυση, το ανελαστικό πρότυπο, επιλέχθηκε ως το πιο κατάλληλο μέσο περιγραφής της ροής ενός λιωμένου μετάλλου. Τα πολυμερή λιωμένα μέταλλα δεν είναι Νευτώνεια ρευστά και διάφορα πρότυπα αναπτύχθηκαν για να περιγράψουν την εξάρτηση του ιξώδους από τη διατμητική τάση και τη θερμοκρασία. Η ευελιξία παρέχεται από το πρότυπο Carreau•Yasuda περιγραφόμενο ως

$$n = a_T n_0 T_R \left[1 + (a_T \dot{\gamma} \lambda (T_R))^\alpha \right]^{(n-1)/\alpha} \quad (5.9)$$

Όπου n_0 , λ , α , n είναι παράμετροι συναρμολόγησης του προτύπου και είναι παράγοντας μετατόπισης και δίνεται ως

$$a_T = \exp \left\{ \frac{E_0}{R} \left(\frac{1}{T_R} - \frac{1}{T} \right) \right\} \quad (5.10)$$

Η εξάρτηση της θερμοκρασίας εισάγεται στην τελευταία εξίσωση μέσω του παράγοντα μετατόπισης, a_T ενώ E_0 είναι η ενέργεια και R είναι η παγκόσμια σταθερά των αερίων. Οι διάφορες παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν στο πρότυπο Carreau•Yasuda παρατίθενται στον πίνακα σταθερών των υλικών στο πρότυπο Carreau - Yasuda.

$n = 0.2723$
$\eta_0 = (5.43)10^4 \text{ Pa}\cdot\text{s}$
$\lambda = 0.063 \text{ s}$
$E_0 = 6.5 \text{ kcal/mol}$
$T_R = 190\text{K}$
$a = 2$

ΣΤΑΘΕΡΕΣ ΤΩΝ
ΥΛΙΚΩΝ ΣΤΟ ΠΡΟΤΥΠΟ
CARREAU-YASUDA

Σύμφωνα με τη θεωρία της υπολογιστικής ρευστομηχανικής, οι διέπουσες εξισώσεις για να λύσουν τα προβλήματα των λειωμένων μετάλλων μπορούν να ληφθούν από τις εξισώσεις συνέχειας, κίνησης και διατήρησης μάζας βασισμένες στη διατήρηση μάζας, ορμής και ενέργειας αντίστοιχα. Εξετάζοντας τα χαρακτηριστικά της πολυμερούς ροής των λειωμένων μετάλλων στο κανάλι της μήτρας όταν επιτυγχάνεται η σταθερή κατάσταση της εξώθησης, οι ακόλουθες υποθέσεις γίνονται:

- Η ασυμπίεστη σταθερή ελαστική γραμμή επικρατεί δηλ. η παραλλαγή των φυσικών μεταβλητών του συστήματος που εναντιώνονται στο χρόνο μπορούν να αμεληθούν.
- Δεν αναφέρεται κανένας όρος ολίσθησης στην επιφάνεια των τοιχωμάτων, δηλ. η ταχύτητα ροής του λειωμένου μετάλλου στη διεπαφή ρευστού-μήτρας είναι ίση με ταχύτητα των τοιχωμάτων της μήτρας. Οι αδρανειακές και οι βαρυτικές δυνάμεις αμελούνται, δεδομένου αριθμός Reynolds των πολυμερών λειωμένων μετάλλων είναι σχετικά μικρός.
- Βασισμένοι στις πιο πάνω υποθέσεις, τίθενται οι οριακές συνθήκες. Οι διέπουσες εξισώσεις μπορούν να γραφτούν ως

$$\text{εξίσωση συνέχειας : } \mathbf{P}u = 0 \quad (5.11)$$

$$\text{εξίσωση κίνησης : } \mathbf{P}\sigma = 0 \quad (5.12)$$

$$\text{εξίσωση ενέργειας : } \rho C_P u \mathbf{P}T = -\mathbf{P}q + Q \quad (5.13)$$

Όπου \mathbf{P} είναι ο διαφορικός τελεστής Hamilton, u είναι η ταχύτητα και σ είναι ο δείκτης πίεσης Cauchy, ο οποίος εκφράζεται ως

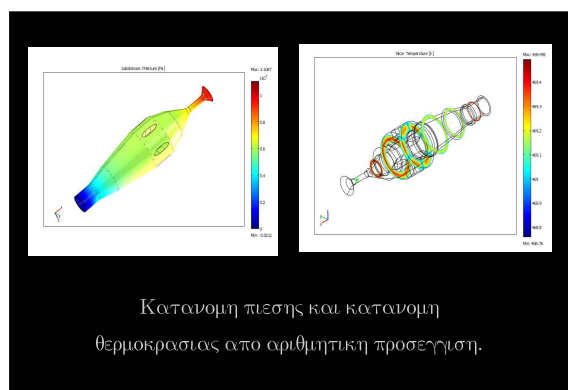
$$\sigma = -p\mathbf{I} + S \quad (5.14)$$

p είναι η υδροστατική πίεση, S είναι ο συντελεστής διατμητικής τάσης, \mathbf{I} είναι το δέλτα του Kronecker, C_P είναι η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση, T είναι η θερμοκρασία και Q η συνολική ενέργεια, ενσωματώνοντας τη μέθοδο **streamline upwind** Petrov-Galerkin (SUPG) για τη βελτίωση της σταθερότητας του υπολογισμού. Οι διέπουσες εξισώσεις επιλύθηκαν αριθμητικά χρησιμοποιώντας των κώδικα CFD των πεπερασμένων στοιχείων COMSOL 3.4 και το πρότυπο Carreau-Yasuda για το ιξώδες. Αυτό το αριθμητικό πρότυπο, ερεύνα την επίδραση της απώλειας του ιξώδους, η οποία προκαλεί μια αύξηση στη θερμοκρασία του ρευστού. Η θερμότητα παίζει ένα σημαντικό ρόλο στην εξώθηση των πολυμερών υλικών και, συνεπώς, θα πρέπει να ληφθεί υπ' όψιν προκειμένου να βελτιστοποιηθεί η επεξεργασία πολυμερών υλικών.



Ο αριθμός των πεπερασμένων στοιχείων που χρησιμοποιήθηκαν για την αριθμητική λύση ήταν 37019 τετραεδρικά στοιχεία (DOF 254596). Ένας σημαντικός λόγος για την κατανόηση της προτυποποίησης είναι η ικανότητα της ακριβούς πρόβλεψης της πτώσης

πίεσης στη μήτρα. Το σχήμα 4(α) δείχνει την κατανομή της πίεσης σε ολόκληρη την περιοχή της μήτρας. Μπορεί να επισημανθεί ότι η πίεση μειώνεται συνεχώς από την είσοδο ως την έξοδο της μήτρας. Η κατανομή της πίεσης σε όλη τη μήτρα όπως υπολογίστηκε από FE προσομοίωση δείχνει μια συνολική πτώση πίεσης 9.1 MPa.



Η κατανομή της θερμοκρασίας προέκυψε επιλύοντας τις εξισώσεις που περιγράφουν την ενεργειακή ισορροπία στην περιοχή της μήτρας. Το σχήμα 4(β) επεξηγεί την κατανομή της θερμοκρασίας του πολυμερούς κατά τη διάρκεια της εξώθησης. Το πολυμερές εισάγεται στην μήτρα με μια θερμοκρασία 469K και τα τοιχώματα θεωρείται ότι έχουν την ίδια σταθερή θερμοκρασία. Η θερμοκρασία του πολυμερούς ρευστού αυξάνεται βαθμιαία σε κατεύθυνση κάθετη στη ροή από τα τοιχώματα της μήτρας προς τον κεντρικό άξονα της, καθώς το ρευστό προοδευτικά μετακινείται προς την έξοδο της μήτρας. Το μέγεθος της θερμοκρασίας του πολυμερούς λιωμένου τήγματος, όπως περιγράφηκε από το αριθμητικό μοντέλο, προκύπτει από την εξίσωση

$$T = \frac{TuX}{uX} \quad (5.15)$$

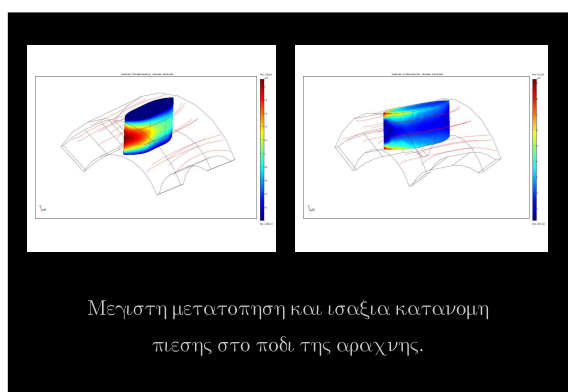
όπου, u είναι η ταχύτητα στην κατεύθυνση της ροής. Η αύξηση της θερμοκρασίας είναι

$$\Delta T = T_{out} - T_{in} = 1.2K \quad (5.16)$$

όπου, T_{out} και T_{in} είναι τα μεγέθη εσωτερικής και εξωτερικής θερμοκρασίας του λιωμένου πολυμερούς.

5.6 ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΠΙΕΣΗΣ ΤΩΝ ΤΑΣΕΩΝ ΣΤΑ ΠΟΔΙΑ ΤΗΣ ΑΡΑΧΝΗΣ.

Κατά το σχεδιασμό μιας μήτρας εξώθησης, είναι ουσιώδες να ερευνηθεί ο άξονας υποστήριξης όσον αφορά την ικανότητα του να απορροφήσει τα φορτία που θα δημιουργηθούν, και να ελαχιστοποιήσει την πιθανότητα αποτυχίας κατά τη διάρκεια λειτουργίας της μήτρας. Μια αριθμητική λύση υιοθετήθηκε για ένα από τα πόδια της αράχνης, το οποίο είναι το πιο αδύνατο μέλος του άξονα εξώθησης και όχι στην πλήρη υποστήριξη του άξονα. Χρησιμοποιήθηκαν λύσεις αλληλεπίδρασης της δομής των ρευστών, οι οποίες συνδέουν τις εξισώσεις συνέχειας της μηχανικής των στερεών με τις εξισώσεις Navier- Stokes της μηχανικής των ρευστών. Ο κώδικας COMSOL Multiphysics υιοθετήθηκε για να λύσει αυτές τις εξισώσεις ταυτόχρονα πάνω στην ίδια υπολογιστική περιοχή χρησιμοποιώντας μια Αυθαίρετη διατύπωση των Lagrange-Euler (ALE).



Οι ικανότητες του κινούμενου πλέγματος στις διατυπώσεις ALE της COSMOL επιτρέπουν μια σταθερή λύση ενώ αυξάνεται η παραμόρφωση και η μετακίνηση. Τα αποτελέσματα της ανάλυσης παρουσιάζονται στα επόμενα σχήματα. Όπως ειπώθηκε παραπάνω, η μήτρα κατασκευάστηκε χρησιμοποιώντας το χάλυβα IMPIAΞ, με πίεση $8 \cdot 10^8$ Pa. Βασισμένη στην ανάλυση, η μέγιστη πίεση που αναπτύχθηκε στα πόδια της αράχνης κατά τη διάρκεια της εξώθησης, η οποία αντιστοιχεί στη μέγιστη ποσότητα ροής του λιωμένου πολυμερούς υλικού είναι $(9.93)10^4$ Pa. Οι αντίστοιχες πιέσεις που προκύπτουν από το κριτήριο Von Mises, είναι σημαντικά μικρότερες από τις πιέσεις του υλικού και, συνεπώς, πρέπει να συναχθεί

το συμπέρασμα ότι ο προαναφερθέν χάλυβας είναι κατάλληλος για την κατασκευή των ποδιών της αράχνης για εφαρμογές πολυμερούς εξώθησης. Απ' την άλλη πλευρά, η μέγιστη αντικατάσταση όπως καθορίστηκε από το πρότυπο ALE είναι $(2.1)10^{-6}mm$.

5.7 ΣΥΝΟΨΗ ΚΑΙ ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.

Συνοψίζοντας τα κύρια χαρακτηριστικά γνωρίσματα των αναφερόμενων αποτελεσμάτων, μπορεί να συναχθεί το συμπέρασμα ότι, υπάρχει μια σημαντική διαφορά συγκρίνοντας τα αριθμητικά και αναλυτικά πρότυπα όσον αφορά τη θερμοκρασία που αναπτύσσεται στο ρευστό κατά τη διάρκεια της διαδικασίας εξώθησης. Πιο συγκεκριμένα,

σάξια κατανομή της πίεσης στο πόδι της αράχνης. Το αναλυτικό μοντέλο υπερεκτιμά τη θερμοκρασία του ρευστού, έκτοτε, για απλοποίηση, η ανάλυση βασίζεται στην υπόθεση ότι υπάρχουν αδιαβατικές συνθήκες, που σημαίνει ότι δεν υπάρχει μεταφορά θερμότητας μεταξύ των τοιχωμάτων και του πολυμερούς τήγματος όπως περιγράφηκε παραπάνω. Απ' την άλλη πλευρά η αριθμητική ανάλυση υποθέτει σταθερή τη θερμοκρασία των τοιχωμάτων της μήτρας, το οποίο είναι μια οριακή συνθήκη πολύ κοντά στο ότι συμβαίνει κατά τη διάρκεια της πραγματικής διαδικασίας εξώθησης. Αυτό εξηγεί την απόκλιση μεταξύ των αποτελεσμάτων της αριθμητικής και αναλυτικής μεθόδου που αναφέρθηκαν παραπάνω

	<i>Analytic</i>	<i>Arithmetic</i>	<i>Experimental</i>
$\Delta P(MPa)$	9.21	9.1	9.0
$T(K)$	4.72	1.2	1.3

Τελικά, αποδείχθηκε από την ανάλυση της πίεσης, ότι η κατασκευή της μήτρας είναι αρκετά σταθερή για να αντισταθεί στην πίεση που αναπτύσσεται κατά τη διάρκεια λειτουργίας της και ότι οι πιέσεις σε κάθε περίπτωση δεν υπερβαίνουν την αντοχή του υλικού.

Βιβλιογραφία

• ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

- [1] Α.Γ. Ανδρέουπουλος, «Επεξεργασία και Σχεδιασμός Προϊόντων», Ε.Μ.Π., 1995
- [2] Ε. Μητσούλης, «Βασικές Αρχές Μορφοποίησης Πολυμερών», Ε.Μ.Π., 1999
- [3] Μ. Καμπούρης, «Επεξεργασία Πολυμερών», Ε.Μ.Π., 1983
- [4] Κ.Δ. Παπασπυρίδης, «Τεχνολογία Πολυμερών : Απλά προβλήματα κατασκευών από πολυμερή υλικά», Ε.Μ.Π. 1985
- [5] Ι. Σμιτζής, «Τεχνολογία Πολυμερών», Ε.Μ.Π. 1999
- [6] Παναγιώτου Κ., 'Επιστήμη και Τεχνολογία Πολυμερών', Εκδόσεις ΠΗΓΑΣΟΣ, Θεσσαλονίκη, 2001
- [7] Walter Michaeli, "Extrusion dies for plastics and rubber; Design and engineering computations" , 2nd Ed. , Hanser Press (ISBN: 3-446-16190-2) or Oxford University Press (ISBN: 0-19-520910-9)
- [8] S. Levy and J.F. Carley, "Plastics Extrusion Technology Handbook" , 2nd Ed., Industrial Press, 1989 (ISBN: 0-8311-1185-2)
- [9] Hensen, "Plastics Extrusion Technology" , 2nd Ed., Hanser
- [10] Tadmor Gogos, "Principles of Polymer Processing" , Wiley Inter-science (668)
- [11] D.G. Baird and D.I. Collias, "Polymer Processing" , Wiley Inter-science (668.423)
- [12] N.M. Bikales, "Extrusion; Another plastics operation" , Wiley Inter-science (668.41)
- [13] Menges-Mohren, "How to make injection molds" , Hanser (668.42) A.B. GLANVILL, "THE PLASTICS ENGINEER" S DATA BOOK"
- [14] Fried J.R., "Polymer Science and Technology" , Prentice Hall PTR, New Jersey, 1995
- [15] Osswald T.A., "Polymer Processing Fundamentals" , Hanser Publications, 1998

[16] McKelvey J.M., "Polymer Processing", J.Wiley and Sons 1962

• ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

[1] Aris, R., 1989. Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics, Dover Publications, New York

[2] Bernstein, B., Kearsley, E.A. and Zapas L., 1963. A study of stress relaxation with finite strain. Trans. Soc. Rheol. 7, 391-410

[3] Bird, R.B., Armstrong, R.C. and Hassager, O., 1977. Dynamics of Polymeric Fluids, Vol.1: Fluid Mechanics, Wiley, New York.

[4] Bird, R.B., Stewart, W.E. and Lightfoot, E.M., 1960. Transport Phenomena, Wiley, New York

[5] Casson, N., 1959. In: Mill. C.C. (ed.), Rheology of Disperse Systems, Pergamon Press, London

[6] Carreau, P.J., 1968. PhD thesis, Department of Chemical Engineering, University of Wisconsin, Wisconsin

[7] Criminale, W.O. Jr, Ericksen, J.L. and Filby, G.L. Jr., 1958. Steady shear flow of non-Newtonian fluids. Arch. Rat. Mech. Anal. 1, 410-417

[8] de Waele, A., 1923. See Bird, R.B., Armstrong, R.C. and Hassager, O. 1977. Dynamics of Polymeric Fluids, Vol. 1: Fluid Mechanics, Wiley, New York.

[9] Doi, M. and Edwards, S.F., 1978. Dynamics of concentrated polymer systems: 1. Brownian motion in equilibrium state, 2. Molecular motion under flow, 3. Constitutive equation and 4. Rheological properties. J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2 74, 1789, 1802, 1818-1832.

[10] Doi, M. and Edwards, S.F., 1979. Dynamics of concentrated polymer systems: 1. Brownian motion in equilibrium state, 2. Molecular motion under flow, 3. Constitutive equation and 4. Rheological properties. J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2 75, 38-54.

[11] Herschel, W.H. and Bulkeley, R., 1927. See Rudraiah, N. and Kaloni, P.N. 1990. Flow of non-Newtonian fluids. In: Encyclopaedia of Fluid Mechanics, Vol. 9, Chapter 1, Gulf Publishers, Houston

[12] Johnson, M.W. and Segalman, D., 1977. A model for viscoelastic fluid behaviour which allows non-affine deformation. J. Non-Newtonian Fluid Mech. 2, 255-270.

[13] Kaye, A., 1962. Non-Newtonian Flow in Incompressible Fluids, CoA Note No. 134

College of Aeronautics, Cranfield.

- [14] Kemplowski, Z. and Petera, J., 1981. Memory effects during the flow of thixotropic fluids in pipes. *Rheol. Acta* 20, 311-323.
- [15] Lodge, A.S., 1964. *Elastic Liquids*, Academic Press, London
- [16] Metzner, A.B. and Whitlock, M., 1958. Flow behaviour of concentrated dilatant suspensions. *Trans. Soc. Rheol.* 2, 239-254.
- [17] Middleman, S., 1977. *Fundaentals of Polymer Processing*, McGraw-Hill, New York.
- [18] Mitsoulis, E., 1986. The numerical simulation of Boger fluids: a viscometric approximation approach. *Poym. Eng. Sci.* 26, 1552-1562.
- [19] Mitsoulis, E., 1990 Numerical Simulation of Viscoelastic Fluids. In: *Encyclopaedia of Fluid Mechanics*, Vol. 9, Chapter 21, Gulf Publishers, Houston.
- [20] Oldroyd, J.G., 1947. A rational formulation of the equations of plastic flow for a Bingham solid. *Proc. Camb. Philos. Soc.* 43, 100-105.
- [21] Oldroyd, J.G., 1950. On the formulation of rheological equations of state. *Proc. Roy. Soc. A*200, 523-541.
- [22] Olley, P. and Coates, P.D., 1977. An approximation to the KBKZ constitutive equation. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 69, 239-254.
- [23] Ostwald, W., 1925. See Bird, R.B., Armstrong, R.C. and Hassager, O. 1977. *Dynamics of Polymeric Fluids*, Vol. 1: Fluid Mechanics, Wiley, New York.
- [24] Pearson, J.R.A., 1994. Report on University of Wales Institute of Non-Newtonian Fluid Mechanics Mini Symposium on Continuum and Microstructural Modelling in Computational Rheology. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 55, 203-205.
- [25] Phan-Thien, N. and Tanner, R.I., 1977. A new constitutive equation derived from network theory. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 2, 353-365.
- [26] Pittman, J.F.T. and Nakazawa, S., 1984. Finite element analysis of polymer processing operations. In: Pittman, J.F.T., Zienkiewicz, O.C., Wood, R.D. and Alexander, J.M. (eds), *Numerical Analysis of Forming Processes*, Wiley, Chichester.
- [27] Slibar A. and Paslay, P.R., 1959. Retarded flow of Bingham materials. *Trans. ASME* 26, 107-113.
- [28] Stevenson, J.F., 1972. Elongational flow of polymer melts. *AIChE. J.* 540-547.
- [29] Tadmor, R.I., 1985. *Engineering Rheology*, Claredon Press, Oxford.
- [30] Wagner, M.H., 1979. Towards a network theory for polymer melts. *Rheol. Acta.*

18, 33-50.

• ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

- [1] Bathe, K. J., 1996. *Finite Element Procedures*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ.
- [2] Brenner, S.C. and Scott, L.R., 1994. *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*, Springer-Verlag, New York
- [3] Bogner, F.K., Fox, F.L. and Schmit, L.A., 1965. The generation of interelement-compatible stiffness and mass matrices by the use of interpolation formulae. Proc. Conf. on Matrix Methods in Structural Mechanics, Air Force Institute of Technology, Wright-Patterson AF Base, OH.
- [4] Brooks, A. N. and Hughes, T.J.R., 1982. Streamline-upwind/Petrov Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Methods for Elliptic Problems*, North-Holland, Amsterdam.
- [5] Crouzeix, M. and Raviart, P.A., 1973. Conforming and non-conforming finite elements for solving the stationary Navier-Stokes equations. *RAIRO, Serie Rouge* 3, 33-76.
- [6] Donea, J., 1984. A Taylor-Galerkin method for convective transport problems. *Int. J. Num. Methods Eng.* 20, 101-119.
- [7] Forsythe, G.E. and Moler, C.B., 1967. *Computer Solution of Linear Algebraic Systems*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ.
- [8] Gerald, C.F. and Wheatley, P.O., 1984. *Applied Numerical Analysis*, 3rd edn. Addison-Wesley, Reading, MA.
- [9] Girault, V. and Raviart, P.A., 1986. *Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations*, Springer-Verlag, Berlin.
- [10] Hinton, E. and Owen, D.R.J., 1977. *Finite Element Programming*, Academic Press, London.
- [11] Hood, P., 1976. Frontal solution program for unsymmetric matrices. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 10, 379-399.
- [12] Hughes, T.J.R. and Brooks, A.N., 1979. A multidimensional upwind scheme with no cross-wind diffusion. In: Hughes, T.J.R. (ed.), *Finite Element Methods for Convection Dominated Flows*, AMD Vol. 34, ASME, New York.

- [13] Irons, B. and Ahmad, S., 1980. Techniques of finite Elements, ch. 13, Ellis Horwood/Wiley, Chichester, pp. 215-244.
- [14] Johnson, C., 1987. Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method, Cambridge University Press, Cambridge.
- [15] Lapidus, L. and Pinder, G.F., 1982. Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering, Wiley, New York.
- [16] Petera, J., Nassehi, V. and Pittman, J.F.T., 1989. Petrov-Galerkin methods in isoparametric bilinear and biquadratic elements tested for a scalar convection-diffusion problem. *Int. J. Numer. Meth. Heat Fluid Flow* 3, 205-222.
- [17] Pittman, J.F.T., 1989. Finite elements for field problems. In: Tucker III, C.L. (ed.), *Computer Modeling for Polymer Processing*, ch. 6, Hanser Publishers, Munich, pp. 237-331.
- [18] Pittman, J.F.T. and Nakazawa, S., 1984. Finite element analysis of polymer processing operations. In: Pittman, J.F.T., Zienkiewicz., Wood, R.D. and Alexander, J.M. (eds), *Numerical Analysis of Forming Processes*, Wiley, Chichester.
- [19] Strang, G. and Fix, G.L., 1973. *An Analysis of the Finite Element Method*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ.
- [20] Taylor, C. and Hood, P., 1973. A numerical solution of the Navier-Stokes equations using the finite element technique. *Comput. Fluids* 1, 73-100.
- [21] Townsend, P. and Webster, M.F., 1987. An algorithm for the three dimensional transient simulation of non-Newtonian fluid flow. In: Pande, G.N. and Middleton, J.(eds), *Transient Dynamic Analysis and Constitutive Laws for Engineering Materials Vol. 2*, T12, Nijhoff-Holland, Swansea, pp. 1-11.
- [22] Zienkiewicz, O.C. and Morgan, K., 1983. *Finite Elements and Approximation*, Wiley, New York.
- [23] Zienkiewicz, O.C. and Taylor, R.L., 1994. *The Finite Element Method*, 4th edn, Vols 1 and 2, McGraw-Hill, London

• ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

- [1] Aris, R., 1989. *Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics*, Dover Publications, New York
- [2] Babuska, B., 1971. Error bounds for finite element method. *Numer. Methods* 16,

322-333.

- [3] Bell, B.C. and Surana, K.S., 1994. p-version least squares finite element formulations for two dimensional, incompressible, non-Newtonian isothermal and nono-isothermal fluid flow. *Int. J. Numer. Methods Fluids* 18, 127-162.
- [4] Cardona, A. and Idelsohn, S., 1986. Solution of non-linear thermal transient problems by a reduction method. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 23, 1023-1042.
- [5] Christie, I. et al., 1981. Product approximation for non-linear problems in the finite element method. *IMA J. Numer. Anal.* 1, 253-266.
- [6] de Sampaio, P.A.B., 1991. A Petrov-Galerkin formulation for the incompressible Navier-Stokes equations using equal order interpolation for velocity and pressure. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 31, 1135-1149.
- [7] Donea, J., 1992. Arbitrary Lagrangian-Eulerian finite element methods. In: Belytschko, T. and Hughes, T.J.R. (eds), *Computational Methods for Transient Analysis*, Elsevier Science, Amsterdam.
- [8] Gresho, P.M., Lee, R.L. and Sani, R.L., 1980. On the time-dependent solution of the incompressible Navier-Stokes equations in two and three dimensions. In: *Recent Advances in Numerical Methods in Fluids*, Ch. 2, Pineridge Press, Swansea, pp. 27-75.
- [9] Hughes, T.J.R., 1987. Recent progress in the development and understanding of SUPG methods. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 7, 1261-1275.
- [10] Hughes, T.J.R., Franca, L.P. and Balestra, M., 1986. A new finite-element formulation for computational fluid dynamics. 5. Circumventing the Babuska-Brezzi condition • a stable Petrov - Galerkin formulation of the Stokes accommodating equal order interpolations. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 59, 85-99
- [11] Hughes, T.J.R., Mallet, M. and Mizukami, A., 1986. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: II. Beyond SUPG. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 54, 341-355.
- [12] Keuning, R., 1989. Simulation of viscoelastic fluid flow. In: Tucker, C.L. III (ed.), *Computer Modeling for Polymer Processing*, Chapter 9, Hanser Publishers, Munich, pp. 403-469.
- [13] Kheshgi, H.S. and Scriven, L.E., 1985. Variable penalty method for finite element analysis of incompressible flow. *Int. J. Numer. Methods Fluids* 5, 785-803.
- [14] Luo, X.L. and Tanner, R.I., 1989. A decoupled finite element streamline-upwind scheme for viscoelastic flow problems. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 31, 143-162.

- [15] Marchal, J.M. and Crochet, M.J., 1987. A new mixed finite element for calculating viscoelastic flow. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 20, 77-114
- [16] Morton, K. W., 1996. *Numerical Solution of Convection Diffusion Problems*, Chapman Hall, London.
- [17] Nakazawa, S., Pittman, J.F.T. and Zienkiewicz, O.C., 1982. Numerical solution of flow and heat transfer in polymer melts. In: Gallagher, R.H. et al. (eds), *Finite Elements in Fluids*, Vol. 4, Ch. 13, Wiley, Chichester, pp. 251-283.
- [18] Nichols, B.D., Hirt, C.W. and Hitchkiss free surface boundaries. Los Alamos Scientific Laboratories Report No. La-8355, Los Alamos, NM.
- [19] Papanastasiou, T.C., Scriven, L.E. and Macoski, C.W., 1987. A finite element method for liquid with memory. *J. Non-Newtonian Fluid Mech* 22, 271-288.
- [20] Petera, J. and Nassehi, V., 1996. Finite element modelling of free surface viscoelastic flows with particular application to rubber mixing. *Int. J. Numer. Methods Fluids* 23, 1117-1132.
- [21] Petera, J., Nassehi V. and Pittman, J.F.T., 1993. Pertov • Galerkin methods on isoparametric bilinear and biquadratic elements tested for a scalar convection-diffusion problem. *Int. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow* 3, 205-222.
- [22] Petera, J. and Pittman, J.F.T., 1994. Isoparametric Hermite elements. *Int. J. Numer. Methods Eng.* 37, 3489-3519.
- [23] Pittman, J.F.T., 1989. Finite elements for field problems. In: Tucker, C.L. III (ed.), *Computer Modeling for polymer Processing*, Chapter 6, Hanser Publishers, Munich, pp. 237-331.
- [24] Pittman, J.F.T. and Nakazawa, S., 1984. Finite element analysis of polymer processing operations. In: Pittman, J.F.T., Zienkiewicz, O.C., Wood, R.D. and Alexander J.M. (eds), *Numerical Analysis of forming Processes*, Chapter 6, Wiley, Chichester, pp. 165-218.
- [25] Silliman, W.J. and Scriven, L.E., 1980. Separating flow near a static contact line: slip at a wall and shape of a free surface. *J. Comput. Phys.* 34, 287-313.
- [26] Swarbrich, S.J. and Nassehi, V., 1992a. A new decoupled finite element algorithm for viscoelastic flow. Part 1; convergence properties of the algorithm. *Int. J. Numer. Methods Fluids* 14, 1367-1376.
- [27] Swarbrich, S.J. and Nassehi, V., 1992b. A new decoupled finite element algorithm for viscoelastic flow. Part 2; convergence properties of the algorithm. *Int. J. Numer.*

Methods Fluids 14, 1377-1382.

[28] Tanner, R.I. 2000. Engineering Rheology, 2nd edn, Oxford University Press, Oxford.

[29] Zienkiewicz, O.C. and Taylor, R.L., 1994. The Finite Element Method, 4th edn, Vols 1 and 2, McGraw-Hill, London.

[30] Zienkiewicz, O.C. et al., 1986. The patch test for mixed formulations. Int. J. Numer. Methods Eng. 23, 1873-1883.

[31] Zienkiewicz, O.C. et al., 1985. Iterative method for constrained and mixed approximation, an inexpensive improvement to f.e.m. performance. Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 51, 3-29.

[32] Zienkiewicz, O.C. and Wu, J., 1991. Incompressibility without tears how to avoid restrictions on mixed formulation. Int. J. Numer. Methods Eng. 32, 1189-1203.

• ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

[1] H.Yan and J.Xia: Sci. and Tech. of Advanced Mat. Vol. 7 (2006), p. 127-131. [2] F.Ding and A.J.Giacomin: Polymer Eng. and Sci. Vol. 44 (2004), p. 1811-1827.

[3] R.K.Krishnaswamy, D.C.Rohlfing, A.M.Sukhadi and K.R. Slusarz: Polymer Eng. and Sci. Vol. 44 (2004), p. 2266-2273 [4] M.Avc? and O.Ayd?n: C. R. Mecanique, Vol. 334 (2006), p. 164-169.

[5] B.Yang and L.J.Lee: Polymer Eng. and Sci. Vol 27 (1987), p 1079-1087

[6] W.Michaeli: Design and Engineering Computation, 2nd ed. Hanser Publishers, Munich (1992).

[7] J.Vlachopoulos and P.S.Scott: Advances in Polymer Tech., Vol. 5 (1985), p. 81-86.

[8] V.Nassehi: Practical Aspects of Finite Element Modelling of Polymer Processing, John Wiley and Sons, England (2002).

[9] M.Capobianchi and T.E.Irvine Jr.: Wfirme und Stoffubertragung Vol. 27 (1992), p. 209-215.