

Polimerek reológiája és szimulációs technikái (BMEGEPTNG02)



BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
GÉPÉSZMÉRNÖKI KAR
POLIMERTECHNIKA TANSZÉK



Szabó Ferenc

2023

- **Reológiai probléma**

- Ismeretlenek: v_x , v_y , v_z , η , p , T , ρ

- ➔ **Megoldás:**

- **Anyagtól független egyenletek (Megmaradási egyenletek)**

- Impulzus egyenlet, 3 irányban
 - Folytonosság
 - Energia egyenlet

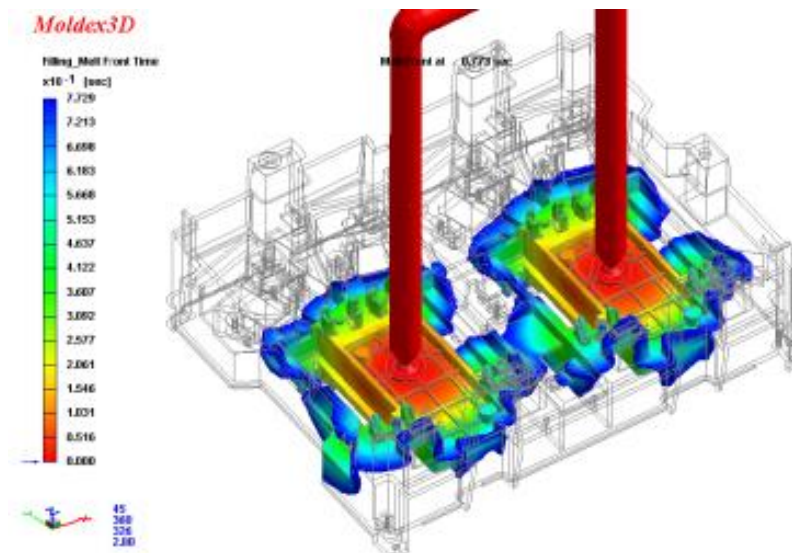
- **Anyagtól függő egyenletek (Állapotegyenletek)**

- Reológiai állapotegyenlet
 - Fizikai állapotegyenlet

- **Zárt alakban gyakran egyszerű geometriák esetén sem írható fel a megoldás**

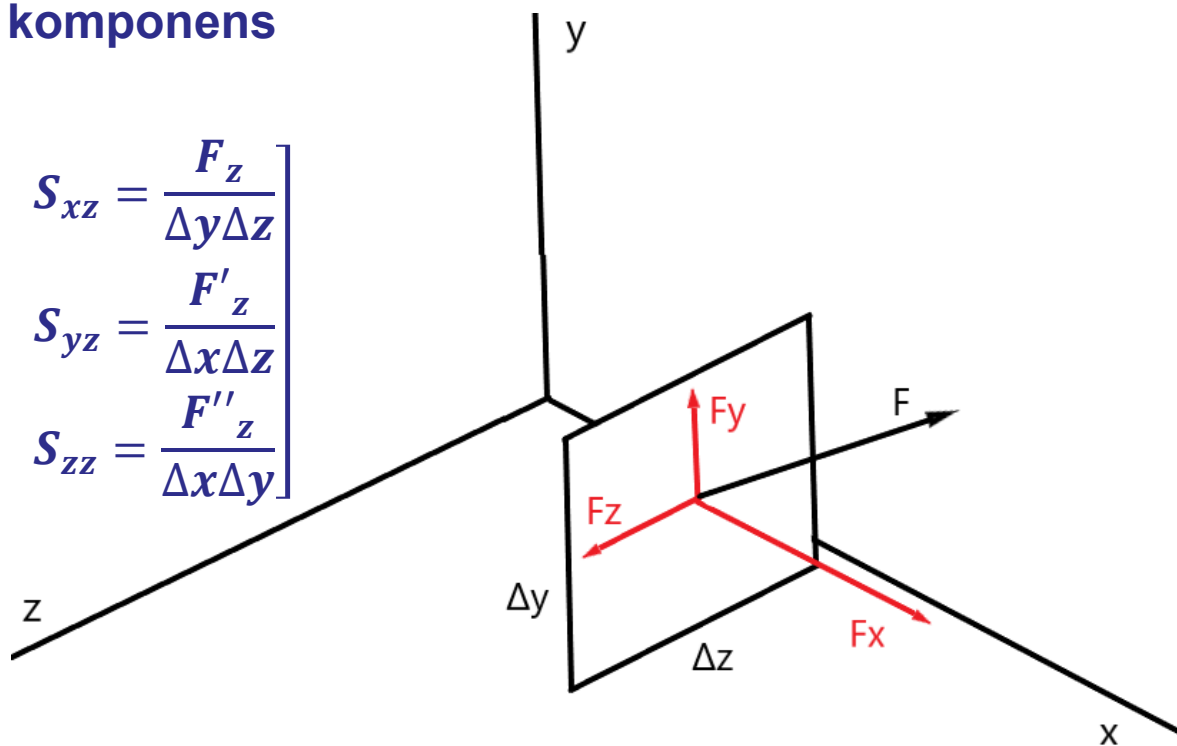
- ➔ **Közelítő módszerek**

- ➔ **Kezdeti és peremfeltételek**



- Normálfeszültségek és csúsztatófeszültségek
- Konvenció:
 - ➔ A felület normálisa legyen az első helyen (1)
 - ➔ Az erő iránya a második helyen (2)
- Egyensúlyi helyzet, ezért a feszültségtenzor szimmetrikus
 - ➔ 9 helyett csak 6 független komponens

$$s = \begin{bmatrix} s_{xx} = \frac{F_x}{\Delta y \Delta z} & s_{xy} = \frac{F_y}{\Delta y \Delta z} & s_{xz} = \frac{F_z}{\Delta y \Delta z} \\ s_{yx} = \frac{F'_x}{\Delta x \Delta z} & s_{yy} = \frac{F'_y}{\Delta x \Delta z} & s_{yz} = \frac{F'_z}{\Delta x \Delta z} \\ s_{zx} = \frac{F''_x}{\Delta x \Delta y} & s_{zy} = \frac{F''_y}{\Delta x \Delta y} & s_{zz} = \frac{F''_z}{\Delta x \Delta y} \end{bmatrix}$$



- Hidrosztatikus nyomás esetén:

$$\bar{\bar{S}} = \begin{bmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{bmatrix}$$

így $-p = \frac{1}{3} [S_{xx} + S_{yy} + S_{zz}]$

- Válasszuk külön a hidrosztatikus nyomást, mer csak térfogatváltozást okoz

$$\bar{\bar{S}} = -p\bar{\bar{E}} + \bar{\bar{\tau}}$$

$$\bar{\bar{S}} = -p \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -p + \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & -p + \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & -p + \tau_{zz} \end{bmatrix}$$

Mozgó folyadékban a normálfeszültségek a felületek irányítottságától is függenek, így az egyszerű nyomás def. már nem használható, helyette S -ből számítható egy nyomás jellegű mennyiség.

- Nem Newtoni folyadék esetén az S 6 független komponense 0-tól eltérő
- Izotróp anyag esetén 3 független komponens!
- ➔ Egyszerű nyíró síkáramlás z irányban, forgassuk el a koordinátarendszert gondolatban 180° -kal a z tengely körül!

$$x'=-x, y'=-y, z'=z$$

- Írjuk fel a feszültség komponenseket a z tengelyre merőleges síkra!
- Az áramló folyadék viselkedése nem függhet a koordináta rendszer megválasztásától, így ez a feszültségeket nem befolyásolhatja!
(anyagi objektivitás elve)

$$e'_x \tau'_{zx} + e'_y \tau'_{zy} + e'_z \tau'_{zz} = -e_x \tau_{zx} - e_y \tau_{zy} + e_z \tau_{zz}$$

Ez csak akkor lehetséges, ha

$$\tau_{zx} = \tau_{xz} = 0 \quad \tau_{zy} = \tau_{yz} = 0$$

- Izotróp anyag nyíró áramlására tehát

$$\bar{S} = -p \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & 0 \\ \tau_{xy} & \tau_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \tau_{zz} \end{vmatrix}$$

- Mérni nyomás különbséget tudunk, összenyomhatatlan anyagnál az abszolút nyomás értelmezése problémás.

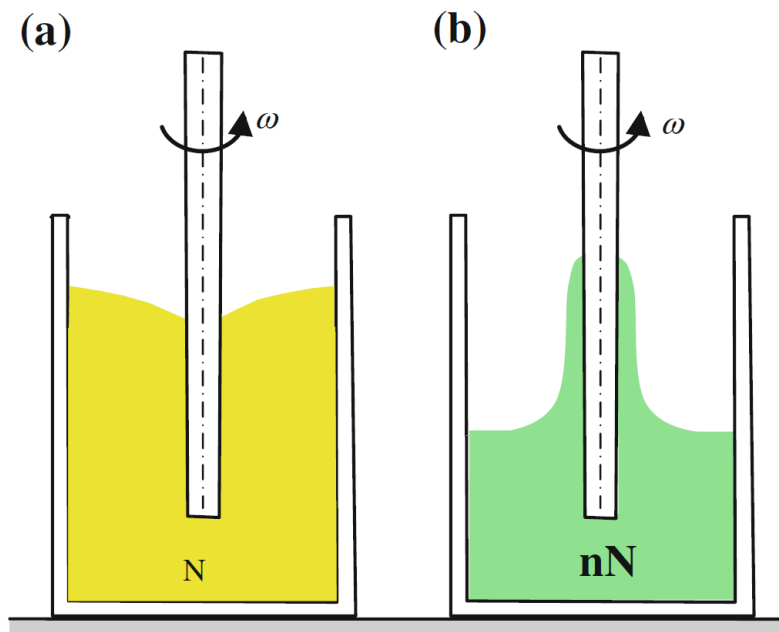
→ különbségek képzése, a nyomás kiesik

1. Normálfeszültség különbség: $\tau_{xx} - \tau_{yy}$

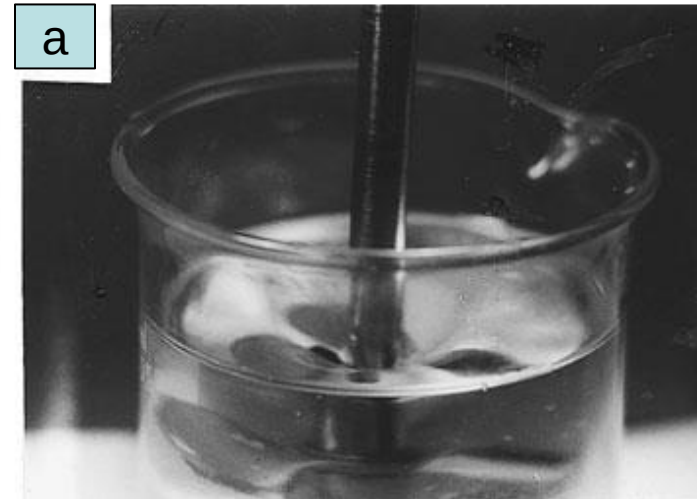
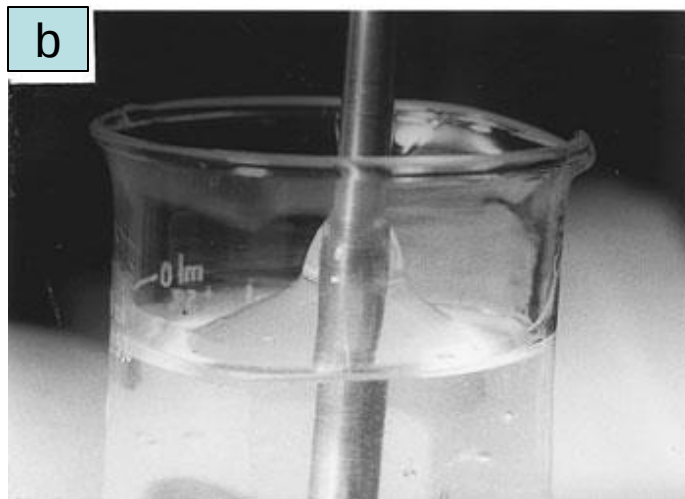
2. Normálfeszültség különbség: $\tau_{yy} - \tau_{zz}$

Nyírófeszültség: τ_{xy}

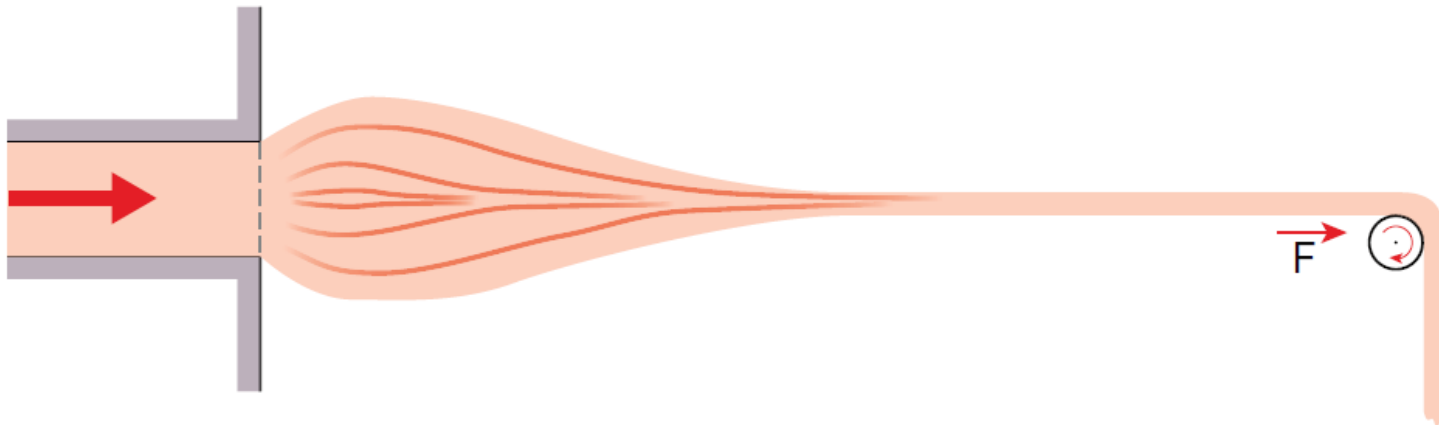
→ Izotróp összenyomhatatlan folyadék nyíró áramlásának jellemzésére 3 független anyagi jellemző szükséges (instacioner esetben is!)



- a) Newtoni folyadék
- b) nem Newtoni folyadék



- Van-e különbség a nyírással szemben mutatott és a nyújtás során mérhető viszkozitások között?



- Deformáció komponensek:

$$\dot{\gamma}_{11} = -\dot{\epsilon}$$

$$\dot{\gamma}_{22} = -\dot{\epsilon}$$

$$\dot{\gamma}_{33} = 2\dot{\epsilon}$$

- A feszültség komponensek:

$$\sigma_{11} = -p - \eta \dot{\epsilon}$$

$$\sigma_{22} = -p - \eta \dot{\epsilon}$$

$$\sigma_{33} = -p + 2\eta \dot{\epsilon}$$

- Mivel csak „z” irányban van a nyomás mellett más erőhatás is,
 $\sigma_{11}=0$ és $\sigma_{22}=0$

- Ezzel:

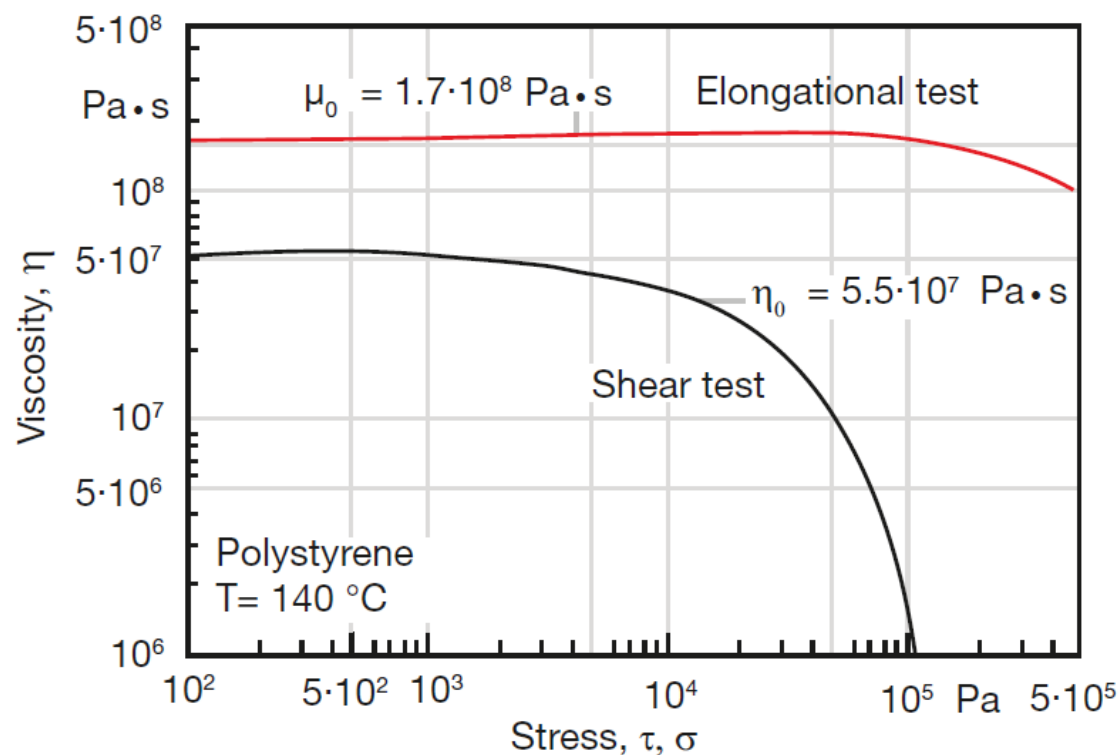
$$p = -\eta \dot{\epsilon}$$

$$\sigma_{33} = 3\eta \dot{\epsilon} = \bar{\eta} \dot{\epsilon}$$

- Nyíró és húzó rugalmassági modulusok analógiája, összenyomhatatlan esetre

$$\frac{E}{G} = 2(1 + \nu)$$

- Valós esetben:



- **Reológiai probléma**

- Ismeretlenek: v_x , v_y , v_z , η , p , T , ρ

- ➔ **Megoldás:**

- **Anyagtól független egyenletek (Megmaradási egyenletek)**

- Impulzus egyenlet, 3 irányban
- Folytonosság
- Energia egyenlet

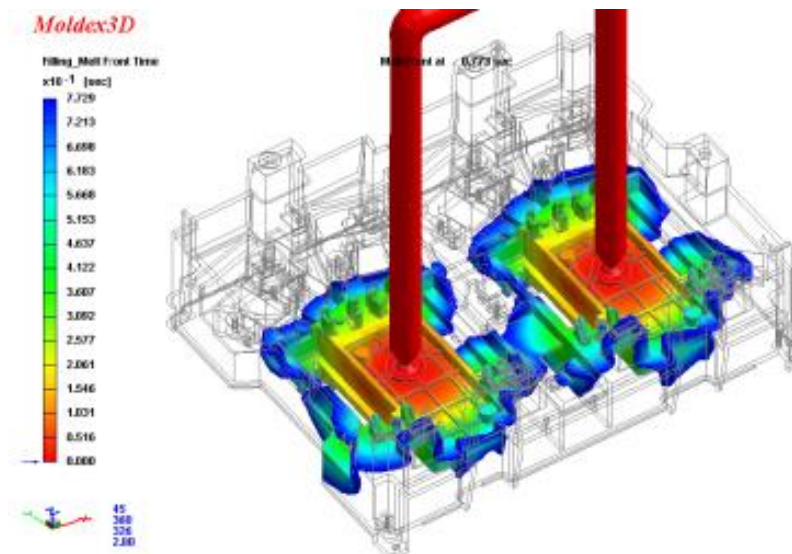
- **Anyagtól függő egyenletek (Állapotegyenletek)**

- Reológiai állapotegyenlet
- Fizikai állapotegyenlet

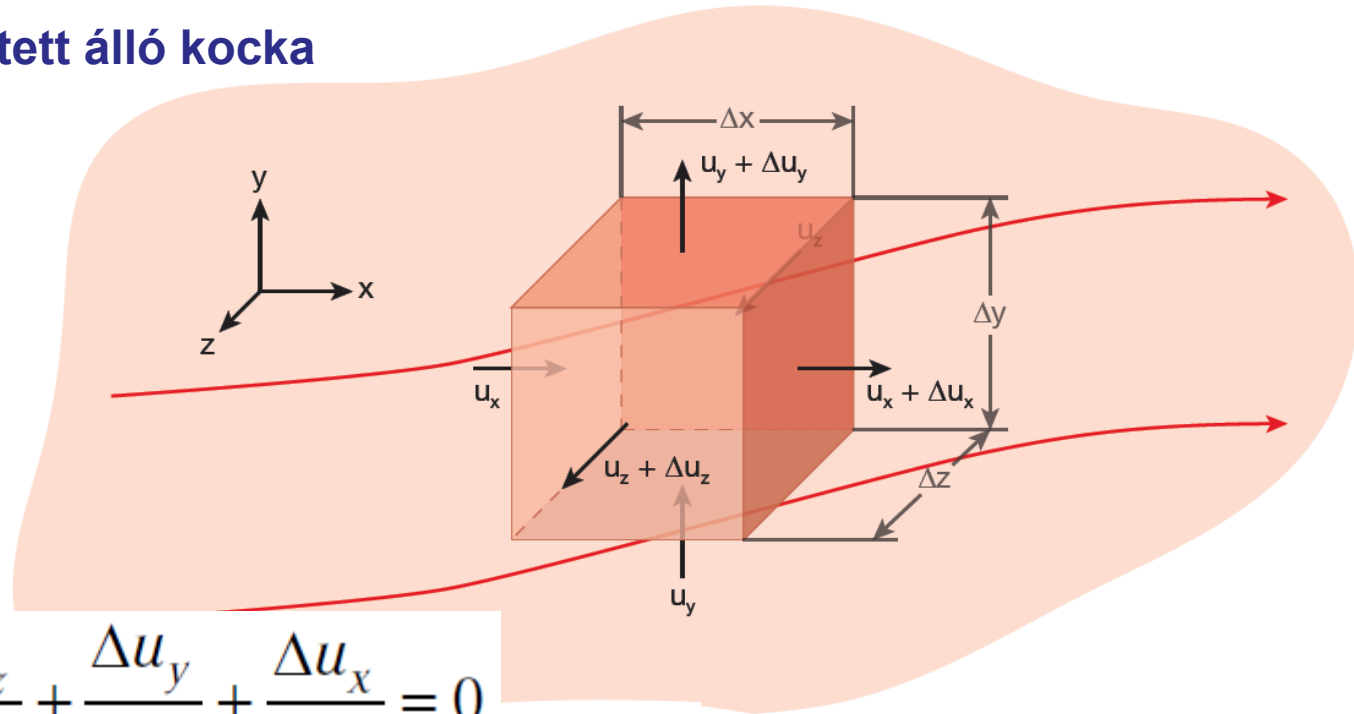
- **Zárt alakban gyakran egyszerű geometriák esetén sem írható fel a megoldás**

- ➔ **Közelítő módszerek**

- ➔ **Kezdeti és peremfeltételek**



- Folyadékba merített álló kocka



- Felírható:
$$\frac{\Delta u_z}{\Delta z} + \frac{\Delta u_y}{\Delta y} + \frac{\Delta u_x}{\Delta x} = 0$$
- Határátmenetet képezve, vektorosan: $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$
- Kompresszibilis esetre: $\nabla(\rho \bar{\mathbf{u}}) = 0$
- Ha még időfüggő is: $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla(\rho \bar{\mathbf{u}})$

- **Parciális derivált:** $\frac{\partial c}{\partial t}$
 - A parton ülve figyeljük a koncentráció változást



- **Teljes idő szerinti derivált:** $\frac{dc}{dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial c}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial c}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial c}{\partial z} \frac{dz}{dt}$
 - Mozgó csónakból figyeljük a változást, mozgás: $dx/dt \dots$

- **Anyagi, mozgást követő, szubsztanciális derivált:**

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + v_x \frac{\partial c}{\partial x} + v_y \frac{\partial c}{\partial y} + v_z \frac{\partial c}{\partial z}$$

- Sordódó csónak esete



- Anyagi derivált segítségével felírva:

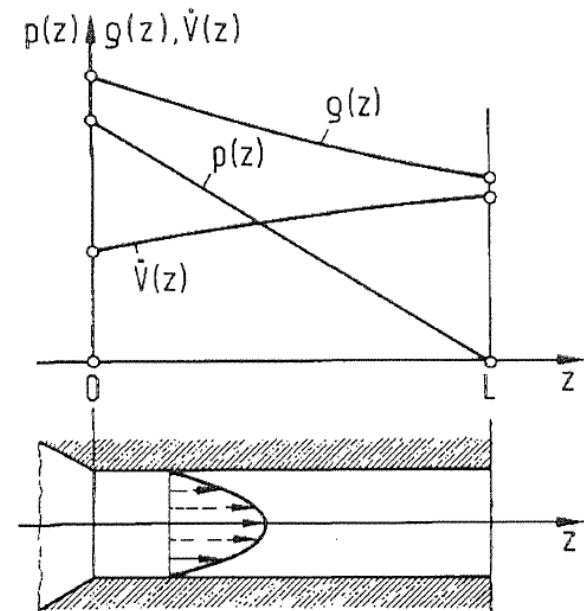
$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho(\nabla \bar{u})$$

- Tehát:

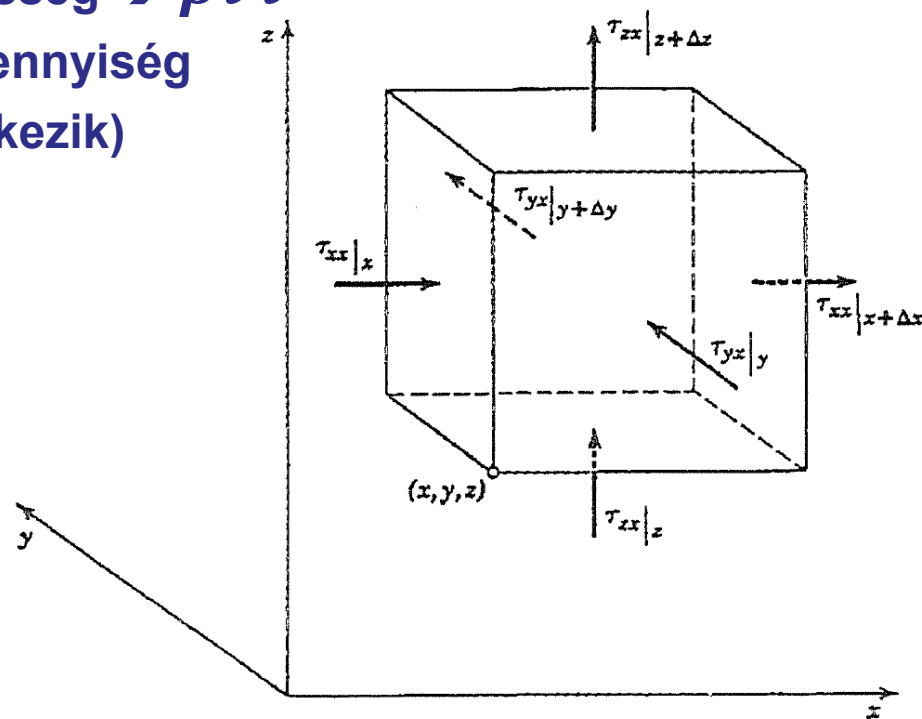
$\nabla \rho = 0 \rightarrow$ Térben állandó sűrűség

$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \rightarrow$ Időben állandó sűrűség(különbség), stacioner áramlás

- Kompresszibilis anyag áramlása csőben:



- [Impulzusáram időbeni változása]=[Belépő impulzusáram]-[Kilépő impulzusáram]+[A rendszerre ható összes erő]
- Impulzus
 - Konvekcióval (áramlás útján)
 - Molekuláris átadási mechanizmussal (sebességgradiens)
- Impulzus áram = tömegáram * sebesség $\rightarrow \rho \bar{v} \bar{v}$
(Az a sebesség, amivel a mozgásmennyiség a kis kocka valamelyik oldalához érkezik)



- X irányú konvekcióval a következő erőhatásokat okozza:**

$$\Delta y \Delta z (\rho v_x v_x|_x - \rho v_x v_x|_{x+\Delta x}) + \Delta x \Delta z (\rho v_y v_x|_y - \rho v_y v_x|_{y+\Delta y}) + \Delta x \Delta y (\rho v_z v_x|_z - \rho v_z v_x|_{z+\Delta z})$$

- Molekuláris transzportfolyamatok hatása:**

$$\Delta y \Delta z (\tau_{xx}|_x - \tau_{xx}|_{x+\Delta x}) + \Delta x \Delta z (\tau_{yx}|_y - \tau_{yx}|_{y+\Delta y}) + \Delta x \Delta y (\tau_{zx}|_z - \tau_{zx}|_{z+\Delta z})$$

- A rendszerre ható erők (nyomás + gravitáció):**

$$\Delta y \Delta z (p_x|_x - p_x|_{x+\Delta x}) + \rho g_x \Delta x \Delta y \Delta z$$

- Az impulzus x komponensének időbeni változása:**

$$\Delta x \Delta y \Delta z (\partial \rho v_x / \partial t)$$

- /:V**

- X irányban:**

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v_x = - \left(\frac{\partial}{\partial x} (\rho v_x v_x) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v_y v_x) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho v_z v_x) \right) - \left(\frac{\partial}{\partial x} (\tau_{xx}) + \frac{\partial}{\partial y} (\tau_{yx}) + \frac{\partial}{\partial z} (\tau_{zx}) \right) - \frac{\partial p}{\partial x} + \rho g_x$$

- Vektoros alakban:**

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \bar{\mathbf{v}} = - \nabla \cdot \rho \bar{\mathbf{v}} \bar{\mathbf{v}} - \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}} - \nabla p + \rho \bar{\mathbf{g}}$$

- Anyagi deriválttal:**

$$\rho \frac{D \bar{\mathbf{v}}}{Dt} = - \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}} - \nabla p + \rho \bar{\mathbf{g}}$$

- Az impulzusváltozást okozhatja:**

- Gravitáció
- Extrafeszültségek
- Nyomás

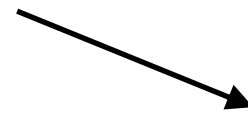
$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \bar{v} = -\nabla \cdot \rho \bar{v} \bar{v} - \nabla \cdot \bar{\tau} - \nabla p + \rho \bar{g}$$



Gyorsulás, gyakran elhagyható
stacioner esetben 0



Tehetetlenség hatása
irányváltáskor ébred



Gravitáció hatása
általában elhanyagolható

- Ezekkel az egyenlet gyakran egyszerűsíthető a következő alakra:**

$$\nabla p = -\nabla \cdot \bar{\tau}$$

- **[Belső és kinetikai energia időbeni megváltozása]=[Konvekcióval belépő belső és kinetikai energia]-[Konvekcióval kilépő belső és kinetikai energia]+[Vezetéssel átadott hőmennyiség]-[A rendszer által a környezeten végzett munka]**

(Nyitott instacioner rendszerre felírva, sugárzás, elektromágneses, radioaktív stb. hatások elhanyagolásával)

- **Kinetikai energia, mozgással kapcsolatos energia $\rightarrow \frac{1}{2} \rho v^2$**
- **Belső energia, molekuláris mozgások $\rightarrow \hat{U}$**
- **Potenciális energia $\rightarrow$ Munkával összevonva**

- **A térfogatban felhalmozódó belső és kinetikus energia:**

$$\Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial}{\partial t} (\rho \hat{U} + \frac{1}{2} \rho v^2)$$

- **Konvekciós tag:**

$$\begin{aligned} & \Delta y \Delta z \{ v_x (\rho \hat{U} + 1/2 \rho v^2) \big|_{x-} - v_x (\rho \hat{U} + 1/2 \rho v^2) \big|_{x+ \Delta x} \} \\ & + \Delta x \Delta z \{ v_y (\rho \hat{U} + 1/2 \rho v^2) \big|_{y-} - v_y (\rho \hat{U} + 1/2 \rho v^2) \big|_{y+ \Delta y} \} \\ & + \Delta x \Delta y \{ v_z (\rho \hat{U} + 1/2 \rho v^2) \big|_{z-} - v_z (\rho \hat{U} + 1/2 \rho v^2) \big|_{z+ \Delta z} \} \end{aligned}$$

- **Vezetési tag (kondukció), $q \rightarrow$ hőáram**

$$\Delta y \Delta z \{ q_x \big|_{x-} - q_x \big|_{x+ \Delta x} \} + \Delta x \Delta z \{ q_y \big|_{y-} - q_y \big|_{y+ \Delta y} \} + \Delta x \Delta y \{ q_z \big|_{z-} - q_z \big|_{z+ \Delta z} \}$$

- **Környezeten végzett munka**

- **Térfogati erők ellen $\rightarrow$ gravitáció**
- **Felületi erők ellen $\rightarrow$ Nyomás és viszkózus erők**

- **A gravitáció ellen végzett munka:**

$$- \rho \Delta x \Delta y \Delta z (v_x g_x + v_y g_y + v_z g_z)$$

- **A nyomással szemben végzett munka:**

$$\Delta y \Delta z \{ (p v_x) |_{x+\Delta x} - (p v_x) |_x \} + \Delta x \Delta z \{ (p v_y) |_{y+\Delta y} - (p v_y) |_y \} + \Delta x \Delta y \{ (p v_z) |_{z+\Delta z} - (p v_z) |_z \}$$

- **A viszkózus erőkkel szemben végzett munka:**

$$\begin{aligned} & \Delta y \Delta z \{ (\tau_{xx} v_x + \tau_{xy} v_y + \tau_{xz} v_z) |_{x+\Delta x} - (\tau_{xx} v_x + \tau_{xy} v_y + \tau_{xz} v_z) |_x \} \\ & + \Delta x \Delta z \{ (\tau_{yx} v_x + \tau_{yy} v_y + \tau_{yz} v_z) |_{y+\Delta y} - (\tau_{yx} v_x + \tau_{yy} v_y + \tau_{yz} v_z) |_y \} \\ & + \Delta x \Delta y \{ (\tau_{zx} v_x + \tau_{zy} v_y + \tau_{zz} v_z) |_{z+\Delta z} - (\tau_{zx} v_x + \tau_{zy} v_y + \tau_{zz} v_z) |_z \} \end{aligned}$$

- V-vel való osztás után, a határátmenetet elvégezve**

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \hat{U} + \frac{1}{2} v^2) = - \left(\nabla \cdot \rho \bar{v} \left(\hat{U} + \frac{1}{2} v^2 \right) \right) - (\nabla \cdot \bar{q}) + \rho(\bar{v} \cdot \bar{g}) - (\nabla \cdot p \bar{v}) - (\nabla \cdot (\bar{\tau} \cdot \bar{v}))$$

↓
Egységnyi térf.
energianyereségi
sebessége
↓
Egységnyi térfogatba
konvekcióval és vezetéssel
belépő energiaáram
↓
Gravitációval, nyomással, viszkózus
erőkkel szembeni munkavégzési
sebesség

- A hőmérséklet mérhető, a belső energia helyett használjuk ezt**

$$\rho c_v \frac{DT}{Dt} - \rho c_v \left[\frac{\partial T}{\partial t} + (\bar{v} \cdot \nabla) T \right] = -(\nabla \cdot \bar{q}) - T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_v (\nabla \cdot \bar{v}) + (\bar{\tau} : \nabla \bar{v})$$

↙
Helyi energia változás
az időben
↘
Áramlás által szállított
energia
↘
Hőforrások és
nyelők
↘
Reverzibilis térfogatváltozási
munka
↘
Viszkózus disszipáció

- **Reológiai probléma**

- Ismeretlenek: v_x , v_y , v_z , η , p , T , ρ

- ➔ **Megoldás:**

- **Anyagtól független egyenletek (Megmaradási egyenletek)**

- Impulzus egyenlet, 3 irányban
 - Folytonosság
 - Energia egyenlet

- **Anyagtól függő egyenletek (Állapotegyenletek)**

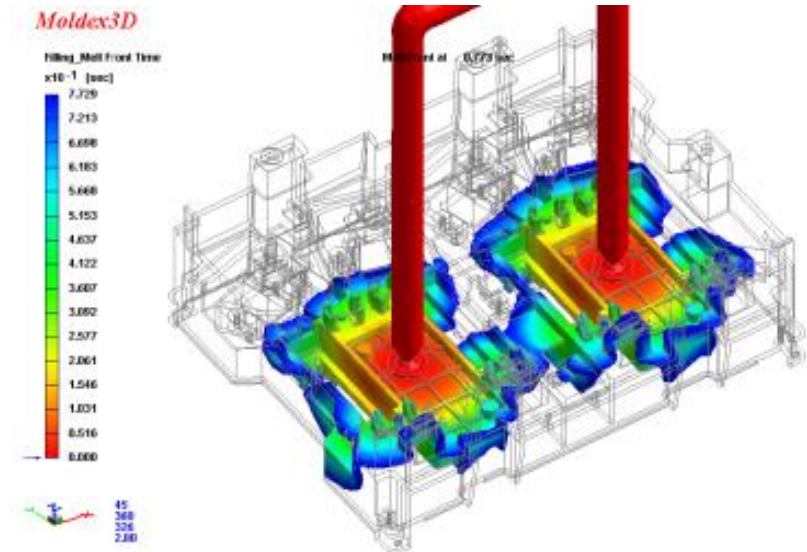
- Reológiai állapotegyenlet
 - Fizikai állapotegyenlet

- **Zárt alakban gyakran egyszerű geometriák esetén sem írható fel a megoldás**

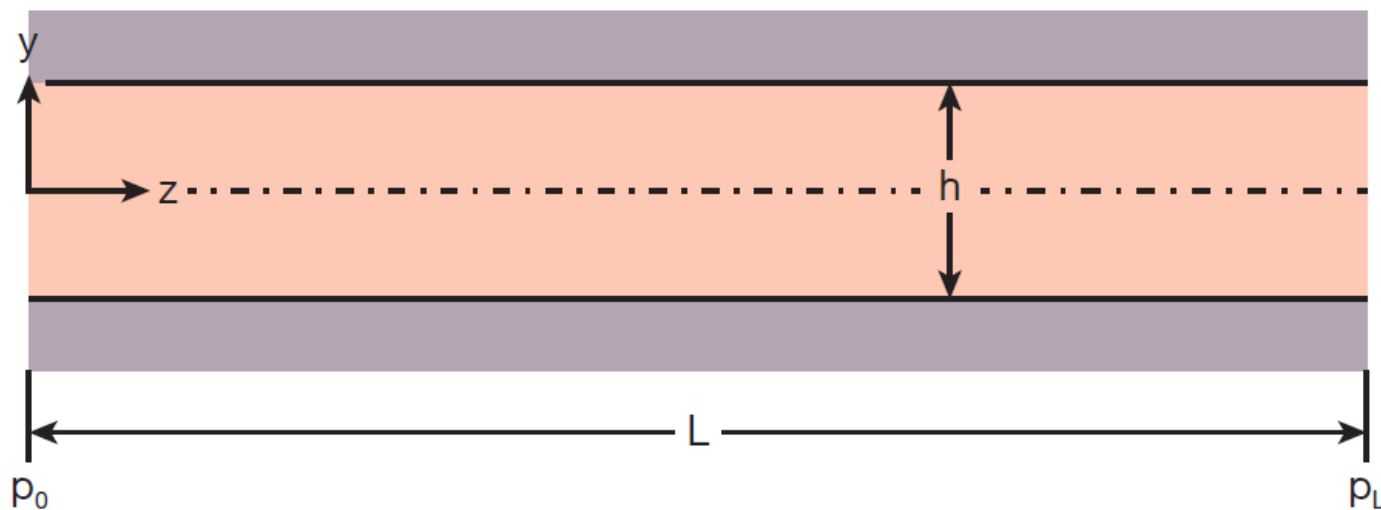
- ➔ **Közelítő módszerek**

- ➔ **Kezdeti és peremfeltételek**

- ➔ **Mérés során egyszerű geometriák alkalmazása**



- (1D-s áramlások)
- 1D sík áramlás (résáramlás)



$$u_z(y) = \frac{h^2}{8\mu} \frac{dp}{dz} \left[1 - \left(\frac{2y}{h} \right)^2 \right] = \frac{h^2}{8\mu} \frac{\Delta p}{L} \left[1 - \left(\frac{2y}{h} \right)^2 \right]$$

- (1D-s áramlások)
- Áramlás csőben
- Áramlás koncentrikus hengerek között
- Áramlás párhuzamos lapok között préselés hatására

