

Εκτενής περίληψη στα ελληνικά Διπλωματικής Εργασίας

Κοντογιάννης Αθανάσιος

1059799

Πρόβλεψη θερμικής αγωγιμότητας εποξικών συγκολλητικών ουσιών ενισχυμένων με γραφιτικά νανοσωματίδια

Περιεχόμενα

Πίνακας επεξήγησης ορολογίας	2
1. Εισαγωγή.....	3
2. Αναλυτικό, Μικρο-Μηχανικό Μοντέλο-Πρώτη προσέγγιση	4
2.1 Αποτελέσματα	7
3.2 Συμπεράσματα	8
3. Αριθμητικό μοντέλο (DIGIMAT)	9
4.1 Αποτελέσματα και Συμπεράσματα.....	10
4. Αριθμητικό Μοντέλο με Python αλγόριθμο σε ABAQUS	11
5.1 Διακριτοποίηση	11
5.2 Πως λειτουργεί ο εσωτερικός αλγόριθμος διακριτοποίησης	12
5.3 Τα προβλήματα με την διακριτοποίηση	13
5.5 Αποτελέσματα και Συμπεράσματα.....	14

Πίνακας επεξήγησης ορολογίας

CNT	Νανοσωλήνας άνθρακα
GNP	Νανοπλακίδιο γραφενίου
RVE	Αντιπροσωπευτικό στοιχείο όγκου
MLG	Πολυστρωματικό γραφένιο
FEA	Ανάλυση με πεπερασμένα στοιχεία
Global seed size	Ενιαίο μέγεθος στοιχείου
GO	Οξείδιο γραφίτη
Tg	Θερμοκρασία υάλωσης
EG	Διογκωμένος γραφίτης
MWCNT	Νανοσωλήνες πολλαπλών τοιχωμάτων
SWCNT	Νανοσωλήνας μονού τοιχώματος
ITR	Θερμική Αντίσταση διεπιφάνειας
2-D	δισδιάστατο
Phonos	φωνόνια
PNC	Πολυμερή νάνο-ενισχυμένα υλικά
Aspect Ratio	Γεωμετρικός λόγος αναλογίας

1. Εισαγωγή

Η διπλωματική αυτή εκπονήθηκε στα πλαίσια ανάγκης πρόβλεψης της θερμικής αγωγιμότητας σε σύνθετα πολυμερή θερμοσκυρηνόμενης μήτρας με νάνο-σύνθετα σωματίδια άνθρακα. Αρχικά γίνεται μια εκτενής περιγραφή του θεωρητικού υπόβαθρου της χρησιμότητας των σύνθετων υλικών καθώς και των υλικών και των μεθόδων που χρησιμοποιήθηκαν. Εφόσον η παρούσα διπλωματική εργασία, επικεντρώνεται στην θερμική αγωγιμότητα των σύνθετων υλικών, η παρουσίαση του θεωρητικού υπόβαθρου περιστρέφεται γύρω από αυτή, αλλά γίνονται και αναφορές στις μηχανικές και ηλεκτρικές ιδιότητες των υλικών. Στην συνέχεια γίνεται μια εκτενής βιβλιογραφική ανασκόπηση με σκοπό να βρεθούν οι τρόποι προσέγγισης που έχουν χρησιμοποιηθεί στο παρελθόν, να κριθεί η αποτελεσματικότητα τους και να ληφθούν υπόψη στο σχεδιασμό του τρόπου προσέγγισης του θέματος από τον συγγραφέα. Έπειτα παρουσιάζονται οι διαφορετικοί τρόποι προσέγγισης που ακολουθήθηκαν μαζί με τους λόγους που επιλέχθηκαν εξ αρχής, τα αποτελέσματα που εξήγαγαν και τέλος τα προβλήματα και οι λόγοι που κρίθηκαν μη αποτελεσματικοί, τι συμπεράσματα προσέφεραν και πως οδήγησαν ο καθένας διαδοχικά, στον τελικό τρόπο εργασίας.

2. Αναλυτικό, Μικρο-Μηχανικό Μοντέλο-Πρώτη προσέγγιση

Η αρχική ιδέα για την ανάπτυξη ενός προγνωστικού μοντέλου για τη θερμική αγωγιμότητα πολυμερών νάνο-εγκλεισμάτων άνθρακα ήταν να χρησιμοποιηθεί ένα υπάρχον μικρομηχανικό μοντέλο. Οι Κωσταγιαννακοπούλου Χ. κ.α. [1], στην έρευνά τους συνέκριναν τα περισσότερα από τα υπάρχοντα μικρομηχανικά μοντέλα για την πρόβλεψη της θερμικής αγωγιμότητας. Τα μοντέλα χωρίστηκαν σε 3 ομάδες όσον αφορά το πλήθος των μεταβλητών και των χαρακτηριστικών τιμών του σύνθετου υλικού που λαμβάνουν υπόψη. Στην πρώτη ομάδα λαμβάνονται υπόψη μόνο η θερμική αγωγιμότητα των υλικών και τα κλάσματα όγκου τους. Στη δεύτερη ομάδα, τα μοντέλα λαμβάνουν υπόψη τους και το μέγεθος, τη γεωμετρία, τις διαστάσεις και τον λόγο διαστάσεων των εγκλεισμάτων. Στην τελευταία ομάδα, τα μοντέλα λαμβάνουν επίσης υπόψη τη διεπιφανειακή θερμική αντίσταση μεταξύ της μήτρας και του υλικού ενίσχυσης.

Όπως γίνεται αντιληπτό, η πρώτη ομάδα μοντέλων τείνει να υπερεκτιμά τη θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού, καθώς αυτά δεν καταφέρνουν να συλλάβουν τα πολύπλοκα χαρακτηριστικά του νάνο σύνθετου υλικού και έτσι θεωρούν μια υπεραπλουστευμένη και ιδανική κατάσταση, η οποία αν ίσχυε, θα οδηγούσε σε τεράστιες τιμές θερμικής αγωγιμότητας. Συνεπώς η επιλογή αναλυτικού μοντέλου που κάνει τις προαναφερθείσες παραδοχές, δεν υπάρχει λόγος να κριθεί ικανό να προβλέψει την θερμική αγωγιμότητα του επιθυμητού υλικού.

Στο ακριβώς αντίθετο άκρο του φάσματος, στην τρίτη ομάδα όπου ανήκει το μοντέλο του Phraser, η θερμική αγωγιμότητα είναι επίσης λανθασμένα προβλεπόμενη. Αυτό το μοντέλο υποεκτιμά στην πραγματικότητα τη θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού. Έχει παρατηρηθεί ότι καθώς αυξάνεται η φόρτιση του υλικού ενίσχυσης, λόγω του σχηματισμού συσσωματωμάτων εντός της μήτρας, ο πραγματικός λόγος διαστάσεων του εγκλείσματος μειώνεται. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα τη μείωση της επιφάνειας επαφής μεταξύ του εγκλείσματος και της μήτρας με τη σειρά του, σε αυξημένη θερμική αντίσταση διεπιφάνειας. Δεδομένου ότι το μοντέλο του Phraser φαίνεται να μην επηρεάζεται με αύξηση των τιμών της θερμικής αντίστασης διεπιφάνειας πάνω από 10⁻⁸. Έτσι, αυτό αποτυγχάνει να συλλάβει την αύξηση της θερμικής αγωγιμότητας του σύνθετου υλικού καθώς αυξάνεται το ποσοστό ενίσχυσης. Συνεπώς, όλα τα παραπάνω πρέπει επίσης να ληφθούν υπ' όψιν στην επιλογή του μοντέλου.

Από τη δεύτερη ομάδα το μοντέλο των Lewis και Nielsen στην πραγματικότητα ξεχωρίζει, καθώς, ενώ δεν λαμβάνει υπόψη τη διεπιφανειακή θερμική αντίσταση, και περιλαμβάνει δύο νέες παραμέτρους, μία για τον προσανατολισμό και μία για τη συσκευασία των υλικών ενίσχυσης, οι οποίες, αν βελτιστοποιηθούν, έχει αποδειχθεί ότι προβλέπουν με επιτυχία τη θερμική αγωγιμότητα ενός PNC. Ωστόσο, η μέθοδος αυτή προσαρμόζει το αναλυτικό μοντέλο σε ένα συγκεκριμένο σύνολο πειραματικών δεδομένων, οπότε οι δυνατότητες πρόβλεψης δεν είναι εγγυημένες και συνεπώς η επιλογή μοντέλου που δεν λαμβάνει υπ' όψιν την θερμική αντίσταση διεπιφάνειας, κρίνεται όχι συνετή.

Ύστερα από την βιβλιογραφική έρευνα, βρέθηκε το μικρομηχανικό αναλυτικό μοντέλο του Nan, αλλά με περιορισμένη εφαρμογή σε εγκλείσματα γραφενίου ή CNT μέσα σε σύνθετα υλικά εποξειδικής μήτρας. Έτσι, το πρώτο μέρος της παρούσας διπλωματικής εργασίας ήταν να εφαρμοστεί κατάλληλα η εξίσωση του μοντέλου, να υπολογισθεί η θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού ενισχυμένου με γραφένιο και στη συνέχεια να διασταυρωθούν τα αποτελέσματα με τα αντίστοιχα πειραματικά αποτελέσματα.

Η εξίσωση του μοντέλου για τυχαία προσανατολισμένα ελλειπτικά σωματίδια έχει ως εξής:

$$K^* = K_m \frac{3 + f[2\beta_{11}(1 - L_{11}) + \beta_{33}(1 - L_{33})]}{3 - f[2\beta_{11}L_{11} + \beta_{33}L_{33}]}$$

όπου:

K_m : η θερμική αγωγιμότητα της μήτρας

- $\beta_{ii} = \frac{K_{ii}^c - K_m}{K_m + L_{ii}(K_{ii}^c - K_m)}$

L_{ii} : γεωμετρικός παράγοντας που υπολογίζεται με:

$$L_{11} = L_{22} = \begin{cases} \frac{p^2}{2(p^2 - 1)} - \frac{p}{2(p^2 - 1)^{\frac{3}{2}}} \cosh^{-1} p, \text{ for } p > 1 \\ \frac{p^2}{2(p^2 - 1)} + \frac{p}{2(1 - p^2)^{\frac{3}{2}}} \cosh^{-1} p, \text{ for } p < 1 \end{cases} \quad \text{and } L_{33} = 1 - 2L_{11}$$

όπου $p = \frac{a_3}{a_1}$ και a_3, a_1 αντίστοιχα είναι οι ακτίνες του ελλειψοειδούς κατά μήκος των X'_3 και X'_1 αξόνων συμμετρίας.

K_{ii}^c : είναι η αγωγιμότητα του μοναδιαίου δομικού κελιού του σύνθετου υλικού (σωματίδιο + διεπιφάνεια) και υπολογίζεται ως εξής:

Θεωρώντας ενδιάμεση φάση με πάχος δ και αγωγιμότητα K_s :

$$K_{ii}^c = K_s \frac{K_s + L_{ii}(K_p - K_s)(1 - u) + u(K_p - K_s)}{K_s + L_{ii}(K_p - K_s)(1 - u)} \quad \text{με } u = \frac{a_1^2 a_3}{(a_1 + \delta)^2 (a_3 + \delta)}$$

και K_p : η αγωγιμότητα του σωματιδίου

Θεωρώντας $\delta \rightarrow 0$ and $K_s \rightarrow 0$ και ότι οι θερμικές ιδιότητες της ενδιάμεσης φάσης συγκεντρώνονται σε μια επιφάνεια μηδενικού πάχους που χαρακτηρίζεται από την ακτίνα Kapitza ως εξής: a_k as:

$$\alpha_k = R_{Bd} K_m \text{ were } R_{Bd} = \lim_{\substack{\delta \rightarrow 0 \\ K_s \rightarrow 0}} \frac{\delta}{K_s}$$

Εναλλακτικά: $\alpha_k = \frac{K_m}{G_k}$ (με G_k τη θερμική αγωγιμότητα της ενδιάμεσης φάσης σωματιδίων/μήτρας).²

Τότε:

$$K_{ii}^c = \frac{K_p}{1 + \frac{\gamma L_{ii} K_p}{K_m}} \mu \varepsilon \gamma = \begin{cases} \left(2 + \frac{1}{p}\right) a \text{ for } p \geq 1 \\ (1 + 2p) a \text{ for } p \leq 1 \end{cases} \left(\text{were } p = \frac{a_3}{a_1} \right), \text{ and } \alpha = \begin{cases} \frac{\alpha_k}{a_1} \text{ for } p \geq 1 \\ \frac{\alpha_k}{a_3} \text{ for } p \leq 1 \end{cases}$$

Ο όρος f αντιπροσωπεύει το κλάσμα του όγκου του σύνθετου υλικού που καταλαμβάνουν τα σωματίδια

Τέλος ο όρος $\langle \cos^2 \theta \rangle$ υπολογίζεται με:

$$\langle \cos^2 \theta \rangle = \frac{\int \rho(\theta) \cos^2 \theta \sin \theta d\theta}{\int \rho(\theta) \sin \theta d\theta},$$

όπου θ είναι η γωνία μεταξύ του άξονα X_3 του υλικού και του άξονα συμμετρίας X'_3 του σωματιδίου ενίσχυσης και $\rho(\theta)$ είναι μια συνάρτηση κατανομής που περιγράφει τον προσανατολισμό των ελλειψοειδών σωματιδίων.

Αυτός ο σύνθετος όρος έχει υπολογιστεί από τον συγγραφέα για την τυχαία τοποθέτηση ελλειψοειδών σωματιδίων ως εξής:

$$\langle \cos^2 \theta \rangle = 1/3$$

2.1 Αποτελέσματα

Παρατηρώντας τον Πίνακας 1 τα αποτελέσματα της θερμικής αγωγιμότητας φαίνονται πολύ υψηλές.

wf	wm	vf	Keff(W/mK)	wf %
0.005	0.995	0.002881	0.596988183	0.5
0.01	0.99	0.005775	0.842396045	1
0.03	0.97	0.017473	1.838819355	3
0.05	0.95	0.029374	2.859559408	5
0.1	0.9	0.060052	5.523820642	10
0.15	0.85	0.092123	8.361189988	15

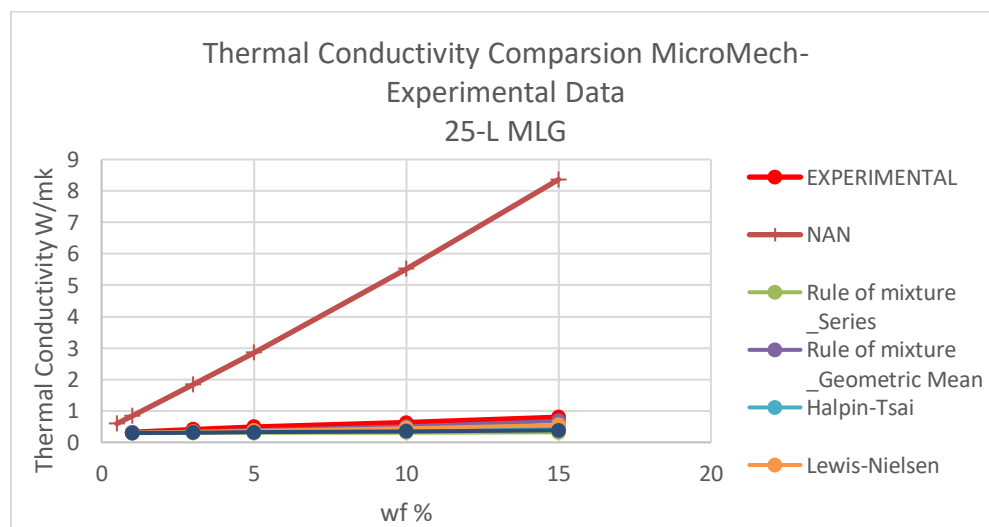
Πίνακας 1 Αποτελέσματα Αναλυτικού Μοντέλου

Στη συνέχεια τις συγκρίνουμε με τις τιμές των αναλυτικών μοντέλων από την [1] και συγκεντρώνουμε τα αποτελέσματα στον Πίνακας 2

wf %	EXPERIMENTAL	Nan	Rule of mixture _Series	Rule of mixture _Geometric Mean	Halpin-Tsai	Lewis-Nielsen	Prasher
1	0.32	0.84	0.29	0.31	0.30	0.30	0.29
3	0.41	1.84	0.30	0.34	0.32	0.33	0.31
5	0.49	2.86	0.30	0.38	0.34	0.37	0.32
10	0.63	5.52	0.31	0.50	0.39	0.45	0.35
15	0.8	8.36	0.32	0.68	0.46	0.55	0.38

Πίνακας 2 Αποτελέσματα αναλυτικών μοντέλων και πειραματικών αποτελεσμάτων

Στη συνέχεια απεικονίζουμε τα αποτελέσματα των αναλυτικών μοντέλων και των πειραματικών δεδομένων στο Διάγραμμα 1.



Διάγραμμα 1 Σύγκριση Αναλυτικών Μοντέλων και πειραματικών αποτελεσμάτων

3.2 Συμπεράσματα

- το αναλυτικό μοντέλο του Nan [2], υπερεκτιμά σημαντικά τις τιμές της θερμικής αγωγιμότητας του σύνθετου υλικού ενισχυμένου με γραφένιο.
- Το αναλυτικό μοντέλο δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την πρόβλεψη της θερμικής αγωγιμότητας των ενισχυμένων με άνθρακα νάνο πολυμερών.

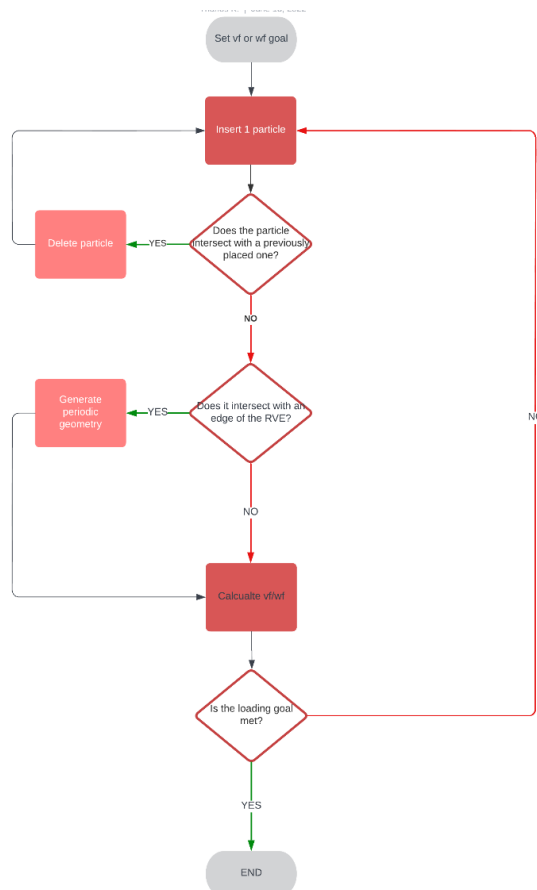
Ο πρώτος και σημαντικότερος λόγος που το μοντέλο του Nan υπερεκτιμά τη θερμική αγωγιμότητα καθώς αυξάνεται το ποσοστό ενίσχυσης, είναι ότι το αναλυτικό μοντέλο, υποθέτει ότι τα σωματίδια είναι τέλεια διασκορπισμένα μέσα στη μήτρα και ότι όλα τους διατηρούν τις αρχικές γεωμετρικές και θερμικές τους ιδιότητες. Ωστόσο, έχει παρατηρηθεί [3] ότι όταν τα σωματίδια ενσωματώνονται στη μήτρα (ανεξάρτητα από το αν είναι γραφένιο ή νανοσωλήνες), τείνουν να έλκονται μεταξύ τους και να σχηματίζουν μεγάλα συσσωματώματα. Αυτό μειώνει την επιφάνεια των σωματιδίων που βρίσκεται σε επαφή με τη μήτρα, γεγονός που έχει ως αποτέλεσμα τη μείωση της θερμικής αγωγιμότητάς τους (αφού οι υψηλές ιδιότητές τους αποδίδονται κυρίως στο μικρό τους μέγεθος). Αυτό παρεμποδίζει τη μεταφορά θερμικής ενέργειας από το υλικό της μήτρας στην επιφάνεια ενίσχυσης.

Ο δεύτερος λόγος στον οποίο αποδίδεται αυτή η ασυμφωνία των αποτελεσμάτων, είναι ότι το μοντέλο κατασκευάστηκε στα τέλη της δεκαετίας του 1990, όπου τα νανοσωματίδια βρίσκονταν ακόμη σε πρώιμο ερευνητικό στάδιο και δεν αποτελούσαν ρεαλιστική επιλογή για να χρησιμοποιηθούν ως ενισχυτικά για σύνθετα υλικά. Το μοντέλο λοιπόν, υλοποιήθηκε και επικυρώθηκε για σωματίδια σε μικροκλίμακα με ένα αρκετά περιορισμένο εύρος αναλογιών διαστάσεων. Έτσι, αναμένεται ότι το μοντέλο δεν συμπεριφέρεται σωστά για σωματίδια σε νανο κλίμακα με ακραίες τιμές λόγου διαστάσεων (της τάξης του 10^{-3}).

3. Αριθμητικό μοντέλο (DIGIMAT)

Ύστερα από τη διερεύνηση της πιθανής χρήσης του αναλυτικού μοντέλου του Nan και λαμβάνοντας υπόψη την [1], κατέστη προφανές ότι τα αναλυτικά μοντέλα δεν μπορούν να προβλέψουν με επιτυχία και αξιοπιστία την ωφέλιμη θερμική αγωγιμότητα των νανο σύνθετων υλικών. Έτσι, η επόμενη πιο λογική (από άποψη χρόνου και υπολογιστικού κόστους) επιλογή ήταν να προσπαθήσουμε να προσομοιώσουμε το νανο-σύνθετο υλικό στη μεσοκλίμακα, χρησιμοποιώντας ένα αντιπροσωπευτικό στοιχείο όγκου (ΑΣΟ).

Το Digimat είναι ένα πολύ φιλικό προς το χρήστη και απλό λογισμικό όταν πρόκειται για τη δημιουργία ενός ΑΣΟ για ένα σύνθετο υλικό με γνωστές ιδιότητες. Όταν πρόκειται για σύνθετα υλικά με σωματίδια, το DIGIMAT διαθέτει έναν ενσωματωμένο αλγόριθμο που τοποθετεί τυχαία τα σωματίδια εντός της μήτρας, πραγματοποιεί έναν έλεγχο για το αν το εισαγόμενο σωματίδιο τέμνει κάποιο προ υπάρχον (εάν έχει επιλεγεί η σχετική επιλογή από τον χρήστη) και σταματά όταν επιτευχθεί ο στόχος του ποσοστού ενίσχυσης. Το διάγραμμα ροής του αλγορίθμου απεικονίζεται στη Εικόνα 1.



Εικόνα 1 Αλγόριθμος λειτουργίας DIGIMAT

4.1 Αποτελέσματα και Συμπεράσματα

- Μπορεί να οριστεί μόνο ένα ενιαίο μέγεθος πεπερασμένου στοιχείου, οπότε δεν είναι δυνατή η δημιουργία πλέγματος πιο πυκνού στα άκρα του ΑΣΟ.

Ένα πιο αραιό πλέγμα στα άκρα του ΑΣΟ είναι μια λογική επιλογή, δεδομένου ότι η γεωμετρία εκεί είναι πολύ απλή, και είναι περιοχές που παρουσιάζουν το λιγότερο ενδιαφέρον όσον αφορά την απαιτούμενη ακρίβεια των αποτελεσμάτων. Με τη δημιουργία ενός προσαρμοστικού πλέγματος, μπορεί να επιτευχθεί η απαιτούμενη ακρίβεια των αποτελεσμάτων στους νάνο-σωλήνες και στις ενδιάμεσες φάσεις, μπορεί να δημιουργηθεί πλέγμα στη πολύπλοκη γεωμετρία των εγκλεισμάτων στο εσωτερικό της μήτρας διατηρώντας τις λεπτομέρειες της γεωμετρίας τους, και μπορεί να εξοικονομηθεί τεράστιο υπολογιστικό κόστος με τη δραστική μείωση του αριθμού των στοιχείων.

- Το εσωτερικό εργαλείο διακριτοποίησης του DIGIMAT, είναι αδύναμο και δεν μπορεί να αντιμετωπίσει τις περίπλοκες γεωμετρίες που προκύπτουν από τις ενισχύσεις σωματιδίων.

Ακόμη και αν ο αριθμός των στοιχείων ήταν μεγαλύτερος από αυτόν που θα ήταν αν χρησιμοποιούνταν μια προσαρμοστική τεχνική πλέγματος, το μοντέλο θα μπορούσε να λειτουργήσει και να δώσει αποτελέσματα. Ωστόσο, λόγω του αδύναμου εσωτερικού εργαλείου διακριτοποίησης του DIGIMAT, εμφανίζεται το ακόλουθο μήνυμα σφάλματος (;;) κατά την προσπάθεια δημιουργίας του πλέγματος. Αυτό οδηγεί στην ανάγκη μεγάλης μείωσης του μεγέθους των στοιχείων στο σημείο αύξησης του απαιτούμενου αριθμού στοιχείων σε περισσότερα από 100 εκατομμύρια. Όπως γίνεται αντιληπτό, το λογισμικό δεν μπορεί να χειριστεί τον υπολογισμό την εμφάνιση ή την αντιγραφή από τη μνήμη τυχαίας πρόσβασης στη μνήμη αποθήκευσης και σε κάποιο σημείο, είτε αποτυγχάνει να διακριτοποιήσει είτε τερματίζει.

- Εξ όσων γνωρίζει ο συγγραφέας, ενώ το DIGIMAT παρέχει έναν πολύ εύκολο και απλό τρόπο για τη δημιουργία περιοδικού ΑΣΟ για σύνθετα υλικά ενισχυμένα με σωματίδια, δεν μπορεί να εκτελεστεί παραμετρικά σε ένα αυτοματοποιημένο σύστημα.

Αυτό περιορίζει σημαντικά τις περιπτώσεις που μπορεί να αξιοποιηθεί το DIGIMAT. Μια διαδικασία βελτιστοποίησης θα απαιτούσε από τον χρήστη να αλλάξει τις παραμέτρους του μοντέλου και στη συνέχεια να το εκτελέσει ξανά χειροκίνητα. Αυτό καθιστά αδύνατη την εκπαίδευση ενός αλγόριθμου μηχανικής εκμάθησης, καθώς θα απαιτούσε τη δημιουργία ενός μεγάλου συνόλου δεδομένων. Για όλους τους παραπάνω λόγους, η πορεία αυτής της εργασίας έπρεπε να αλλάξει και πάλι, προκειμένου να δημιουργηθεί ένα έγκυρο μοντέλο που μπορεί να ενσωματωθεί σε ένα σχήμα βελτιστοποίησης ή να εκτελεστεί παραμετρικά για τη δημιουργία ενός συνόλου δεδομένων, αν αυτό απαιτείται. Η λύση που βρέθηκε παρουσιάζεται στην επόμενη παράγραφο.

4. Αριθμητικό Μοντέλο με Python αλγόριθμο σε ABAQUS

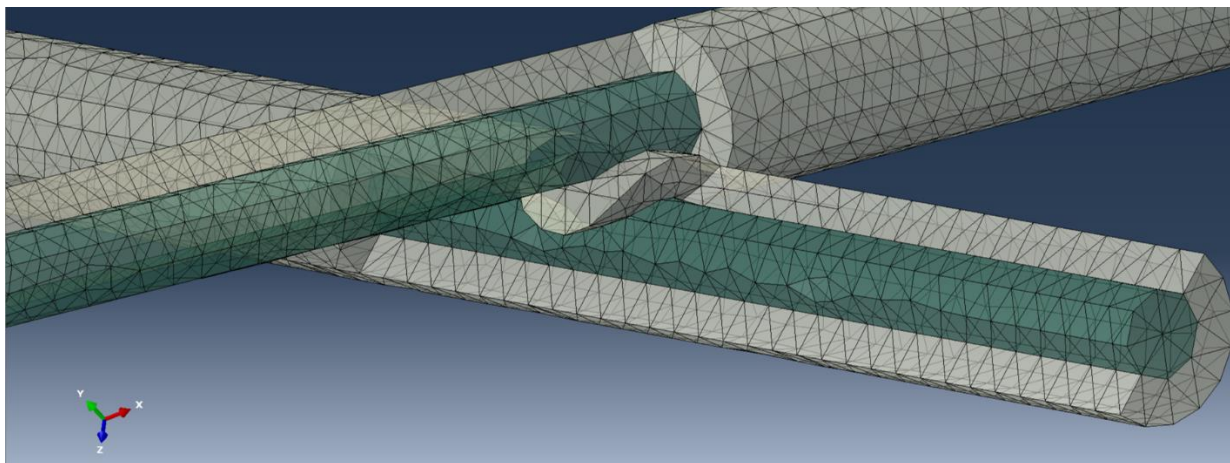
Όπως εξηγήθηκε στην προηγούμενη ενότητα, παρόλο που το λογισμικό DIGIMAT είναι απλό, διαθέτει πολλές διαφορετικές ρυθμίσεις και μπορεί να παράγει σχετικά γρήγορα ένα ΑΣΟ για ένα σύνθετο υλικό, αυτό δεν μπορεί να εκτελεστεί παραμετρικά. Κάθε δοκιμή πρέπει να ρυθμίζεται και να εκτελείται χειροκίνητα. Επίσης, το DIGIMAT διαθέτει ένα αδύναμο εργαλείο διακριτοποίησης, το οποίο δεν μπορεί να δημιουργήσει ένα προσαρμοστικό πλέγμα, αφού η μόνη επιλογή είναι ο καθορισμός ενός ενιαίου μεγέθους πεπερασμένου στοιχείου. Αυτό είναι ένα πολύ σοβαρό ζήτημα ειδικά για τα ΑΣΟ των νανο σύνθετων υλικών, καθώς η γεωμετρία που σχηματίζεται από τα διασταυρούμενα σωματίδια, χρειάζεται ένα πολύ λεπτό πλέγμα προκειμένου να διακριτοποιηθεί. Ωστόσο, οι πλούσιες σε μήτρα περιοχές που δεν περιλαμβάνουν πολλά ή και καθόλου εγκλείσματα, χρειάζονται μόνο μέτρια πυκνότητα πλέγματος. Έτσι, για να διακριτοποιηθεί σωστά το ΑΣΟ, χρειάζεται πιο αραιό πλέγμα στις περιοχές πλούσιες σε μήτρα και πιο πυκνό για τα εγκλείσματα και τις ενδιάμεσες φάσεις τους. Έτσι, η χρήση ενός εξωτερικού εργαλείου διακριτοποίησης και επίλυσης είναι απαραίτητά για τον υπολογισμό της θερμικής αγωγιμότητας του ΑΣΟ. Συνδυάζοντας αυτό με την ανάγκη παραμετρικής δημιουργίας της γεωμετρίας και εκτέλεσης της προσομοίωσης, κρίθηκε κατάλληλη η ιδέα της δημιουργίας ενός αλγορίθμου που παράγει τη γεωμετρία του ΑΣΟ.

Ύστερα από βιβλιογραφική έρευνα, διαπιστώθηκε ότι πολλοί [4, 5], ερευνητές έχουν αναπτύξει τα δικά τους σενάρια για τη δημιουργία της γεωμετρίας και στη συνέχεια εισάγουν τη γεωμετρία σε ένα υπάρχον πακέτο Ανάλυσης με Πεπερασμένα Στοιχεία (ΑΠΣ) για την διακριτοποίηση, την επιβολή οριακών συνθηκών και τέλος για τον υπολογισμό της θερμικής αγωγιμότητας.

Ο αρχικός στόχος της παρούσας εργασίας ήταν η προσομοίωση πολυμερών ενισχυμένων με πολυστρωματικά γραφένια (ΠΓΣ). Ωστόσο, η προσομοίωσή τους αποδείχθηκε μεγάλη πρόκληση και ο στόχος της παρούσας διατριβής μετατοπίστηκε στην προσομοίωση σύνθετων με νανοσωλήνες άνθρακα (ΝΣΑ), καθώς έχουν λιγότερο πολύπλοκη γεωμετρία, παρουσιάζουν καλή αύξηση της θερμικής αγωγιμότητας και αν επιτευχθεί η προσομοίωσή τους, θα βοηθήσουν ώστε να ανοίξει ο δρόμος για την προσομοίωση όλων των ειδών και σχημάτων νάνο-σωματιδίων.

5.1 Διακριτοποίηση

Η μεγαλύτερη πρόκληση όταν πρόκειται για τη μοντελοποίηση σύνθετων υλικών με σωματίδια, είναι η διακριτοποίηση τους, λόγω των πολύπλοκων γεωμετριών που προκύπτουν από την τομή των σωματιδίων και την ενσωμάτωσή τους στη μήτρα. Αυτό δημιουργεί εξαιρετικά μικρά (σε σύγκριση με το μέσο μέγεθος του μη διασταυρούμενου κελιού) και πολύπλοκα κελιά Εικόνα 2



Εικόνα 2 Διασταυρούμενοι ΝΣΑ

Κατά την προσπάθεια διακριτοποίησης της γεωμετρίας με τον αυτοματοποιημένο αλγόριθμο του ABAQUS για τετραεδρικά στοιχεία, εμφανίζεται πάντα ένα σφάλμα, είτε ότι η συγχώνευση του πλέγματος απέτυχε, είτε ότι ορισμένες περιοχές δεν μπορούν να διακριτοποιηθούν. Έτσι, η κατανόηση του τρόπου με τον οποίο λειτουργεί ο εσωτερικός αλγόριθμος διακριτοποίησης του ABAQUS κρίθηκε ζωτικής σημασίας, προκειμένου στη συνέχεια να βρεθεί ένας τρόπος ώστε να διακριτοποιηθεί οποιαδήποτε πολύπλοκη γεωμετρία.

5.2 Πως λειτουργεί ο εσωτερικός αλγόριθμος διακριτοποίησης

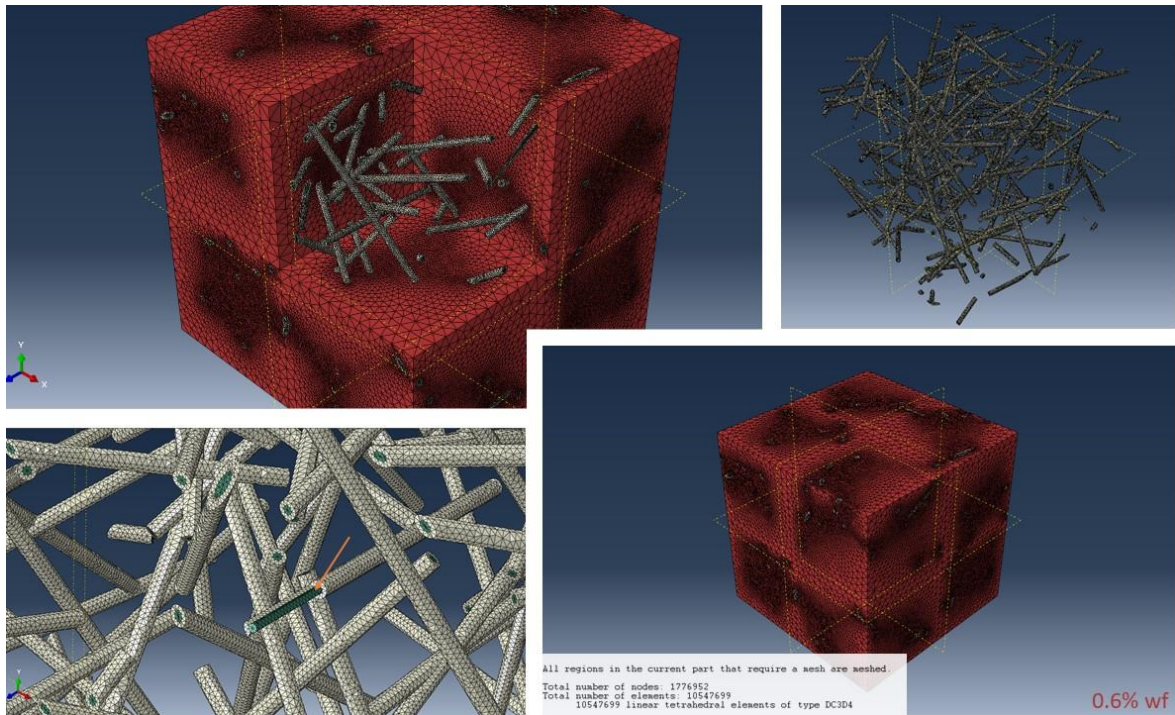
Το ABAQUS, προκειμένου να διακριτοποιήσει μια στερεά γεωμετρία, δημιουργεί πρώτα το λεγόμενο "επιφανειακό πλέγμα", που σημαίνει ότι δημιουργεί ένα 2D επιφανειακό πλέγμα στις επιφάνειες του στερεού. Στη συνέχεια, εισάγει τους εσωτερικούς κόμβους και τους συνδέει με τους πλησιέστερους επιφανειακούς, προκειμένου να δημιουργήσει τετράεδρα και, τέλος, συγχωνεύει τα παραγόμενα τετράεδρα για να δημιουργήσει ένα ομοιογενές και συνεχές πλέγμα.

5.3 Τα προβλήματα με την διακριτοποίηση

Τα κύρια προβλήματα όσον αφορά τον αυτοματοποιημένο αλγόριθμο διακριτοποίησης προκύπτουν όταν πολύπλοκες γεωμετρίες με διαφορετικά μεγέθη κελιών να πλέκονται ταυτόχρονα. Παρόλο που, το οριακό πλέγμα μπορεί να κατασκευαστεί εύκολα, όταν εισάγονται οι εσωτερικοί κόμβοι και στη συνέχεια ο αλγόριθμος προσπαθεί να κατασκευαστεί ένα ομοιογενές πλέγμα, δεδομένου ότι η τοποθέτηση των εσωτερικών κόμβων δεν είναι βέλτιστη, το πλέγμα αποτυγχάνει να δημιουργηθεί. Έτσι, η ιδέα της δημιουργίας πολύ μικρότερων κελιών με την τμηματοποίηση τόσο των ΠΓΣ και των ενδιάμεσων φάσεων όσο και της μήτρας και ύστερα, την πλέξη τους ένα προς ένα, φαίνεται πολλά υποσχόμενη, αφού μειώνεται ο χώρος μεταξύ των οριακών πλεγμάτων. Επίσης, η σειρά με την οποία τα επιμέρους κελιά διακριτοποιούνται είναι επίσης ένας σημαντικός παράγοντας, δεδομένου ότι εάν κάποια άρτια κελιά που γειτονεύουν με ένα σύνθετο και μικρό κελί, διακριτοποιηθούν πρώτα, τότε οι κόμβοι των ορίων του μικρού κελιού θα καθορίζονται από τους κόμβους του γειτονικού άρτιου. Αυτό μπορεί να αναγκάσει τη δημιουργία πάρα πολλών στοιχείων στο εσωτερικό του μικρού κελιού, με παραμορφωμένα στοιχεία, και έτσι να οδηγήσει σε αποτυχία της διαδικασίας διακριτοποίησης. Έτσι, πρέπει να δημιουργηθεί ένα εργαλείο που να μπορεί να επιλέγει αυτόματα ορισμένα κελιά από το μοντέλο (ή ένα σύνολο του μοντέλου) με βάση ένα συγκεκριμένο κριτήριο. Το κριτήριο αυτό στην προκειμένη περίπτωση θα είναι το μέγεθός τους και ο αριθμός των επιφανειών τους, αφού πρέπει να επιλέξουμε τα μικρά και πολύπλοκα κελιά. Το εργαλείο αυτό πρέπει επίσης να μπορεί να συγκεντρώνει όλα τα υπόλοιπα κελιά του τεμαχίου σε ένα διαφορετικό σύνολο, ώστε να μπορούν να διακριτοποιηθούν στο δεύτερο στάδιο της διαδικασίας.

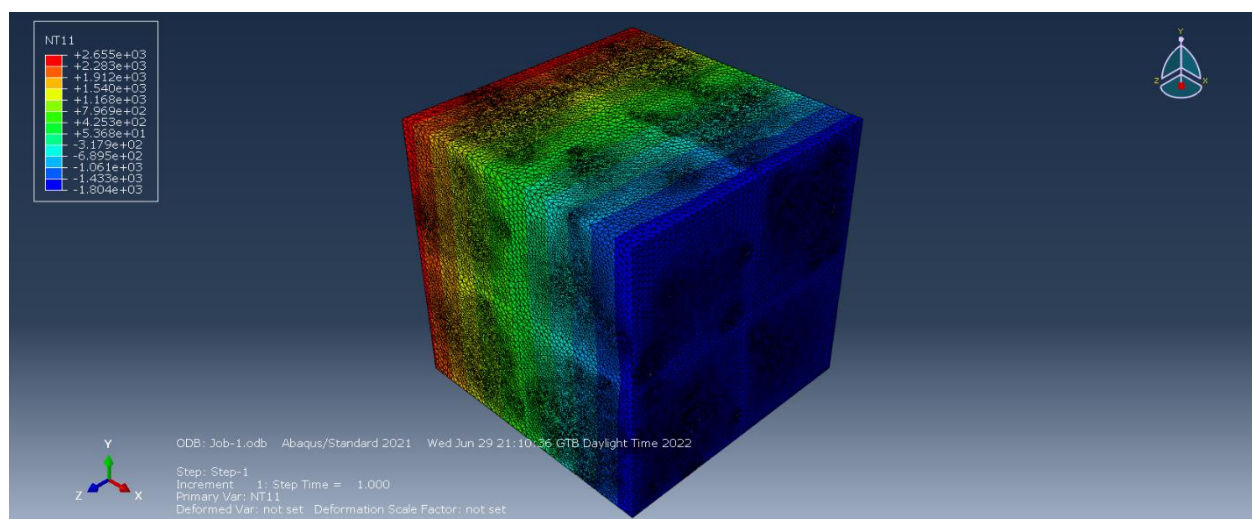
5.5 Αποτελέσματα και Συμπεράσματα

Ενδεικτικά παρουσιάζεται το πλέγμα με 0.6% ποσοστό ενίσχυσης.



Εικόνα 3 Πλέγμα ΑΣΟ με ποσοστό ενίσχυσης 0.6%

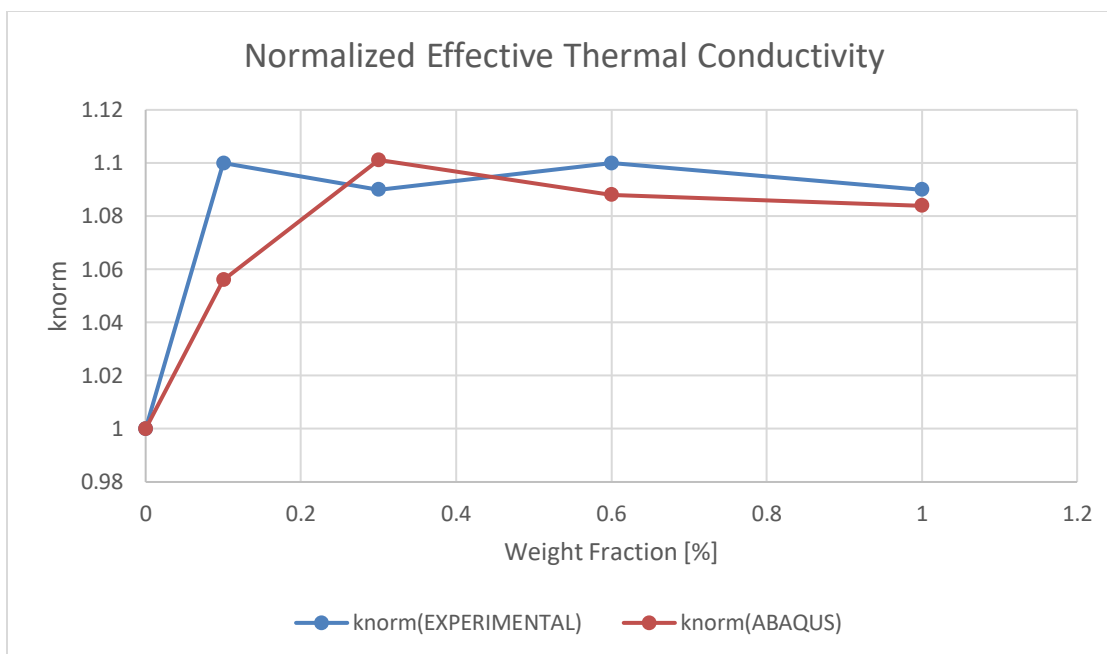
α αποτελέσματα συνοψίζονται παρακάτω:



Εικόνα 4 Θερμοκρασιακό Πεδίο, Λύση Μοντέλου

wf	Keff(W/mK)	knorm(ABAQUS)	knorm(EXPERIMENTAL)	RMSE
0	0.29	1	1	0.023667
0.1	0.3063	1.0560	1.1	
0.3	0.3193	1.1012	1.09	
0.6	0.3157	1.0880	1.1	
1	0.3144	1.0840	1.09	

Πίνακας 3 Πειραματικά αποτελέσματα και αποτελέσματα ABAQUS



Εικόνα 5 Σύγκριση αποτελεσμάτων ABAQUS και πειραματικών

Τόσο το Διάγραμμα 1 όσο και ο Πίνακας 3 δείχνουν ότι τα αποτελέσματα της προσομοίωσης συγκλίνουν με τα πειραματικά δεδομένα από την [6] όταν χρησιμοποιούνται οι τιμές ITR από την παραμετρική μελέτη. Το μέσο τετραγωνικό σφάλμα ρίζας (RMSE) της προσομοίωσης και των πειραματικών δεδομένων είναι μόλις 0,023 που είναι μια μικρή τιμή. Αυτό οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η προσομοίωση αυτή παρέχει αξιόπιστα αποτελέσματα, δεδομένων των σωστών ιδιοτήτων του υλικού.

Βιβλιογραφία

1. Kostagiannakopoulou C, Fiamegkou E, Sotiriadis G et al. (2016) Thermal Conductivity of Carbon Nanoreinforced Epoxy Composites. *Journal of Nanomaterials* 2016:1–12.
<https://doi.org/10.1155/2016/1847325>
2. Nan C-W, Birringer R, Clarke DR et al. (1997) Effective thermal conductivity of particulate composites with interfacial thermal resistance. *Journal of Applied Physics* 81:6692–6699.
<https://doi.org/10.1063/1.365209>
3. Kim SY, Jang HG, Yang C-M et al. (2018) Multiscale prediction of thermal conductivity for nanocomposites containing crumpled carbon nanofillers with interfacial characteristics. *Composites Science and Technology* 155:169–176.
<https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2017.12.011>
4. Alasvand Zarasvand K, Golestanian H (2017) Investigating the effects of number and distribution of GNP layers on graphene reinforced polymer properties: Physical, numerical and micromechanical methods. *Composites Science and Technology* 139:117–126.
<https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2016.12.024>
5. Liu DM, Tuan WH (1996) Microstructure and thermal conduction properties of $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{Ag}$ composites. *Acta Materialia* 44:813–818. [https://doi.org/10.1016/1359-6454\(95\)00205-7](https://doi.org/10.1016/1359-6454(95)00205-7)
6. Fiamegkou E, Athanasopoulos N, Kostopoulos V (2014) Prediction of the effective thermal conductivity of carbon nanotube-reinforced polymer systems. *Polym Compos* 35:1997–2009.
<https://doi.org/10.1002/pc.22859>