



Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Πολυτεχνική Σχολή

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών

**Η ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΩΝ ΑΝΙΣΟΤΡΟΠΩΝ ΙΝΩΝ ΣΤΗΝ ΘΕΡΜΙΚΗ
ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑ ΤΩΝ ΣΥΝΘΕΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ**

Παπανικολόπουλος Κωνσταντίνος

Επιβλέπων:

Παπαθανασίου Αθανάσιος

Διπλωματική Εργασία

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μέρους των απαιτήσεων για την απόκτηση του
Διπλώματος Μηχανολόγου Μηχανικού.

Βόλος, Ιούνιος 2024



Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Πολυτεχνική Σχολή

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών

**Η ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΩΝ ΑΝΙΣΟΤΡΟΠΩΝ ΙΝΩΝ ΣΤΗΝ ΘΕΡΜΙΚΗ
ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑ ΤΩΝ ΣΥΝΘΕΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ**

Παπανικολόπουλος Κωνσταντίνος

Επιβλέπων:

Παπαθανασίου Αθανάσιος

Διπλωματική Εργασία

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μέρους των απαιτήσεων για την απόκτηση του
Διπλώματος Μηχανολόγου Μηχανικού.

Βόλος, Ιούνιος 2024

© 2024 Παπανικολόπουλος Κωνσταντίνος

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

Εγκρίθηκε από τα Μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:

Πρώτος Εξεταστής

Δρ. Αθανάσιος Παπαθανασίου

(Επιβλέπων)

Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,

Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Δεύτερος Εξεταστής

Δρ. Παναγιώτης Τσιακάρης

Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,

Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Τρίτος Εξεταστής

Δρ. Γεώργιος Χαραλάμπους

Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,

Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να εκφράσω τις ειλικρινείς ευχαριστίες μου στον Καθηγητή κ. Αθανάσιο Παπαθανασίου για την συνεργασία, την βοήθεια, την καθοδήγηση και τις πολύτιμες συμβουλές που μου παρείχε κατά τη διάρκεια της επίβλεψης της διπλωματικής μου εργασίας.

Οφείλω επίσης να ευχαριστήσω τον διδάσκοντα του τμήματος κ. Ανδρέα Τσιαντή για τη συνεχή βοήθειά του στο τεχνικό και υπολογιστικό σκέλος, τις υποδείξεις του για την λειτουργία των λογισμικών που χρησιμοποιήθηκαν και τις πάντα χρήσιμες παρατηρήσεις του σε όλη την διάρκεια της εκπόνησης της εργασίας μου.

Τέλος, είμαι ευγνώμων στους γονείς μου για την ολόψυχη αγάπη και υποστήριξή τους όλα αυτά τα χρόνια. Αφιερώνω αυτή την εργασία στην μητέρα μου και στον πατέρα μου.

Περίληψη

Στην αναζήτηση υλικών που συνδυάζουν εξαιρετικές μηχανικές ιδιότητες με αυξημένη θερμική αγωγιμότητα, τα σύνθετα υλικά ενισχυμένα με σωματίδια υψηλής θερμικής αγωγιμότητας έχουν αναδειχθεί ως μια από τις πλέον προηγμένες λύσεις. Τέτοια υλικά προσφέρουν σημαντικά πλεονεκτήματα στη βιομηχανία, ειδικά σε εφαρμογές υψηλών απαιτήσεων, όπου η διαχείριση της θερμότητας και η διατήρηση της δομικής ακεραιότητας κατά την έκθεση σε ακραίες θερμοκρασίες είναι κρίσιμη. Η παρούσα εργασία πραγματεύεται την πρόβλεψη της τιμής του συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας του σύνθετου υλικού (K_{eff}) και το πώς αυτή επηρεάζεται από την μορφή της γεωμετρίας και των σωματιδίων. Αφότου καθορίστηκε το πλήθος των υπολογιστικών κελιών και δημιουργήθηκε γεωμετρία με 500 φυλλίδια, μέσω του λογισμικού ανοιχτού κώδικα OpenFOAM εξετάστηκε μέσω προσομοιώσεων η επίδραση του λόγου διαστάσεων α των φυλλιδίων στην αγωγιμότητα, για διάφορους λόγους αγωγιμοτήτων σωματιδίων-μήτρας (k_f / k_m) έως και την τιμή 10. Τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με το μοντέλο Lewis-Nielsen το οποίο έχει αποδειχθεί κατάλληλο για το είδος του προβλήματος που επιλύεται, και εξετάστηκε μέσω της διαδικασίας ανάλυσης ευαισθησίας η επίδραση κάποιων εκ των συντελεστών του μοντέλου και τα όριά της. Στην συνέχεια εισήχθη στην μελέτη το φαινόμενο της θερμικής ανισοτροπίας των σωματιδίων, το οποίο εμφανίζεται σε πολλά υλικά με ευρεία χρήση, όπως όσα είναι ενισχυμένα με ίνες άνθρακα ή γραφένιο. Αναπτύχθηκε ένας τροποποιημένος επιλύτης με ονομασία LaplacianFoamT στον οποίο το πεδίο της διαχυτότητας είναι τανυστικό αντί βαθμωτού, και επιβεβαιώθηκε η ορθότητα της λειτουργίας του σε σύγκριση με περιπτώσεις ισότροπων φυλλιδίων αλλά και προβλέψεων τιμών της βιβλιογραφίας. Ερευνήθηκε τέλος η επίδραση του προσανατολισμού των ανισότροπων φυλλιδίων στην συνολική θερμική αγωγιμότητα για 3 διαφορετικά κλάσματα όγκου και διάφορους λόγους αγωγιμοτήτων με όριο την τιμή 10.

Λέξεις-κλειδιά: θερμική αγωγιμότητα, φυλλίδια, ανισοτροπία, κλάσμα όγκου

Summary

In searching for materials that combine excellent mechanical properties with increased thermal conductivity, composite materials that contain particles with a high thermal conductivity constant have proved to be one of the most advanced solutions. Such materials exhibit important qualities in industrial applications, particularly those where the combination of being able to withstand high temperatures without compromising their structural strength is critical. In this thesis we are calculating the thermal conductivity coefficient (K_{eff}) through computational simulations, as well as investigating how it is influenced by the structure of the material and the type of particles used. After finding the optimal number of cells required for the mesh we created a composite consisting of 500 flakes and used the open-source computational environment OpenFOAM to examine the effect of the flake aspect ratio α on the thermal conductivity for a number of particle-matrix conductivity ratios (k_f / k_m) up to a value of 10. The results obtained were compared to the Lewis-Nielsen model which has proved to be reliable and representative of the phenomenon examined. Also examined through the method of sensitivity analysis was the influence of a number of the model's coefficients and its limits. We then introduced heat conductivity anisotropy effects to our study, which is a well-known property for some widely used particles such as graphene and carbon fibers. A new modified solver with the name LaplacianFoamT was developed, in which the thermal diffusivity field is tensorial instead of scalar. Its validity was confirmed through comparing the obtained results with those obtained from previous simulations assuming thermally isotropic particles, as well as results from literature sources. Finally, the effect of anisotropic flake orientation on the thermal conductivity was examined for 3 different particle volume fractions and several particle-matrix conductivity ratios up to a value of 10.

Keywords : thermal conductivity, flakes, anisotropy, volume fraction

Περιεχόμενα

Κατάλογος εικόνων	10
Κατάλογος πινάκων	12
1 Εισαγωγή	13
1.1 Αντικείμενο της διπλωματικής	13
1.2 Οργάνωση Διπλωματικής Εργασίας	14
2 Θεωρητικό υπόβαθρο	15
2.1 Πολυμερή Υλικά	15
2.2 Σύνθετα Υλικά	16
2.3 Σύνθετα πολυμερή υλικά	17
2.4 Πορώδες	18
2.5 Μεταφορά Μάζας	19
2.6 Μετάδοση Θερμότητας	20
3 Υπολογιστική Ανάλυση	23
3.1 Κατασκευή Γεωμετρίας Και Υπολογιστικού Πλέγματος	23
3.1.1 Autopilot	23
3.1.2 Gmsh	24
3.2 Επίλυση	27
3.2.1 OpenFOAM	27
3.2.2 Case	27
3.2.3 Συνοριακές Συνθήκες	29
3.3 LaplacianFoamD	30
3.4 Paraview	31
4 Θερμική Αγωγιμότητα Ισότροπων Φυλλιδίων	32
4.1 Υπολογισμός Συντελεστή Θερμικής Αγωγιμότητας	32

4.2	Εγκυρότητα πλέγματος	34
4.3	Επίδραση λόγου διαστάσεων σωματιδίων	37
4.4	Σύγκριση με το μοντέλο Lewis-Nielsen	38
4.5	Ανάλυση Ευαισθησίας Μοντέλου Lewis-Nielsen	41
5	Θερμική Αγωγιμότητα Ανισότροπων Φυλλιδίων	46
5.1	Ανισότροπα Σωματίδια	46
5.2	LaplacianFoamT	47
5.3	Επιβεβαίωση Αποτελεσμάτων	50
5.4	Επίδραση Προσανατολισμού Ανισότροπων Φυλλιδίων	51
6	Συμπεράσματα	54
	Βιβλιογραφία	68

Κατάλογος εικόνων

2.1	Σχήμα 2.1: Πολυμερισμός φαινυλαιθυλενίου[1]	16
2.2	Σχήμα 2.2: Ταξινόμηση των σύνθετων υλικών	17
2.3	Σχήμα 2.3: Μικροδομή σύνθετου πολυμερούς FSMA/PU[2]	18
2.4	Σχήμα 2.4: Αγωγή θερμότητας μέσω υλικών διαφορετικών θερμικών αγωγιμοτήτων[4]	21
3.1	Σχήμα 3.1: Περιβάλλον λογισμικού Autopilot	23
3.2	Σχήμα 3.2: Ονομασία συνόρων γεωμετρίας	24
3.3	Σχήμα 3.3: Γεωμετρία και υπολογιστικό πλέγμα	25
3.4	Σχήμα 3.4: Εστιασμένη άποψη υπολογιστικού πλέγματος	26
3.5	Σχήμα 3.5: Διαφορές μεθόδων FVM, FDM και FEM[11]	28
3.6	Σχήμα 3.6: Δομή αρχείων solver LaplacianFoamD	29
3.7	Σχήμα 3.7: Θερμοκρασιακό πεδίο γεωμετρίας $N=50, \alpha=2, \alpha\Phi=0.5, \theta=30^\circ$	31
4.1	Σχήμα 4.1: Θερμοκρασιακό πεδίο $N=1, \alpha=2, \alpha\Phi=0.5, \theta=0^\circ$	32
4.2	Σχήμα 4.2: Διάγραμμα βαθμίδας κλίσης της θερμοκρασίας της γεωμετρίας του Σχήματος 4.1	33
4.3	Σχήμα 4.3: Επίδραση πλήθους κελιών γεωμετρίας $N=500, \alpha=8, \alpha\Phi=0.5, \theta=0^\circ$ στην υπολογιστική λύση και σύγκριση αποτελεσμάτων με μοντέλο Lewis-Nielsen	35
4.4	Σχήμα 4.4: Επίδραση πλήθους κελιών γεωμετρίας $N=500, \alpha=8, \alpha\Phi=0.5, \theta=0^\circ, \varepsilon=90^\circ$ στην υπολογιστική λύση και σύγκριση αποτελεσμάτων με μοντέλο Lewis-Nielsen	36
4.5	Σχήμα 4.5: Επίδραση λόγου διαστάσεων σωματιδίων γεωμετρίας $N=500, \alpha\Phi=0.5, \theta=0^\circ, \varepsilon=90^\circ$ στην τιμή της θερμικής αγωγιμότητας	37
4.6	Σχήμα 4.6: Σύγκριση μεταξύ τιμών θερμικής αγωγιμότητας προσομοιώσεων και μοντέλου για $\alpha=2$ έως $6, N=500, \alpha\Phi=0.5, \theta=0^\circ, \varepsilon=90^\circ$	40
4.7	Σχήμα 4.7: Σύγκριση μεταξύ τιμών θερμικής αγωγιμότητας προσομοιώσεων και μοντέλου για $\alpha=8$ έως $12, N=500, \alpha\Phi=0.5, \theta=0^\circ, \varepsilon=90^\circ$	40
4.8	Σχήμα 4.8: Θερμοκρασιακό πεδίο γεωμετρίας $N=500, \alpha\Phi=0.5, \theta=0^\circ, \varepsilon=90^\circ$	41
4.9	Σχήμα 4.9: Επίδραση τιμών παραμέτρου Φm στην βαθμίδα του συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας	44
4.10	Σχήμα 4.10: Επίδραση τιμών παραμέτρου A στην βαθμίδα του συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας	44
5.1	Σχήμα 5.1: Ενίσχυση ινών άνθρακα με νανοσωλήνες άνθρακα προς ενίσχυση της θερμικής αγωγιμότητας [21]	46
5.2	Σχήμα 5.2: Πειραματική συσκευή μέτρησης θερμικής αγωγιμότητας μέσω Laser [24]	47

5.3	Σχήμα 5.3: Αλλαγή πεδίου DTvar σε τανυστικό αντί βαθμωτού πεδίου στο αρχείο createFields.H του solver.	48
5.4	Σχήμα 5.4: Αλλαγή πεδίου DTvar σε τανυστικό στον φάκελο των συνοριακών συνθηκών.	49
5.5	Σχήμα 5.5: Καθορισμός δομής αρχείου setFieldsDict για τον ορισμό του τανυστικού πεδίου της διαχυτότητας στο εσωτερικό της γεωμετρίας.	49
5.6	Σχήμα 5.6: Επίδραση της γωνίας στην αγωγιμότητα ανισότροπων φυλλιδίων με $N=500$, $\alpha=6$, $\alpha\phi=0.25$, $\epsilon=0^\circ$	52
5.7	Σχήμα 5.7: Επίδραση της γωνίας στην αγωγιμότητα ανισότροπων φυλλιδίων με $N=500$, $\alpha=6$, $\alpha\phi=0.5$, $\epsilon=0^\circ$	52
5.8	Σχήμα 5.7: Επίδραση της γωνίας στην αγωγιμότητα ανισότροπων φυλλιδίων με $N=500$, $\alpha=6$, $\alpha\phi=1$, $\epsilon=0^\circ$	53

Κατάλογος πινάκων

1	Πίνακας 1: Τιμές του συντελεστή A	39
2	Πίνακας 2: Τιμές του συντελεστή Φ_m	39
3	Πίνακας 3: Τιμές παραμέτρων A και Φ_m για $K_f/k_m=1$ έως 6, $\alpha=2$ έως 12 που απαιτούνται για την σύγκλιση μοντέλου Lewis-Nielsen και προσομοιώσεων.	41
4	Πίνακας 4: Σύγκριση αποτελεσμάτων συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας μεταξύ ισότροπων και ανισότροπων φυλλιδίων για $N=500$, $\alpha=8$, $\alpha\Phi=0.5$, $\theta=0$ και 30 , $\varepsilon=0$. . .	50
5	Πίνακας 5: Σύγκριση αποτελεσμάτων συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας μεταξύ ισότροπων και ανισότροπων φυλλιδίων για $N=500$, $\alpha=8$, $\alpha\Phi=0.5$, $\theta=60$ και 90 , $\varepsilon=0$. . .	50
6	Πίνακας 6: Σύγκριση αποτελεσμάτων συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας για $k_{22}=1$ και βαθμιαία αυξανόμενο k_{11}	51

1 Εισαγωγή

Τα σύνθετα υλικά αποτελούν μια κατηγορία υλικών που χαρακτηρίζονται από την συνδυαστική τους δομή και τις εξαιρετικές ιδιότητές τους. Είναι κατασκευασμένα από δύο ή περισσότερα διαφορετικά υλικά που, όταν συνδυάζονται, δημιουργούν ένα νέο υλικό με βελτιωμένες ιδιότητες σε σχέση με τα αρχικά συστατικά του. Η χρήση σύνθετων υλικών έχει αυξηθεί σημαντικά τις τελευταίες δεκαετίες, κυρίως λόγω της ικανότητάς τους να προσφέρουν υψηλή αντοχή, χαμηλό βάρος, και ανθεκτικότητα σε διάφορες συνθήκες περιβάλλοντος.

Τα φαινόμενα μεταφοράς που παρουσιάζουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον σε αυτή την κατηγορία υλικών κατηγοριοποιούνται στην μεταφορά μάζας και τη μεταφορά θερμότητας. Η μεταφορά μάζας γίνεται με μηχανισμούς όπως η προσρόφηση, η απορρόφηση, η διήθηση, η απόσταξη και η εξάτμιση. Η μεταφορά θερμότητας στην οποία εστιάζει η παρούσα εργασία γίνεται με 3 μηχανισμούς: Την αγωγή μέσω των μορίων του στερεού ή ενός ακίνητου ρευστού, την συναγωγή στην περίπτωση κινούμενο ρευστού και την ακτινοβολία, η οποία είναι και η μόνη μορφή όπου δεν απαιτείται η παρουσία κάποιου μέσου για την μετάδοση.

1.1 Αντικείμενο της διπλωματικής

Στην παρούσα διπλωματική εργασία ερευνάται η επίδραση των ανισότροπων ως προς τη θερμική τους συμπεριφορά φυλλιδίων στην συνολική θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού. Η θερμική αγωγιμότητα ως ιδιότητα προσδιορίζει την ικανότητα του υλικού να διευκολύνει ή να δυσχεραίνει την μετάδοση της θερμότητας μέσω της εσωτερικής δομής του. Στην περίπτωση ενός σύνθετου υλικού συνυπάρχουν δύο τέτοιες χαρακτηριστικές ιδιότητες, η αγωγιμότητα του μητρικού υλικού και η αγωγιμότητα των σωματιδίων ενίσχυσης που έχουν διασπαρεί σε αυτό, και ο συνδυασμός τους οδηγεί στην συνολική θερμική αγωγιμότητα του υλικού. Θερμικά ανισότροπη συμπεριφορά των φυλλιδίων συνεπάγεται την εξάρτηση της τιμής της αγωγιμότητας από την διεύθυνση διάδοσης της θερμότητας, υπάρχει δηλαδή διαφορετική συμπεριφορά των σωματιδίων ενίσχυσης κατά την αγωγή της θερμότητας ανάλογα με τον προσανατολισμό τους στο χώρο. Το φαινόμενο εντοπίζεται σε πολλά σωματίδια ενίσχυσης με ευρεία χρήση όπως οι ίνες και οι νανοσωλήνες άνθρακα, η μελέτη του πειραματικά έχει αποδειχθεί ιδιαίτερα σύνθετη, γεγονός που καθιστά την προσομοίωση και υπολογιστική μελέτη του φαινομένου ιδιαίτερα σημαντικές.

1.2 Οργάνωση Διπλωματικής Εργασίας

Το υπόλοιπο της διπλωματικής εργασίας χωρίζεται σε πέντε ενότητες που καταλαμβάνουν τα Κεφάλαια 2-6 .

Συγκεκριμένα:

Στο Κεφάλαιο 2 δίνεται το θεωρητικό υπόβαθρο των φαινομένων και διατυπώνονται θεμελιώδεις ορισμοί για τα σύνθετα υλικά, τα πολυμερή και τον συνδυασμό τους, τα σύνθετα πολυμερή. Γίνεται αναφορά στο πορώδες του υλικού, αναλύονται τα φαινόμενα της μεταφοράς μάζας και θερμότητας και δίνονται οι εξισώσεις τους.

Στο Κεφάλαιο 3 γίνεται εκτενής αναφορά στις τεχνικές και το υπόβαθρο της υπολογιστικής μελέτης. Παρατίθενται τα λογισμικά που χρησιμοποιήθηκαν για την κατασκευή της γεωμετρίας και του πλέγματος, καθώς και για την υπολογιστική επίλυση του φαινομένου. Ιδιαίτερα για το τελευταίο αναλύεται ο τρόπος λειτουργίας, η δομή αρχείων καθώς και η υπορουτίνα επίλυσης που χρησιμοποιήθηκε.

Στο Κεφάλαιο 4 πραγματοποιείται έλεγχος της εγκυρότητας του υπολογιστικού πλέγματος για τις περιπτώσεις ομοιόμορφα και τυχαία προσανατολισμένων φυλλιδίων, καθώς και σύγκριση της θερμικής αγωγιμότητας του υλικού για διάφορα μεγέθη φυλλιδίων. Τα αποτελέσματα αντιπαραβάλλονται με ένα απ'τα αριθμητικά μοντέλα της βιβλιογραφίας, στο οποίο πραγματοποιείται ανάλυση ευαισθησίας ως προς κάποιες από τις παραμέτρους του.

Το Κεφάλαιο 5 επικεντρώνεται στο ζήτημα των θερμικά ανισότροπων φυλλιδίων. Γίνεται αναφορά σε στοιχεία της βιβλιογραφίας και κατόπιν αναλύονται οι τροποποιήσεις που έγιναν στο λογισμικό επίλυσης για την πραγματοποίηση της υπολογιστικής μελέτης. Στη συνέχεια επαληθεύεται η ορθότητα των παρεμβάσεων με αντιπαραβολή των αποτελεσμάτων με αυτά της βιβλιογραφίας, καθώς και σύγκριση με αποτελέσματα σε ισότροπες γεωμετρίες. Αναλύεται τέλος η επίδραση του προσανατολισμού των φυλλιδίων στη συνολική θερμική αγωγιμότητα του υλικού.

Τα τελικά συμπεράσματα της διπλωματικής εργασίας και κατευθύνσεις για περαιτέρω έρευνα παρουσιάζονται στο Κεφάλαιο 6.

2 Θεωρητικό υπόβαθρο

2.1 Πολυμερή Υλικά

Πολυμερή ονομάζονται οι χημικές ενώσεις μακρομορίων που σχηματίζονται από τη σύνδεση πολλών όμοιων, μικρότερων μορίων που λέγονται μονομερή. Τα πολυμερή προκύπτουν μέσα από την χημική αντίδραση των μονομερών η οποία ονομάζεται πολυμερισμός.

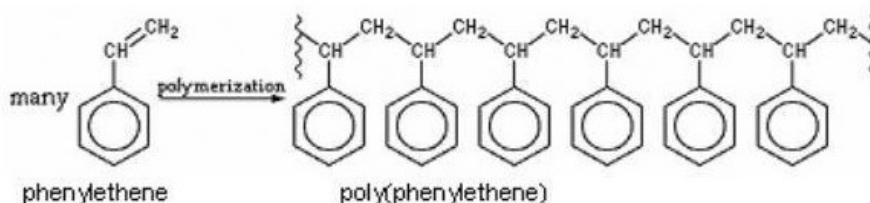
Η ταξινόμηση των πολυμερών μπορεί να γίνει με διάφορους τρόπους, δύο από τους οποίους είναι με βάση την προέλευση τους ή με βάση τις θερμικές τους ιδιότητες. Βάσει της προέλευσής τους τα πολυμερή κατηγοριοποιούνται:

- Στα φυσικά, δηλαδή όσα συναντώνται στην φύση, με χαρακτηριστικά παραδείγματα να αποτελούν τα μακρομόρια των ζωντανών οργανισμών (πρωτεΐνες, γενετικό υλικό), η κυτταρίνη, το ξύλο ή το μετάξι.
- Στα συνθετικά, δηλαδή όσα είναι κατασκευασμένα από τον άνθρωπο, με χαρακτηριστικά παραδείγματα το νάιλον, το πολυστυρένιο, τα πολυβινυλοχλωρίδια (PVC), τα συνθετικά ελαστικά κ.α.

Βάσει των θερμικών ιδιοτήτων τους τα πολυμερή κατηγοριοποιούνται:

- Στα θερμοπλαστικά, δηλαδή πολυμερή που γίνονται εύπλαστα με την αύξηση της θερμοκρασίας και επαναστερεοποιούνται με την ψύξη. Η διαδικασία αυτή είναι αντιστρεπτή. Χαρακτηριστικά παραδείγματα είναι το πολυαιθυλένιο, το πολυστυρένιο και το πολυβινυλοχλωρίδιο (PVC).
- Στα θερμοσκληρυνόμενα, δηλαδή όσα υφίστανται κατά την θέρμανσή τους πολυμερισμό και μη αντιστρεπτή σκλήρυνση ως συνέπεια. Χαρακτηριστικά παραδείγματα αποτελούν ο πολυεστέρας και η πολυουρεθάνη.
- Στα ελαστομερή, δηλαδή πολυμερή που παρουσιάζουν ιξωδοελαστικότητα και χαρακτηρίζονται από ασθενείς διαμοριακούς δεσμούς. Χαρακτηριστικά παραδείγματα αποτελούν τα συνθετικά ελαστικά.

Όπως προαναφέρθηκε, ο πολυμερισμός είναι η χημική διαδικασία με την οποία τα μικρά μόρια, γνωστά ως μονομερή, συνδυάζονται για να σχηματίσουν μεγάλα μόρια που ονομάζονται πολυμερή



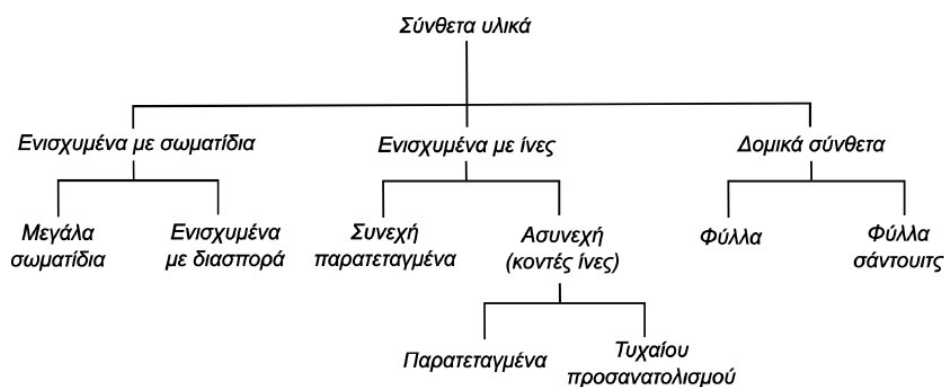
Σχήμα 2.1: Πολυμερισμός φαινυλαιθυλενίου[1]

(εικόνα 2.1) . Στον πολυμερισμό αλυσίδας, τα μονομερή προστίθενται ένα προς ένα σε μια ενεργή αλυσίδα ενώ στον σταδιακό πολυμερισμό μικρά μονομερή ή oligομερή ενώνονται και σχηματίζουν αλυσίδες, οι οποίες αργότερα θα ενωθούν για να σχηματίσουν το πολυμερές. Σε σύγκριση με τον πολυμερισμό αλυσίδας τα στάδια έναρξης, ανάπτυξης και τερματισμού δεν είναι διακριτά.

2.2 Σύνθετα Υλικά

Τα σύνθετα υλικά αποτελούνται από δύο ή και περισσότερα υλικά με ανόμοιες φυσικοχημικές ιδιότητες. Ο συνδυασμός τους παράγει ένα υλικό το οποίο συνδυάζει τις βέλτιστες ιδιότητες των επιμέρους. Στην τελική δομή τα επιμέρους υλικά εξακολουθούν να είναι διακριτά, σε αντίθεση με την περίπτωση ενός ομογενούς μίγματος. Τα σύνθετα υλικά αποτελούνται από δύο φάσεις, την μήτρα και το συστατικό ενίσχυσης, με τον ρόλο τους να διαφέρει σημαντικά. Ο ρόλος των συστατικών ενίσχυσης είναι να προσδώσουν βελτιωμένες χημικές, φυσικές ή μηχανικές ιδιότητες ενώ ο ρόλος την μήτρας είναι να καθορίσει την τελική μορφή, να προστατευτεί το συστατικό ενίσχυσης από το περιβάλλον και να εξασφαλίσει την μέγιστη δυνατή εκμετάλλευση των ιδιοτήτων των ενισχυτικών σωματιδίων. Τα σύνθετα υλικά ταξινομούνται με βάση το συστατικό ενίσχυσης στα ενισχυμένα με σωματίδια, με ίνες, στα δομικά σύνθετα και στις υποκατηγορίες τους, ταξινομημένες ανάλογα με το μέγεθός τους, την γεωμετρία τους και τον προσανατολισμό τους όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.2.

Εστιάζοντας στην περίπτωση των ινών η διεσπαρμένη φάση έχει γεωμετρία ίνας, δηλαδή ο λόγος του μήκους προς το πλάτος του σωματιδίου είναι αρκετά μεγαλύτερος της μονάδας. Το κλάσμα όγκου των ινών σε σχέση με το μητρικό υλικό, ο λόγος μεγέθους, η κατανομή τους και ο προσανατολισμός τους έχουν καθοριστική επίδραση στις τελικές ιδιότητες του υλικού. Χαρακτηριστικά παραδείγματα ινών ενίσχυσης αποτελούν το γυαλί, ο άνθρακας, τα διάφορα κεραμικά και το αραμίδιο. Στην περίπτωση των φυλλιδίων, η διαφορά έγκειται στην φύση των ιδιοτήτων των σωματιδίων οι οποίες σε αντίθεση με τις ίνες μπορούν να θεωρηθούν διδιάστατες. Στην περίπτωση

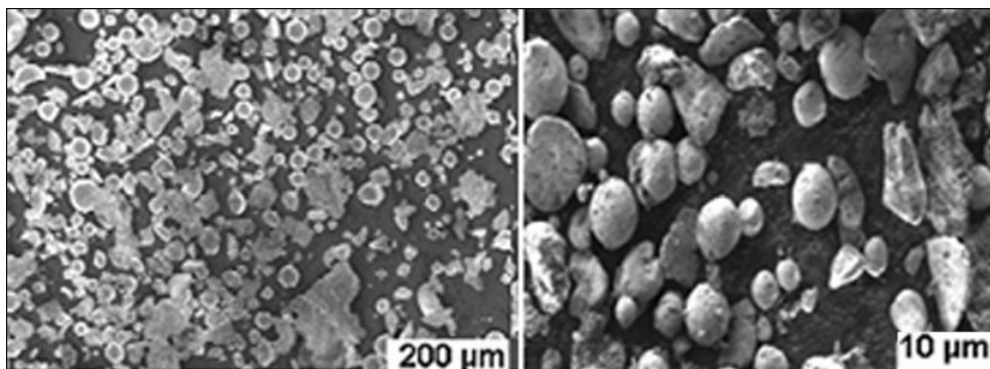


Σχήμα 2.2: Ταξινόμηση των σύνθετων υλικών

των ινών μπορεί να θεωρηθεί ότι οι ενισχυτικές ιδιότητες αναπτύσσονται κατά κύριο λόγο κατά το μήκος τους και σε πολύ μικρότερο βαθμό κατά πλάτος, ενώ οι ενισχυτικές ιδιότητες των φυλλιδίων αναπτύσσονται και στις δύο διευθύνσεις. Τα φυλλίδια μπορεί να είναι κατασκευασμένα από γραφένιο, σαπονίτη, μίκα, γυαλί και διάφορες άλλες ενώσεις του πυριτίου.

2.3 Σύνθετα πολυμερή υλικά

Τα σύνθετα πολυμερή υλικά είναι μια κατηγορία των σύνθετων υλικών όπου η μήτρα που περιέχει το πληρωτικό υλικό αποτελείται από κάποιο πολυμερές (Σχήμα 2.3). Το υλικό ενίσχυσης εξακολουθεί να έχει τη μορφή σωματιδίων όπως τα σφαιρικά, τα φυλλίδια ή οι ίνες. Επίσης το ενισχυτικό υλικό μπορεί να έχει συγκεκριμένο ή τυχαίο προσανατολισμό. Χαρακτηριστικές εφαρμογές τέτοιου τύπου υλικών είναι στις συσκευασίες τροφίμων, τις βιομηχανικές μεμβράνες, τις κυψέλες καυσίμου κλπ. Το βασικό πλεονέκτημα των σύνθετων πολυμερών υλικών σε σχέση με σύνθετα υλικά μεταλλικού μητρικού υλικού είναι η διαμορφωσιμότητά τους, καθώς μπορούν εύκολα να κατασκευαστούν σύνθετες γεωμετρικές προσαρμοσμένες στις ανάγκες της εφαρμογής, αλλά και η χαμηλή τους πυκνότητα που συνεπάγεται μικρό βάρος. Αυτό το χαρακτηριστικό τους είναι ιδιαίτερα σημαντικό σε εφαρμογές όπου το χαμηλό βάρος είναι κρίσιμης σημασίας, όπως στην αυτοκινητοβιομηχανία, την αεροναυπηγική και την αεροδιαστημική. Το κόστος τους μπορεί επίσης να είναι πολύ ανταγωνιστικό σε σχέση με ένα μεταλλικής βάσης σύνθετο υλικό.



Σχήμα 2.3: Μικροδομή σύνθετου πολυμερούς FSMA/PU[2]

2.4 Πορώδες

Η πλήρης περιγραφή των σύνθετων πολυμερών απαιτεί τον ορισμό του πορώδους, δηλαδή του ποσοστού των διάκενων και των περιοχών με τα σωματίδια ενίσχυσης επί του συνόλου. Ως διάκενα ορίζονται οι περιοχές όπου απουσιάζουν τα σωματίδια ενίσχυσης και υπάρχει μόνο μητρικό υλικό. Για τα υλικά με διάκενα η σχέση που περιγράφει το πορώδες είναι:

$$\phi = \frac{V_{\text{void}}}{V_{\text{total}}} \quad (2.1)$$

όπου:

- $\phi[\%]$ το πορώδες,
- $V_{\text{void}}[m^3]$ ο όγκος του διάκενου στο υλικό,
- $V_{\text{total}}[m^3]$ ο συνολικός όγκος του υλικού.

Για υλικά όπου υπάρχουν στο εσωτερικό τους περισσότερα του ενός στέρα υλικά ορίζεται ως ολικό κλάσμα όγκου και συμβολίζεται με Φ η ποσότητα που δίνεται από τη σχέση:

$$\Phi = \frac{V_{\text{solid}}}{V_{\text{total}}} \quad (2.2)$$

Ο συνολικός όγκος του υλικού συνεπώς προκύπτει ως:

$$V_{\text{total}} = V_{\text{void}} + V_{\text{solid}} \quad (2.3)$$

Συνδυάζοντας τις σχέσεις προκύπτει η εξίσωση συσχέτισης του πορώδους και του ολικού κλάσματος όγκου του υλικού:

$$\Phi = 1 - \phi \quad (2.4)$$

2.5 Μεταφορά Μάζας

Σε οποιαδήποτε θερμοκρασία εκτός του απόλυτου μηδενός, όλα τα μόρια της ύλης βρίσκονται σε διαρκή κίνηση. Όταν εμφανιστεί μεταξύ δύο περιοχών ενός υλικού μια κλίση (gradient) της συγκέντρωσης, δηλαδή όταν υπάρξει μια περιοχή με υψηλή και μια με χαμηλή συγκέντρωση, αυτό δρα ως κινητήρια δύναμη για την εμφάνιση του φαινομένου της διάχυσης. Διάχυση είναι η διαδικασία με την οποία μεταφέρεται ύλη λόγω των κινήσεων των μορίων μιας ουσίας. Στην περίπτωση της διάχυσης μάζας, αυτή η μετατόπιση συμβαίνει από περιοχές υψηλής συγκέντρωσης προς περιοχές χαμηλής συγκέντρωσης.

Το φαινόμενο της διάχυσης περιγράφεται μαθηματικά από τους νόμους του Fick και χωρίζεται στις διαδικασίες διάχυσης μάζας που πραγματοποιούνται σε μόνιμες συνθήκες (steady state) και σε χρονομεταβαλλόμενες συνθήκες (time dependent). Η πρώτη περίπτωση των μόνιμων συνθηκών όπου η διάχυση μάζας γίνεται υπό σταθερό ρυθμό περιγράφεται από τον 1ο Νόμο του Fick. Αναλυτικότερα, η μαζική ροή, δηλαδή ο αριθμός των μορίων που διαπερνούν μια συγκεκριμένη επιφάνεια παραμένει σταθερή σε σχέση με τον χρόνο.

Η μαθηματική σχέση του 1ου Νόμου του Fick που δίνει τη διάχυση μάζας υπό μόνιμες συνθήκες είναι η εξής [3] :

$$J = -D \frac{\partial c}{\partial n} \quad (2.5)$$

όπου,

- $J \left[\frac{\text{mol}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \right]$: η μαζική ροή,
- $D \left[\frac{\text{m}^2}{\text{s}} \right]$: ο συντελεστής διάχυσης της ουσίας,
- $c \left[\frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \right]$: η συγκέντρωση της ουσίας,

- n [m]: το μοναδιαίο διάνυσμα επί της επιφάνειας.

Ο 2ος νόμος του Fick συμπεριλαμβάνει τον χρόνο στην μελέτη της ροής μάζας που διαχύεται. Αναφέρεται σε χρονομεταβαλλόμενες συνθήκες και δίνει την μεταβολή της συγκέντρωσης σε συνάρτηση με τον χρόνο. Ο νόμος διατυπώνεται ως:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2.6)$$

Η διάχυση μάζας βρίσκεται σε αντιστοιχία με την μετάδοση θερμότητας που αναλύεται παρακάτω και αποτελεί το βασικό θέμα της παρούσης εργασίας.

2.6 Μετάδοση Θερμότητας

Όπως και στην περίπτωση της μεταφοράς μάζας, η μετάδοση της θερμότητας μπορεί να κατηγοριοποιηθεί σε δύο περιπτώσεις. Στην πρώτη περίπτωση η ροή θερμότητας παραμένει αμετάβλητη με το χρόνο και τα προβλήματα που εντάσσονται σε αυτήν καλούνται προβλήματα μόνιμης κατάστασης. Στην δεύτερη περίπτωση υπάρχει χρονική εξάρτηση της θερμοροής και τα προβλήματα που εντάσσονται σε αυτήν καλούνται χρονομεταβαλλόμενα. Σε αντιστοιχία με την μεταφορά μάζας η κινητήρια δύναμη για την μετάδοση θερμότητας είναι η ύπαρξη κλίσης της θερμοκρασίας (gradient), δηλαδή η διαφορά θερμοκρασίας μεταξύ δύο περιοχών επάγει την ροή θερμότητας από τις θερμότερες προς τις ψυχρότερες περιοχές. Οι μηχανισμοί μετάδοσης της θερμότητας είναι η αγωγή, η συναγωγή και η ακτινοβολία. Η παρούσα εργασία επικεντρώνεται στην μετάδοση με αγωγή, η οποία περιγράφεται από τον νόμο του Fourier:

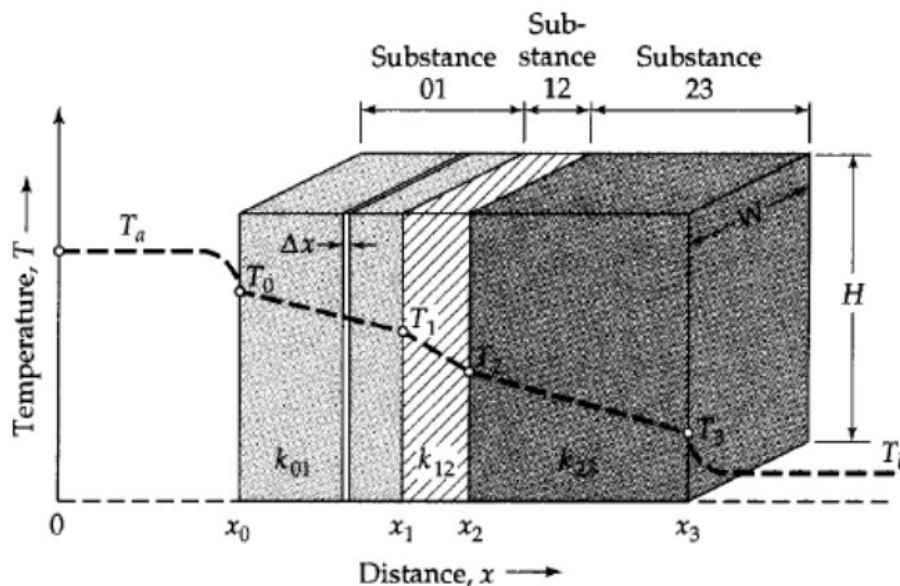
$$q = -k \frac{\partial T}{\partial n} \quad (2.7)$$

όπου,

- q $\left[\frac{J}{m^2 \cdot s} \right]$ η θερμοροή,
- k $\left[\frac{W}{m \cdot K} \right]$ ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας,
- T [K] η θερμοκρασία,

- $n [m]$ το μοναδιαίο διάνυσμα επί της επιφάνειάς.

Η θερμική αγωγιμότητα ενός υλικού εκφράζει την ικανότητα του υλικού να άγει την θερμότητα και είναι η ιδιότητα που διακρίνει τα υλικά σε θερμικούς αγωγούς ή μονωτές. Αναφέρεται μόνο σε φαινόμενα μετάδοσης όπου υπάρχει μέσο διάδοσης και όπου το μέσο δεν κινείται, δηλαδή στην μετάδοση με αγωγή. Σε μικροσκοπική κλίμακα, η αγωγή της θερμότητας συμβαίνει καθώς άτομα και μόρια με υψηλή κινητική ενέργεια τα οποία ταλαντώνονται αλληλεπιδρούν με γειτονικά τους τα οποία έχουν χαμηλή κινητική ενέργεια. Η θερμότητα μεταφέρεται μέσω αγωγής όταν τα γειτονικά άτομα συγκρούονται μεταξύ τους, ή καθώς τα ηλεκτρόνια μετακινούνται από ένα άτομο σε ένα άλλο. Η αγωγή είναι ο σημαντικότερος τρόπος μεταφοράς θερμότητας μέσα σε ένα στερεό και ο λόγος που είναι μεγαλύτερη στα στερεά είναι επειδή το δίκτυο των σχετικά στενών και σταθερών χωρικών σχέσεων μεταξύ των ατόμων βοηθά στη μεταφορά ενέργειας μεταξύ τους.



Σχήμα 2.4: Αγωγή θερμότητας μέσω υλικών διαφορετικών θερμικών αγωγιμοτήτων[4]

Για τα χρονομεταβαλλόμενα προβλήματα μετάδοσης θερμότητας ισχύει ο 2ος νόμος του Fourier, ο οποίος περιλαμβάνει τον όρο της θερμικής διαχυτότητας και διατυπώνεται ως εξής [5]:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \nabla^2 T \quad (2.8)$$

όπου,

- $T [\text{Kelvin}]$ η θερμοκρασία,

- t [seconds] ο χρόνος,
- $\nabla^2 T$ ο Λαπλασιανός τελεστής, ο οποίος στο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων παίρνει την μορφή:

$$\nabla^2 T = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \left[\frac{m^2}{s} \right]$$

Ως θερμική διαχυτότητα ορίζεται ο λόγος της θερμικής αγωγιμότητας προς την ογκομετρική θερμοχωρητικότητα, και εκφράζει τον ρυθμό μεταφοράς θερμότητας μέσα από ένα υλικό. Η μαθηματική του διατύπωση είναι:

$$\alpha = \frac{k}{\rho c_p} \quad (2.9)$$

όπου,

- $k \left[\frac{W}{m \cdot K} \right]$ ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας,
- $\rho \left[\frac{kg}{m^3} \right]$ η πυκνότητα,
- $c_p \left[\frac{J}{kg \cdot K} \right]$ η θερμοχωρητικότητα.

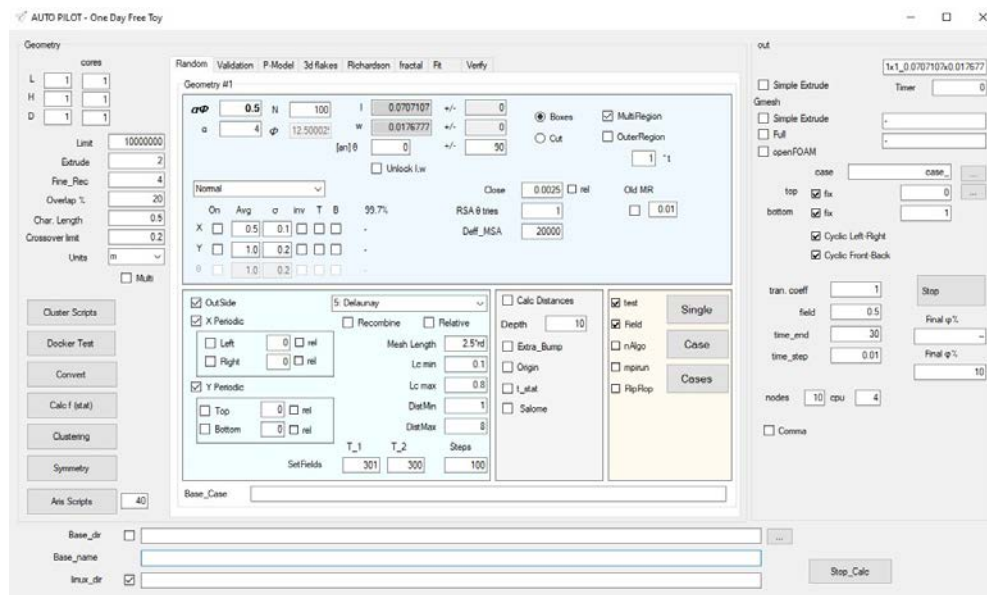
3 Υπολογιστική Ανάλυση

3.1 Κατασκευή Γεωμετρίας Και Υπολογιστικού Πλέγματος

3.1.1 Autopilot

Οι γεωμετρίες που χρησιμοποιήθηκαν στις υπολογιστικές προσομοιώσεις κατασκευάστηκαν με αυτοματοποιημένο τρόπο μέσω του λογισμικού Autopilot [6][7]. Ο χρήστης καθορίζει όλες τις παραμέτρους της γεωμετρίας, όπως:

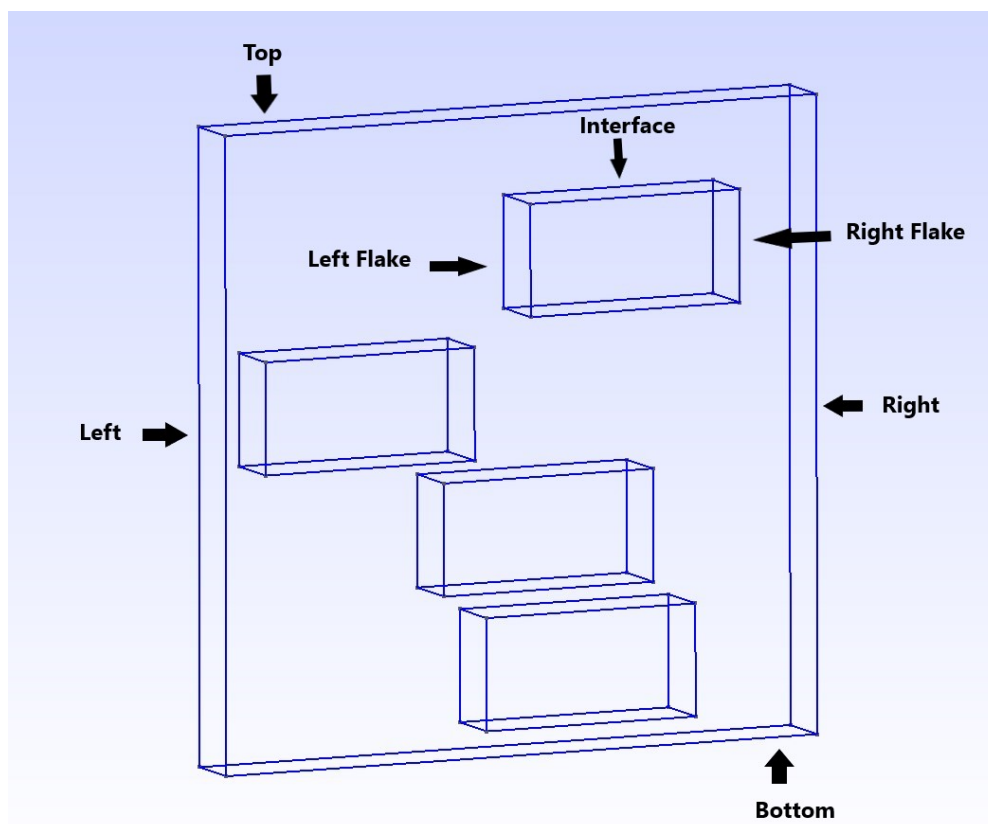
- Τον συνολικό αριθμό των ινών (N)
- Το κλάσμα όγκου ($\alpha\Phi$)
- Τον επιθυμητό λόγο διαστάσεων της ίνας (α)
- Την γωνία (θ) και το κατά πόσο αυτή θα είναι ίδια για όλες τις ίνες
- Την ύπαρξη ή μη περιβλήματος (bump) στη γεωμετρία



Σχήμα 3.1: Περιβάλλον λογισμικού Autopilot

Μπορούν επίσης να προεπιλεγούν βασικές παράμετροι του υπολογιστικού πλέγματος το οποίο θα δημιουργηθεί στην συνέχεια στο Gmsh. Το πρόγραμμα δέχεται ως πρότυπο ένα σύστημα αρχείων κατάλληλα διαμορφωμένο και προσαρμοσμένο στην περίπτωση του φαινομένου που επιλύεται έτσι ώστε κάθε δημιουργία γεωμετρίας να συνεπάγεται και την αυτόματη δημιουργία

του case που θα εισαχθεί στο λογισμικό επίλυσης OpenFOAM. Με αυτόν τον τρόπο περνάνε στην δημιουργηθείσα γεωμετρία αυτόματα τα ονόματα των συνόρων της γεωμετρίας (Σχήμα 3.2) που είναι απαραίτητα για το επόμενο βήμα, αυτό της δημιουργίας του πλέγματος στο Gmsh.



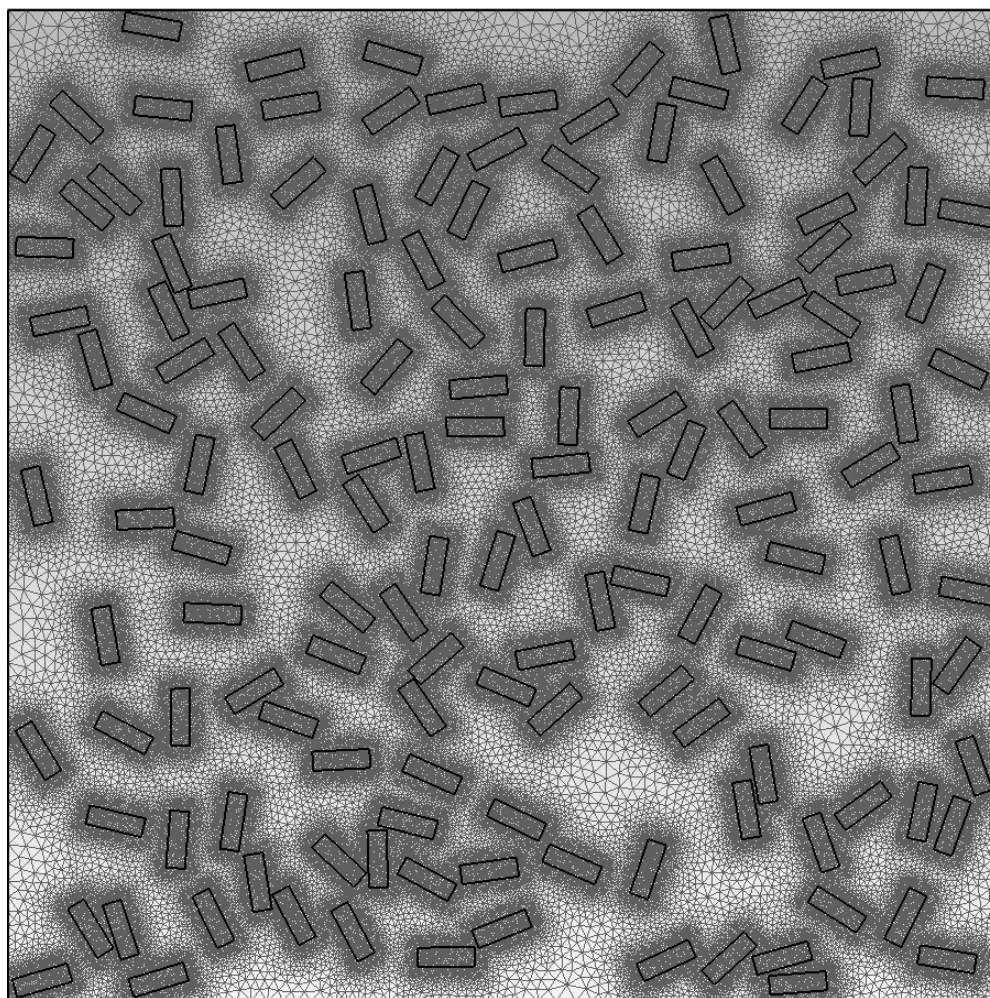
Σχήμα 3.2: Ονομασία συνόρων γεωμετρίας

3.1.2 Gmsh

Για την δημιουργία του υπολογιστικού πλέγματος μετά την δημιουργία της γεωμετρίας χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό ανοιχτού κώδικα Gmsh [8]. Το Gmsh χρησιμοποιεί τα τριδιάστατα πρότυπα της βιβλιοθήκης Open Cascade για να δημιουργήσει τις απαιτούμενες γεωμετρίες, παρέχει πολλές δυνατότητες και αλγόριθμους δημιουργίας υπολογιστικών πλεγμάτων και συμπεριλαμβάνει επιλογές για την προ- και μετεπεξεργασία των αποτελεσμάτων.

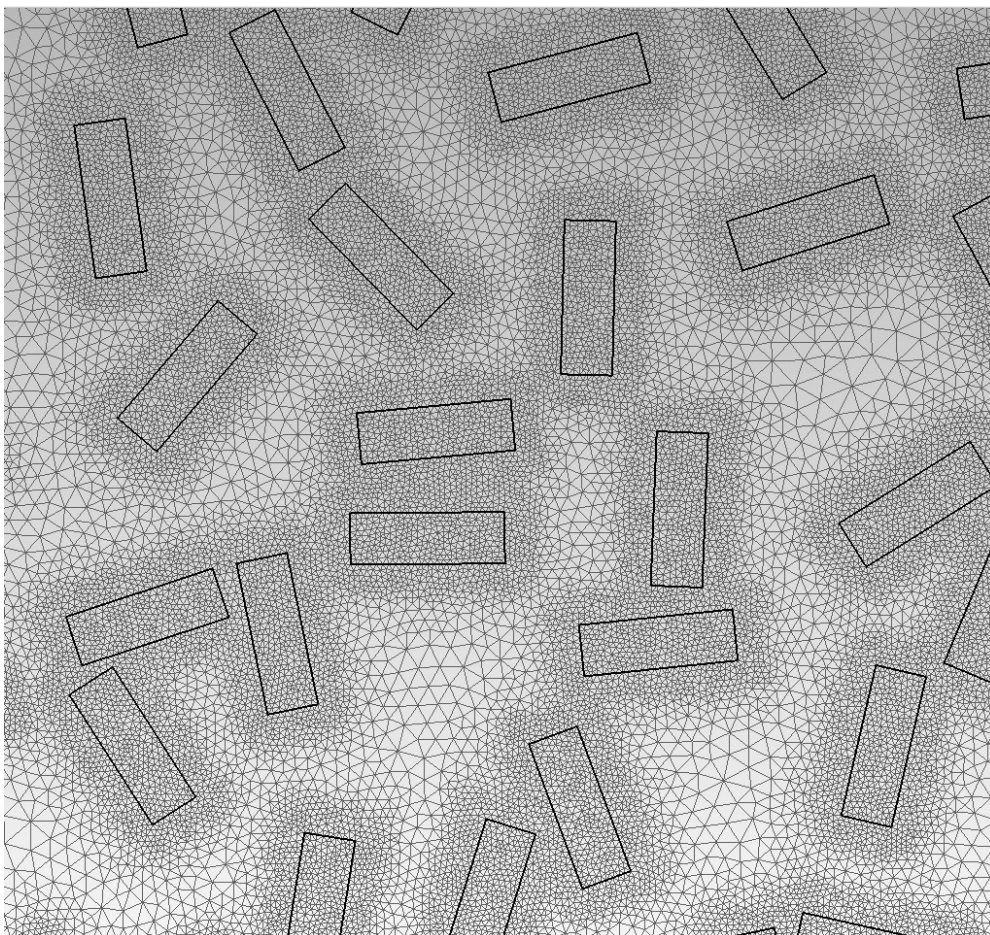
Στην περίπτωση που μελετάται, η γεωμετρία έχει την μορφή ενός τετράπλευρου με διαστάσεις 1x1 [m] όπου περιέχονται το μητρικό υλικό και τα σωματίδια ενίσχυσης, τα οποία έχουν την μορφή ινών ή φυλλιδίων. Η γεωμετρία που επιλύεται θεωρείται διδιάστατη όμως στην πραγματικότητα είναι τριδιάστατη με πάχος στην διάσταση z ενός υπολογιστικού κελιού, έτσι ώστε να μπορεί να γίνεται δεκτή από τον OpenFOAM ο οποίος λειτουργεί με τριδιάστατες γεωμετρίες. Όλες οι

παράμετροι που έχουν ήδη επιλεχθεί μέσω του Autopilot όπως ο αριθμός σωματιδίων ενίσχυσης (N), ο λόγος διαστάσεων (α), το κλάσμα όγκου ($\alpha\Phi$), η γωνία των σωματιδίων (θ) κ.α αποτυπώνονται στο Σχήμα 3.3. Εκεί φαίνεται επίσης το υπολογιστικό πλέγμα που έχει σχηματιστεί στο οποίο έχει επιλεγεί να γίνεται πύκνωση γύρω από τα σωματίδια που είναι και η περιοχή με το μεγαλύτερο ενδιαφέρον. Η πύκνωση υποδεικνύεται από την εντονότερη σκίαση γύρω από τις ίνες.



Σχήμα 3.3: Γεωμετρία και υπολογιστικό πλέγμα

Μια πιο εστιασμένη άποψη του πλέγματος γύρω από τις ίνες παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.4. Επισημαίνεται επίσης η επιλογή του εύρους τυχαίου προσανατολισμού (ϵ), δηλαδή το επιτρεπτό εύρος απόκλισης από την οριζόντια διεύθυνση, στις 90° .



Σχήμα 3.4: Εστιασμένη άποψη υπολογιστικού πλέγματος

3.2 Επίλυση

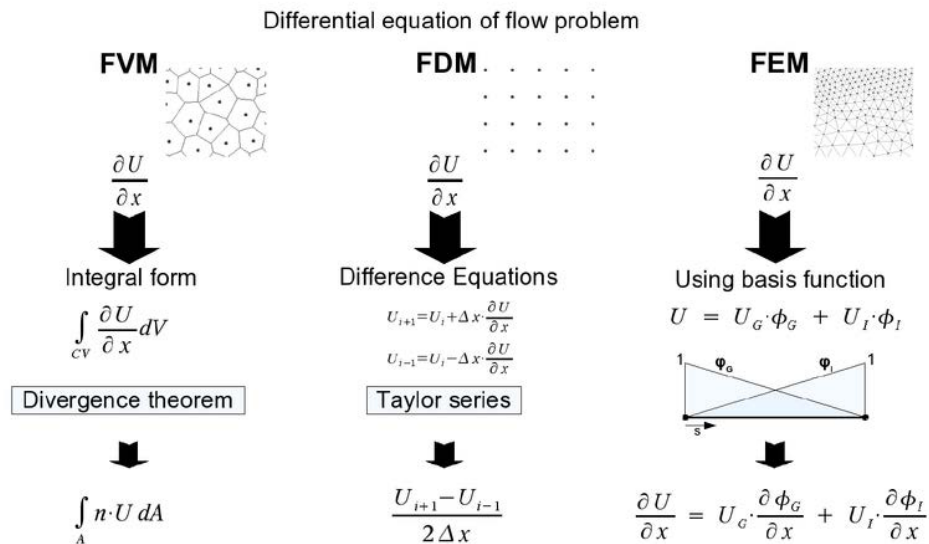
3.2.1 OpenFOAM

Για την υπολογιστική επίλυση των φαινομένων που πραγματεύεται η παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό OpenFOAM [9], ένας ανοιχτού κώδικα επιλύτης προβλημάτων υπολογιστικής ρευστομηχανικής. Ο OpenFOAM παρέχει πληθώρα εργαλείων επίλυσης προσαρμοσμένα σε κάθε τύπο προσομοίωσης, όπως μεταφορά θερμότητας, μάζας, υπερηχητικές και συμπιεστές ροές, χημικές αντιδράσεις, φαινόμενα τυρβώδους ροής μεγάλου ιξώδους κ.α. Όντας πλήρως ανοιχτού κώδικα παρέχει στον χρήστη την δυνατότητα να πραγματοποιήσει αλλαγές σε πολλά επίπεδα, όπως να παρέμβει στο είδος των εξισώσεων που περιγράφουν το υπο μελέτη φαινόμενο, να επιλέξει τα αριθμητικά σχήματα που θα χρησιμοποιηθούν, να συνδυάσει παραμέτρους επίλυσης από άλλα φαινόμενα για μια συγκεντρωτική επίλυση. Το γεγονός αυτό το καθιστά ιδανικό για εφαρμογές τόσο ερευνητικές όσο και βιομηχανικές.

Τα υπολογιστικά προβλήματα στον OpenFOAM λύνονται με την μέθοδο των πεπερασμένων όγκων (FVM - Finite Volume Method)[10]. Η βασική λογική της μεθόδου είναι ο μετασχηματισμός των διαφορικών εξισώσεων μερικών παραγώγων που περιγράφουν τον νόμο διατήρησης που ισχύει στο φαινόμενο σε ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων που αναφέρεται σε κάθε πεπερασμένο όγκο. Οι εξισώσεις διατήρησης μετατρέπονται στην ολοκληρωτική τους μορφή και το υπολογιστικό πλέγμα υποδιαιρείται σε μικρά χωρία τα οποία ονομάζονται πεπερασμένοι όγκοι και μπορούν να έχουν οποιοδήποτε πολυγωνικό σχήμα. Σε κάθε κελί επιλύεται η ολοκληρωτική μορφή των εξισώσεων διατήρησης με το ενδεδειγμένο σχήμα αριθμητικής ολοκλήρωσης και λαμβάνεται η τιμή της εξαρτημένης μεταβλητής στο κεντροειδές (centroid) του όγκου ελέγχου. Η βασικότερη διαφορά της μεθόδου πεπερασμένων όγκων σε σχέση με τις μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων (FEM) και πεπερασμένων διαφορών (FDM) είναι η επίλυση ολοκληρωτικών αντί διαφορικών εξισώσεων (Σχήμα 3.5). Επαναλαμβάνοντας την ίδια διαδικασία για όλα τα κελιά του πλέγματος λαμβάνεται το τελικό αποτέλεσμα της μεθόδου.

3.2.2 Case

Η διαχείριση του υπό μελέτη προβλήματος από τον OpenFOAM απαιτεί την οργάνωση όλων των απαραίτητων δεδομένων σε μια συγκεκριμένη δομή αρχείων που ονομάζεται Case. Σε αντίθεση



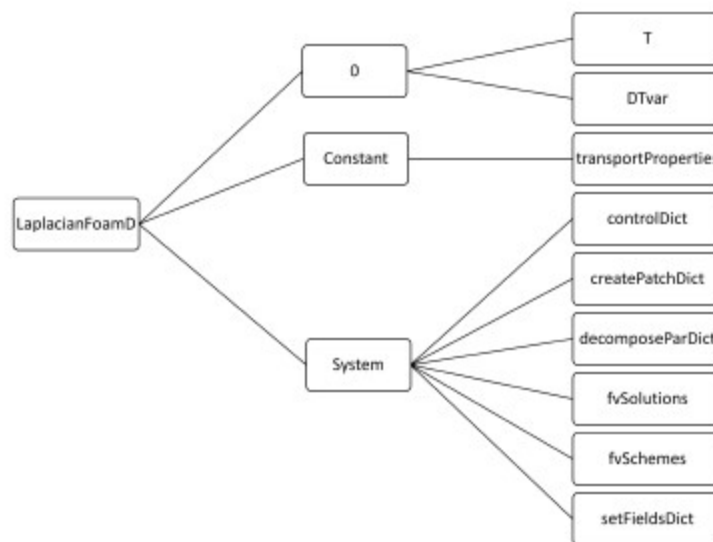
Σχήμα 3.5: Διαφορές μεθόδων FVM, FDM και FEM[11]

με άλλα παρόμοια λογισμικά ο OpenFOAM δεν διαθέτει γραφικό περιβάλλον εργασίας συνεπώς μέσω των αρχείων κειμένου του Case γίνεται σε πρώτη φάση ο καθορισμός όλων των παραμέτρων του προβλήματος από τον χρήστη. Η βασική μορφή κάθε case περιλαμβάνει 3 φακέλους: Στον φάκελο 0 περιέχονται όλες οι πληροφορίες για τις συνοριακές συνθήκες, στον φάκελο constant δίνονται όλες οι απαραίτητες φυσικές ιδιότητες και στον φάκελο system καθορίζονται οι παράμετροι και τα σχήματα επίλυσης, καθώς και η χρήση τυχόν βοηθητικών εργαλείων απαραίτητων για την προσομοίωση.

Αναλυτικότερα, παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.6 η δομή αρχείων ενός case του επιλύτη Laplacian-FoamD ο οποίος είναι ένας από τους 2 επιλύτες που χρησιμοποιήθηκαν, και περιγράφεται η λειτουργία κάθε αρχείου:

- Ο φάκελος 0 περιέχει τις μεταβλητές της θερμοκρασίας (T) και του πεδίου της θερμοδιαχυτότητας (DTvar). Εδώ ορίζονται οι συνοριακές συνθήκες σε κάθε ένα από τα σύνορα της γεωμετρίας.
- Ο φάκελος transportProperties περιέχει τις τιμές όλων των φυσικών ιδιοτήτων του προβλήματος, δηλαδή της θερμοδιαχυτότητας (DT).
- Στον φάκελο controlDict δίνονται τα επιθυμητά κριτήρια σύγκλισης και το χρονικό βήμα αποτύπωσης των αποτελεσμάτων.
- Στον φάκελο createPatchDict υπάρχουν οι πληροφορίες για τον ορισμό των επιφανειών της γεωμετρίας.

- Στον φάκελο `decomposeParDict` το υπολογιστικό πρόβλημα μοιράζεται στους επιμέρους πυρήνες του επεξεργαστή για ταχύτερη επίλυση
- Στον φάκελο `fvSolution` ορίζονται οι παράμετροι και οι αλγόριθμοι επίλυσης
- Στον φάκελο `fvSchemes` επιλέγεται το είδος των αριθμητικών μεθόδων που θα χρησιμοποιηθούν
- Στον φάκελο `setFieldsDict` στον οποίο θα γίνει εκτενέστερη αναφορά στην συνέχεια, ορίζονται οι τιμές των πεδίων των ιδιοτήτων.



Σχήμα 3.6: Δομή αρχείων solver LaplacianFoamD

3.2.3 Συνοριακές Συνθήκες

Οι συνοριακές συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν είναι του ίδιου είδους για την θερμοκρασία (T) και το πεδίο της θερμοδιαχυτότητας (DTvar), προσαρμοσμένες στις ανάγκες του προβλήματος αλλά και στο είδος solver που έχει επιλεγθεί να χρησιμοποιηθεί. Εφόσον δεν μελετάται η μετάδοση θερμότητας στην διάσταση z όλες οι εμπρός και πίσω επιφάνειες του μητρικού υλικού και των σωματιδίων ορίζονται ως `empty`, δηλαδή δεν εξετάζονται.

Στα αριστερά και δεξιά σύνορα σωματιδίων και μήτρας ορίζεται τύπος συνοριακής συνθήκης `cyclicAMI` (Cyclic Arbitrary Mesh Interface) ώστε η κατεύθυνση διάδοσης της θερμότητας να είναι κατακόρυφη. Με αυτό το είδος περιοδικής συνοριακής συνθήκης η ροή που βγαίνει από την επιφάνεια τίθεται όμοια με την ροή η οποία εισέρχεται στην επιφάνεια.

Στην διεπιφάνεια επαφής μήτρας και σωματιδίων τίθεται συνοριακή συνθήκη τύπου zeroGradient, η οποία θέτει τοπικά μηδενική κλίση της θερμοκρασίας.

Τέλος, οι επιφάνειες στο πάνω και κάτω μέρος των σωματιδίων τίθενται με σταθερή θερμοκρασία 0 και 1 αντίστοιχα με την συνοριακή συνθήκη fixedValue, ώστε για λόγους απλούστευσης των υπολογισμών η διαφορά θερμοκρασίας να ισούται με την μονάδα ($\Delta T=1$).

3.3 LaplacianFoamD

Ο LaplacianFoamD είναι ο βασικός επιλύτης που χρησιμοποιήθηκε για την υπολογιστική ανάλυση και αποτελεί μια παραλλαγή του LaplacianFoam [12] ο οποίος είναι ένας εκ των βασικών solver του OpenFOAM για πληθώρα προβλημάτων. Συγκεκριμένα για το πρόβλημα της μετάδοσης θερμότητας ο solver υπολογίζει το θερμοκρασιακό πεδίο λύνοντας την εξίσωση:

$$\frac{\partial}{\partial t}(T) - \nabla \cdot (D_T \nabla T) = S_T \quad (3.1)$$

Εφόσον το πρόβλημα μετάδοσης που επιλύεται είναι σταθερού χρόνου η χρονική παράγωγος απαλείφεται, όπως και ο πηγαίος όρος S_T , οπότε η υπό επίλυση εξίσωση γίνεται

$$\nabla \cdot (D_T \nabla T) = 0 \quad (3.2)$$

Η διαφορά του LaplacianFoamD σε σχέση με αυτόν στον οποίο είναι βασισμένος είναι ότι η θερμική διαχυτότητα δεν είναι βαθμωτό μέγεθος το οποίο αντιστοιχεί σε όλη την γεωμετρία, αλλά ένα βαθμωτό πεδίο με διαφορετική τιμή για τα σωματίδια και το μητρικό υλικό. Ορίζεται ως:

$$D_T = \frac{k}{\rho c_p} \quad (3.3)$$

όπου,

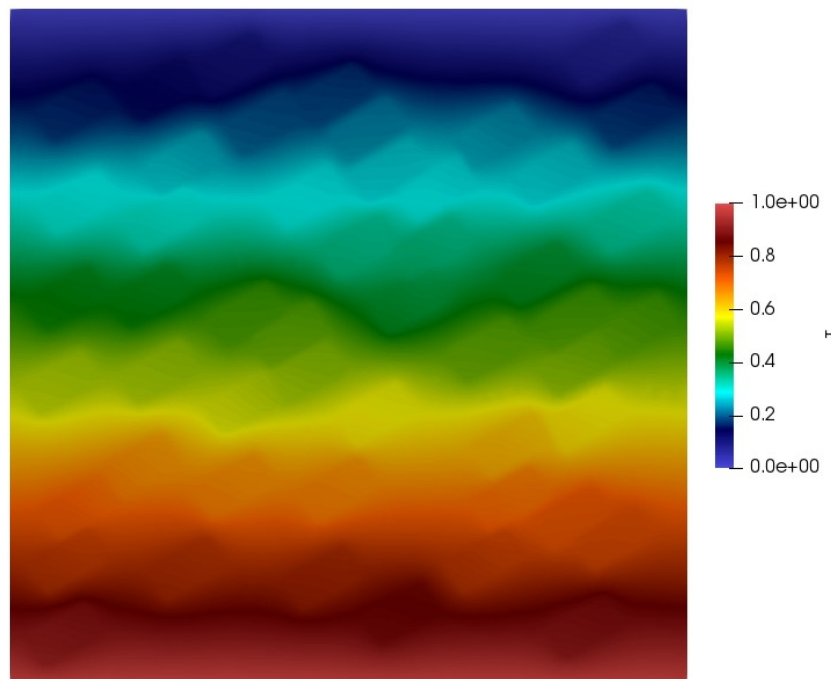
- $k \left[\frac{W}{m \cdot K} \right]$ ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας,
- $\rho \left[\frac{kg}{m^3} \right]$ η πυκνότητα,

- $c_p \left[\frac{J}{kg \cdot K} \right]$ η θερμοχωρητικότητα.

Η πυκνότητα και η θερμοχωρητικότητα θεωρούνται κοινές και για τις δύο περιοχές, οπότε η διαφορά της θερμικής διαχυτότητας εν τέλει είναι και η διαφορά μεταξύ των θερμικών αγωγιμοτήτων.

3.4 Paraview

Για την μετεπεξεργασία των αποτελεσμάτων και την σωστή οπτικοποίησή τους χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό Paraview. Πρόκειται για ένα ανοιχτού κώδικα λογισμικό post-processing με ικανότητα οπτικοποίησης των αποτελεσμάτων, ποιοτικής αλλά και ποσοτικής αξιολόγησής τους μέσω των δυνατοτήτων δημιουργίας διαγραμμάτων, διανυσμάτων και ισοϋψών καμπύλων. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα χρήσης της εφαρμογής παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.7 όπου απεικονίζεται το θερμοκρασιακό πεδίο μιας γεωμετρίας 50 φυλλιδίων (N) με λόγο διαστάσεων (α) 2, κλάσμα όγκου 0.5 ($\alpha\Phi$) και σε γωνία 30° .

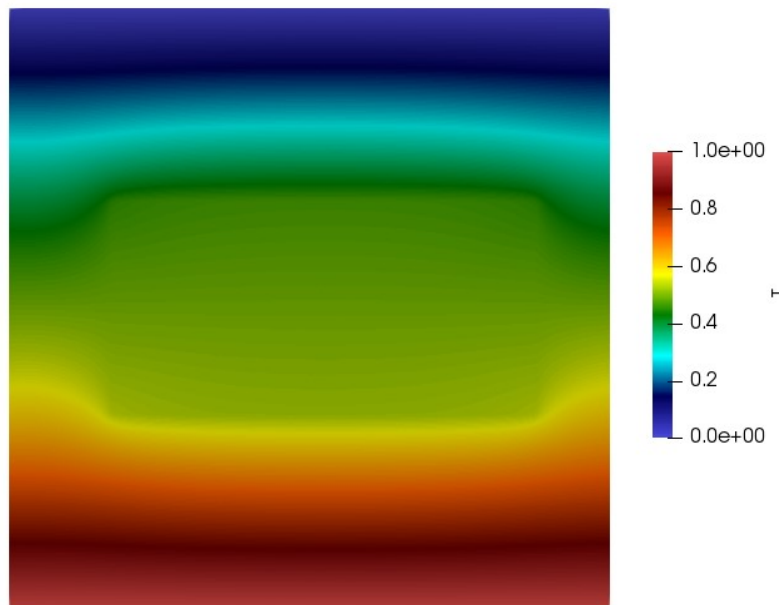


Σχήμα 3.7: Θερμοκρασιακό πεδίο γεωμετρίας $N=50, \alpha=2, \alpha\Phi=0.5, \theta=30^\circ$

4 Θερμική Αγωγιμότητα Ισότροπων Φυλλιδίων

4.1 Υπολογισμός Συντελεστή Θερμικής Αγωγιμότητας

Το παρόν κεφάλαιο εστιάζει στον υπολογισμό του συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας του σύνθετου υλικού. Αυτό το οποίο υπολογίζεται από τον επιλύτη OpenFOAM είναι το θερμοκρασιακό πεδίο εντός της δοθείσας γεωμετρίας, και συνεπώς και το πεδίο της κλίσης (gradient) της θερμοκρασίας. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα αυτού του πεδίου για γεωμετρία ενός μόνο οριζόντιου φυλλιδίου δίνεται στο Σχήμα 4.1, και το διάγραμμα της κλίσης φαίνεται στο Σχήμα 4.2. Οι αρνητικές τιμές του διαγράμματος εκφράζουν την μετάδοση της θερμότητας από κάτω προς τα πάνω.

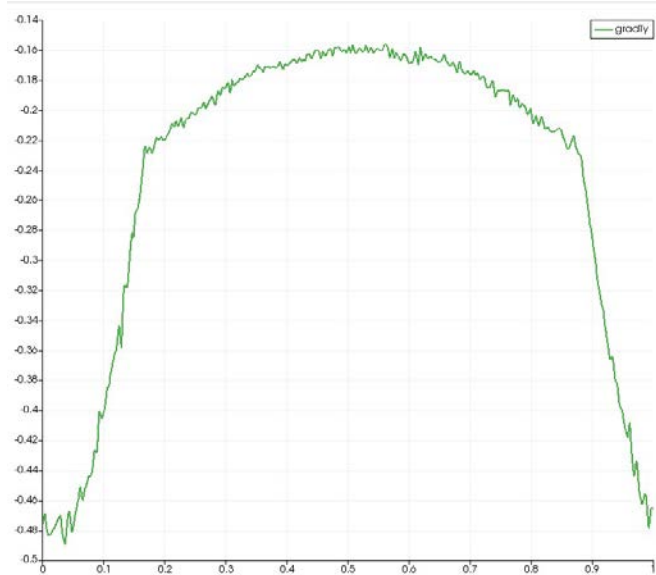


Σχήμα 4.1: Θερμοκρασιακό πεδίο $N=1$, $\alpha=2$, $\alpha\Phi=0.5$, $\theta=0^\circ$

Αρχικά επιλύεται η εξίσωση Laplace $\nabla^2 T = 0$ σε 2 διαστάσεις βάσει των παραδοχών της συγκεκριμένης μελέτης. Στη συνέχεια η θερμορροή μπορεί να υπολογιστεί από την εξίσωση:

$$Q = -K_0 \int_0^L \frac{\partial T}{\partial n} dx \quad (4.1)$$

όπου n το μοναδιαίο διάνυσμα κάθετο εξωτερικά της γεωμετρίας, K_0 η θερμική αγωγιμότητα του μητρικού υλικού και L το μήκος της επιφάνειας του σύνθετου υλικού. Στην περίπτωση αυτή $n = y$, με y τον κατακόρυφο άξονα στο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων.



Σχήμα 4.2: Διάγραμμα βαθμίδας κλίσης της θερμοκρασίας της γεωμετρίας του Σχήματος 4.1

Διαφαίνεται άρα πώς για τον υπολογισμό της θερμορροής αρκεί ο υπολογισμός της κλίσης της θερμοκρασίας στην κατακόρυφη διεύθυνση από τον OpenFOAM, και στην συνέχεια η εφαρμογή μιας υπορουτίνας ολοκλήρωσης στην πάνω επιφάνεια του υλικού όπου καταλήγει η ροή της θερμότητας. Συνδυάζοντας την Εξίσωση 4.1 με τον Νόμο του Fourier για την μετάδοση με αγωγή καταλήγουμε στην εξίσωση από που μπορεί να υπολογιστεί ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας του υλικού:

$$K_{\text{eff}} = \frac{H \cdot K_0}{\Delta T \cdot L} \int_0^L \frac{\partial T}{\partial n} dx \quad (4.2)$$

όπου L το μήκος του σύνθετου υλικού, H το ύψος του, ΔT η διαφορά θερμοκρασίας μεταξύ της πάνω και της κάτω επιφάνειας, K_0 η θερμική αγωγιμότητα του μητρικού υλικού.

Εφόσον το υλικό όμως περιέχει δύο συντελεστές θερμικής αγωγιμότητας υπό την μορφή των διαφορετικών βαθμωτών πεδίων για τα φυλλίδια και το μητρικό υλικό, η εξίσωση διαφοροποιείται και έχει την μορφή:

$$k_{\text{eff}} = \frac{H}{\Delta T \cdot L} \left(k_{\text{matrix}} \cdot \int_{A_m} \left(\frac{dT}{dy_{\text{matrix}}} \right) + k_{\text{flake}} \cdot \int_{A_f} \left(\frac{dT}{dy_{\text{flake}}} \right) \right) \quad (4.3)$$

Στην περίπτωση που η γεωμετρία επιλεχθεί να έχει κάποιο περίβλημα (bump) τότε απαλείφεται από την εξίσωση ο όρος του ολοκληρώματος για τα φυλλίδια και έχουμε την εξίσωση για την

συνολική αγωγιμότητα:

$$k_1 = \frac{H \cdot k_{\text{matrix}}}{\Delta T \cdot L} \left(\int_0^L \left(\frac{dT}{dy_{\text{matrix}}} \right) \right) \quad (4.4)$$

Επισημαίνεται τέλος ότι οι διαστάσεις της γεωμετρίας που είναι μοναδιαίες και στις δύο διαστάσεις, και το μοναδιαίο ΔT που έχει επιλεγθεί απλοποιούν περαιτέρω την εξίσωση.

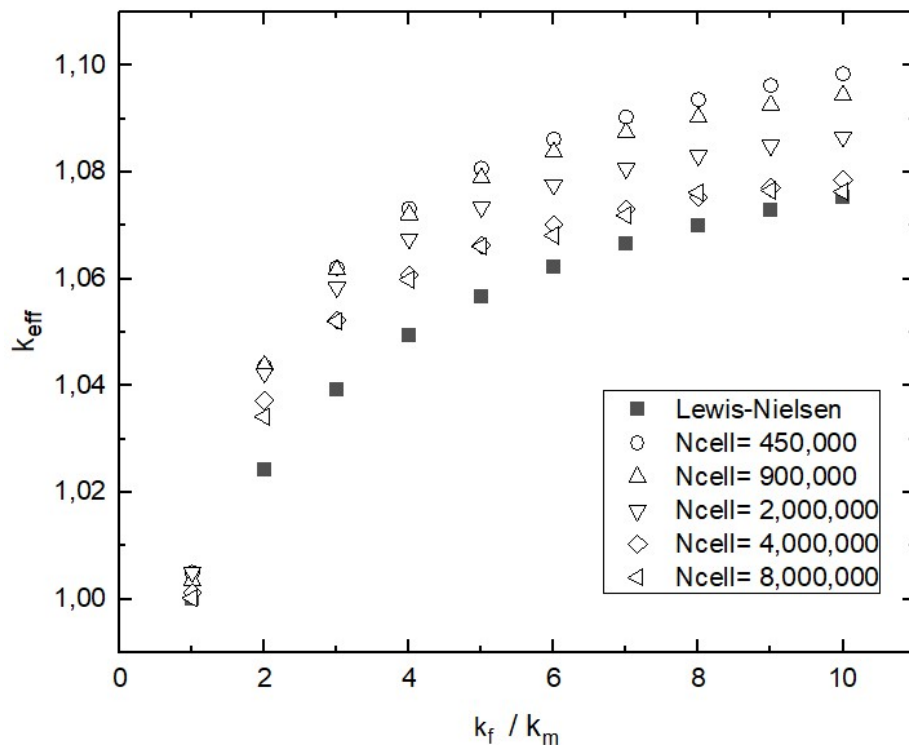
4.2 Εγκυρότητα πλέγματος

Πριν την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων και για να μπορεί να εξαχθεί οποιοδήποτε ασφαλές συμπέρασμα είναι απαραίτητη μια συστηματική διαδικασία καθορισμού ορισμένων παραμέτρων του υπολογιστικού πλέγματος και ο έλεγχος της εγκυρότητάς του. Γενικώς ένα πλέγμα το οποίο είναι πιο πυκνό, δηλαδή που υποδιαιρεί την γεωμετρία σε μικρότερα κομμάτια και ελαχιστοποιεί την απόσταση μεταξύ των κελιών, επιτυγχάνει μεγαλύτερη ακρίβεια των αποτελεσμάτων. Ο αυξημένος αριθμός κελιών του πλέγματος ωστόσο συνεπάγεται και την σημαντική αύξηση του χρόνου σύγκλισης της προσομοίωσης και αυξάνει το υπολογιστικό κόστος, οπότε είναι σημαντικό να γίνεται ένας συμβιβασμός μεταξύ των απαιτήσεων για μια λύση με αποδεκτή ακρίβεια και ένα λογικό υπολογιστικό κόστος.

Στόχος της μελέτης εγκυρότητας πλέγματος είναι η λύση που λαμβάνεται από τις υπολογιστικές προσομοιώσεις να μην επηρεάζεται από το μέγεθος του πλέγματος, δηλαδή να βρεθεί ένα σετ παραμέτρων για τις οποίες περαιτέρω αύξηση της πυκνότητας πλέγματος συνεπάγεται μια ασήμαντη διαφορά στην τιμή της λύσης. Για την πραγματοποίηση της μελέτης μπορούν να ακολουθηθούν αρκετές εξειδικευμένες μέθοδοι, όπως η μέθοδος του Roache [13] ή η παρεμβολή Richardson [14].

Στην συγκεκριμένη περίπτωση επιλέχθηκε να ακολουθηθεί μια απλούστερη μέθοδος. Ο ενδεδειγμένος αριθμός φυλλιδίων προσδιορίστηκε σε προηγούμενη ερευνητική εργασία [15] και ορίστηκε σε $N=500$ για όλες τις περιπτώσεις που θα εξεταστούν στην παρούσα εργασία. Ο λόγος διαστάσεων των φυλλιδίων ορίστηκε ως $\alpha=8$ και το κλάσμα όγκου ως $\alpha\Phi=0.5$. Έγινε διάκριση σε 2 περιπτώσεις: Στην πρώτη γεωμετρία δόθηκε στα φυλλίδια οριζόντιος προσανατολισμός ομοιόμορφα ενώ στην δεύτερη ο προσανατολισμός τους επιλέχθηκε να είναι τυχαίος με $\epsilon=90^\circ$. Με εκκίνηση ένα μικρό πλέγμα 450.000 κελιών ο αριθμός τους διπλασιάστηκε σε κάθε νέα προσομοίωση και έγινε σύγκριση της τιμής του συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας που προέκυπτε με αυτόν της προηγούμενης

προσομοίωσης. Σε κάθε πλέγμα έγινε υπολογισμός του συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας για λόγο αγωγιμοτήτων φυλλιδίων προς το μητρικό υλικό $\frac{k_f}{k_m}$ μέχρι την τιμή 10, με εκκίνηση το 1 και αντίστοιχο βήμα. Τα αποτελέσματα για την περίπτωση του ομοιόμορφου οριζόντιου προσανατολισμού παρουσιάζονται στο Σχήμα 4.3:

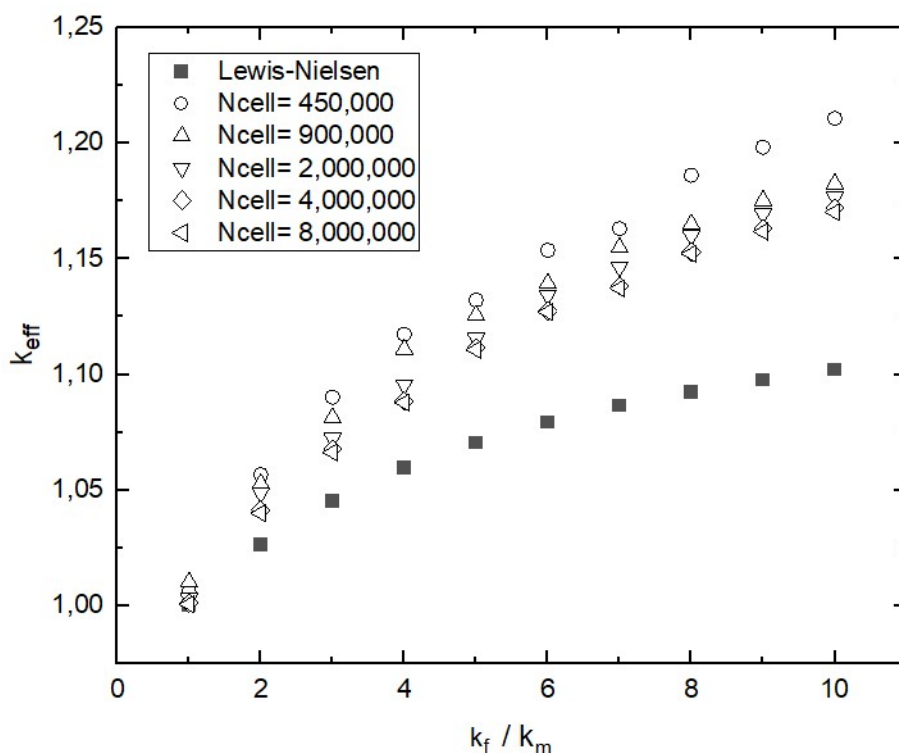


Σχήμα 4.3: Επίδραση πλήθους κελιών γεωμετρίας $N=500$, $\alpha=8$, $\alpha\Phi=0.5$, $\theta=0^\circ$ στην υπολογιστική λύση και σύγκριση αποτελεσμάτων με μοντέλο Lewis-Nielsen

Κοιτάζοντας το διάγραμμα παρατηρείται ότι τα πλέγματα 450 και 900 χιλιάδων κελιών ταυτίζονται στις προβλέψεις τους για την τιμή του συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας σε χαμηλές τιμές του λόγου αγωγιμοτήτων ενώ στις υψηλότερες είναι ορατή η διαφοροποίηση στο αποτέλεσμα. Διπλασιάζοντας τον αριθμό κελιών σε 2 εκατομμύρια τα αποτελέσματα παρουσιάζουν σημαντική διαφορά, με αντίστοιχη εικόνα να υπάρχει και στην περίπτωση του πλέγματος 4 εκατομμυρίων κελιών. Παρατηρείται ωστόσο ότι φτάνοντας στα 8 εκατομμύρια κελιά οι τιμές που παίρνουμε για την θερμική αγωγιμότητα είναι πρακτικά όμοιες και η αλλαγή στην λύση αντιστοιχεί σε ποσοστό μεταβολής της τάξεως του 1%, κριτήριο που επίσης χρησιμοποιείται στην παρεμβολή Richardson.

Στο διάγραμμα επίσης παρουσιάζονται και οι προβλέψεις τιμών για την αγωγιμότητα που δίνει σε κάθε λόγο αγωγιμοτήτων το μοντέλο Lewis-Nielsen στο οποίο θα γίνει εκτενέστερη αναφορά στη συνέχεια. Η αύξηση του αριθμού των κελιών μειώνει σημαντικά την απόκλιση τιμών μεταξύ προσομοιώσεων και μοντέλου μέχρι ο αριθμός κελιών να αντιστοιχεί σε περίπου 4 εκατομμύρια.

Εξετάζοντας την περίπτωση φυλλιδίων ίδιου αριθμού και γεωμετρίας αλλά με τον προσανατολισμό να είναι αυτή τη φορά τυχαίος, η εικόνα του διαγράμματος παρουσιάζεται στο Σχήμα 4.4:



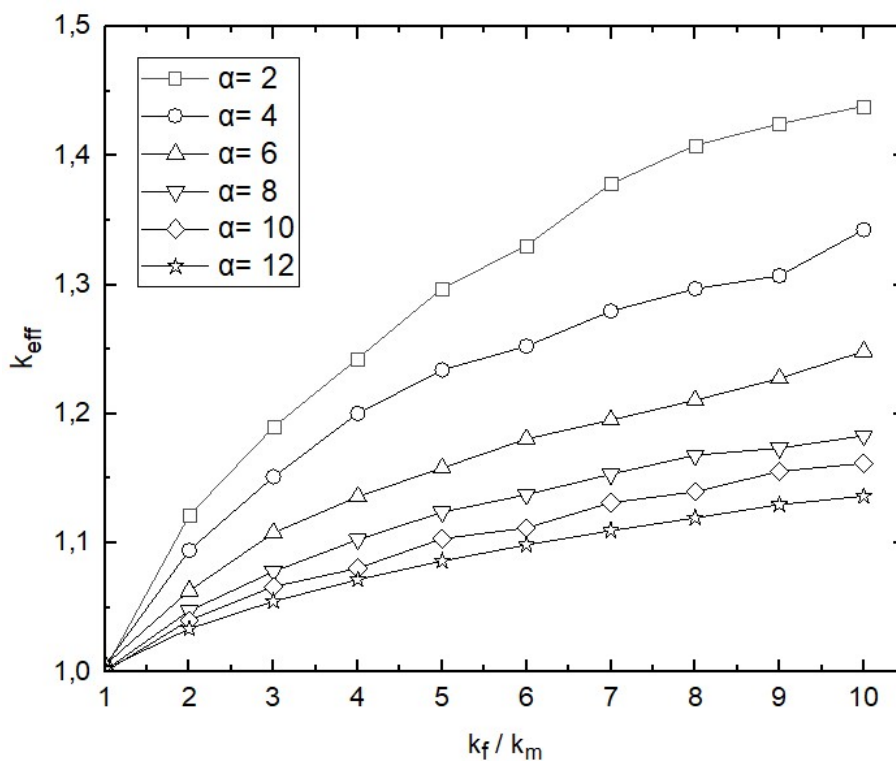
Σχήμα 4.4: Επίδραση πλήθους κελιών γεωμετρίας $N=500$, $\alpha=8$, $\alpha\Phi=0.5$, $\theta=0^\circ$, $\varepsilon=90^\circ$ στην υπολογιστική λύση και σύγκριση αποτελεσμάτων με μοντέλο Lewis-Nielsen

Αντίστοιχη εικόνα στην βελτίωση της λύσης παρουσιάζεται μεταξύ των πλεγμάτων 450, 900 χιλιάδων και 2 εκατομμυρίων κελιών. Ωστόσο η βελτίωση δεν είναι τόσο σημαντική όσο στην περίπτωση των οριζόντιων φυλλιδίων με τον διπλασιασμό των κελιών σε 4 εκατομμύρια, ενώ υπάρχει ουσιαστικά ταύτιση των αποτελεσμάτων όταν τα κελιά γίνουν 8 εκατομμύρια. Η ίδια εικόνα παρουσιάζεται και σε ότι αφορά την σύγκλιση με τις τιμές του μοντέλου Lewis-Nielsen, και αξίζει να σημειωθεί η μεγαλύτερη απόκλιση των τιμών του μοντέλου από αυτές των προσομοιώσεων σε σχέση με προηγουμένως.

Συμπεραίνεται ότι για την περίπτωση τυχαίου προσανατολισμού φυλλιδίων ενδεχομένως θα αρκούσε ένας αριθμός κελιών πλέγματος μικρότερος από 4 εκατομμύρια, ωστόσο επειδή αντικείμενο της εργασίας δεν αποτελούν μόνο τα φυλλίδια τυχαίου προσανατολισμού ο αριθμός των κελιών για τις προσομοιώσεις τίθεται σε $N_{cell} = 4.000.000$. Περαιτέρω αύξηση του αριθμού δεν προσδίδει ουσιαστική βελτίωση στην λύση ενώ το υπολογιστικό κόστος αυξάνεται σημαντικά.

4.3 Επίδραση λόγου διαστάσεων σωματιδίων

Έχοντας καταλήξει στις παραμέτρους για το υπολογιστικό πλέγμα στην συνέχεια μελετήθηκε η σχέση ανάμεσα στον λόγο διαστάσεων των φυλλιδίων α και στην τιμή της θερμικής αγωγιμότητας. Κρατώντας όσο το δυνατόν σταθερό τον αριθμό των υπολογιστικών κελιών, με εκκίνηση την τιμή $\alpha=2$, με βήμα 2 και τελικό όριο την τιμή $\alpha=12$ έγιναν προσομοιώσεις για τιμές του λόγου αγωγιμοτήτων φυλλιδίου μήτρας από 1 ως 10. Ο προσανατολισμός των φυλλιδίων επιλέχθηκε να είναι τυχαίος, με τυχειότητα 90° . Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων παρουσιάζονται στο διάγραμμα του Σχήματος 4.5:



Σχήμα 4.5: Επίδραση λόγου διαστάσεων σωματιδίων γεωμετρίας $N=500$, $\alpha\Phi=0.5$, $\theta=0^\circ$, $\varepsilon=90^\circ$ στην τιμή της θερμικής αγωγιμότητας

Από τα αποτελέσματα συμπεραίνεται πως η τιμή του λόγου διαστάσεων είναι καθοριστική για την τιμή του συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας του υλικού. Μεγαλύτερη τιμή του λόγου α , δηλαδή λεπτότερα φυλλίδια με μεγάλο μήκος και μικρό πλάτος, συνεπάγεται μικρότερη τιμή της αγωγιμότητας. Η διαφορά γίνεται σημαντικότερη καθώς αυξάνεται ο λόγος των αγωγιμοτήτων.

4.4 Σύγκριση με το μοντέλο Lewis-Nielsen

Για το πρόβλημα του υπολογισμού του συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας του σύνθετου υλικού έχουν αναπτυχθεί διάφορα μαθηματικά μοντέλα, μεταξύ των οποίων τα μοντέλα Baschirow/Selenew [16], Hamilton/Crosser [17] και Lewis-Nielsen [18]. Το μοντέλο Baschirow/Selenew αναφέρεται σε σφαιρικά σωματίδια και ισότροπες φάσεις ενώ το μοντέλο Hamilton/Crosser σε σωματίδια διαφόρων τύπων τα οποία μπορεί να είναι σφαιρικά ή και να αποκλίνουν πολύ από την σφαιρικότητα.

Το μοντέλο ωστόσο το οποίο αναφέρεται σε περιπτώσεις όμοιες με αυτές που μελετώνται στην παρούσα εργασία και είναι καλύτερα προσαρμοσμένο στον τύπο των γεωμετριών που χρησιμοποιούνται είναι το μοντέλο Lewis-Nielsen. Για αυτό το λόγο επιλέγεται να γίνει σύγκριση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων με το συγκεκριμένο μοντέλο.

Το μοντέλο έχει ως βασικές συνιστώσες του το σχήμα των σωματιδίων ενίσχυσης και τον προσανατολισμό τον οποίον έχουν μέσα στην γεωμετρία. Οι εξισώσεις του μοντέλου είναι:

$$k_c = k_m \left[\frac{1 + AB\Phi}{1 - B\psi\Phi} \right] \quad (4.5)$$

$$B = \frac{\frac{k_f}{k_m} - 1}{\frac{k_f}{k_m} + A}, \quad \psi = 1 + \frac{1 - \Phi}{\Phi_m^2} \Phi \quad (4.6)$$

Η παράμετρος A σχετίζεται με την σταθερά Einstein k_e με την εξίσωση $A = k_e - 1$ και η τιμή της δίνεται από πίνακες. Το Φ_m είναι το μέγιστο κλάσμα όγκου των σωματιδίων και ορίζεται ως ο πραγματικός τους όγκος προς τον φαινομενικό τους όγκο όταν βρίσκονται σε πλήρη έκταση. Οι τιμές για τις παραμέτρους του μοντέλου δίνονται στους δύο πίνακες παρακάτω. Σημειώνεται πως το ϕ_a είναι το μέγιστο κλάσμα όγκου σφαιρικών σωματιδίων.

Το μοντέλο Lewis-Nielsen αξιοποιήθηκε για την σύγκριση μεταξύ των αποτελεσμάτων που παρουσιάστηκαν στην ενότητα 4.3 και όσων προβλέπουν οι εξισώσεις του μοντέλου. Για τον υπολογισμό των αποτελεσμάτων του μοντέλου υπολογίστηκε ο βαθμός πλήρωσης μέσω της εξίσωσης: $\phi = \frac{N\alpha t^2}{LH}$, με α και t τις διαστάσεις των φυλλιδίων για τον εκάστοτε λόγο διαστάσεων. Εισάγοντας τις τιμές των παραμέτρων A και Φ_m που ενδείκνυνται για το υπό μελέτη πρόβλημα υπολογίζονται οι ποσότητες της εξίσωσης 4.6, και τελικώς της εξίσωσης 4.5. Τα αποτελέσματα των συγκρίσεων

Είδος σωματιδίων πλήρωσης	Κατεύθυνση ροής θερμότητας	A
Σφαίρες	Οποιαδήποτε	1.5
Συσσωματώματα σφαιρών	Οποιαδήποτε	$\frac{2.5}{\Phi_a} - 1$
Τυχαία τοποθετημένες ράβδοι $a = 2$	Οποιαδήποτε	1.58
Τυχαία τοποθετημένες ράβδοι $a = 4$	Οποιαδήποτε	2.08
Τυχαία τοποθετημένες ράβδοι $a = 6$	Οποιαδήποτε	2.8
Τυχαία τοποθετημένες ράβδοι $a = 10$	Οποιαδήποτε	4.93
Τυχαία τοποθετημένες ράβδοι $a = 15$	Οποιαδήποτε	8.38
Μονοαξονικές ίνες	Παράλληλη στις ίνες	$\frac{2L}{D}$
Μονοαξονικές ίνες	Κάθετη στις ίνες	0.5

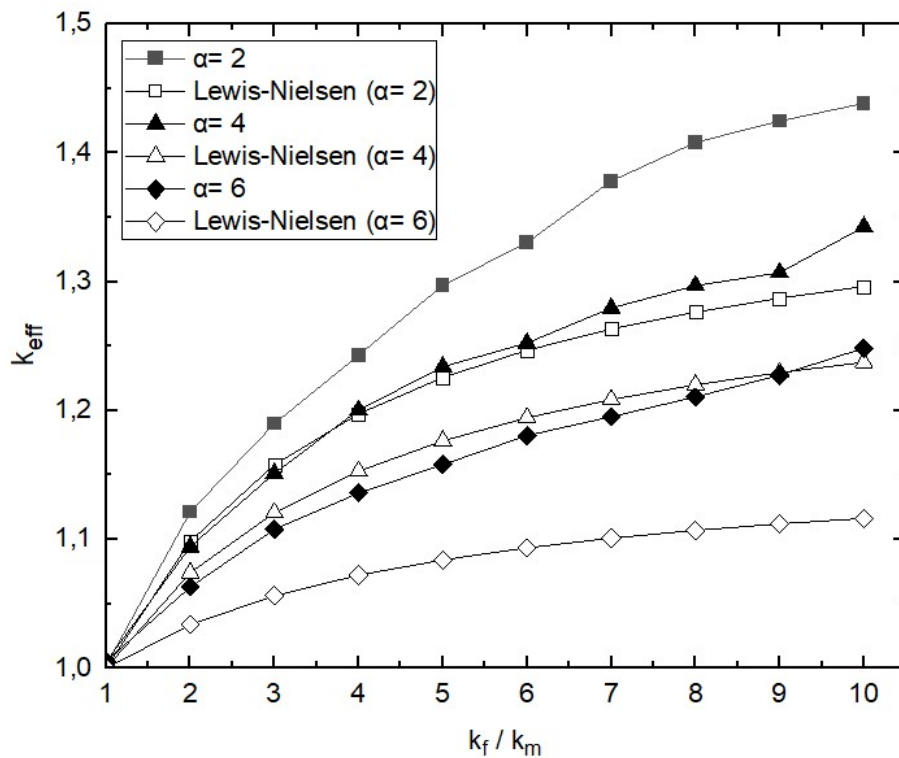
Πίνακας 1: Τιμές του συντελεστή A

Είδος σωματιδίων πλήρωσης	Τύπος πλήρωσης	Φ_m
Σφαίρες	Εξαγωνικός	0.7405
Σφαίρες	Κυβικός στις επιφάνειες	0.7405
Σφαίρες	Κυβικός στο κέντρο σώματος	0.6
Σφαίρες	Απλός κυβικός	0.524
Σφαίρες	Τυχαίος κλειστός	0.637
Σφαίρες	Τυχαίος αραιός	0.601
Ράβδοι ή ίνες	Μονοαξονικές εξαγωνικός κλειστός	0.907
Ράβδοι ή ίνες	Μονοαξονικές απλός κυβικός	0.785
Ράβδοι ή ίνες	Μονοαξονικές τυχαία	0.82
Ράβδοι ή ίνες	Τριδιάστατες τυχαία	0.52

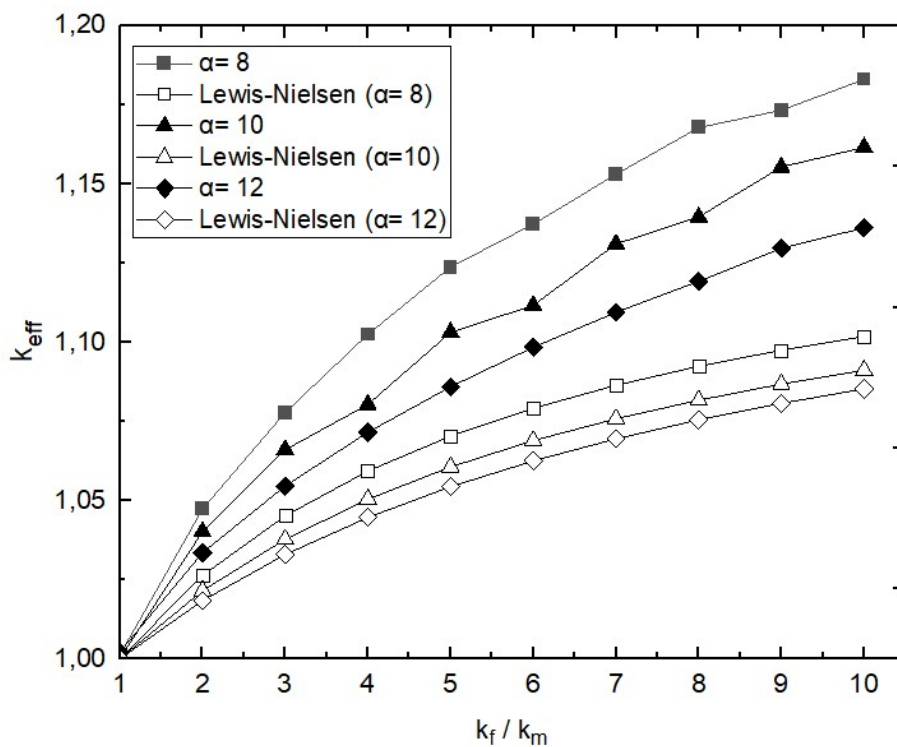
Πίνακας 2: Τιμές του συντελεστή Φ_m

μεταξύ προσομοιώσεων και μοντέλου παρουσιάζονται στα Σχήματα 4.6 και 4.7, ενώ στο Σχήμα 4.8 δίνεται η εικόνα του θερμοκρασιακού πεδίου μιας εκ των γεωμετριών από την οποία λήφθηκαν τα αποτελέσματα.

Κοιτάζοντας τα διαγράμματα παρατηρείται ότι η γενική συμπεριφορά μοντέλου και προσομοιώσεων είναι σε συμφωνία, υπάρχει ωστόσο ορατή απόκλιση μεταξύ των αποτελεσμάτων η οποία αυξάνεται με την αύξηση του λόγου των αγωγιμοτήτων. Τα αποτελέσματα που λαμβάνονται από τις προσομοιώσεις για τις καμπύλες δίνουν γενικά μεγαλύτερες τιμές συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας, ενώ και στις 2 περιπτώσεις υπάρχει τάση για οριζοντίωση των αποτελεσμάτων και μείωση της κλίσης των καμπυλών με την αύξηση της αγωγιμότητας των φυλλιδίων. Το αποτέλεσμα αυτό ερμηνεύεται ως μειούμενη επίδραση της αυξημένης αγωγιμότητας των φυλλιδίων σε υψηλούς λόγους kf/km , γεγονός που επιβεβαιώνεται σε προηγούμενη μελέτη που έγινε επί του προβλήματος [15]. Τέλος, η απόκλιση μεταξύ προσομοιώσεων και μοντέλου φαίνεται να είναι επίσης μεγαλύτερη σε υψηλούς λόγους διαστάσεων φυλλιδίων.



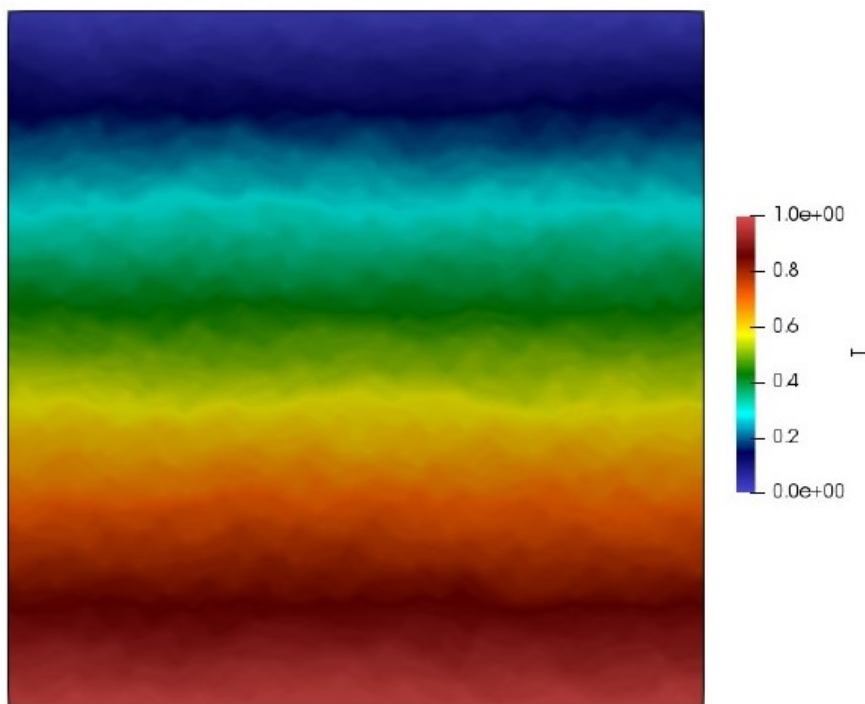
Σχήμα 4.6: Σύγκριση μεταξύ τιμών θερμικής αγωγιμότητας προσομοιώσεων και μοντέλου για $\alpha=2$ έως 6, $N=500$, $\alpha\Phi=0.5$, $\theta=0^\circ$, $\varepsilon=90^\circ$



Σχήμα 4.7: Σύγκριση μεταξύ τιμών θερμικής αγωγιμότητας προσομοιώσεων και μοντέλου για $\alpha=8$ έως 12, $N=500$, $\alpha\Phi=0.5$, $\theta=0^\circ$, $\varepsilon=90^\circ$

4.5 Ανάλυση Ευαισθησίας Μοντέλου Lewis-Nielsen

Η απόκλιση των τιμών για το K_{eff} οδήγησε στην περαιτέρω διερεύνηση των συντελεστών A και Φ_m του μοντέλου. Οι συντελεστές είναι διορθωτικοί δηλαδή λαμβάνουν τιμές ανάλογα με το εκάστοτε πρόβλημα ώστε το μοντέλο να παρουσιάζει την επιθυμητή συμπεριφορά, συνεπώς αναζητήθηκαν οι τιμές για τις οποίες θα υπάρξει συμφωνία με τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων.



Σχήμα 4.8: Θερμοκρασιακό πεδίο γεωμετρίας $N=500$, $\alpha\Phi=0.5$, $\theta=0^\circ$, $\varepsilon=90^\circ$

Θέτοντας ως μεταβλητές τις δύο παραμέτρους του μοντέλου και χρησιμοποιώντας τον solver του MS Excel απαιτήθηκε να εξισωθούν οι τιμές του μοντέλου με αυτές που πάρθηκαν ως αποτελέσματα των προσομοιώσεων. Τα αποτελέσματα αυτής της διαδικασίας παρουσιάζονται στον Πίνακα 3:

Λόγος Διαστάσεων α	Συντελεστής Φ_m	Συντελεστής A				
		$\frac{k_f}{k_m} = 6$	$\frac{k_f}{k_m} = 7$	$\frac{k_f}{k_m} = 8$	$\frac{k_f}{k_m} = 9$	$\frac{k_f}{k_m} = 10$
$\alpha = 2$	0.65	27.11	22.05	16.28	13.76	10.37
$\alpha = 4$	0.69	7.23	7.12	6.78	6.44	5.43
$\alpha = 6$	0.74	38.42	24.84	21.37	19.33	15.68
$\alpha = 8$	0.77	43.56	31.27	25.99	20.98	15.88
$\alpha = 10$	0.79	67.26	35.28	31.53	27.78	25.36
$\alpha = 12$	0.83	69.12	38.13	32.86	28.86	26.61

Πίνακας 3: Τιμές παραμέτρων A και Φ_m για $K_f/k_m=1$ έως 6, $\alpha=2$ έως 12 που απαιτούνται για την σύγκλιση μοντέλου Lewis-Nielsen και προσομοιώσεων.

Παρατηρείται ότι οι τιμές για να υπάρξει σύγκλιση είναι πολύ αυξημένες σε σχέση με όσες προτείνονται από την βιβλιογραφία σε αντίστοιχες περιπτώσεις (Πίνακες 1 και 2), ενώ για λόγους αγωγιμότητας κάτω του 6 δεν μπορεί να βρεθεί ζεύγος τιμών ώστε να υπάρξει σύγκλιση.

Το γεγονός αυτό οδήγησε στην περαιτέρω διερεύνηση της επίδρασης των παραμέτρων στο μοντέλο, με την πραγματοποίηση ανάλυσης ευαισθησίας. Αντικαθιστώντας την εξίσωση 4.6 στην εξίσωση 4.5 και έχοντας υπολογίσει την παράμετρο Φ για γεωμετρία με $\alpha=8$ προκύπτει η εξίσωση:

$$k_c = \frac{\left(\frac{k_f}{k_m} \Phi_m^2\right) + \left(0.0314A \frac{k_f}{k_m} \Phi_m^2\right) + \left(0.9686A \Phi_m^2\right)}{\left(\left(\frac{k_f}{k_m} + A\right) \Phi_m^2\right) - \left(0.0314 \frac{k_f}{k_m} \Phi_m^2\right) + \left(0.00314 \Phi_m^2\right) + \left(0.00095 \frac{k_f}{k_m}\right) + 0.00095} \quad (4.7)$$

Για να απαιφθεί η παράμετρος k_f/k_m επιλέχθηκε να εξεταστούν 3 περιπτώσεις, για λόγο $k_f/k_m=2$, 5 και 10. Οι 3 εξισώσεις τότε είναι:

Για $k_f/k_m=2$:

$$k_c = \frac{2\Phi_m^2 + 0.0314A \cdot 2\Phi_m^2 + 0.9686A \cdot \Phi_m^2}{(2 + A)\Phi_m^2 - 0.0314 \cdot 2\Phi_m^2 + 0.00314 \cdot \Phi_m^2 + 0.00095 \cdot 2 + 0.00095} \quad (4.8)$$

Για $k_f/k_m=5$:

$$k_c = \frac{5\Phi_m^2 + 0.0314A \cdot 5\Phi_m^2 + 0.9686A \cdot \Phi_m^2}{(5 + A)\Phi_m^2 - 0.0314 \cdot 5\Phi_m^2 + 0.00314 \cdot \Phi_m^2 + 0.00095 \cdot 5 + 0.00095} \quad (4.9)$$

Για $k_f/k_m=10$:

$$k_c = \frac{10\Phi_m^2 + 0.0314A \cdot 10\Phi_m^2 + 0.9686A \cdot \Phi_m^2}{(10 + A)\Phi_m^2 - 0.0314 \cdot 10\Phi_m^2 + 0.00314 \cdot \Phi_m^2 + 0.00095 \cdot 10 + 0.00095} \quad (4.10)$$

Για την μελέτη ανάλυσης ευαισθησίας απαιτείται να υπολογιστεί η ολική παράγωγος της συνάρτησης, δηλαδή πρακτικά να υπολογιστούν οι μερικές παράγωγοι ως προς τις παραμέτρους A και Φ_m . Οι μερικές παράγωγοι ως προς Φ_m προσδιορίστηκαν ως:

Για $k_f/k_m=2$:

$$\frac{\partial k_c}{\partial \Phi_m} = \frac{\Phi_m(0.0114 + 0.00587898A)}{(0.00285 + \Phi_m^2(1.94034 + A))^2} \quad (4.11)$$

Για kf/km=5:

$$\frac{\partial k_c}{\partial \Phi_m} = \frac{\Phi_m(0.057 + 0.0128318A)}{(0.0057 + \Phi_m^2(4.84614 + A))^2} \quad (4.12)$$

Για kf/km=10:

$$\frac{\partial k_c}{\partial \Phi_m} = \frac{\Phi_m(0.209 + 0.0268063A)}{(0.01045 + \Phi_m^2(9.68914 + A))^2} \quad (4.13)$$

Με αντίστοιχο τρόπο υπολογίζονται και οι μερικές παράγωγοι ως προς τον συντελεστή A και για τους 3 επιλεγείς λόγους θερμικής αγωγιμότητας.

Για kf/km=2:

$$\frac{\partial k_c}{\partial A} = \frac{0.00293949\Phi_m^2 + 0.00126668\Phi_m^4}{(0.00285 + \Phi_m^2(1.94034 + A))^2} \quad (4.14)$$

Για kf/km=5:

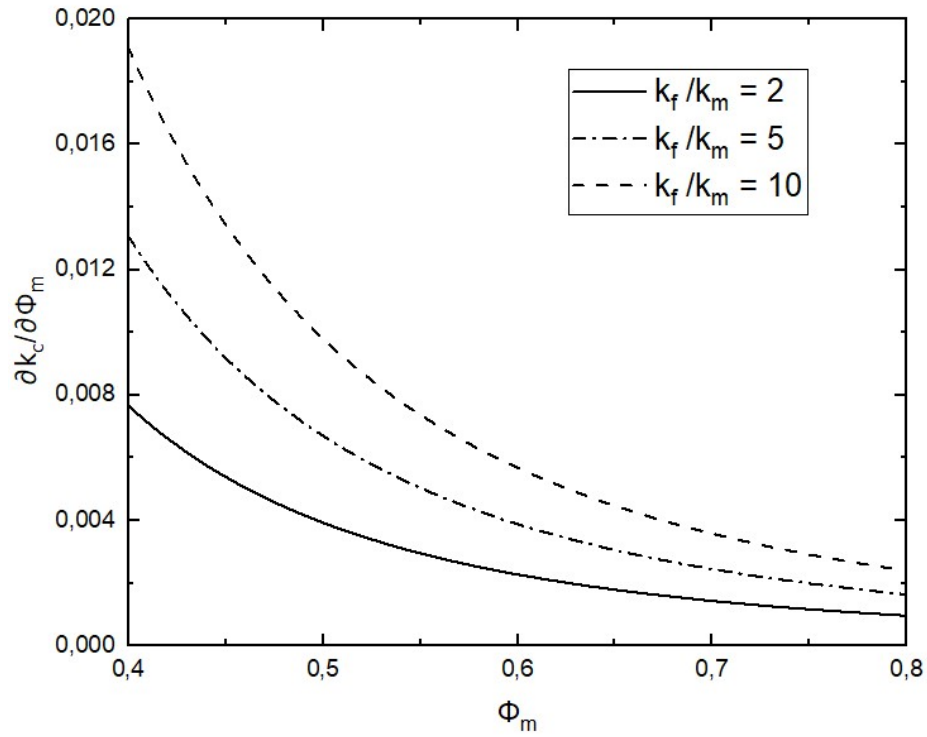
$$\frac{\partial k_c}{\partial A} = \frac{0.00641592\Phi_m^2 + 0.454815\Phi_m^4}{(0.0057 + \Phi_m^2(4.84614 + A))^2} \quad (4.15)$$

Για kf/km=10:

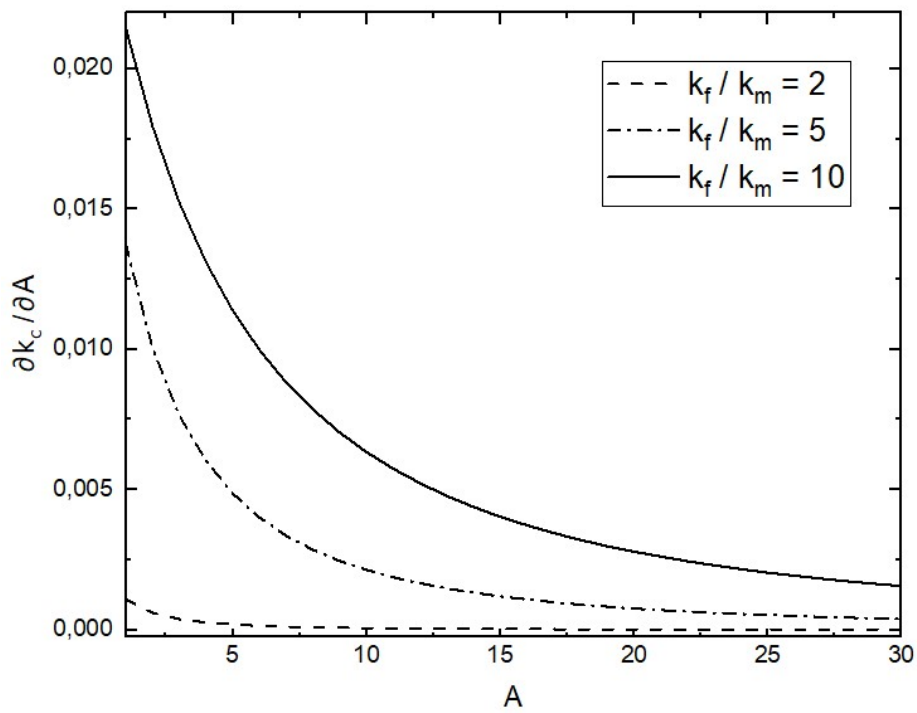
$$\frac{\partial k_c}{\partial A} = \frac{0.0134032\Phi_m^2 + 2.42729\Phi_m^4}{(0.01045 + \Phi_m^2(9.68914 + A))^2} \quad (4.16)$$

Στην συνέχεια τα αποτελέσματα οπτικοποιήθηκαν σχηματίζοντας τα διαγράμματα των μερικών παραγώγων σε σχέση με τις τιμές των παραμέτρων. Δημιουργήθηκε μια καμπύλη για κάθε λόγο αγωγιμοτήτων:

Συμπεραίνεται πως η επίδραση της παραμέτρου Φ_m στο μοντέλο διατηρείται για περιορισμένο



Σχήμα 4.9: Επίδραση τιμών παραμέτρου Φ_m στην βαθμίδα του συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας



Σχήμα 4.10: Επίδραση τιμών παραμέτρου A στην βαθμίδα του συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας

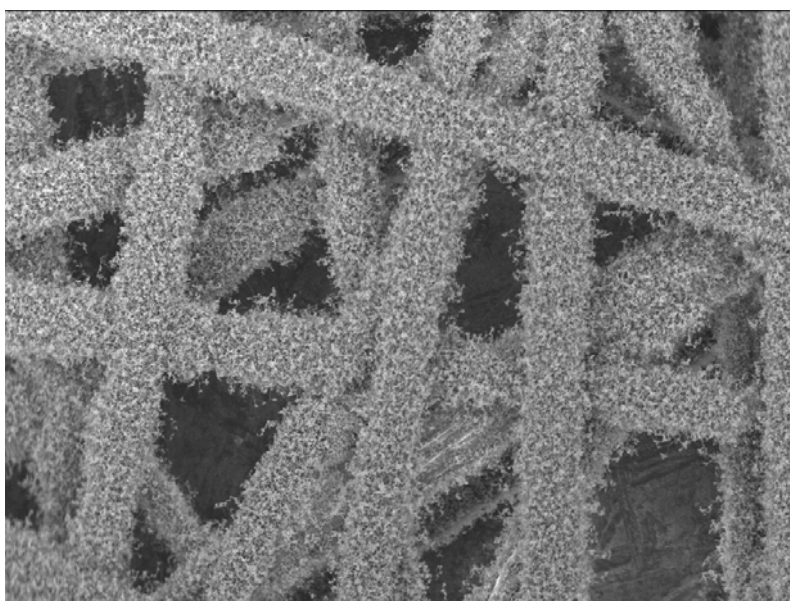
εύρος τιμών και η επίδρασή της είναι μικρότερη όσο μικρότερος είναι ο λόγος των αγωγιμοτήτων. Αντίστοιχη εικόνα παρουσιάζεται και για την παράμετρο A , με την διαφορά ότι οι επιτρεπτές τιμές της παραμέτρου έχουν μεγαλύτερο εύρος. Η διαφορά ανάμεσα σε υψηλούς και χαμηλούς λόγους αγωγιμοτήτων είναι σημαντικότερη, ωστόσο και σε αυτήν την περίπτωση η επίδραση της παραμέτρου στο μοντέλο μειώνεται γρήγορα καθώς αυξάνεται η τιμή της. Συνδυάζοντας τα αποτελέσματα με όσα παρουσιάστηκαν στον Πίνακα 3, φαίνεται πως οι διορθωτικοί αυτοί συντελεστές του μοντέλου μπορούν να οδηγήσουν σε σύγκλιση με τις προσομοιώσεις μόνο όταν η απόκλιση των τιμών δεν είναι μεγάλη. Οι υψηλότερες τιμές που απαιτούνται για τον συντελεστή A στους χαμηλούς λόγους αγωγιμοτήτων επιβεβαιώνει τις προηγούμενες παρατηρήσεις και αιτιολογεί το γιατί δεν κατέστη δυνατό να βρεθούν κατάλληλες τιμές για σύγκλιση για $\frac{k_f}{k_m} < 6$.

5 Θερμική Αγωγιμότητα Ανισότροπων Φυλλιδίων

5.1 Ανισότροπα Σωματίδια

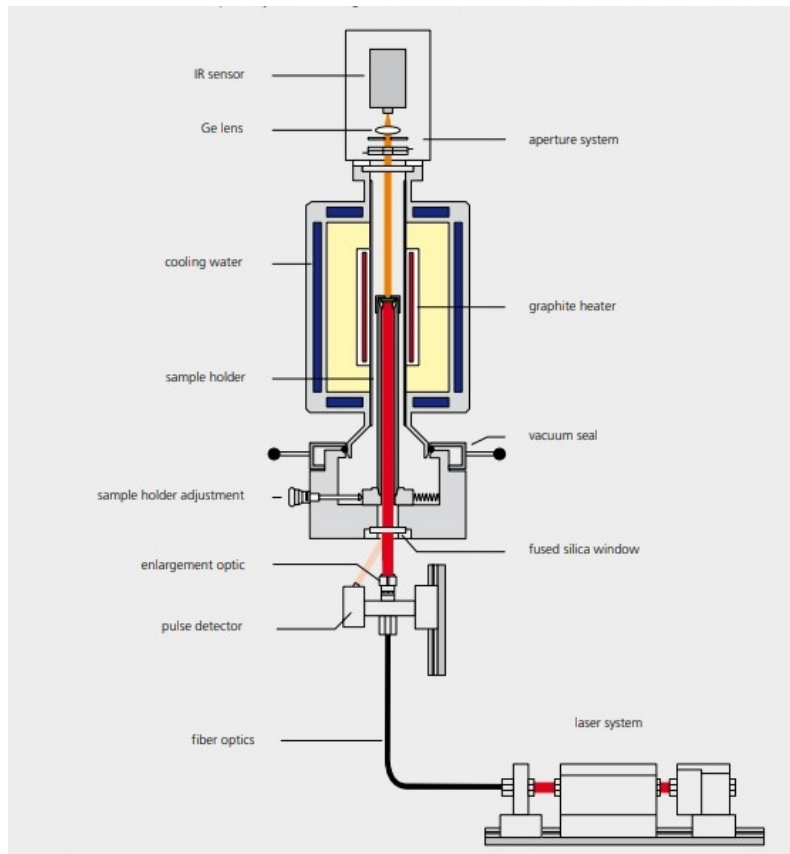
Στις περιπτώσεις φυλλιδίων που εξετάστηκαν στην προηγούμενη ενότητα θεωρήθηκε ότι η θερμική αγωγιμότητα είναι ιδιότητα ισότροπη. Στην πραγματικότητα πολλά από τα σωματίδια ενίσχυσης τα οποία χρησιμοποιούνται στα σύνθετα υλικά όπως τα ανθρακονήματα εμφανίζουν ανισοτροπία ως προς τις ιδιότητές τους, μια εκ των οποίων είναι και η θερμική αγωγιμότητα.

Υλικά όπως οι ίνες γραφενίου, οι νανοσωλήνες άνθρακα (CNTs) και ίνες άνθρακα (CFs) παρουσιάζουν μεγάλη θερμική αγωγιμότητα και χρησιμοποιούνται σε πολλές σύγχρονες εφαρμογές όπου η αγωγιμότητα συνδυάζεται με άριστες μηχανικές ιδιότητες. Η διαφορά στην αγωγιμότητα μήτρας και σωματιδίων διαφέρει ανάλογα με την εφαρμογή την μεθοδολογία και τον τρόπο μέτρησης, ωστόσο έχει παρατηρηθεί στην βιβλιογραφία ότι συνήθως βρίσκεται στο εύρος τών 6 με 10 φορές [19] [20] υψηλότερης αγωγιμότητας υπέρ των σωματιδίων.



Σχήμα 5.1: Ενίσχυση ινών άνθρακα με νανοσωλήνες άνθρακα προς ενίσχυση της θερμικής αγωγιμότητας [21]

Η ανισοτροπία της θερμικής αγωγιμότητας εμφανίζεται ανάμεσα στην διεύθυνση της κύριας διάστασης των σωματιδίων, δηλαδή του μήκους τους, και της ακτινικής διεύθυνσης. Ποσοτικοποιώντας την διαφορά των τιμών μεταξύ των δύο διευθύνσεων για τις ίνες άνθρακα, η θερμική αγωγιμότητα στο μήκος των ινών είναι 10 φορές μεγαλύτερη από την αγωγιμότητα ακτινικά των ινών [22]. Ο ακριβής προσδιορισμός της αγωγιμότητας ωστόσο για σύνθετα υλικά που εμφανίζουν έντονη



Σχήμα 5.2: Πειραματική συσκευή μέτρησης θερμικής αγωγιμότητας μέσω Laser [24]

ανισοτροπία είναι αρκετά σύνθετος και έχει αναπτυχθεί πλήθος τεχνικών μέτρησης τόσο για σταθερές συνθήκες όσο και για μεταβατικές [23]. Για τον λόγο αυτό καθίσταται ιδιαίτερα σημαντική η πρόσεγγιση του προβλήματος υπολογιστικά και η παραγωγή αξιόπιστων αποτελεσμάτων.

5.2 LaplacianFoamT

Η εμβάθυνση στο φαινόμενο της ανισοτροπίας απαίτησε την δημιουργία μιας νέας παραλλαγής του solver LaplacianFoamD που χρησιμοποιήθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Διατηρήθηκε η απαίτηση για τον ορισμό της θερμικής διαχυτότητας ως πεδίου αντί βαθμωτής ιδιότητας όλης της γεωμετρίας, ωστόσο σε αντίθεση με προηγουμένως το πεδίο είναι αυτή την φορά τανυστικό.

Η μορφή του τανυστή για την θερμική διαχυτότητα σε ανισότροπες ίνες είναι[25]:

$$D' = \begin{bmatrix} D_{11} \cos^2 \theta + D_{22} \sin^2 \theta & -D_{11} \sin \theta \cos \theta + D_{22} \sin \theta \cos \theta \\ -D_{11} \sin \theta \cos \theta + D_{22} \sin \theta \cos \theta & D_{11} \sin^2 \theta + D_{22} \cos^2 \theta \end{bmatrix}$$

όπου D_{11} και D_{22} οι συντελεστές θερμικών αγωγιμοτήτων στις δύο διευθύνσεις που εξετάζονται, και θ η γωνία που σχηματίζουν τα φυλλίδια αντιωρολογιακά σε σχέση με τον άξονα x στο καρτεσιανό σύστημα.

Η εξίσωση 3.2 που λύνει ο LaplacianFoam δεν διαφοροποιείται με την αλλαγή της διαχυτότητας σε τανυστή, συνεπώς οι αλλαγές στον κώδικα του solver εστιάζονται στο αρχείο όπου δημιουργούνται τα πεδία (createFields.H). Ο τύπος πεδίου αλλάζεται από volScalarField σε volTensorField. Η αρχικοποίηση του πεδίου μπορεί να παραλειφθεί και γίνεται απευθείας στον φάκελο του case:

```
#include "createFvOptions.H"

Info<< "Reading field T\n" << endl;

volScalarField T
(
    IOobject
    (
        "T",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);

volTensorField DTvar
(
    IOobject
    (
        "DTvar",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);
```

Σχήμα 5.3: Αλλαγή πεδίου DTvar σε τανυστικό αντί βαθμωτού πεδίου στο αρχείο createFields.H του solver.

Οι ίδιες αλλαγές γίνονται και στον φάκελο 0 που ορίζει τις συνοριακές συνθήκες στο case. Το πεδίο DTvar ορίζεται και πάλι ως volTensorField και αρχικοποιείται με τις επιθυμητές τιμές τόσο στο εσωτερικό όσο και στα εκάστοτε σύνορα της γεωμετρίας όπου ισχύουν συνοριακές συνθήκες τύπου fixedValue.

Ο επιλύτης LaplacianFoam, στον οποίο είναι βασισμένες οι δύο παραλλαγές που χρησιμοποιούνται στην παρούσα εργασία, στην βασική του μορφή προβλέπεται συνήθως να λύνει προβλήματα φαινομένων όπου το πεδίο είναι ένα. Για την δημιουργία περισσότερων του ενός πεδίων στην γεωμετρία αξιοποιείται το εργαλείο setFields, το οποίο για τανυστικό πεδίο δημιουργήθηκε ως:

Η εντολή defaultFieldValues ορίζει τον τανυστή σε οποιοδήποτε τμήμα της γεωμετρίας δεν καθορί-

```

\*-----* C++ *-----*\
=====
\\      / F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
\\      / O peration  | Website: https://openfoam.org
\\      / A nd        | Version: 8
\\      / M anipulation|
\*-----*/

// ***** //
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       binary;
    class        volTensorField;
    location     "0";
    object       DTvar;
}
// ***** //

dimensions      [0 2 -1 0 0 0];

internalField    uniform (1 0 0 0 1 0 0 0 1);

```

Σχήμα 5.4: Αλλαγή πεδίου DTvar σε τανυστικό στον φάκελο των συνοριακών συνθηκών.

```

\*-----* C++ *-----*\
=====
\\      / F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
\\      / O peration  | Website: https://openfoam.org
\\      / A nd        | Version: 8
\\      / M anipulation|
\*-----*/

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    object       setFieldsDict;
}
// ***** //

defaultFieldValues
(
    volTensorFieldValue DTvar (1 0 0 0 1 0 0 0 1)
);

regions
(
    cellToCell
    {
        type cellSet;
        set Flake_vol;

        fieldValues
        (
            volTensorFieldValue DTvar (10 0 0 0 10 0 0 0 10)
        );
    }
)

```

Σχήμα 5.5: Καθορισμός δομής αρχείου setFieldsDict για τον ορισμό του τανυστικού πεδίου της διαχυτότητας στο εσωτερικό της γεωμετρίας.

ζονται συγκεκριμένες τιμές από τον χρήστη. Με την εντολή cellSet λαμβάνονται οι τιμές της διαχυτότητας για το εσωτερικό των φυλλιδίων ως αυτές που ορίζει ο χρήστης στο πεδίο fieldValues που ακολουθεί. Με αυτόν τον τρόπο ο τανυστής παραμένει μοναδιαίος για το μητρικό υλικό και λαμβάνει την επιθυμητή μορφή για τα σωματίδια. Η πλήρης μορφή των αρχείων του solver και του case μπορεί να βρεθεί στο Παράρτημα Α'.

5.3 Επιβεβαίωση Αποτελεσμάτων

Για την επιβεβαίωση της σωστής λειτουργίας του νέου solver έγινε σύγκριση των αποτελεσμάτων με ισότροπα φυλλίδια, κρατώντας σταθερές όλες τις ιδιότητες και τα χαρακτηριστικά γεωμετρίας και πλέγματος. Συγκεκριμένα η γεωμετρία που χρησιμοποιήθηκε αποτελείται από $N = 500$ φυλλίδια, με $\alpha = 8$, $\alpha\Phi = 0.5$, $\epsilon = 0$ για γωνίες 0° , 30° , 60° και 90° . Τα αποτελέσματα των συγκρίσεων δίνονται στους Πίνακες 4 και 5:

kf/km	$\theta = 0^\circ$		$\theta = 30^\circ$	
	Ανισότροπες	Ισότροπες	Ανισότροπες	Ισότροπες
1	1,002473	1,005086	1,004736	1,00382
3	1,074961	1,075996	1,09052	1,089987
5	1,09352	1,0961511	1,12787	1,12651
7	1,105317	1,106533	1,152025	1,1509
10	1,11177	1,11427	1,17454	1,1728

Πίνακας 4: Σύγκριση αποτελεσμάτων συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας μεταξύ ισότροπων και ανισότροπων φυλλιδίων για $N=500$, $\alpha=8$, $\alpha\Phi=0.5$, $\theta=0$ και 30 , $\epsilon=0$

kf/km	$\theta = 60^\circ$		$\theta = 90^\circ$	
	Ανισότροπες	Ισότροπες	Ανισότροπες	Ισότροπες
1	1,00311	1,003285	1,003423	1,00057
3	1,121972	1,11972	1,13378	1,13165
5	1,1934	1,18877	1,2207	1,2192
7	1,245094	1,24658	1,28069	1,2794
10	1,29676	1,29456	1,35076	1,35333

Πίνακας 5: Σύγκριση αποτελεσμάτων συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας μεταξύ ισότροπων και ανισότροπων φυλλιδίων για $N=500$, $\alpha=8$, $\alpha\Phi=0.5$, $\theta=60$ και 90 , $\epsilon=0$

Παρατηρείται ότι στην πλειοψηφία των προσομοιώσεων τα αποτελέσματα είναι όμοια με ακρίβεια εκατοστού, γεγονός που επιβεβαιώνει ότι ο επιλύτης και το case λειτουργούν με τον αναμενόμενο τρόπο. Για λόγους πληρότητας εξετάστηκε επίσης η περίπτωση μοναδιαίας αγωγιμότητας των φυλλιδίων στην κατακόρυφη διεύθυνση και για βαθμιαία αυξανόμενο k_{fx} στην οριζόντια διεύθυνση. Οι προσομοιώσεις έγιναν για τους ίδιους λόγους αγωγιμοτήτων με προηγούμενως και τις ίδιες γωνίες. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 6:

k_{11}/k_{22}	θ			
	0°	30°	60°	90°
1	1,00087	1,00102	1,00208	1,00225
3	1,004661	1,01559	1,018677	1,004558
5	1,005177	1,029926	1,0837	1,005075
7	1,005604	1,03361	1,131305	1,005509
10	1,006172	1,036557	1,181985	1,006092

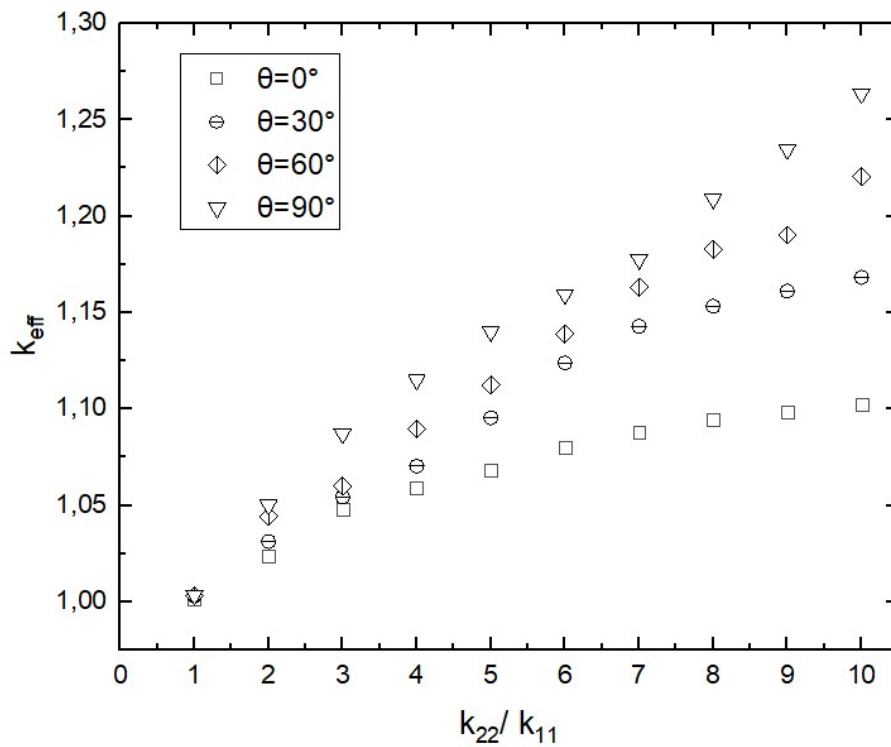
Πίνακας 6: Σύγκριση αποτελεσμάτων συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας για $k_{22}=1$ και βαθμιαία αυξανόμενο k_{11}

Η συμπεριφορά και σε αυτήν την περίπτωση είναι η αναμενόμενη. Στην οριζόντια και κατακόρυφη διεύθυνση εφόσον η θερμορροή μετράται μόνο στην πάνω επιφάνεια της γεωμετρίας δεν υπάρχει συνεισφορά της k_{fx} αγωγιμότητας και οι τιμές που λαμβάνονται είναι πολύ κοντά στην μονάδα, εφόσον μονάδα είναι και η αγωγιμότητα του μητρικού υλικού. Στις ενδιάμεσες γωνίες 30° και 60° η αγωγιμότητα παρουσιάζει μια μικρή αύξηση, και αυτό μπορεί να εξηγηθεί από την μορφή του τανυστή της θερμικής αγωγιμότητας ο οποίος για τις ενδιάμεσες γωνίες εμφανίζει μη διαγώνια στοιχεία τα οποία συνεισφέρουν στο αποτέλεσμα.

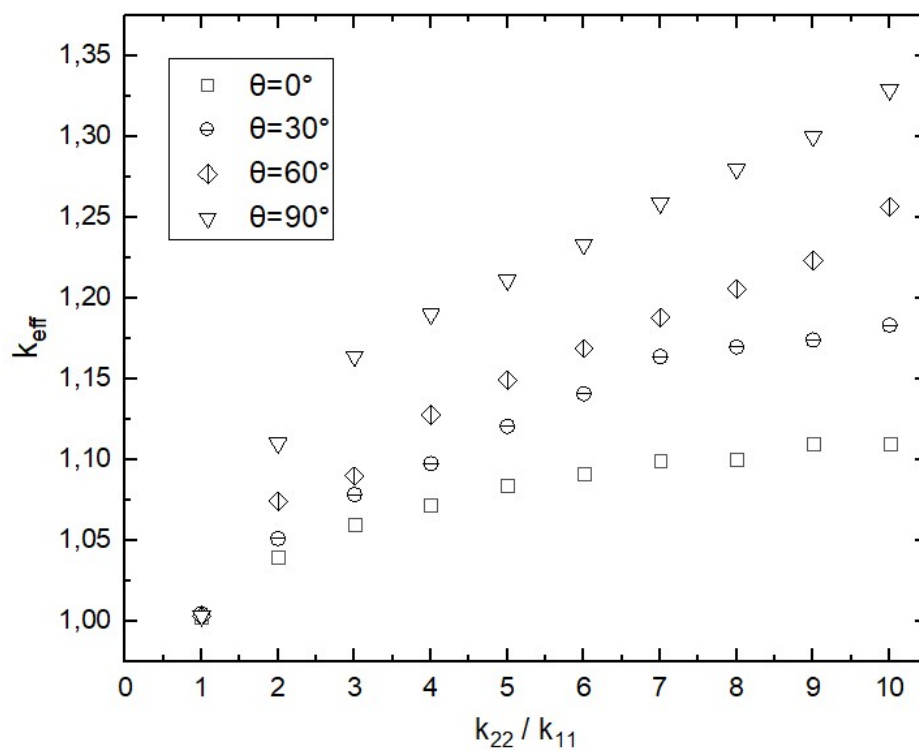
5.4 Επίδραση Προσανατολισμού Ανισότροπων Φυλλιδίων

Στην συνέχεια εξετάστηκε η επίδραση του προσανατολισμού των φυλλιδίων στην τιμή του συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας για το σύνθετο υλικό στην περίπτωση που τα φυλλίδια είναι ανισότροπα, με υψηλή αγωγιμότητα στην διαμήκη τους διεύθυνση. Επιλέχθηκε η μελέτη να γίνει για 3 κλάσματα όγκου $\alpha_F=0.25$, $\alpha_F=0.5$ και $\alpha_F=1$, και για λόγους k_{22}/k_{11} με αφετηρία την μονάδα και κατάληξη την τιμή 10 που είναι και αυτή που διατυπώνεται στην βιβλιογραφία για ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα τέτοιων σωματιδίων (ίνες άνθρακα). Οι γωνίες για τις οποίες έγιναν οι προσομοιώσεις είναι 0° , 30° , 60° και 90° . Ο τυχαίος προσανατολισμός δεν εξετάστηκε καθώς ο τρόπος λειτουργίας του solver θα απαιτούσε τον ορισμό ενός ξεχωριστού πεδίου διαχυτότητας για κάθε γωνία που εμφανίζεται στην γεωμετρία. Η διαχείριση ενός τόσο μεγάλου αριθμού πεδίων σε μια γεωμετρία εισάγει αρκετές τεχνικές δυσκολίες και συνεπάγεται απαίτηση για ιδιαίτερα υψηλή επεξεργαστική ισχύ. Συνεπώς επιλέχθηκε τα φυλλίδια να έχουν κάθε φορά ομοιόμορφο προσανατολισμό. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στα Σχήματα 5.6, 5.7 και 5.8:

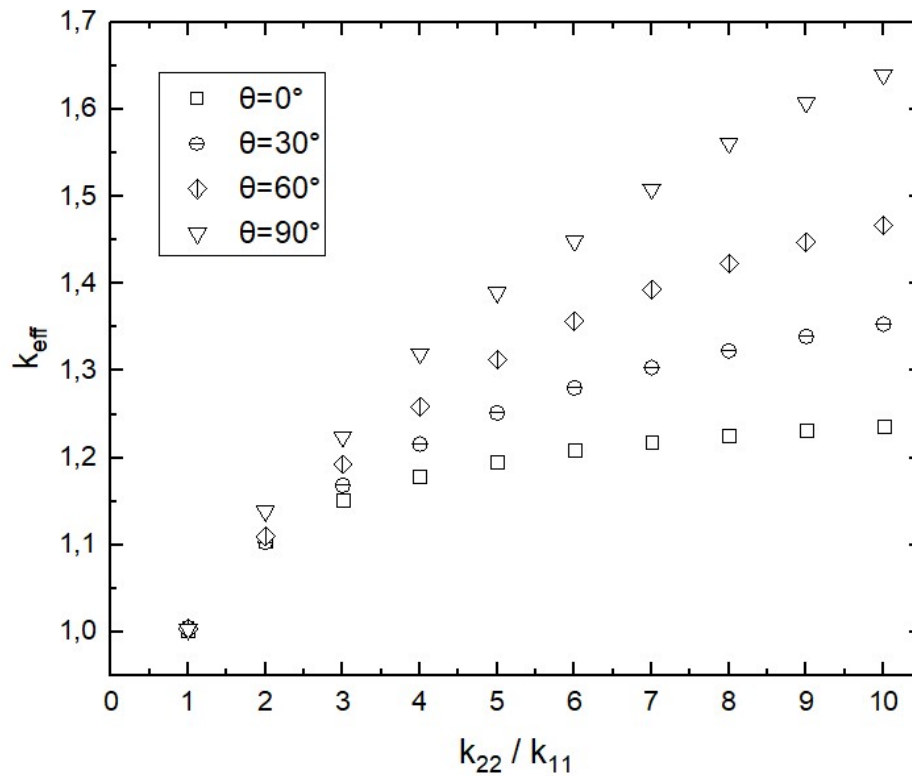
Από τα διαγράμματα συμπεραίνεται πως ο προσανατολισμός των φυλλιδίων στην κατεύθυνση διάδοσης της θερμότητας συνεπάγεται την ιδιαίτερα σημαντική αύξηση του συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας λόγω της ανισοτροπίας τους. Το φαινόμενο γίνεται εντονότερο όσο αυξάνει το k_{22}



Σχήμα 5.6: Επίδραση της γωνίας στην αγωγιμότητα ανισότροπων φυλλιδίων με $N=500$, $\alpha=6$, $\alpha\phi=0.25$, $\varepsilon=0^\circ$



Σχήμα 5.7: Επίδραση της γωνίας στην αγωγιμότητα ανισότροπων φυλλιδίων με $N=500$, $\alpha=6$, $\alpha\phi=0.5$, $\varepsilon=0^\circ$



Σχήμα 5.7: Επίδραση της γωνίας στην αγωγιμότητα ανισότροπων φυλλιδίων με $N=500$, $\alpha=6$, $\alpha\phi=1$, $\varepsilon=0^\circ$

αλλά και το κλάσμα όγκου $\alpha\phi$. Η διασπορά των φυλλιδίων σε μια συγκεκριμένη διεύθυνση και όχι τυχαία, προς εκμετάλλευση των ιδιοτήτων τους, είναι εφικτή αξιοποιώντας το γεγονός πως η κατεύθυνση ροής του υλικού κατά την κατασκευή προσανατολίζει τα σωματίδια [26].

6 Συμπεράσματα

Από τα αποτελέσματα της διπλωματικής εργασίας λαμβάνονται χρήσιμα συμπεράσματα για την επίδραση ισότροπων αλλά και ανισότροπων φυλλιδίων στην θερμική αγωγιμότητα των σύνθετων πολυμερών υλικών. Με αφετηρία μια γεωμετρία 500 φυλλιδίων προσδιορίστηκε το κατάλληλο μέγεθος πλέγματος ως προς τον αριθμό κελιών για σωματίδια τυχαίου και ενιαίου προσανατολισμού. Το υπολογιστικό πλέγμα αξιοποιήθηκε για την μελέτη της επίδρασης του λόγου διαστάσεων των φυλλιδίων στην τιμή του συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας, όπου διαπιστώθηκε ότι όσο μικρότερος είναι ο λόγος διαστάσεων τόσο αυξάνεται η ικανότητα των σωματιδίων να άγουν την θερμότητα. Τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με όσα προβλέπει ένα από τα καλύτερα προσαρμοσμένα στις συνθήκες του προβλήματος μοντέλα, αυτό του Lewis-Nielsen. Η διαφορά μεταξύ των αποτελεσμάτων οδήγησε στην ανάλυση ευαισθησίας του μοντέλου ως προς τις διορθωτικές του παραμέτρους για να βρεθούν τα περιθώρια βελτίωσης της σύγκλισης μοντέλου και προσομοιώσεων.

Στην συνέχεια η μελέτη εστίασε στο φαινόμενο των θερμικά ανισότροπων σωματιδίων τα οποία παρουσιάζουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον και εντοπίζονται σε πολλές εφαρμογές. Αναζητήθηκαν στην βιβλιογραφία χαρακτηριστικοί τύποι τέτοιων σωματιδίων και η αναμενόμενη συμπεριφορά τους στο υπό μελέτη πρόβλημα. Με αφετηρία τον επιλύτη LaplacianFoam αναπτύχθηκε μια νέα παραλλαγή του με δυνατότητα ορισμού τανυστικού πεδίου διαχυτότητας και επιβεβαιώθηκε η εγκυρότητά της μέσω συγκρίσεων με προηγούμενες προσομοιώσεις και όσων προβλέπει η βιβλιογραφία. Τέλος διερευνήθηκε η επίδραση του προσανατολισμού στην θερμική αγωγιμότητα για ανισότροπα φυλλίδια και 3 κλάσματα όγκου, όπου διαπιστώθηκε ότι ο προσανατολισμός του φυλλιδίου παράλληλα στην διεύθυνση μετάδοσης θερμότητας είναι ο ευνοϊκότερος.

Η βάση που τέθηκε για την μελέτη του φαινομένου της θερμικής ανισοτροπίας μπορεί να αξιοποιηθεί για περαιτέρω διερεύνηση της επίδρασης και άλλων παραγόντων στην θερμική αγωγιμότητα του υλικού. Παρουσιάζει επίσης ενδιαφέρον περαιτέρω έρευνας η περίπτωση ανισότροπων, τυχαία διεσπαρμένων σωματιδίων. Είναι σημαντικό να διερευνηθεί επίσης η επίδραση της αντίστασης της διεπιφάνειας μήτρας και σωματιδίου (ITR) στην αγωγιμότητα, όπως επίσης και να μελετηθεί περισσότερο η μεταβολή της μικροδομής του υλικού τοπικά στην περιοχή γύρω από τα σωματίδια ενίσχυσης και η επίδρασή της στο φαινόμενο.

Παράρτημα Α

Στο παράρτημα δίνεται αναλυτικότερα η μορφή των βασικότερων αρχείων των 2 solvers που χρησιμοποιήθηκαν κατά την επίλυση.

LaplacianFoamD

Συνοριακές συνθήκες για την θερμική διαχυτότητα DTvar:

```
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       binary;
    class        volScalarField;
    location     "0";
    object       DTvar;
}

dimensions      [0 2 -1 0 0 0 0];

internalField   uniform 1;

boundaryField
{
    backMatrix
    {
        type          empty;
    }
    frontMatrix
    {
        type          empty;
    }
    backFlake
    {
        type          empty;
    }
    frontFlake
    {
        type          empty;
    }
    topMatrix
    {
        type          fixedValue;
        value         uniform 1;
    }
    topFlake
    {
        type          fixedValue;
        value         uniform 10;
    }
}
```

```

    }
    bottomMatrix
    {
        type          fixedValue;
        value          uniform 1;
    }
    bottomFlake
    {
        type          fixedValue;
        value          uniform 10;
    }
    leftMatrix
    {
        type          cyclicAMI;
    }
    leftFlake
    {
        type          cyclicAMI;
    }
    rightMatrix
    {
        type          cyclicAMI;
    }
    rightFlake
    {
        type          cyclicAMI;
    }

    intMatrix
    {
        type          zeroGradient;
    }
    intFlake
    {
        type          zeroGradient;
    }
}

```

Συνοριακές συνθήκες για την θερμοκρασία T:

```
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       binary;
    class        volScalarField;
    location     "0";
    object       T;
}

dimensions      [0 0 0 1 0 0 0];

internalField    uniform 0;

boundaryField
{
    backMatrix
    {
        type          empty;
    }
    frontMatrix
    {
        type          empty;
    }
    backFlake
    {
        type          empty;
    }
    frontFlake
    {
        type          empty;
    }
    topMatrix
    {
        type          fixedValue;
        value          uniform 0;
    }
    topFlake
    {
        type          fixedValue;
        value          uniform 0;
    }
    bottomMatrix
    {
        type          fixedValue;
        value          uniform 1;
    }
    bottomFlake
    {
        type          fixedValue;
```

```

        value          uniform 1;
    }
    leftMatrix
    {
        type            cyclicAMI;
        value            uniform 0;
    }
    leftFlake
    {
        type            cyclicAMI;
        value            uniform 0;
    }
    rightMatrix
    {
        type            cyclicAMI;
        value            uniform 0;
    }
    rightFlake
    {
        type            cyclicAMI;
        value            uniform 0;
    }
    intMatrix
    {
        type            zeroGradient;
    }
    intFlake
    {
        type            zeroGradient;
    }
}

```

Φάκελος utility setFields:

```
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    object       setFieldsDict;
}

defaultFieldValues
(
    volScalarFieldValue DTvar 1
);

regions
(
    cellToCell
    {
        set Flake_vol;
        fieldValues
        (
            volScalarFieldValue DTvar 10
        );
    }
);
```

LaplacianFoamT

Τροποποιημένο αρχείο createFields.H του solver:

```
#include "createFvOptions.H"

Info<< "Reading field T\n" << endl;

volScalarField T
(
    IOobject
    (
        "T",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);

volTensorField DTvar
(
    IOobject
    (
        "DTvar",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh
);

Info<< "Reading transportProperties\n" << endl;

IOdictionary transportProperties
(
    IOobject
    (
        "transportProperties",
        runTime.constant(),
        mesh,
        IOobject::MUST_READ_IF_MODIFIED,
        IOobject::NO_WRITE
    )

    Info<< "Reading diffusivity DT\n" << endl;
```

```
dimensionedScalar DT  
(  
    transportProperties.lookup("DT")  
);
```

Αρχείο laplacianFoamT.C του solver:

```
#include "wallDist.H"
#include "fvCFD.H"
#include "fvOptions.H"
#include "simpleControl.H"
```

```
#include "fvCFD.H"
#include "fvOptions.H"
#include "simpleControl.H"
```

```
int main(int argc, char *argv[])
{
    #include "setRootCaseLists.H"

    #include "createTime.H"
    #include "createMesh.H"

    simpleControl simple(mesh);

    #include "createFields.H"
```

```
Info<< "\nCalculating temperature distribution\n" << endl;
```

```
while (simple.loop(runTime))
{
```

```
    Info<< "Time = " << runTime.timeName() << nl << endl;
```

```
    while (simple.correctNonOrthogonal())
    {
```

```
        fvScalarMatrix TEqn
        (
            fvm::ddt(T) == fvm::laplacian(DTvar, T)
            ==
            fvOptions(T)
        );
```

```
        fvOptions.constrain(TEqn);
        TEqn.solve();
        fvOptions.correct(T);
    }
```

```
#include "write.H"
```

```
Info<< "ExecutionTime = " << runTime.elapsedCpuTime() << " s"
```



```
        << "    ClockTime = " << runTime.elapsedClockTime() << " s"
        << nl << endl;
    }
    Info<< "End\n" << endl;

    return 0;
}
```

Τροποποιημένες συνοριακές συνθήκες για τανυστική διαχυτότητα DTvar:

```
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       binary;
    class        volTensorField;
    location     "0";
    object       DTvar;
}
// * * * * *

dimensions      [0 2 1 0 0 0 0];

internalField    uniform (1 0 0 0 1 0 0 0 1);

boundaryField
{
    backMatrix
    {
        type          empty;
    }
    frontMatrix
    {
        type          empty;
    }
    backFlake
    {
        type          empty;
    }
    frontFlake
    {
        type          empty;
    }
    topMatrix
    {
        type          fixedValue;
        value          uniform (1 0 0 0 1 0 0 0 1);
    }
    topFlake
    {
        type          fixedValue;
        value          uniform (1 0 0 0 10 0 0 0 1);
    }
    bottomMatrix
    {
        type          fixedValue;
        value          uniform (1 0 0 0 1 0 0 0 1);
    }
    bottomFlake
    {
```

```

        type      fixedValue;
        value      uniform (1 0 0 0 10 0 0 0 1);
    }
    leftMatrix
    {
        type      cyclicAMI;
    }
    leftFlake
    {
        type      cyclicAMI;
    }
    rightMatrix
    {
        type      cyclicAMI;
    }
    rightFlake
    {
        type      cyclicAMI;
    }

    intMatrix
    {
        type      zeroGradient;
    }
    intFlake
    {
        type      zeroGradient;
    }
}

```

Τροποποιημένο αρχείο utility setFields:

```
FoamFile
{
    version      2.0;
    format        ascii;
    class         dictionary;
    object        setFieldsDict;
}
// * * * * *

defaultFieldValues
(
    volTensorFieldValue DTvar (1 0 0 0 1 0 0 0 1)
);

regions
(
    cellToCell
    {
        type cellSet;
        set Flake_vol;

        fieldValues
        (
            volTensorFieldValue DTvar (10 0 0 0 10 0 0 0 10)
        );
    }
);
```

Αρχείο controlDict:

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

application     laplacianFoamT;

startFrom       startTime;

startTime       0;

stopAt          endTime;

endTime         30;

deltaT          1;

writeControl     adjustableRunTime;

writeInterval    1;

purgeWrite       0;

writeFormat      binary;

writePrecision   16;

writeCompression uncompressed;

timeFormat       general;

timePrecision    6;

runTimeModifiable true;

adjustTimeStep   yes;

maxCo            1.0;

maxDeltaT        1;
```

Βιβλιογραφία

- [1] Royal Society Of Chemistry. Addition polymerisation with phenylethene, 2024. <https://edu.rsc.org/experiments/addition-polymerisation-with-phenylethene/479.article>.
- [2] Senthur Pandi R, Manickam Mahendran, Chokkalingam Ramalingam, M. Manivelraja, and V. Chandrashekar. Temperature dependent damping studies of ni-mn-ga polymer composites. *Bulletin of Materials Science*, 34:739–743, 07 2011.
- [3] A. Fick. Ueber diffusion. *Annalen der Physik*, 170(1):59–86, 1855.
- [4] Università del Salento. Unisalento.it. <https://www.unisalento.it/didattica/cosa-studiare/percorsi/-/dettaglio/insegnamento/160193/heat-and-mass-transfer-phenomena-in-composites-and-polymers>, n.d. Accessed: 15 June 2024.
- [5] A. J. Ghajar and Y. A. Çengel. *Heat and Mass Transfer: Fundamentals and Applications*. McGraw-Hill Professional, 5th edition, 2014.
- [6] Andreas Tsiantis. *Computational Study of Transport Phenomena in Flake Filled Composite Materials*. Phd thesis, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, 2020.
- [7] A. Tsiantis and T.D. Papathanasiou. A novel fastrsa algorithm: Statistical properties and evolution of microstructure. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 534:122083, 2019.
- [8] Christophe Geuzaine and Jean-François Remacle. Gmsh: A 3-d finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79(11):1309–1331, 2009.
- [9] Hrvoje Jasak. Openfoam: Open source cfd in research and industry. *International Journal of Naval Architecture and Ocean Engineering*, 1(2):89–94, 2009.
- [10] Henk Kaarle Versteeg and Weeratunge Malalasekera. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. Pearson Education Limited, 2nd edition, 2007.
- [11] Skill-Lync. Week 9 - fvm literature review. <https://skill-lync.com/student-projects/week-9-fvm-literature-review-258>, n.d. Accessed: 15 June 2024.
- [12] Marwan Darwish and Fadl Moukalled. *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics: An Advanced Introduction with OpenFOAM® and Matlab®*. Springer, 2021.

- [13] P. Roache. Perspective: A method for uniform reporting of grid refinement studies. *ASCE Journal of Fluids Engineering*, 116:405–413, 1994.
- [14] L. Richardson. The approximate arithmetic solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with application to stresses in a masonry dam. *Transactions of the Royal Society of London, Series A*, 210:307–357, 1910.
- [15] Νικόλαος Γ. Μετάδοση θερμότητας μέσω διαφασικών στερεών υλικών - υπολογιστική μελέτη. PhD thesis, Ιδρυματικό Αποθετήριο Πανεπιστημίου Θεσσαλίας, 1970. Available at: <https://ir.lib.uth.gr/xmlui/handle/11615/60079> (Accessed: 18 June 2024).
- [16] A.B. Baschirow and J.W. Selenew. Thermal conductivity of composites. *Plaste Kaut*, 23:656, 1976.
- [17] R.L. Hamilton and O.K. Crosser. Thermal conductivity of heterogeneous two-component systems. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 1(3):187–191, 1962.
- [18] Lawrence E. Nielsen. The thermal and electrical conductivity of two-phase systems. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 13(1):17–20, 1974.
- [19] Yuichi Hamada, Wataru Otsu, Jun Fukai, Yoshio Morozumi, and Osamu Miyatake. Anisotropic heat transfer in composites based on high-thermal conductive carbon fibers. *Energy*, 30(2–4):221–233, 2005.
- [20] Ahmed Arabi Hassen, Ralph B. Dinwiddie, Seokpum Kim, Halil Levent Tekinalp, Vipin Kumar, John Lindahl, Pritesh Yeole, Chad Duty, Uday Vaidya, Hsin Wang, and Vlastimil Kunc. Anisotropic thermal behavior of extrusion-based large scale additively manufactured carbon-fiber reinforced thermoplastic structures. *Additive Manufacturing*, 2022.
- [21] World of Nanoscience. Carbon fibers and nanotubes combined: Multiscale hybrids. <https://worldofnanoscience.weebly.com/carbon-fibers-and-nanotubes-combined-multiscale-hybrids.html>, n.d. Accessed: 18 June 2024.
- [22] Tian Tian and Kevin D. Cole. Anisotropic thermal conductivity measurement of carbon-fiber/epoxy composite materials. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55(23–24):6530–6537, 2012.
- [23] Hu Zhang, Kefan Wu, Guangming Xiao, Yanxia Du, and Guihua Tang. Experimental study of

the anisotropic thermal conductivity of 2d carbon-fiber/epoxy woven composites. *Composite Structures*, 267:113870, 2021.

- [24] Erich NETZSCH GmbH & Co. Holding KG. Laser flash apparatus lfa 427 equipment manual. <https://photos.labwrench.com/equipmentManuals/7514-2756.pdf>, n.d. Accessed: 18 June 2024.
- [25] A. Tsiantis and T.D. Papathanasiou. The barrier properties of flake-filled composites with precise control of flake orientation. *Materials Sciences and Applications*, 8:234–246, 2017.
- [26] Ilya Mazov, Igor Burmistrov, Igor Il'inykh, Andrey Stepashkin, Denis Kuznetsov, and Jean-Paul Issi. Anisotropic thermal conductivity of polypropylene composites filled with carbon fibers and multiwall carbon nanotubes. *Polymer Composites*, 2014. First published: 23 June 2014.