



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ

ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

**ΜΕΛΕΤΗ ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΤΟΥ ΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΥ ΘΕΡΜΟΓΕΦΥΡΩΝ
ΣΤΗΝ ΘΕΡΜΙΚΗ ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑ ΣΥΝΘΕΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ**

υπό

ΑΠΟΣΤΟΛΟΥ ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΥ

Διπλωματική Εργασία

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

Βόλος, 2025



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ

ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

**ΜΕΛΕΤΗ ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΤΟΥ ΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΥ ΘΕΡΜΟΓΕΦΥΡΩΝ
ΣΤΗΝ ΘΕΡΜΙΚΗ ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑ ΣΥΝΘΕΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ**

υπό

ΑΠΟΣΤΟΛΟΥ ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΥ

Διπλωματική Εργασία

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

Βόλος, 2025

© 2025 Αποστόλου 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 (Επιβλέπων)	Δρ. Αθανάσιος Παπαθανασίου Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Δεύτερος Εξεταστής	Δρ. Γεώργιος Χαραλάμπους Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας
Τρίτος Εξεταστής	Δρ. Κωνσταντίνος Ρήτος Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Ημερομηνία Εξέτασης : 27/06/2025

Ευχαριστίες

Αρχικά, θα ήθελα να εκφράσω τις βαθιές μου ευχαριστίες στον επιβλέποντα καθηγητή μου, κ. Θανάση Παπαθανασίου, για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε και την πολύτιμη καθοδήγησή του καθ' όλη τη διάρκεια της διπλωματικής μου εργασίας. Η επιστημονική του κατάρτιση, η συνέπειά του και η διαρκής διαθεσιμότητά του υπήρξαν καταλυτικές για την εξέλιξη αυτής της μελέτης.

Ευχαριστώ επίσης, τα υπόλοιπα μέλη της εξεταστικής επιτροπής της διπλωματικής μου εργασίας, Αναπληρωτή Καθηγητή κ. Χαραλάμπους Γεώργιο και Επίκουρο Καθηγητή κ. Ρήτο Κωνσταντίνο, για την ανάγνωση της εργασίας μου και τις πολύτιμες υποδείξεις τους.

Ιδιαίτερες ευχαριστίες απευθύνω στον Δρ. Ανδρέα Τσιαντή για την ένθερμη υποστήριξή του καθ' όλη την διάρκεια της εργασίας μου, καθώς οι συμβουλές του και οι γνώσεις του συνέβαλαν καθοριστικά στην ανάπτυξη του νέου λύτη, αλλά και για την πολύτιμη βοήθεια κατά την χρήση του εργαστηριακού cluster.

Τέλος, οφείλω ένα μεγάλο ευχαριστώ στην οικογένειά μου και τους φίλους μου, για την αμέριστη υποστήριξη, την υπομονή και την εμπιστοσύνη που μου έδειξαν όλα αυτά τα χρόνια και με στήριξαν σε αυτό το ταξίδι της γνώσης.

Αφιερωμένη στην οικογένειά μου,

ΜΕΛΕΤΗ ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΤΟΥ ΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΥ ΘΕΡΜΟΓΕΦΥΡΩΝ ΣΤΗΝ ΘΕΡΜΙΚΗ ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑ ΣΥΝΘΕΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

ΑΠΟΣΤΟΛΟΥ ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, 2025

Επιβλέπων Καθηγητής: Δρ. Αθανάσιος Παπαθανασίου,
Καθηγητής Ρεολογίας και Διεργασιών Πολυμερών

Περίληψη

Η παρούσα διπλωματική εργασία μελετά τη θερμική αγωγιμότητα σύνθετων πολυμερών υλικών ενισχυμένων με φυλλίδια (flakes), δίνοντας έμφαση στον ρόλο της διεπιφάνειας μεταξύ της πολυμερικής μήτρας (matrix) και των ενισχυτικών σωματιδίων. Σκοπός της εργασίας είναι η υπολογιστική μοντελοποίηση της θερμικής συμπεριφοράς αυτών των υλικών και η ανάπτυξη εργαλείων που επιτρέπουν την ποσοτική πρόβλεψη και βελτιστοποίηση της θερμικής αγωγιμότητας K_{eff} . Στα πλαίσια της μελέτης, αναπτύχθηκε και πιστοποιήθηκε ένας νέος αλγόριθμος – λύτης (laplacianFoamF), κατάλληλος για το υπολογιστικό περιβάλλον OpenFOAM. Ο λύτης αυτός επιτρέπει την ανάλυση γεωμετριών που περιλαμβάνουν πολυάριθμα flakes με ελεγχόμενο προσανατολισμό, μέγεθος και κατανομή. Ιδιαίτερη έμφαση δόθηκε στην ορθή μοντελοποίηση της διεπιφάνειας matrix-flake, η οποία αποτελεί κρίσιμο σημείο στην μεταφορά θερμότητας, καθώς η θερμική αντίσταση σε αυτήν την περιοχή επιδρά στην συνολική αγωγιμότητα του συνθέτου υλικού. Τα αποτελέσματα της υπολογιστικής μελέτης ανέδειξαν πως παράγοντες όπως ο λόγος αγωγιμοτήτων των υλικών (k_f/k_m), η συγκέντρωση και γεωμετρία των φυλλιδίων, καθώς και η ποιότητα διασύνδεσης μεταξύ των δύο φάσεων, επηρεάζουν σημαντικά τη θερμική απόδοση. Τέλος, επιβεβαιώθηκε πως η διεπιφάνεια matrix – flake, έχει επίδραση στα αποτελέσματα του σύνθετου υλικού και φαίνεται πως δρα σαν ένα <<μονοπάτι θερμότητας>> που διευκολύνει την θερμική ροή, με αποτέλεσμα την αύξηση της θερμικής αγωγιμότητας του σύνθετου υλικού. Συνεπώς, η ακριβής μοντελοποίηση της επιφάνειας διεπαφής μπορεί να αποτελέσει βασικό εργαλείο σχεδιασμού και

πρόβλεψης για τη βελτιστοποίηση της θερμικής αγωγιμότητας σε σύνθετα υλικά επόμενης γενιάς.

Λέξεις – κλειδιά: Σύνθετα πολυμερικά υλικά, θερμική αγωγιμότητα, διεπιφάνεια matrix – flake.

ASSESSING THE IMPACT OF THERMAL BRIDGES IN HEAT TRANSFER THROUGH SOLID COMPOSITE MATERIALS

APOSTOLOU KONSTANTINOS

Department of Mechanical Engineering, University of Thessaly, 2025

Supervisor: Dr. Thanasis Papathanasiou,
Professor of Rheology and Polymers Processes

Abstract

The aim of this thesis is to investigate the thermal conductivity of polymer composite materials reinforced with flakes, with a particular emphasis on the role of the interface between the matrix material and the flakes. The objective of the study is to computationally model the thermal behavior of such materials and to develop tools that enable the quantitative prediction and optimization of their effective thermal conductivity (K_{eff}). As part of the research, a new solver—*laplacianFoamF*—was developed and validated, tailored for use within the *OpenFOAM* computational environment. This solver supports the analysis of geometries containing numerous flakes with controlled orientation, size, and distribution. Special attention was given to the accurate modeling of the matrix–flake interface, which is a critical region for heat transfer, as the thermal resistance at this interface significantly influences the overall conductivity of the composite. The computational results revealed that factors such as the thermal conductivity ratio of the materials (k_f/k_m), the volume fraction and geometry of the flakes, and the quality of the interfacial bonding between the two phases play a decisive role in determining the thermal performance. Finally, it was confirmed that the matrix–flake interface acts as a "thermal percolation path" that facilitates heat flow, thereby enhancing the thermal conductivity of the composite material. Consequently, precise modeling of the interfacial region can serve as a key design and predictive tool for optimizing the thermal performance of next-generation composite materials.

Keywords: Polymer composites, thermal conductivity, matrix – flake interface, thermal percolation.

Πίνακας περιεχομένων

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ	1
1.1 ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟ ΜΕΛΕΤΗΣ	1
1.2 ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΗ ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗ	2
1.3 ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΤΗΣ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗΣ	2
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2 ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΠΛΑΙΣΙΟ	3
2.1 ΠΟΛΥΜΕΡΗ ΥΛΙΚΑ	3
2.2 ΣΥΝΘΕΤΑ ΥΛΙΚΑ	4
2.3 ΜΕΤΑΦΟΡΑ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ ΜΕ ΑΓΩΓΗ	6
2.3.1 ΘΕΡΜΙΚΕΣ ΑΝΤΙΣΤΑΣΕΙΣ ΣΕ ΣΕΙΡΑ	7
2.3.2 ΘΕΡΜΙΚΕΣ ΑΝΤΙΣΤΑΣΕΙΣ ΕΝ ΠΑΡΑΛΛΗΛΩ	8
2.4 ΜΕΤΑΦΟΡΑ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ ΣΤΑ ΣΥΝΘΕΤΑ ΥΛΙΚΑ	10
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3 ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΗΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ	13
3.1 ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ	13
3.2 ΚΑΤΑΣΚΕΥΗ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑΣ - ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟΥ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ	14
3.2.1 ΑΥΤΟΠΙΛΟΤ	14
3.2.2 GMSH – ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΠΛΕΓΜΑ	15
3.3 ΕΠΙΛΥΣΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ	18
3.3.1 OPENFOAM	18
3.3.2 ΜΕΘΟΔΟΣ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΌΓΚΩΝ (FVM)	20
3.3.3 ΑΡΧΙΚΕΣ ΚΑΙ ΣΥΝΟΡΙΑΚΕΣ ΣΥΝΘΗΚΕΣ	21
3.4 ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ	22
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 ΑΝΑΠΤΥΞΗ – ΠΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΥ ΕΠΙΛΥΣΗΣ	23
4.1 LAPLACIANFOAMF – ΒΑΣΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ	23
4.2 ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΑΣ ΤΟΥ SOLVER	25
4.3 ΠΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΤΟΥ SOLVER	32
4.4 ΕΓΚΥΡΟΤΗΤΑ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟΥ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ	38
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ ΜΕΛΕΤΗΣ	46
5.1 ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΩΝ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ ΚΑΙ ΤΟΥ ΜΕΓΕΘΟΥΣ ΤΩΝ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ	46
5.2 ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΣΑΝΑΤΟΛΙΣΜΟΥ ΤΩΝ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ	53
5.3 ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΤΟΥ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥ ΤΗΣ ΔΙΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ MATRIX – FLAKE	59

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	61
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α	63
ΠΗΓΑΙΑ ΑΡΧΕΙΑ LAPLACIANFOAMF	63
ΑΡΧΕΙΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ	68
FOLDER <i>O/T</i> – ΣΥΝΟΡΙΑΚΕΣ ΣΥΝΘΗΚΕΣ	68
FOLDER <i>CONSTANT/TRANSPORTPROPERTIES</i> – ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΣΥΝΘΕΤΟΥ ΥΛΙΚΟΥ	70
FOLDER <i>SYSTEM</i> – ΑΡΧΕΙΑ ΕΛΕΓΧΟΥ ΤΗΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ	71
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β	79
A=4, κF/κM=10, ΑΦ=1	79
A=8, κF/κM=10 ΚΑΙ ΑΦ=1	81
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	83

Κατάλογος Σχημάτων

ΣΧΗΜΑ 2.1: ΚΑΤΗΓΟΡΙΕΣ ΚΑΤΑΤΑΞΗΣ ΤΩΝ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ ΜΕ ΒΑΣΗ ΤΗΝ ΠΡΟΕΛΕΥΣΗ ΤΟΥΣ [1].	3
ΣΧΗΜΑ 2.2: ΚΑΤΗΓΟΡΙΕΣ ΣΥΝΘΕΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ ΒΑΣΕΙ ΤΗΣ ΔΟΜΗΣ ΤΟΥ ΠΛΗΡΩΤΙΚΟΥ ΥΛΙΚΟΥ (Α) ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ, (Β) ΦΥΛΛΙΔΙΑ, (C) ΣΥΝΕΧΕΙΣ ΙΝΕΣ ΚΑΙ (D) ΦΥΛΛΑ ΤΥΠΟΥ SANDWITCH [29].	5
ΣΧΗΜΑ 2.3: Η ΑΝΑΛΟΓΙΑ ΑΝΑΜΕΣΑ ΣΤΙΣ ΕΝΝΟΙΕΣ ΤΗΣ (Α) ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΑΝΤΙΣΤΑΣΗΣ ΚΑΙ (Β) ΗΛΕΚΤΡΙΚΗΣ ΑΝΤΙΣΤΑΣΗΣ [7].	7
ΣΧΗΜΑ 2.4: ΤΟ ΔΙΚΤΥΟ ΤΗΣ ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΑΝΤΙΣΤΑΣΗΣ ΓΙΑ ΤΗΝ ΜΕΤΑΦΟΡΑ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ ΜΕΣΑ ΑΠΟ ΕΝΑ ΕΠΙΠΕΔΟ ΤΟΙΧΟ ΠΟΥ ΥΦΙΣΤΑΤΑΙ ΣΥΝΑΓΩΓΗ ΚΑΙ ΑΠΟ ΤΙΣ ΔΥΟ ΠΛΕΥΡΕΣ [7].	8
ΣΧΗΜΑ 2.5: ΔΙΚΤΥΟ ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΑΝΤΙΣΤΑΣΗΣ ΓΙΑ ΔΥΟ ΠΑΡΑΛΛΗΛΑ ΣΤΡΩΜΑΤΑ, ΠΟΥ ΣΤΟ ΠΑΝΩ ΚΑΙ ΚΑΤΩ ΜΕΡΟΣ ΥΠΑΡΧΕΙ ΜΟΝΩΣΗ [7].	9
ΣΧΗΜΑ 2.6: ΔΙΚΤΥΟ ΘΕΡΜΙΚΩΝ ΑΝΤΙΣΤΑΣΕΩΝ ΓΙΑ ΣΥΝΔΥΑΣΜΕΝΗ ΕΝ ΣΕΙΡΑ ΚΑΙ ΕΝ ΠΑΡΑΛΛΗΛΩ ΔΙΑΤΑΞΗ [7].	9
ΣΧΗΜΑ 3.1: ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΕΠΙΛΥΣΗΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ, ΧΩΡΙΣΜΕΝΗ ΣΤΑ ΕΠΙΜΕΡΟΥΣ ΣΤΑΔΙΑ.	14
ΣΧΗΜΑ 3.2: ΤΟ ΓΡΑΦΙΚΟ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝ ΤΗΣ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ ΑΥΤΟΡΙΟΤ.	15
ΣΧΗΜΑ 3.3: ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΗ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΜΕ $A=2$, $N=100$, $\theta=0$ ΚΑΙ $E=90$.	16
ΣΧΗΜΑ 3.4 ΟΝΟΜΑΣΙΑ ΕΠΙΦΑΝΕΙΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ: 1) LEFT MATRIX, 2) TOP MATRIX, 3) RIGHT MATRIX, 4) TOP FLAKE, 5) RIGHT FLAKE, 6) LEFT FLAKE, 7) FRONT FLAKE, 8) FRONT MATRIX, 9) BACK FLAKE, 10) BOTTOM FLAKE, 11) BACK MATRIX, 12) BOTTOM MATRIX.	17
ΣΧΗΜΑ 3.5: ΡΟΗ ΤΩΝ ΕΡΓΑΣΙΩΝ ΤΟΥ OPENFOAM ΓΙΑ ΤΗΝ ΕΠΙΛΥΣΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ.	19
ΣΧΗΜΑ 3.6: ΣΥΝΗΘΕΙΣ ΔΟΜΕΣ 3D ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ (ΚΕΛΙΩΝ), ΤΕΤΡΑΕΔΡΙΚΑ, ΕΞΑΕΔΡΙΚΑ, ΠΡΙΣΜΑΤΙΚΑ ΚΑΙ ΠΟΛΥΕΔΡΙΚΑ (ΑΠΟ ΑΡΙΣΤΕΡΑ ΠΡΟΣ ΤΑ ΔΕΞΙΑ) [12]. Η ΔΟΜΗ ΠΟΥ ΧΡΗΣΙΜΟΠΟΙΗΘΗΚΕ ΣΤΗΝ ΔΙΑΚΡΙΤΟΠΟΙΗΣΗ ΤΟΥ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ ΕΙΝΑΙ Η ΠΡΙΣΜΑΤΙΚΗ.	21
ΣΧΗΜΑ 4.1: ΤΑ ΑΡΧΕΙΑ ΠΟΥ ΠΕΡΙΛΑΜΒΑΝΟΝΤΑΙ ΣΤΟΥΣ ΦΑΚΕΛΟΥΣ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ, ΓΙΑ ΤΗΝ ΕΠΙΛΥΣΗ ΤΟΥ ΑΠΟ ΤΟΝ LAPLACIANFOAMF (ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α).	24
ΣΧΗΜΑ 4.2: ΠΕΔΙΟ ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΔΙΑΧΥΤΟΤΗΤΑΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΕΝΟ ΑΠΟ ΤΟΝ LAPLACIANFOAMF ΜΕ $N=1$, $A=1$, $A\Phi=0,04$, $\theta=0$, $E=0$, $D_{\text{FLAKE}}=10$, $D_{\text{MATRIX}}=1$ ΚΑΙ $W_{\text{DIST}}=0,2$ Μ. ΣΤΟ ΣΗΜΕΙΟ ΜΕ ΤΟ ΜΑΥΡΟ ΧΡΩΜΑ ΔΙΑΚΡΙΝΕΤΑΙ ΤΟ ΤΟΙΧΩΜΑ ΤΟΥ FLAKE.	27
ΣΧΗΜΑ 4.3: ΠΕΔΙΟ ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑΣ ΣΕ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΜΕ $N=500$, $A=1$, $A\Phi=0,25$, $\theta=0$, $E=90$, $D_{\text{FLAKE}}=10$, $D_{\text{MATRIX}}=1$ ΚΑΙ $W_{\text{DIST}}=0,02$ Μ.	28
ΣΧΗΜΑ 4.4: ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΟ ΠΕΔΙΟ ΤΗΣ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗΣ ΜΕ $N=1$ $D_{\text{FLAKE}}=10$, $D_{\text{MATRIX}}=1$ ΚΑΙ $W_{\text{DIST}}=0,2$ Μ.	29
ΣΧΗΜΑ 4.5: ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΗ ΒΑΘΜΙΔΑ ΤΗΣ ΠΑΝΩ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ ΤΗΣ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑΣ ΤΟΥ ΣΧΗΜΑΤΟΣ 4.3, ΟΠΟΥ ΟΙ ΤΙΜΕΣ ΤΗΣ ΕΙΝΑΙ ΑΡΝΗΤΙΚΕΣ, ΑΦΟΥ Η ΘΕΡΜΟΡΟΗ ΓΙΝΕΤΑΙ ΑΠΟ ΤΗΝ ΚΑΤΩ ΠΡΟΣ ΤΗΝ ΕΠΑΝΩ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑ ΤΗΣ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑΣ.	30
ΣΧΗΜΑ 4.6: ΠΕΔΙΟ ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑΣ ΜΕ $D_{\text{FLAKE}} = D_{\text{MATRIX}} = 1$.	32
ΣΧΗΜΑ 4.7: ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΗ ΒΑΘΜΙΔΑ ΑΝΩ ΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ.	33
ΣΧΗΜΑ 4.8: ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΟ ΠΕΔΙΟ.	33
ΣΧΗΜΑ 4.9: ΠΕΔΙΟ ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΕΝΟ ΑΠΟ ΤΟΝ LAPLACIANFOAMF ΜΕ $N=1$, $A=1$, $\theta=0$, $E=0$, $D_{\text{FLAKE}}=10$, $D_{\text{MATRIX}}=1$ ΚΑΙ $W_{\text{DIST}}=0,1$ Μ.	35
ΣΧΗΜΑ 4.10: ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΗΣ ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑΣ ΠΟΥ ΥΠΟΛΟΓΙΖΕΙ Ο SOLVER ΣΕ ΣΧΕΣΗ ΜΕ ΤΟ ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΤΗΣ ΣΧΕΣΗΣ (19) (ΤΟΜΗ ΠΑΡΑΛΛΗΛΗ ΣΤΟΝ ΑΞΟΝΑ Χ ΚΑΙ $Y=0,5$ Μ ΤΟΥ ΣΧΗΜΑΤΟΣ 4.9).	35
ΣΧΗΜΑ 4.11: ΠΕΔΙΟ ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΕΝΟ ΑΠΟ ΤΟΝ LAPLACIANFOAMF ΜΕ $N=1$, $A=1$, $\theta=0$, $E=0$, $D_{\text{FLAKE}} = 10$, $D_{\text{MATRIX}} = 1$ ΚΑΙ $W_{\text{DIST}}=0,2$ Μ.	36
ΣΧΗΜΑ 4.12: ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΗΣ ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑΣ ΠΟΥ ΥΠΟΛΟΓΙΖΕΙ Ο SOLVER ΣΕ ΣΧΕΣΗ ΜΕ ΤΟ ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΤΗΣ ΣΧΕΣΗΣ (20) (ΤΟΜΗ ΠΑΡΑΛΛΗΛΗ ΣΤΟΝ ΑΞΟΝΑ Χ ΚΑΙ $Y = 0,5$ Μ ΤΟΥ ΣΧΗΜΑΤΟΣ 4.11).	36
ΣΧΗΜΑ 4.13: ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΑ ΠΕΔΙΑ ΓΙΑ ΤΙΣ ΓΕΩΜΕΤΡΙΕΣ ΤΩΝ ΠΑΡΑΠΑΝΩ ΠΕΡΙΠΤΩΣΕΩΝ $W_{\text{DIST}}=0,2$ Μ (ΑΡΙΣΤΕΡΑ) ΚΑΙ $W_{\text{DIST}}=0,1$ Μ (ΔΕΞΙΑ).	37
ΣΧΗΜΑ 4.14: ΔΟΜΗ ΑΡΑΙΟΥ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟΥ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ (ΑΡΙΣΤΕΡΑ) ΚΑΙ ΠΥΚΝΟΥ (ΔΕΞΙΑ).	40
ΣΧΗΜΑ 4.15: ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΠΛΕΓΜΑ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑΣ ΜΕ $N=100$, $A=1$, $\theta=0$, $E=90$.	40
ΣΧΗΜΑ 4.16: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ RICHARDSON EXTRAPOLATION. ΟΙ ΔΙΑΚΕΚΟΜΜΕΝΕΣ ΓΡΑΜΜΕΣ ΑΠΟΤΕΛΟΥΝ ΤΑ ΟΡΙΑ ΑΠΟΔΕΚΤΟΥ ΣΦΑΛΜΑΤΟΣ $\pm 1\%$.	44

ΣΧΗΜΑ 4.17: ΜΕΛΕΤΗ ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΤΟΥ ΠΛΗΘΟΥΣ ΤΩΝ ΚΕΛΙΩΝ ΣΤΗΝ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΠΟΥ ΕΞΕΤΑΣΤΗΚΕ ΣΤΗΝ ΠΑΡΕΜΒΟΛΗ RICHARDSON, ΩΣΤΕ Η ΛΥΣΗ ΝΑ ΒΡΙΣΚΕΤΑΙ ΕΝΤΟΣ ΤΩΝ ΟΡΙΩΝ ΤΟΥ ΑΠΟΔΕΚΤΟΥ ΣΦΑΛΜΑΤΟΣ $\pm 1\%$.	45
ΣΧΗΜΑ 5.1: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ ΓΙΑ ΤΟ ΚΕΦΦ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙ ΤΟΥ ΚΦ/ΚΜ, ΓΙΑ $A=1$, $N=500$, $A\Phi=0,25$, $\theta=0$ ΚΑΙ $E=90$.	46
ΣΧΗΜΑ 5.2: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ ΓΙΑ ΓΕΩΜΕΤΡΙΕΣ ΜΕ $N=500$, $A=1$, $\theta=0$, $E=90$ ΚΑΙ $A\Phi=0,25$, ΑΠΟ ΤΗΝ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ ΤΟΥ Κ. ΓΑΪΤΑΝΗ.	47
ΣΧΗΜΑ 5.3: ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΕΣ ΓΕΩΜΕΤΡΙΕΣ ΜΕ ΦΥΛΛΙΔΙΑ ΠΑΡΑΛΛΗΛΑ ΣΤΟΝ ΑΞΟΝΑ Χ, (Α) $A=4$, $N=500$, $A\Phi=1$, $\theta=0$, $E=0$ ΚΑΙ (Β) $A=8$, $N=500$, $A\Phi=1$, $\theta=0$, $E=0$.	48
ΣΧΗΜΑ 5.4: ΠΕΔΙΑ ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑΣ ΜΕ ΚΦ/ΚΜ=10 ΚΑΙ $W_{DIST} = 0,03$ Μ, ΓΙΑ ΤΑ ΣΧΗΜΑΤΑ 5.3.Α ΚΑΙ 5.3.Β ΑΝΤΙΣΤΟΙΧΑ.	48
ΣΧΗΜΑ 5.5: ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΑ ΠΕΔΙΑ ΓΙΑ ΤΙΣ ΠΕΡΙΠΤΩΣΕΙΣ ΤΩΝ ΣΧΗΜΑΤΩΝ 5.4.Α ΚΑΙ 5.4.Β ΑΝΤΙΣΤΟΙΧΑ.	48
ΣΧΗΜΑ 5.6: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΓΙΑ ΤΟ ΚΕΦΦ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙ ΤΟΥ ΚΦ/ΚΜ ΓΙΑ ΓΕΩΜΕΤΡΙΕΣ ΜΕ $N=500$, $A=4$ ΚΑΙ ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ ΠΑΡΑΛΛΗΛΑ ΣΤΟΝ ΑΞΟΝΑ Χ, ΓΙΑ ΔΙΑΦΟΡΑ ΑΦ.	49
ΣΧΗΜΑ 5.7: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΓΙΑ ΤΟ ΚΕΦΦ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙ ΤΟΥ ΚΦ/ΚΜ ΓΙΑ ΓΕΩΜΕΤΡΙΕΣ ΜΕ $N=500$, $A=8$ ΚΑΙ ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ ΠΑΡΑΛΛΗΛΑ ΣΤΟΝ ΑΞΟΝΑ Χ, ΓΙΑ ΔΙΑΦΟΡΑ ΑΦ.	49
ΣΧΗΜΑ 5.8: ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΕΣ ΓΕΩΜΕΤΡΙΕΣ ΜΕ ΦΥΛΛΙΔΙΑ ΣΕ ΤΥΧΑΙΟ ΠΡΟΣΑΝΑΤΟΛΙΣΜΟ, (Α) $A=4$, $N=500$, $A\Phi=1$, $\theta=0$, $E=90$ ΚΑΙ (Β) $A=8$, $N=500$, $A\Phi=1$, $\theta=0$, $E=90$.	50
ΣΧΗΜΑ 5.9: ΠΕΔΙΑ ΘΕΡΜΙΚΗΣ ΑΓΩΓΙΜΟΤΗΤΑΣ ΜΕ ΚΦ/ΚΜ=10 ΚΑΙ $W_{DIST} = 0,03$ Μ, ΓΙΑ ΤΙΣ ΓΕΩΜΕΤΡΙΕΣ ΤΩΝ ΣΧΗΜΑΤΩΝ 5.8.Α ΚΑΙ 5.8.Β ΑΝΤΙΣΤΟΙΧΑ.	50
ΣΧΗΜΑ 5.10: ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΑ ΠΕΔΙΑ ΓΙΑ ΤΑ ΣΧΗΜΑΤΑ 5.9.Α ΚΑΙ 5.9.Β ΑΝΤΙΣΤΟΙΧΑ.	50
ΣΧΗΜΑ 5.11: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΓΙΑ ΤΟ ΚΕΦΦ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙ ΤΟΥ ΚΦ/ΚΜ, ΓΙΑ ΓΕΩΜΕΤΡΙΕΣ ΜΕ $A=4$, $N=500$ ΚΑΙ ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ ΣΕ ΤΥΧΑΙΟ ΠΡΟΣΑΝΑΤΟΛΙΣΜΟ, ΓΙΑ ΔΙΑΦΟΡΑ ΑΦ.	51
ΣΧΗΜΑ 5.12: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΓΙΑ ΤΟ ΚΕΦΦ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙ ΤΟΥ ΚΦ/ΚΜ, ΓΙΑ ΓΕΩΜΕΤΡΙΕΣ ΜΕ $A=8$, $N=500$ ΚΑΙ ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ ΣΕ ΤΥΧΑΙΟ ΠΡΟΣΑΝΑΤΟΛΙΣΜΟ, ΓΙΑ ΔΙΑΦΟΡΑ ΑΦ.	51
ΣΧΗΜΑ 5.13: ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΗΣ ΚΕΦΦ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙ ΤΟΥ ΚΦ/ΚΜ, ΣΕ ΓΕΩΜΕΤΡΙΕΣ ΜΕ $\Phi = 12,5\%$ ΚΑΙ ΤΥΧΑΙΟ ΠΡΟΣΑΝΑΤΟΛΙΣΜΟ ΓΙΑ ΣΩΜΑΤΙΔΙΑ ΜΕ ΛΟΓΟ ΔΙΑΣΤΑΣΕΩΝ $A=4$ ΚΑΙ $A=8$.	52
ΣΧΗΜΑ 5.14: ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΕΣ ΓΕΩΜΕΤΡΙΕΣ ΜΕ $A=4$ ΚΑΙ $N=500$ ΓΙΑ (Α) $\theta=0$, $E=0$, (Β) $\theta=45$, $E=0$, (C) $\theta=90$, $E=0$ ΚΑΙ (D) $\theta=0$, $E=90$.	54
ΣΧΗΜΑ 5.15: ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΕΣ ΓΕΩΜΕΤΡΙΕΣ ΜΕ $A=8$ ΚΑΙ $N=500$ ΓΙΑ (Α) $\theta=0$, $E=0$, (Β) $\theta=45$, $E=0$, (C) $\theta=90$, $E=0$ ΚΑΙ (D) $\theta=0$, $E=90$.	55
ΣΧΗΜΑ 5.16: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΓΙΑ ΤΟ ΚΕΦΦ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙ ΤΟΥ ΚΦ/ΚΜ, ΓΙΑ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΜΕ $A=4$, $N=500$ ΚΑΙ ΠΡΟΣΑΝΑΤΟΛΙΣΜΟ ΦΥΛΛΙΔΙΩΝ $\theta=45$, $E=0$.	56
ΣΧΗΜΑ 5.17: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΓΙΑ ΤΟ ΚΕΦΦ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙ ΤΟΥ ΚΦ/ΚΜ, ΓΙΑ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΜΕ $A=4$, $N=500$ ΚΑΙ ΠΡΟΣΑΝΑΤΟΛΙΣΜΟ ΦΥΛΛΙΔΙΩΝ $\theta=90$, $E=0$.	56
ΣΧΗΜΑ 5.18: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΓΙΑ ΤΟ ΚΕΦΦ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙ ΤΟΥ ΚΦ/ΚΜ, ΓΙΑ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΜΕ $A=8$, $N=500$ ΚΑΙ ΠΡΟΣΑΝΑΤΟΛΙΣΜΟ $\theta=45$, $E=0$.	57
ΣΧΗΜΑ 5.19: ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΓΙΑ ΤΟ ΚΕΦΦ ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙ ΤΟΥ ΚΦ/ΚΜ, ΓΙΑ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΜΕ $A=8$, $N=500$ ΚΑΙ ΠΡΟΣΑΝΑΤΟΛΙΣΜΟ $\theta=90$, $E=0$.	57
ΣΧΗΜΑ 5.20: ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΟΥ ΚΕΦΦ ΓΙΑ $A=4$ ΚΑΙ ΚΦ/ΚΜ=10, ΓΙΑ ΚΑΘΕ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ ΠΡΟΣΑΝΑΤΟΛΙΣΜΟΥ.	58

Κεφάλαιο 1 Εισαγωγή

Τα πολυμερή υλικά ενισχυμένα με φυλλίδια (flakes) είναι υλικά τα οποία, αποτελούνται από μια πολυμερική μήτρα και ένα ή περισσότερα ενισχυτικά υλικά. Συνήθως, τα υλικά ενίσχυσης βρίσκονται σε νανοκλίμακα και προσδίδουν εξαιρετική μηχανική αντοχή, θερμική αγωγιμότητα και ηλεκτρικές ιδιότητες, διατηρώντας παράλληλα την οικονομικότητα του τελικού υλικού [1]. Ως αποτέλεσμα των παραπάνω, η βιομηχανία των σύνθετων υλικών αναπτύσσεται με ραγδαίους ρυθμούς, έτσι ώστε να ικανοποιήσει τις απαιτήσεις της σύγχρονης μηχανικής. Ενδεικτικές εφαρμογές των πολυμερών υλικών ενισχυμένων με φυλλίδια, ευρίσκονται από την αεροδιαστημική τεχνολογία έως την ιατρική.

1.1 Αντικείμενο Μελέτης

Η μελέτη της θερμικής συμπεριφοράς πολυμερών υλικών ενισχυμένα με flakes αποτελεί κρίσιμο ερευνητικό πεδίο, ιδιαίτερα σε εφαρμογές που η αποτελεσματική διαχείριση θερμότητας είναι καθοριστική. Στην παρούσα διπλωματική εργασία, εστιάζουμε στην ανάπτυξη αλγορίθμου και υπολογιστική μελέτη πολυμερών με flakes τα οποία έχουν διαφορετικές θερμικές αγωγιμότητες, με στόχο την ποσοτική πρόβλεψη της θερμοκρασιακής τους απόκρισης και την βελτιστοποίηση της απόδοσής τους. Μεθοδολογικά, χρησιμοποιούνται υπολογιστικές προσομοιώσεις, ενώ παράλληλα διερευνώνται παράμετροι όπως η συγκέντρωση, η γεωμετρία και ο προσανατολισμός των flakes. Καίριο σημείο της εργασίας, αποτελεί ο λεπτομερής υπολογισμός της θερμικής αγωγιμότητας στην διεπιφάνεια μεταξύ της πολυμερικής μήτρας και του flake. Ο παραπάνω υπολογισμός, επιτρέπει να προβλέψουμε με μεγαλύτερη ακρίβεια την θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού λαμβάνοντας υπόψιν τις αλληλεπιδράσεις των ιδιοτήτων μεταξύ των δύο υλικών.

1.2 Βιβλιογραφική Ανασκόπηση

Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, στην παρούσα μελέτη έγινε ιδιαίτερη έρευνα για την ανάπτυξη ενός λύτη (solver), στο ανοιχτό λογισμικό προσομοιώσεων OpenFoam. Πιο συγκεκριμένα, προσαρμόστηκε ένας υπάρχων solver του OpenFoam με την εύρεση των κατάλληλων υπολογιστικών βιβλιοθηκών, ώστε να δημιουργηθεί το επιθυμητό υπολογιστικό πλέγμα και να προχωρήσει η αριθμητική επίλυση της προσομοίωσης. Η μελέτη αυτή θεμελιώνεται στην χρόνια έρευνα των κ. Παπαθανασίου και κ. Τσιαντή, οι οποίοι έχουν εντυφλήσει στον τρόπο πλήρωσης του μητρικού υλικού με τα σωματίδια ενίσχυσης, αλλά και στην επίδραση της γεωμετρίας των σωματιδίων στις ιδιότητες του σύνθετου υλικού [2] [3].

1.3 Οργάνωση της Διπλωματικής

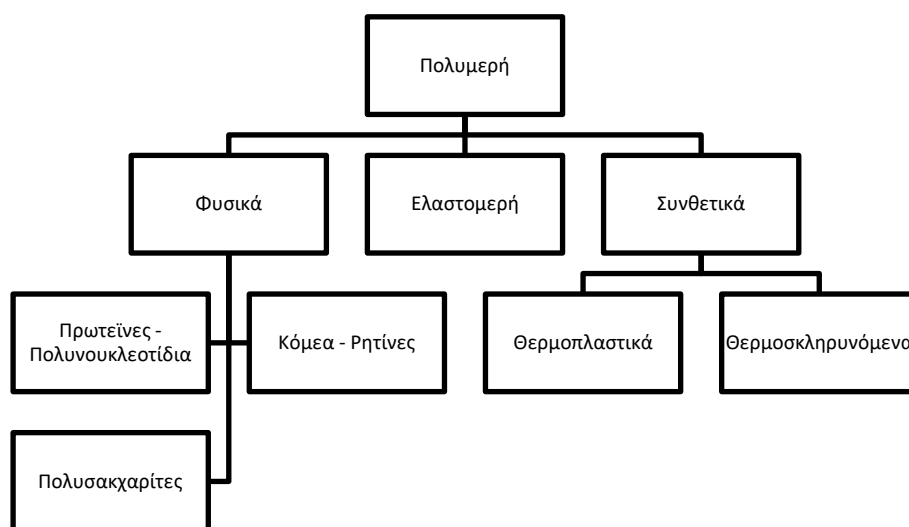
Στην παρούσα εργασία, υλοποιείται η ανάπτυξη και πιστοποίηση του solver *LaplacianFoamF*, ο οποίος δίνει ιδιαίτερη έμφαση στον δυναμικό υπολογισμό της θερμικής αγωγιμότητας στην επιφάνεια επαφής πολυμερικής μήτρας – υλικού ενίσχυσης. Η ανάπτυξη των υπολογιστικών μοντέλων, στηρίζεται στο υπολογιστικό πακέτο ανοικτού κώδικα OpenFoam και η αριθμητική επίλυση εφαρμόζεται σε δισδιάστατη γεωμετρία. Κατά το στάδιο της πιστοποίησης, εφαρμόστηκε μέθοδος υπολογισμού των υπολογιστικών κελιών που είναι απαραίτητα για την επιθυμητή ακρίβεια, καθώς και βελτιστοποίηση του αλγόριθμου με στόχο το υπολογιστικό αποτέλεσμα να συγκλίνει με το θεωρητικό μοντέλο. Στην συνέχεια, εξάγονται αποτελέσματα τα οποία βοηθούν στην κατανόηση της θερμικής συμπεριφοράς του σύνθετου υλικού. Αξίζει να σημειωθεί ότι, γίνεται αντιπαραβολή με αποτελέσματα από την διπλωματική εργασία του κ. Γαϊτάνη [4], ο οποίος δεν λαμβάνει υπόψιν την συμβολή της διεπιφάνειας μητρικού υλικού – ενισχυτικού υλικού, στον υπολογισμό της θερμικής αγωγιμότητας του σύνθετου.

Κεφάλαιο 2 Θεωρητικό Πλαίσιο

Στο παρόν κεφάλαιο, γίνεται μια θεωρητική ανασκόπηση στις έννοιες του πολυμερούς, του σύνθετου υλικού και του μηχανισμού μεταφοράς θερμότητας με αγωγή, τα οποία χρησιμοποιούνται στην παρούσα εργασία.

2.1 Πολυμερή Υλικά

Τα πολυμερή υλικά συνιστούν μακρομοριακές αλυσίδες, οι οποίες αποτελούνται από επαναλαμβανόμενες δομικές μονάδες, γνωστές ως μονομερή, συνδεδεμένα μεταξύ τους μέσω ομοιοπολικών δεσμών. Ο σχηματισμός των πολυμερών πραγματοποιείται μέσω της διαδικασίας του πολυμερισμού και συγκεκριμένα είτε με μεθόδους προσθήκης (chain-growth polymerization) είτε με μεθόδους συμπύκνωσης (step-growth polymerization), αναλόγως της φύσης των μονομερών και του μηχανισμού αντίδρασης. Τα πολυμερή κατατάσσονται σε τρεις κατηγορίες με βάση την φύση τους, τα φυσικά (κυτταρίνη, ρητίνες), τα ελαστομερή (φυσικό καουτσούκ) και τα συνθετικά (πολυαιθυλένιο, πολυπροπυλένιο, πολυβινυλοχλωρίδιο, πολυτερεφθαλικό αιθυλένιο κ.α.). Η δομή και ο βαθμός πολυμερισμού επηρεάζουν σημαντικά τις μηχανικές, θερμικές και χημικές ιδιότητες του υλικού, όπως η ελαστικότητα, η θερμική αγωγιμότητα, η θερμική αντοχή και η χημική αδράνεια [1] [5].



Σχήμα 2.1: Κατηγορίες κατάταξης των πολυμερών με βάση την προέλευσή τους [1].

Λόγω των επιθυμητών φυσικοχημικών ιδιοτήτων τους, όπως το χαμηλό ειδικό βάρος, η αντοχή στη διάβρωση και η δυνατότητα θερμοπλαστικής ή θερμοσκυρηνόμενης επεξεργασίας, τα πολυμερή έχουν ευρεία εφαρμογή στην βιομηχανία. Στον τομέα τροφίμων και ποτών χρησιμοποιούνται σε συσκευασίες λόγω του φραγμού τους σε υγρασία και αέρα. Στην ιατρική, εξειδικευμένα πολυμερή βρίσκουν εφαρμογή στην κατασκευή προσθετικών μελών, αλλά και στην φαρμακευτική επιστήμη μέσω της χρήσης τους ως φορείς για τις χημικές ουσίες. Επιπλέον έχουν μεγάλη απήχηση στην μικροηλεκτρονική, στα σύνθετα υλικά και στην αεροναυπηγική, που σύμφωνα με μελέτες παρουσιάζει τον μεγαλύτερο ετήσιο ρυθμό ανάπτυξης. Συμπερασματικά, τα πολυμερή αποτελούν κρίσιμο τομέα της επιστήμης των υλικών, με συνεχώς αυξανόμενη σημασία στην τεχνολογική πρόοδο και στην βιώσιμη ανάπτυξη.

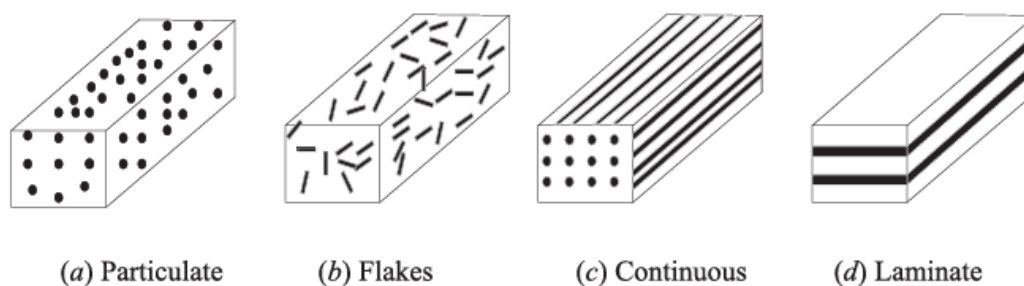
2.2 Σύνθετα Υλικά

Τα σύνθετα υλικά που ενισχύονται με φυλλίδια (flakes), αποτελούν ένα ταχέως αναπτυσσόμενο πεδίο στην επιστήμη των υλικών, λόγω των εξαιρετικών μηχανικών και θερμικών ιδιοτήτων τους, αλλά και των ιδιοτήτων φραγμού.

Η βασική δομή αυτών των σύνθετων υλικών αποτελείται από μία πολυμερική μήτρα (matrix) εντός της οποίας ενσωματώνονται τα ενισχυτικά φυλλίδια (flakes), τα οποία είναι συνήθως λεπτά δισδιάστατα υλικά με καθορισμένο λόγο πλήρωσης και συγκεκριμένο ή τυχαίο προσανατολισμό. Ο σκοπός της προσθήκης αυτών των υλικών είναι αφενός να λειτουργούν ως ενισχυτικά στοιχεία, προσδίδοντας αυξημένη μηχανική αντοχή και αφετέρου επηρεάζουν σημαντικές ιδιότητες όπως την θερμική αγωγιμότητα, την θερμική αντοχή και τις ιδιότητες φραγμού του σύνθετου υλικού. Σημαντική επιρροή στις τελικές ιδιότητες του σύνθετου υλικού έχει η επιφάνεια διεπαφής μεταξύ matrix και flake, στην οποία συναντώνται ιδιαίτερα φαινόμενα που επιδρούν στον μηχανισμό μετάδοσης θερμότητας.

Μια ιδιαίτερη πρόκληση που αντιμετωπίζεται στην κατασκευή σύνθετων υλικών με flakes είναι η επίτευξη ομοιόμορφης διασποράς των ενισχυτικών υλικών εντός της πολυμερικής μήτρας, καθώς και η πρόσφυση μεταξύ των δύο φάσεων. Η κακή

διασπορά μπορεί να οδηγήσει σε δημιουργία συσσωματωμάτων φυλλιδίων (agglomeration), με αποτέλεσμα την εμφάνιση αστοχιών και υποβάθμιση των τελικών λειτουργικών ιδιοτήτων του σύνθετου υλικού. Για την αποφυγή τέτοιων αστοχιών χρησιμοποιούνται τεχνικές, οι οποίες ενισχύουν την ομοιόμορφη διασύνδεση των δύο υλικών, μέσω χημικών δεσμών ή δευτερογενών αλληλεπιδράσεων. Επιπλέον, η χρήση τεχνικών ενσωμάτωσης όπως, εφαρμογή υπερήχων, μηχανική ανάδευση υψηλής διάτμησης (high-shear mixing) και in-situ πολυμερισμού [6] συμβάλλει στην ομοιομορφία του σύνθετου υλικού. Η κατανόηση και βελτιστοποίηση των παραπάνω παραμέτρων είναι καίριας σημασίας για την αξιοποίηση των εξαιρετικών ιδιοτήτων που προσφέρουν τα σύνθετα υλικά στις τεχνολογικές εφαρμογές τους.



Σχήμα 2.2: Κατηγορίες σύνθετων υλικών βάσει της δομής του πληρωτικού υλικού (α) σωματίδια, (b) φυλλίδια, (c) συνεχείς ίνες και (d) φύλλα τύπου Sandwich [29].

Συμπερασματικά, τα σύνθετα υλικά ενισχυμένα με φυλλίδια αντιπροσωπεύουν μια πολλά υποσχόμενη κατηγορία υλικών, με δυνατότητα προσαρμογής των μηχανικών και θερμικών τους ιδιοτήτων σύμφωνα με τις απαιτήσεις της εκάστοτε εφαρμογής. Η πρόοδος στην έρευνα της σχέσης μεταξύ μικροδομής και μακροσκοπικής συμπεριφοράς, καθώς και οι εξελίξεις στην τεχνολογία επεξεργασίας και διάχυσης των φυλλιδίων, αναμένεται να ενισχύσουν περαιτέρω τη χρήση αυτών των υλικών σε τομείς αιχμής, όπως η ενέργεια, η μικροηλεκτρονική και συστήματα θερμικής διαχείρισης. Τέλος, η διεπιστημονική προσέγγιση που απαιτείται για την ανάπτυξή τους καθιστά τον τομέα ιδιαίτερα ενεργό και πολλά υποσχόμενο για μελλοντική έρευνα και καινοτομία.

2.3 Μεταφορά Θερμότητας με Αγωγή

Η μεταφορά θερμότητας με αγωγή αποτελεί έναν από τους βασικούς μηχανισμούς μετάδοσης θερμότητας στην φύση και την μηχανική. Πρόκειται για την διαδικασία μεταφοράς θερμικής ενέργειας μέσω ενός υλικού χωρίς μακροσκοπική μετακίνηση της ύλης και πραγματοποιείται λόγω της διαφοράς θερμοκρασίας μεταξύ δύο περιοχών [7].

Η αγωγή θερμότητας περιγράφεται μαθηματικά από τον νόμο του *Fourier* :

$$q = -k\nabla T \quad (2.1)$$

όπου:

q είναι η πυκνότητα θερμοροής (W/m^2)

k είναι η θερμική αγωγιμότητα του υλικού (W/mK)

$\frac{dT}{dn}$ η χωρική μεταβολή της θερμοκρασίας

Σε σταθερές συνθήκες και για επίπεδα τοιχώματα σταθερού πάχους L , η θερμική ροή δίνεται από την σχέση:

$$Q = \frac{kA(T_1 - T_2)}{L} \quad (2.2)$$

όπου A είναι η επιφάνεια μεταφοράς και T_1, T_2 οι θερμοκρασίες στις δύο πλευρές του τοιχώματος .

Επιπλέον η θερμική αγωγιμότητα k συνδέεται με την θερμική διαχυτότητα D_T του υλικού από την σχέση:

$$k = D_T * \rho * c_p \quad (2.3)$$

όπου:

D_T η θερμική διαχυτότητα (m^2/s)

ρ η πυκνότητα του υλικού (kg/m^3)

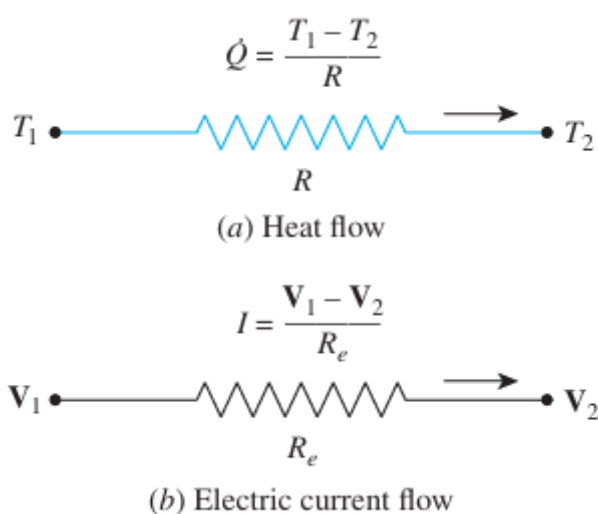
c_p η ειδική θερμότητα υπό σταθερή πίεση (J/kgK)

Για την ανάλυση πιο πολύπλοκων συστημάτων μεταφοράς θερμότητας, χρησιμοποιείται το μοντέλο δικτύου θερμικών αντιστάσεων, το οποίο είναι ανάλογο με αυτό των ηλεκτρικών κυκλωμάτων. Η θερμική αντίσταση ορίζεται ως:

$$R_{th} = \frac{L}{kA} \quad (2.4)$$

και η θερμική ροή δίνεται από την σχέση:

$$Q = \frac{\Delta T}{R_{th}} \quad (2.5)$$



Σχήμα 2.3: Η αναλογία ανάμεσα στις έννοιες της (a) θερμικής αντίστασης και (b) ηλεκτρικής αντίστασης [7].

2.3.1 Θερμικές Αντιστάσεις σε Σειρά

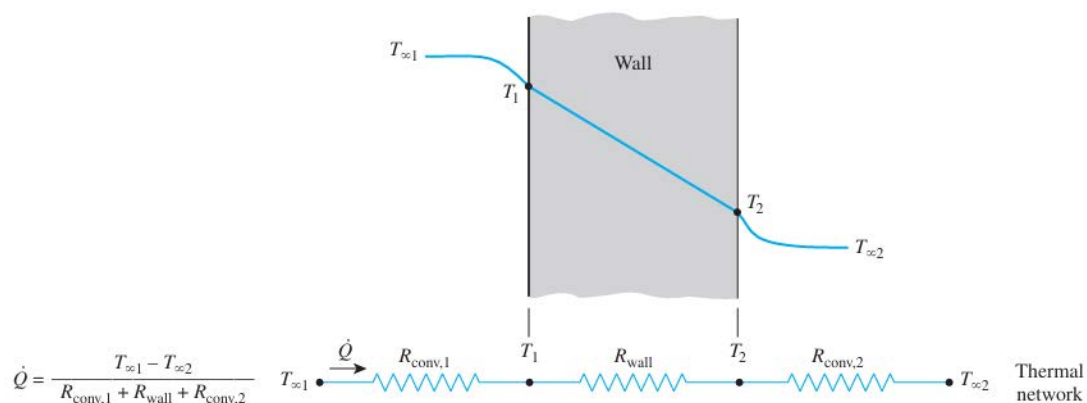
Όταν η θερμότητα διέρχεται διαδοχικά από περισσότερα από ένα υλικά ή στρώματα, οι θερμικές αντιστάσεις τους προστίθενται σε σειρά:

$$R_{total} = R_1 + R_2 + R_3 + \dots \quad (2.6)$$

Αυτό συμβαίνει για παράδειγμα όταν μια τοιχοποιία αποτελείτε από διαφορετικά υλικά, όπως τούβλο, μόνωση και επίχρισμα. Η συνολική θερμική αντίσταση της τοιχοποιίας ισούται με το άθροισμα των επιμέρους αντιστάσεων.

Η θερμική ροή είναι ίδια μέσα από κάθε στρώμα και δίνεται από την σχέση:

$$Q = \frac{T_{in} - T_{out}}{R_{total}} \quad (2.7)$$



Σχήμα 2.4: Το δίκτυο της θερμικής αντίστασης για την μεταφορά θερμότητας μέσα από ένα επίπεδο τοίχο που υφίσταται συναγωγή και από τις δύο πλευρές [7].

Η θερμοκρασιακή κατανομή κατά μήκος του τοιχώματος εξαρτάται από τις σχετικές τιμές των θερμικών αγωγιμοτήτων των υλικών. Σε στρώματα με υψηλή θερμική αντίσταση εμφανίζεται μεγαλύτερη πτώση θερμοκρασίας.

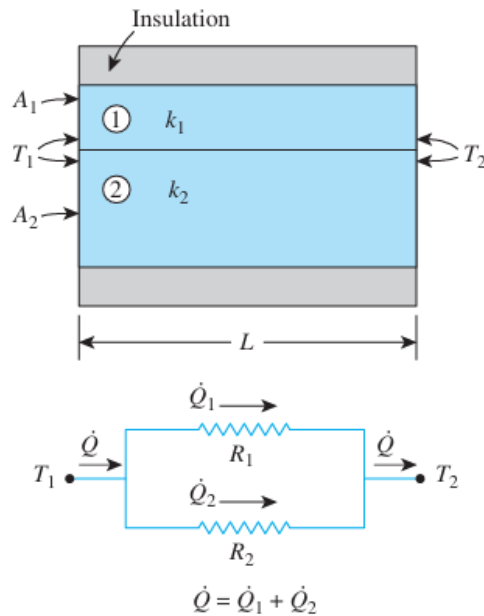
2.3.2 Θερμικές Αντιστάσεις εν Παραλλήλω

Σε περιπτώσεις που η θερμότητα μπορεί να μεταφέρεται από δύο ή περισσότερες παράλληλες διαδρομές (π.χ. συνδυασμός διαφορετικών υλικών ή κοιλοτήτων σε ένα επίπεδο), τότε οι αντίστοιχες θερμικές αντιστάσεις βρίσκονται σε παράλληλη διάταξη και εκφράζονται από την σχέση:

$$\frac{1}{R_{total}} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_3} + \dots \quad (2.8)$$

Αυτό σημαίνει ότι η συνολική θερμική αντίσταση είναι μικρότερη από κάθε μία μεμονωμένη. Το μοντέλο αυτό εφαρμόζεται για παράδειγμα σε τοιχώματα με

ενσωματωμένα υλικά διαφορετικής θερμικής αγωγιμότητας σε επαφή με το εσωτερικό και εξωτερικό περιβάλλον [7].

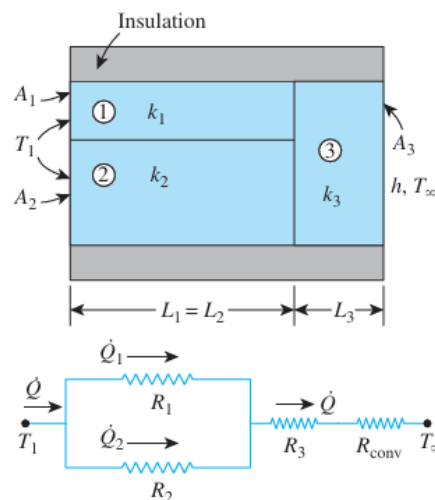


Σχήμα 2.5: Δίκτυο θερμικής αντίστασης για δύο παράλληλα στρώματα, που στο πάνω και κάτω μέρος υπάρχει μόνωση [7].

Η συνολική θερμική ροή δίνεται από την σχέση:

$$Q_{total} = Q_1 + Q_2 + Q_3 + \dots (2.9)$$

όπου κάθε $Q_i = \frac{\Delta T}{R_i}$. Η διαφορά θερμοκρασίας είναι κοινή για κάθε διαδρομή, αλλά οι μεμονωμένες θερμικές ροές εξαρτώνται από την αντίστοιχη αντίσταση.



Σχήμα 2.6: Δίκτυο θερμικών αντιστάσεων για συνδυασμένη εν σειρά και εν παράλληλω διάταξη [7].

Στην πράξη, πολλά θερμικά συστήματα περιλαμβάνουν συνδυασμό αντιστάσεων σε σειρά και εν παραλλήλω. Αυτό ισχύει αντίστοιχα και στα σύνθετα υλικά, που το μητρικό υλικό και τα σωματίδια ενίσχυσης αποτελούν δίκτυο θερμικών αντιστάσεων σε σειρά, όμως υπάρχει και η περιοχή διεπαφής μητρικού υλικού – σωματιδίων ενίσχυσης στην οποία ουσιαστικά δημιουργείται ένα είδος θερμογέφυρας και δρα με το υπόλοιπο σύστημα ως παράλληλη αντίσταση.

2.4 Μεταφορά Θερμότητας στα Σύνθετα Υλικά

Τα σύνθετα υλικά (composite materials), λόγω της πολυφασικής τους φύσης, αποτελούν ένα ερευνητικό πεδίο ιδιαίτερης σημασίας για την τεχνολογία και τις εφαρμογές υψηλής απόδοσης. Η μελέτη της θερμικής τους συμπεριφοράς έχει αποκτήσει ιδιαίτερο βάρος τα τελευταία χρόνια, καθώς ο σχεδιασμός θερμικά αγωγίμων σύνθετων υλικών είναι κρίσιμος σε εφαρμογές ηλεκτρονικής ψύξης, αεροδιαστημικών δομών, ευφυών υλικών και ενεργειακών συστημάτων. Βασικό στοιχείο της θερμικής απόδοσης αυτών των υλικών αποτελεί η διεπιφανειακή θερμική αντίσταση (inter-phase thermal resistance, ή Kapitza resistance) [8], η οποία αναδεικνύεται ως ο κρίσιμος παράγοντας που καθορίζει την αποτελεσματική μεταφορά θερμότητας εντός των σύνθετων δομών.

Πιο συγκεκριμένα, η θερμότητα μεταφέρεται κυρίως μέσω φωνονίων, δηλαδή κβαντικών ταλαντώσεων του πλέγματος και η διεπαφή μεταξύ δύο υλικών με διαφορετικές φωνονικές ιδιότητες στη μάζα, στην ταχύτητα διάδοσης και στην κρυσταλλική τάξη των υλικών μπορεί να εμποδίσει σημαντικά τη θερμική ροή. Αυτό συμβαίνει διότι τα φωνόνια ενδέχεται να ανακλαστούν στη διεπιφάνεια, αντί να μεταδοθούν στο γειτονικό υλικό. Το ποσοστό μετάδοσης ή ανάκλασης εξαρτάται από παραμέτρους όπως η τραχύτητα της διεπιφάνειας, η ποιότητα συγκόλλησης, και η θερμοδυναμική σύζευξη των υλικών. Η κατανόηση αυτού του φαινομένου είναι κρίσιμη για την ακριβή πρόβλεψη και βελτιστοποίηση της θερμικής αγωγιμότητας σε μικρο- και νανοσυστήματα, καθώς και για τη σχεδίαση υλικών υψηλής θερμικής απόδοσης. Αυτό το φαινόμενο περιγράφεται θεωρητικά από τα μοντέλα Acoustic

Mismatch Model (AMM) και Diffuse Mismatch Model (DMM), ενώ η σύγχρονη ποσοτική προσέγγιση των *Minnich & Chen* [9] επιτρέπει τη φασματική ανάλυση της φωνονικής ροής και την ακριβέστερη πρόβλεψη της διεπιφανειακής αντίστασης με βάση τις ιδιότητες των υλικών.

Η εφαρμογή αυτής της θεωρίας στα σύνθετα υλικά είναι ιδιαίτερα σημαντική, καθώς ακόμη και υλικά με εξαιρετικά υψηλή θερμική αγωγιμότητα, όπως οι νανοσωλήνες άνθρακα ή το γραφένιο (CNT), δεν αποδίδουν θερμικά στο σύνολο του σύνθετου υλικού, όταν η σύζευξή τους με τη μήτρα είναι ανεπαρκής. Σε πολλές περιπτώσεις, η διεπιφανειακή αντίσταση κυριαρχεί επί της συνολικής θερμικής συμπεριφοράς, καθιστώντας κρίσιμη την ενίσχυση της σύζευξης αυτής μέσω χημικής τροποποίησης – λειτουργικοποίησης των επιφανειών, ή χρήσης ενδιάμεσων στρωμάτων.

Η εργασία των *Cahill et al* [8]. αναδεικνύει ότι η θερμική αγωγιμότητα σε νανοδομημένα σύνθετα δεν μπορεί να περιγραφεί μόνο από το ποσοστό πληρωτικού ή τη θερμική αγωγιμότητα των συστατικών του. Αντίθετα, κρίσιμη παράμετρος είναι η γεωμετρία επαφής, η διάταξη (π.χ. ευθυγράμμιση), η διασπορά και κυρίως η ποιότητα των διεπιφανειών. Η μέτρηση της θερμικής αγωγιμότητας πραγματοποιείται μέσω τεχνικών υψηλής ακρίβειας, όπως η θερμοανακλαστικότητα χρονικού πεδίου (TDTR), η οποία επιτρέπει την εκτίμηση της θερμικής αντίστασης σε επίπεδο νανομέτρων. Ενδεικτικά, σε σύνθετα υλικά τύπου epoxy-CNT, έχει παρατηρηθεί ότι η θερμική αγωγιμότητα αυξάνεται πολλαπλάσια όταν οι νανοσωλήνες έχουν λειτουργικοποιηθεί με ομάδες -OH ή -COOH, γεγονός που οδηγεί σε καλύτερη διαβροχή της επιφάνειας και μικρότερη θερμική αντίσταση. Παρόμοια αποτελέσματα έχουν καταγραφεί σε σύνθετα με γραφένιο και h-BN, όπου η καλή διασύνδεση των φύλλων με τη μήτρα οδηγεί σε διαμόρφωση συνεχούς θερμικού μονοπατιού (thermal percolation path).

Η κατανόηση και έλεγχος της μετάδοσης θερμότητας σε σύνθετα υλικά έχει άμεσες εφαρμογές:

- **Ψύξη ηλεκτρονικών κυκλωμάτων:** Τα σύνθετα υλικά χρησιμοποιούνται σε θερμικά pads και υλικά διεπαφής μεταξύ μικροεπεξεργαστών και heat sinks. Η

αποτελεσματική απομάκρυνση της θερμότητας εξαρτάται από τη χαμηλή διεπιφανειακή αντίσταση μεταξύ του αγωγίμου πληρωτικού και της μήτρας.

- **Συστήματα αποθήκευσης ενέργειας:** Σε μπαταρίες και supercapacitors, σύνθετα υλικά με υψηλή θερμική αγωγιμότητα βοηθούν στη σταθεροποίηση της θερμοκρασίας και στην αποτροπή θερμικών runaway φαινομένων.
- **Νανοθερμοηλεκτρικά υλικά:** Η θερμική απομόνωση σε συγκεκριμένες περιοχές, μέσω ελεγχόμενης θερμικής αντίστασης, ενισχύει την απόδοση αυτών των συστημάτων.
- **Αεροδιαστημική και αμυντική τεχνολογία:** Τα σύνθετα υλικά με ελεγχόμενη θερμική αγωγιμότητα χρησιμοποιούνται σε θερμικά προστατευτικά συστήματα, όπου η πρόβλεψη της ροής θερμότητας είναι κρίσιμη για τη σταθερότητα της δομής.

Συμπερασματικά, η κατανόηση της διεπιφανειακής θερμικής αντίστασης σε σύνθετα υλικά αποτελεί θεμέλιο για τον αποτελεσματικό σχεδιασμό και την εφαρμογή αυτών των συστημάτων σε τεχνολογίες αιχμής. Οι θεωρίες φασματικής θερμικής μεταφοράς [9], προσφέρουν ένα πιο ρεαλιστικό και ακριβές μοντέλο για την πρόβλεψη της θερμικής ροής σε ανομοιογενή συστήματα, ενώ η πρόοδος στη μέτρηση και ανάλυση [8] επιτρέπει την ποσοτική αξιολόγηση της επίδρασης των διεπιφανειών. Η διεπιστημονική φύση του προβλήματος – που περιλαμβάνει τη φυσική της ύλης, τη χημεία επιφανειών, την επιστήμη υλικών και την θερμική μηχανική, καθιστά σαφές ότι η βελτίωση της θερμικής απόδοσης σύνθετων υλικών απαιτεί συστηματική κατανόηση των διεπιφανειακών φαινομένων σε νανοκλίμακα. Με τη συνεχή πρόοδο στην υπολογιστική μοντελοποίηση, ανοίγεται ο δρόμος για τον σχεδιασμό έξυπνων σύνθετων υλικών με εξατομικευμένη θερμική αγωγιμότητα, κατάλληλη για τις απαιτήσεις κάθε εφαρμογής.

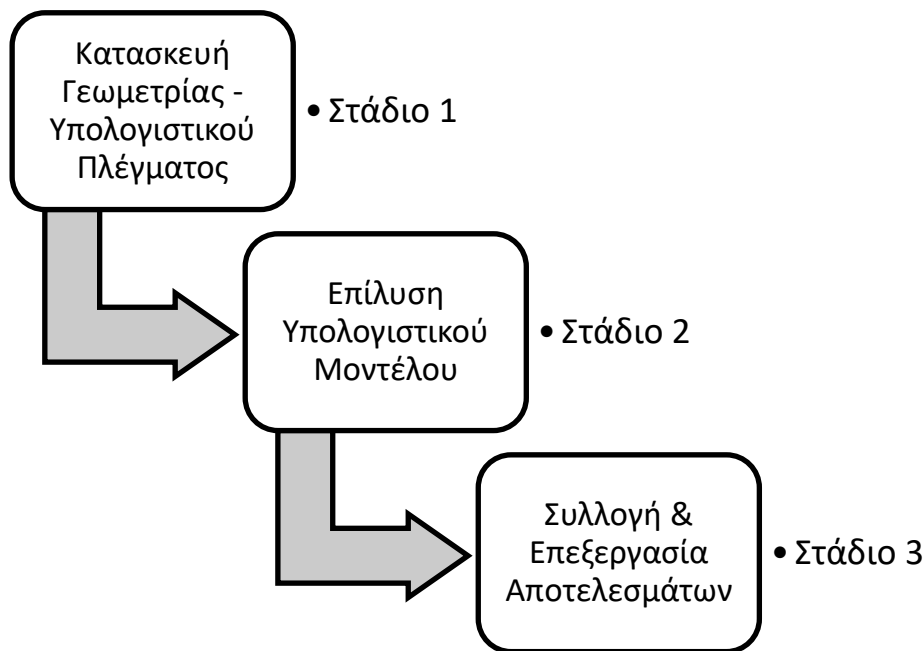
Κεφάλαιο 3 Εισαγωγή στην Υπολογιστική Ανάλυση

Στο παρόν κεφάλαιο γίνεται παρουσίαση των υπολογιστικών πακέτων που χρησιμοποιήθηκαν για την περάτωση της διπλωματικής εργασίας και συγκεκριμένα αναλύεται η διαδικασία που ακολουθείτε για την κατασκευή του υπολογιστικού μοντέλου, την επίλυση και την επεξεργασία των αποτελεσμάτων. Συγκεκριμένα, στην παρούσα εργασία έγινε χρήση των λογισμικών *Autopilot* [3] και *Gmsh* [10] για την κατασκευή της γεωμετρίας, του υπολογιστικού πακέτου ανοικτού κώδικα *Openfoam* [11] για την υπολογιστική ανάλυση και του λογισμικού *Paraview*, που αποτελεί εργαλείο του *Openfoam*, για την μετεπεξεργασία και οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων. Τέλος, η υπολογιστική ανάλυση πραγματοποιήθηκε στο cluster του εργαστηρίου Ρευστομηχανικής και Στροβιλομηχανών του τμήματος.

3.1 Δημιουργία Υπολογιστικού Μοντέλου

Όπως έχει αναφερθεί σε προηγούμενο κεφάλαιο, σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η μελέτη των θερμικών ιδιοτήτων στερεών σύνθετων υλικών με χρήση υπολογιστικής ανάλυσης. Πιο αναλυτικά, είναι απαραίτητο να γίνει περιγραφή της διαδικασίας που εκτελείτε, ώστε να δημιουργηθεί το υπολογιστικό μοντέλο πάνω στο οποίο θα γίνει η έρευνα.

Η διαδικασία δημιουργίας και επίλυσης του υπολογιστικού μοντέλου αποτελείται από τρία στάδια. Αρχικά, γίνεται η κατασκευή της γεωμετρίας με το εργαλείο *Autopilot* και εν συνεχεία η κατασκευή του υπολογιστικού πλέγματος από την εφαρμογή *Gmsh*. Έπειτα, εκτελείτε ο αλγόριθμος επίλυσης από το λογισμικό *Openfoam*, στον οποίο εισάγονται οι απαραίτητες αρχικές και συνοριακές συνθήκες του προβλήματος και ακολουθεί το τελευταίο στάδιο, η συλλογή και επεξεργασία των αποτελεσμάτων.



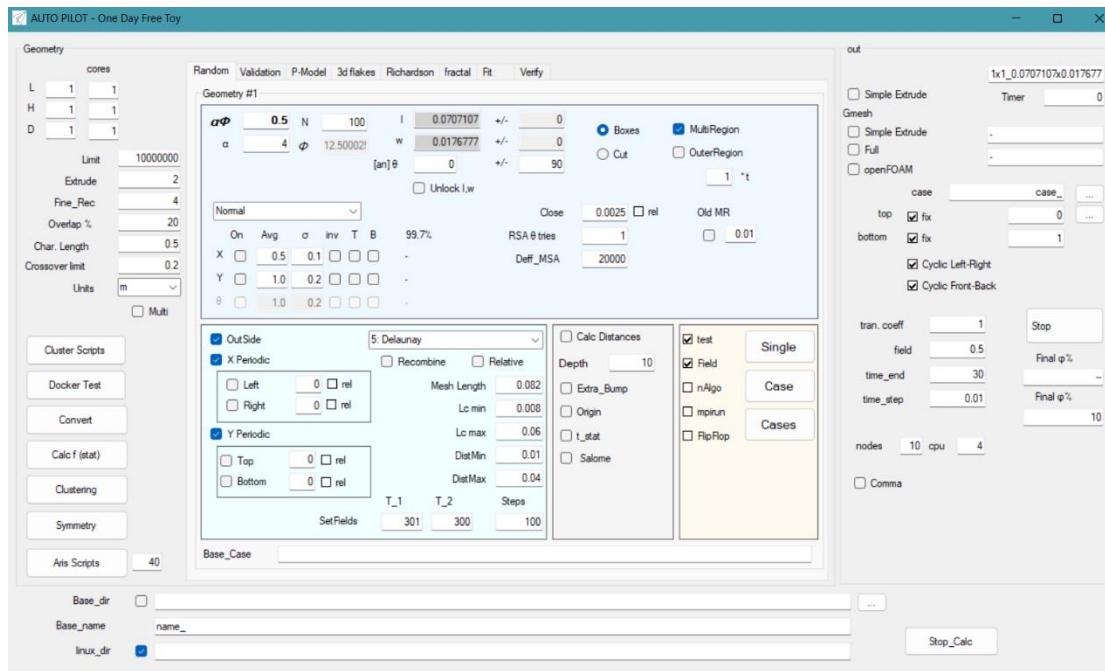
Σχήμα 3.1: Διαδικασία επίλυσης υπολογιστικού μοντέλου, χωρισμένη στα επιμέρους στάδια.

Στο παραπάνω σχήμα 3.1 παρουσιάζεται η διαδικασία επίλυσης και ακολουθούν η περιγραφή των εργαλείων που χρησιμοποιήθηκαν στις επιμέρους ενότητες.

3.2 Κατασκευή Γεωμετρίας - Υπολογιστικού Πλέγματος

3.2.1 Autopilot

Πρωταρχική διαδικασία για την κατασκευή του υπολογιστικού μοντέλου αποτελεί η κατασκευή της γεωμετρίας, για την οποία έγινε χρήση του εργαλείου Autopilot. Το Autopilot, έχει αναπτυχθεί από τον κ. Τσιαντή στο πλαίσιο της μακρόχρονης έρευνάς του στον τομέα των συνθετών υλικών και ειδικότερα στην πλήρωση του μητρικού υλικού με τα ενισχυτικά σωματίδια [3]. Το λογισμικό αυτό έχει πολλές δυνατότητες, καθώς κατασκευάζει γεωμετρίες σύνθετων υλικών ενισχυμένα με flakes διαφόρων μεγεθών, έχει συμβατότητα με το εργαλείο κατασκευής υπολογιστικού πλέγματος Gmsh, δημιουργεί τα αρχεία που είναι απαραίτητα για το στάδιο της επίλυσης και ορίζει τις κατάλληλες μεταβλητές για το υπολογιστικό πλέγμα.



Σχήμα 3.2: Το γραφικό περιβάλλον της εφαρμογής Autopilot.

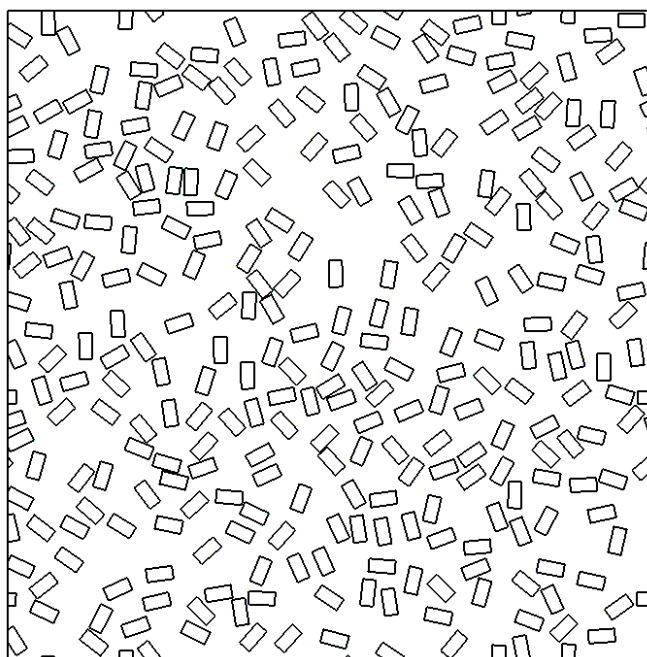
3.2.2 Gmsh – Υπολογιστικό Πλέγμα

Το *Gmsh* είναι ένα λογισμικό ανοιχτού κώδικα και χρησιμοποιείται για την δημιουργία υπολογιστικών πλεγμάτων (meshes), τα οποία έχουν ιδιαίτερη σημασία σε υπολογιστικές προσομοιώσεις, όπως υπολογιστική ρευστοδυναμική (CFD), ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων και προσομοίωση ηλεκτρομαγνητικών πεδίων. Αναπτύχθηκε κυρίως από τους Christophe Geuzaine και Jean – Francois Remacle [10] και είναι ιδιαίτερα δημοφιλές λόγω της ευκολίας χρήσης, της ευελιξίας και της ισχυρής υποστήριξης για την ανάπτυξη παραμετρικών μοντέλων και scripting.

Το *Gmsh* παρέχει γραφικό περιβάλλον (GUI), αλλά και υποστήριξη μέσω αρχείων εντολών (.geo), δίνοντας στο χρήστη την δυνατότητα να δημιουργεί παραμετρικά και αυτοματοποιημένα γεωμετρικά μοντέλα. Οι γεωμετρίες μπορεί να είναι δισδιάστατες ή τρισδιάστατες, απλές ή πολύπλοκες, με δυνατότητα καθορισμού των φυσικών περιοχών για την εφαρμογή συνοριακών συνθηκών και αλληλεπίδραση με άλλες εφαρμογές. Για πιο απαιτητικές εφαρμογές, υποστηρίζεται API σύνδεση με εξωτερικό

λογισμικό, όπως το Autopilot που χρησιμοποιείται στην παρούσα μελέτη, μέσω C++, Python ή άλλων γλωσσών προγραμματισμού.

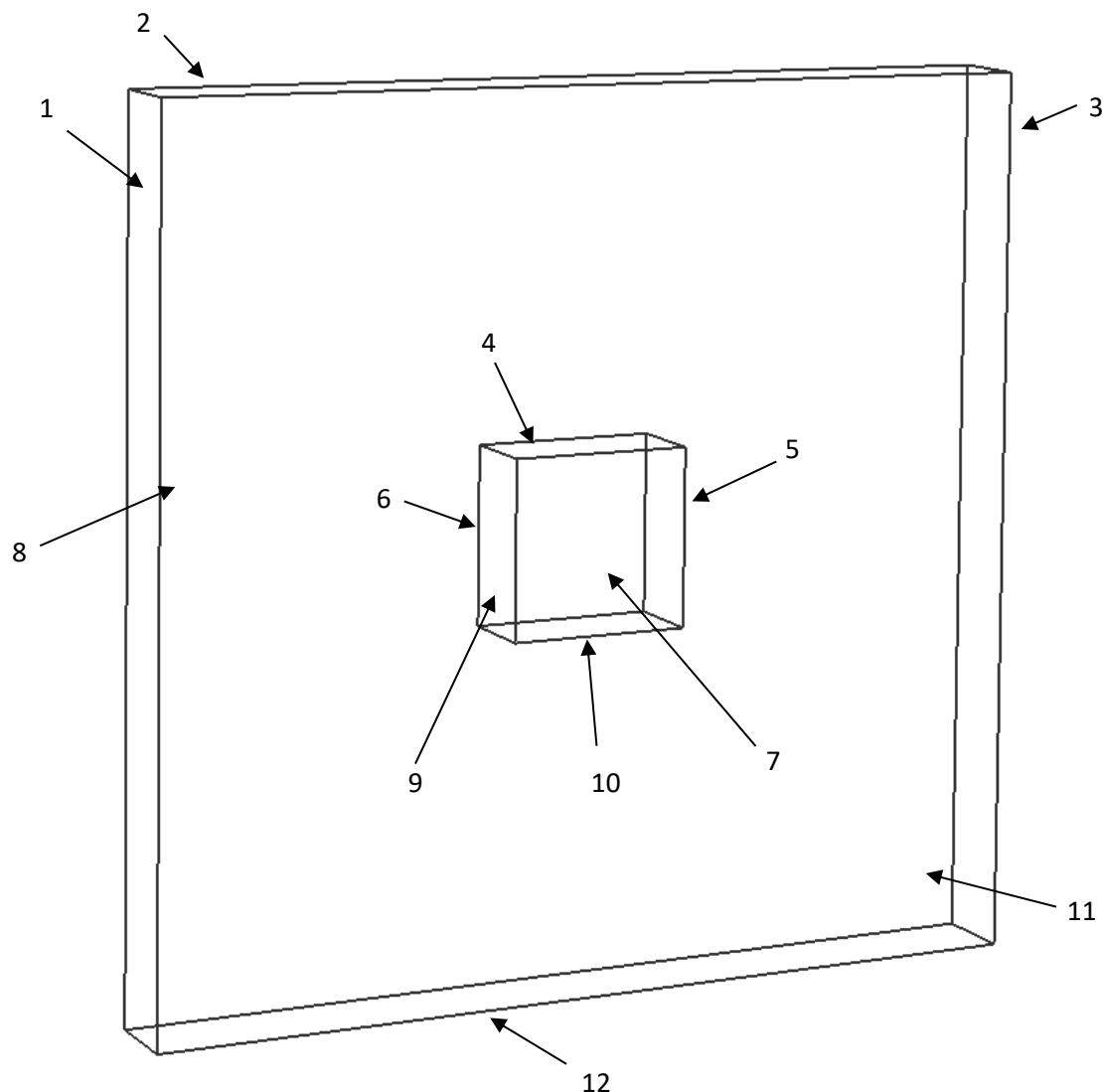
Η γεωμετρία που χρησιμοποιήθηκε είναι ένα ορθογώνιο διαστάσεων 1×1 [m], που χαρακτηρίζει το μητρικό υλικό και τα ενισχυτικά σωματίδια με λόγο διαστάσεων α και αποτελούν τα επιμέρους στοιχεία του σύνθετου υλικού. Το Autopilot φροντίζει για την σωστή τοποθέτηση των φυλλιδίων στο μητρικό υλικό με συγκεκριμένο τρόπο, έτσι ώστε να μην συντελείται επαφή μεταξύ των φυλλιδίων. Επιπλέον, το Autopilot καθορίζει το πλήθος των φυλλιδίων N , τον λόγο πλήρωσης του υλικού, τον προσανατολισμό των φυλλιδίων θ και το εύρος τυχαίου προσανατολισμού ε , τα οποία τροποποιούνται για την μελέτη επίδρασής τους στις ιδιότητες του σύνθετου υλικού.



Σχήμα 3.3: Ενδεικτική γεωμετρία υπολογιστικού μοντέλου με $\alpha=2$, $N=100$, $\theta=0$ και $\varepsilon=90$.

Για τους σκοπούς της υπολογιστικής μελέτης κατά την δημιουργία της γεωμετρίας είναι απαραίτητο το σύνθετο υλικό να διαχωρισθεί σε δύο διακριτές ζώνες, την ζώνη του μητρικού υλικού (matrix zone) και την ζώνη των φυλλιδίων ενίσχυσης (flake zone).

Αυτές οι δύο ζώνες αποτελούνται από υποπεριοχές, ώστε να εφαρμοστούν οι κατάλληλες συνοριακές συνθήκες σε κάθε επιφάνεια.



Σχήμα 3.4 Ονομασία επιφανειών υπολογιστικού μοντέλου: 1) left matrix, 2) top matrix, 3) right matrix, 4) top flake, 5) right flake, 6) left flake, 7) front flake, 8) front matrix, 9) back flake, 10) bottom flake, 11) back matrix, 12) bottom matrix.

Τώρα ως αναφορά για την ποιότητα και την δόμηση του υπολογιστικού πλέγματος, το Gmsh παρέχει πολλές επιλογές κατά την παραγωγή των κελιών και μερικές από αυτές είναι τα γραμμικά, τα τριγωνικά, τα τετραεδρικά και τα πρισματικά. Στην παρούσα μελέτη, έγινε χρήση της μεθόδου De – Launay και το σχήμα των κελιών που

παράγει είναι πρισματικά. Επιπλέον, γίνεται λεπτομερέστερη διακριτοποίηση στην περιοχή διεπαφής matrix – flake, εφόσον αποτελεί περιοχή καίριας σημασίας για την υπολογιστική μελέτη και σε αυτό βοηθά η συνδυασμένη χρήση του Gmsh με το Autopilot.

3.3 Επίλυση υπολογιστικού μοντέλου

Σε αυτήν την ενότητα θα γίνει παρουσίαση της διαδικασίας που ακολουθήθηκε για την επίλυση του υπολογιστικού μοντέλου με το λογισμικό προσομοιώσεων *Openfoam*.

3.3.1 OpenFoam

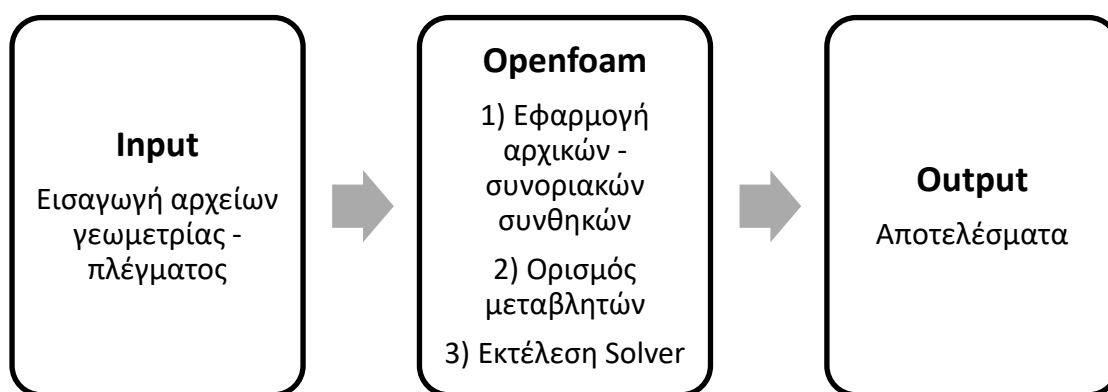
Το *Openfoam* είναι ένα σύγχρονο λογισμικό ανοιχτού κώδικα που χρησιμοποιείται για την προσομοίωση ρευστοδυναμικών φαινομένων και γενικότερα για την επίλυση προβλημάτων μηχανικής μέσω αριθμητικών μεθόδων. Πρόκειται για ένα ισχυρό εργαλείο που επιτρέπει την προσομοίωση πολύπλοκων φυσικών διεργασιών όπως, η ροή ρευστών, η μετάδοση θερμότητας, οι χημικές αντιδράσεις, οι πολυφασικές ροές και πολλές ακόμα περιπτώσεις.

Βασίζεται στην μεθοδολογία επίλυσης των πεπερασμένων όγκων (Finite Volume Method), η οποία χρησιμοποιείται για την διακριτοποίηση και επίλυση διαφορικών εξισώσεων που περιγράφουν ρευστοδυναμικά και θερμοδυναμικά μοντέλα. Η κωδικοποίηση του λογισμικού είναι σε γλώσσα C++ με αντικειμενοστραφή αρχιτεκτονική, γεγονός που καθιστά δυνατή την μέγιστη ευελιξία στην ανάπτυξη και παραμετροποίηση των προσομοιώσεων. Επιπλέον, ο χρήστης μπορεί να χρησιμοποιήσει ενσωματωμένα μοντέλα από τις βιβλιοθήκες ή να δημιουργήσει τις δικές του βιβλιοθήκες μοντέλων, προσαρμόζοντας την επίλυση στις ανάγκες της κάθε εφαρμογής.

Μια από τις ιδιαιτερότητες του *Openfoam* είναι η φιλοσοφία της παραμετρικής ρύθμισης μέσω αρχείων κειμένου (input files) και όχι μέσω γραφικής διεπαφής, η

οποία προσφέρει σημαντικά πλεονεκτήματα σε επίπεδο ευελιξίας, αυτοματοποίησης και επεκτασιμότητας. Η δημιουργία του πλέγματος (meshing), ο καθορισμός των αρχικών και συνοριακών συνθηκών, η επιλογή μοντέλων στροβιλώδους ροής, καύσης ή πολυφασικής ροής, διαμορφώνονται μέσω ειδικών φακέλων και αρχείων.

Εφόσον έχουν προηγηθεί επιτυχώς οι διαδικασίες κατασκευής γεωμετρίας, παραγωγής υπολογιστικού πλέγματος και ορισμού αρχικών και συνοριακών συνθηκών, ακολουθεί η εκτέλεση του κατάλληλου λύτη (solver), ώστε να λύσει τις διαφορικές εξισώσεις που διέπουν το μοντέλο και να συλλεχθούν τα αποτελέσματα. Τώρα, ως αναφορά τον solver που επιλέχθηκε για την παρούσα εργασία, παρουσιάζεται αναλυτικά η λειτουργία και πιστοποίηση του στο επόμενο *Κεφάλαιο 4*, μιας και αποτελεί το κύριο σημείο της μελέτης, αφού αναπτύχθηκε ειδικά για τις ανάγκες της εργασίας. Τέλος, η έκδοση που επιλέχθηκε ήταν η Openfoam V9 [11], λόγω συμβατότητας με το υπολογιστικό σύστημα του εργαστηρίου Ρευστομηχανικής & Στροβιλομηχανών.



Σχήμα 3.5: Ροή των εργασιών του Openfoam για την επίλυση προσομοίωσης.

Για την επιτυχή εκτέλεση μιας προσομοίωσης, αναφέρθηκε ότι το μοντέλο πρέπει να έχει κάποια απαραίτητα αρχεία εισόδου ώστε να τρέξει η διαδικασία επίλυσης. Πιο

συγκεκριμένα, στο μοντέλο (case) περιλαμβάνονται τρεις φάκελοι αρχείων *0*, *constant*, *system* και φυσικά το αρχείο γεωμετρίας – υπολογιστικού πλέγματος και ένα αρχείο εντολών *a.sh* για την αυτοματοποίηση της επίλυσης. Ο φάκελος *0* περιέχει τις αρχικές συνθήκες για την χρονική στιγμή $t=0$ και τις οριακές συνθήκες για τις επιφάνειες της γεωμετρίας του προβλήματος. Στην συνέχεια, υπάρχει ο φάκελος *constant*, όπου περιλαμβάνει τις φυσικές ιδιότητες του μοντέλου και τέλος ακολουθεί ο φάκελος *system*, που περιλαμβάνει τα σχήματα αριθμητικής επίλυσης που εφαρμόζονται από τον solver και άλλα αρχεία που απαιτούνται για τον έλεγχο της προσομοίωσης (παράρτημα Α).

Συνοψίζοντας, το *Openfoam* αποτελεί ένα πανίσχυρο εργαλείο υπολογιστικής ρευστομηχανικής και προσομοίωσης φυσικών φαινομένων, προσφέροντας υψηλό επίπεδο ακρίβειας, επεκτασιμότητας και ελευθερίας διαμόρφωσης. Παρά τις δυσκολίες στην αρχική εκμάθηση, η αξία του ως ερευνητικό εργαλείο είναι αδιαμφισβήτητη, ιδιαίτερα την σημερινή εποχή που η ακρίβεια της προσομοίωσης είναι θεμέλιο της καινοτομίας.

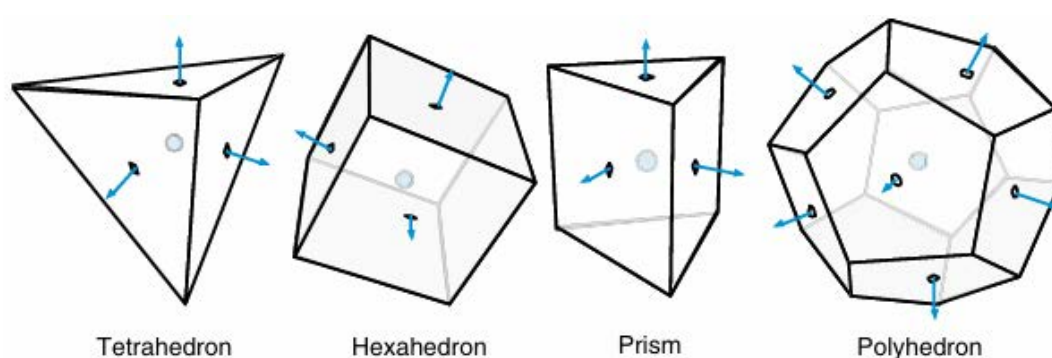
3.3.2 Μέθοδος Πεπερασμένων Όγκων (FVM)

Η μέθοδος πεπερασμένων όγκων (FVM) είναι μια αριθμητική μέθοδος που χρησιμοποιείται ευρέως για την προσομοίωση φυσικών φαινομένων τα οποία περιγράφονται από μερικές διαφορικές εξισώσεις, όπως η ροή ρευστών, η μετάδοση θερμότητας, η μεταφορά μάζας και τα ηλεκτρομαγνητικά πεδία. Η μέθοδος εφαρμόζεται ιδιαίτερα συχνά στον τομέα της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (CFD) [12].

Ο βασικός πυρήνας της μεθόδου είναι η διακριτοποίηση της περιοχής μελέτης σε μικρά, πεπερασμένα στοιχεία όγκου (control volumes). Αντί να προσεγγίζει τις παραγώγους των εξισώσεων όπως στην μέθοδο πεπερασμένων διαφορών, η μέθοδος ενσωματώνει τις διαφορικές εξισώσεις στον χώρο κάθε στοιχείου όγκου. Στην συνέχεια, εφαρμόζει το θεώρημα της απόκλισης Gauss για να μετατρέψει τις χωρικές παραγώγους σε ροές διαμέσου των επιφανειών των στοιχείων. Αυτό έχει ως

αποτέλεσμα ένα διακριτό σύστημα εξισώσεων, στο οποίο η τιμή της κάθε μεταβλητής εξαρτάται από τις ροές στις επιφάνειες που περιβάλλουν τον όγκο.

Η μέθοδος είναι ευέλικτη και μπορεί να εφαρμοστεί σε διαφόρων τύπων πλέγματα, επιτρέποντας την εύκολη προσαρμογή της σε πολύπλοκες γεωμετρίες, κάτι που είναι ιδιαίτερα σημαντικό στον τομέα της έρευνας. Επιπλέον, είναι κατάλληλη τόσο για την επίλυση προβλημάτων μόνιμης κατάστασης όσο και για χρονικά μεταβαλλόμενα προβλήματα.



Σχήμα 3.6: Συνήθεις δομές 3D υπολογιστικών στοιχείων (κελιών), τετράεδρικά, εξαεδρικά, πρισματικά και πολυεδρικά (από αριστερά προς τα δεξιά) [12]. Η δομή που χρησιμοποιήθηκε στην διακριτοποίηση του πλέγματος είναι η πρισματική.

3.3.3 Αρχικές και Συνοριακές Συνθήκες

Το πρόβλημα που λύνεται αφορά σε δισδιάστατη μεταφορά θερμότητας, υπό μόνιμες συνθήκες, χωρίς παραγωγή εσωτερικής ενέργειας. Για την ευκολία της επίλυσης, επιλέχθηκε μια διαφορά θερμοκρασίας ανάμεσα στην πάνω και κάτω επιφάνεια του σύνθετου υλικού ίση με $\Delta T = 1K$.

Συγκεκριμένα είναι στην κάτω επιφάνεια $T_{bottom} = 301 K$ και στην πάνω επιφάνεια $T_{top} = 300 K$, όπως λήφθηκε υπόψιν και η παρουσία των ενισχυτικών σωματιδίων στην περιοχή για τον καθορισμό των κατάλληλων συνθηκών.

Τώρα στις επιφάνειες δεξιά και αριστερά του matrix, συμπεριλαμβανομένου και των flakes επιλέχθηκαν περιοδικές συνθήκες με χρήση της επιλογής cyclicAMI που

προσφέρει το *Openfoam*. Η συνοριακή συνθήκη *cyclicAMI*, σε περιπτώσεις που υπάρχουν διαφορετικά στοιχεία στην γεωμετρία, όπως είναι *matrix – flake*, ικανοποιεί την συνέχεια των δεδομένων του πλέγματος μεταξύ των διαφορετικών περιοχών με την χρήση ειδικών αλγόριθμων παρεμβολής.

Στην συνέχεια, ορίζονται οι οριακές συνθήκες για την εμπρός και πίσω περιοχή της γεωμετρίας ως *empty*, εφόσον το μοντέλο είναι δισδιάστατο. Με αυτόν τον τρόπο μπορεί να το επεξεργαστεί το *Openfoam*, διότι μπορεί να επιλύει μόνο γεωμετρίες τριών διαστάσεων.

Τέλος, ως αναφορά για την διεπιφάνεια των δύο υλικών, έχει γίνει ειδική δουλειά στον *solver* που αναπτύχθηκε, ώστε να ορίζει την θερμοκρασιακή βαθμίδα με μηδενική τιμή με την επιλογή *zeroGradient*.

Συνοψίζοντας, οι αρχικές και συνοριακές συνθήκες διατηρήθηκαν σε μεγάλο βαθμό ίδιες με αυτές που είχε χρησιμοποιήσει ο κ. Γαϊτάνης Ν. [4] στην διπλωματική του εργασία και περιλαμβάνεται αναλυτική τους παρουσίαση στο *παράρτημα Α*.

3.4 Επεξεργασία Αποτελεσμάτων

Όταν ολοκληρώνεται η επίλυση μιας προσομοίωσης, γίνεται παραγωγή κατάλληλων αρχείων εξόδου για τις μεταβλητές που έχουν υπολογιστεί. Στην μελέτη αυτή, τα αποτελέσματα που ενδιαφέρουν είναι η θερμική αγωγιμότητα και το θερμοκρασιακό πεδίο του σύνθετου υλικού και κάποιες ακόμα μεταβλητές που είναι χρήσιμες για την εξαγωγή συμπερασμάτων. Επιπλέον, για την οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων, χρησιμοποιείται το λογισμικό *Paraview*, που αποτελεί εργαλείο του *Openfoam* και παράγει μέσω συγκεκριμένων εντολών εικόνες και γραφήματα για τις μεταβλητές του προβλήματος. Τέλος, μέσω κατάλληλων ορισμάτων στο αρχείο *a.sh*, υπολογίζεται η θερμοροή σε συγκεκριμένες επιφάνειες της γεωμετρίας και τα αποτελέσματα επεξεργάζονται στο λογισμικό κατασκευής γραφημάτων *Origin*.

Κεφάλαιο 4 Ανάπτυξη – Πιστοποίηση Αλγορίθμου Επίλυσης

Στο παρόν κεφάλαιο γίνεται παρουσίαση της λειτουργίας και της διαδικασίας πιστοποίησης του λύτη (solver) *laplacianFoamF* που αναπτύχθηκε στο πλαίσιο της διπλωματικής εργασίας και αποτελεί τον κορμό της διατριβής.

4.1 LaplacianFoamF – Βασικά Στοιχεία

Όπως έχει αναφερθεί και σε προηγούμενες ενότητες, βασικό στόχος της εργασίας αποτελεί η κατασκευή μοντέλου προσομοίωσης για την μελέτη της επίδρασης των διεπιφανειών *matrix – flake* στην θερμική αγωγιμότητα ενός σύνθετου υλικού ενισχυμένου με φυλλίδια. Πιο συγκεκριμένα η ανάπτυξη του λύτη *laplacianFoamF*, βασίστηκε στον ήδη υπάρχοντα λύτη του *Openfoam*, *laplacianFoam*, που επιλύει την εξίσωση διάχυσης σε προβλήματα μόνιμης κατάστασης (*steady-state*), η οποία σχετίζεται με φαινόμενα όπως η μεταφορά θερμότητας, διάχυση χημικών ουσιών ή άλλων βαθμωτών πεδίων (*scalar-fields*) σε στερεά υλικά.

Η εξίσωση διάχυσης (Laplace) που επιλύει ο *laplacianFoam* είναι:

$$\nabla \cdot (D_T \nabla T) = 0 \quad (4.1)$$

όπου:

D_T [m^2/s], η θερμική διαχυτότητα

T [K], η θερμοκρασία

Η κύρια διαφορά του λύτη που αναπτύχθηκε για τους σκοπούς της εργασίας είναι ότι, ο *laplacianFoamF* υπολογίζει δυναμικά το πεδίο θερμικής διαχυτότητας, δηλαδή επιτρέπει η θερμική διαχυτότητα να μεταβάλλεται ανάλογα με την περιοχή, πριν προχωρήσει στην λύση της εξίσωσης (4.1), σε σχέση με τον *laplacianFoam* που έχει το D_T ως σταθερό δεδομένο εισόδου και προχωράει κατευθείαν στην επίλυση της εξίσωσης (4.1).

Συγκεκριμένα, ως σταθερές εισόδου ορίζουμε τις θερμικές διαχυτότητες του matrix ως $D_{Tmatrix}$ και των flakes ως D_{Tflake} και μία απόσταση W_{Dist} η οποία καθορίζει το πλάτος της περιοχής γύρω από την επιφάνεια του flake, μέσα στην οποία η θερμική αγωγιμότητα μεταβάλλεται γραμμικά. Έπειτα, το πεδίο θερμικής διαχυτότητας αποθηκεύετε στην μεταβλητή D_{Tfinal} και ακολουθεί η επίλυση της εξίσωσης διάχυσης.

Η θερμική διαχυτότητα ορίζεται ως:

$$D_T = \frac{k}{\rho c_p} \quad (4.2)$$

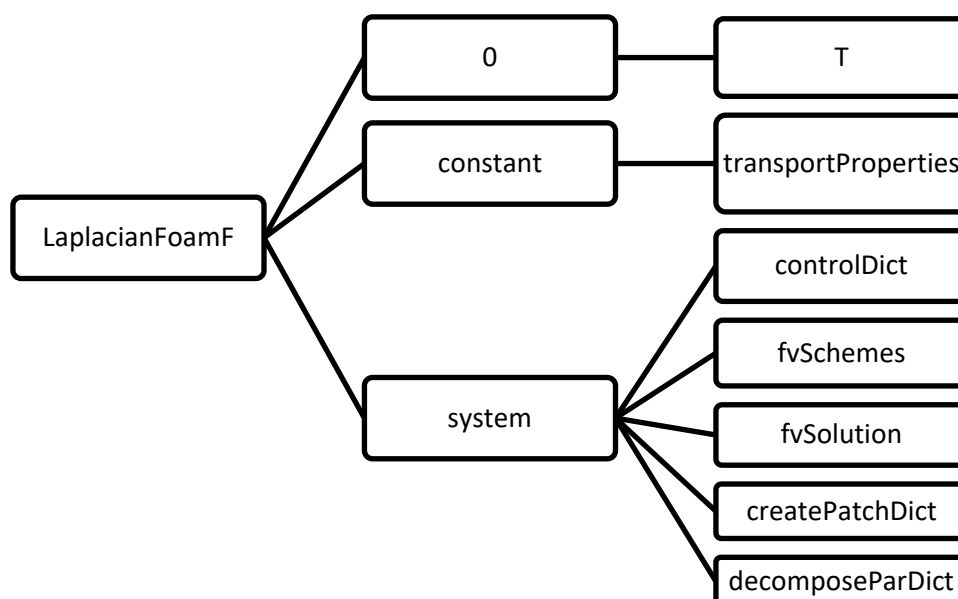
όπου:

k [W/mK], η θερμική αγωγιμότητα

ρ [kg/m³], η πυκνότητα του υλικού

c_p [J/KgK], η θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση

Τέλος, έγινε ειδική τροποποίηση για την δημιουργία και αναγνώριση των δύο διαφορετικών υλικών matrix – flakes από τον solver, αφού ο *laplacianFoam* στην αρχική του μορφή δεν πρόσφερε αυτήν την λειτουργικότητα. Επίσης, τα δύο αυτά υλικά έχουν ίδια πυκνότητα και θερμοχωρητικότητα με αποτέλεσμα η το πεδίο θερμικής διαχυτότητας να μετατρέπεται σε πεδίο θερμικής αγωγιμότητας.



Σχήμα 4.1: Τα αρχεία που περιλαμβάνονται στους φακέλους του μοντέλου, για την επίλυση του από τον *laplacianFoamF* (Παράρτημα Α).

4.2 Παρουσίαση Λειτουργίας του Solver

Ο λύτης *laplacianFoamF* επιτελεί δύο κύριες εργασίες, αρχικά κατασκευάζει το πεδίο θερμικής διαχυτότητας/αγωγιμότητας και στην συνέχεια επιλύει την εξίσωση Laplace για την δημιουργία του θερμοκρασιακού πεδίου. Κατά την διαδικασία δημιουργίας του πεδίου αγωγιμότητας οι περιοχές του matrix και των flakes διαχωρίζονται σε δύο διακριτές ζώνες *MatrixZone* και *FlakeZone* αντίστοιχα, καθώς έχουν διαφορετικές τιμές θερμικής αγωγιμότητας. Τώρα για την μοντελοποίηση της μεταβολής της θερμικής διαχυτότητας στην διεπιφάνεια matrix – flake, γίνεται χρήση μιας γραμμικής καμπύλης (4.3), ώστε να μεταβάλλεται σταδιακά η θερμική αγωγιμότητα από το τοίχωμα του flake προς το matrix, σε καθορισμένη απόσταση που έχει ορισθεί κατά την εισαγωγή των σταθερών με την μεταβλητή W_{Dist} .

Η γραμμική μεταβολή δίνεται από την σχέση:

$$D_{Tcalc} = D_{Tflake} - a * Calc_{Dist} \quad (4.3)$$

όπου

$$a = \frac{D_{Tflake} - D_{Tmatrix}}{W_{Dist}} \quad (4.4)$$

και είναι ως εξής:

D_{Tcalc} : η θερμική αγωγιμότητα που υπολογίζεται από τον solver

D_{Tflake} : η θερμική αγωγιμότητα των φυλλιδίων ενίσχυσης

$D_{Tmatrix}$: η θερμική αγωγιμότητα του μητρικού υλικού

W_{Dist} : η απόσταση γύρω από το flake που θα γίνει η γραμμική μεταβολή του D_T

a : η κλίση της ευθείας που υπολογίζεται από την σχέση (4.4)

$Calc_{Dist}$: η μεταβλητή που χρησιμοποιεί την υπορουτίνα $wallDist.H$ για τον υπολογισμό αποστάσεων από το τοίχωμα των flakes

Έπειτα, ακολουθεί ο έλεγχος για την τιμή που εκχωρείται στην μεταβλητή D_{Tfinal} , αφού πρέπει σε απόσταση μεγαλύτερη από W_{Dist} η D_{Tfinal} να είναι ίση με την τιμή $D_{Tmatrix}$. Για την επίτευξη αυτού του ελέγχου, χρησιμοποιείται η συνάρτηση $Foam::max$ του Openfoam, η οποία συγκρίνει δύο τιμές και εκχωρεί την μέγιστη στην μεταβλητή D_{Tfinal} .

$$D_{Tfinal} = Max(D_{Tcalc}, D_{Tmatrix}) \quad (4.5)$$

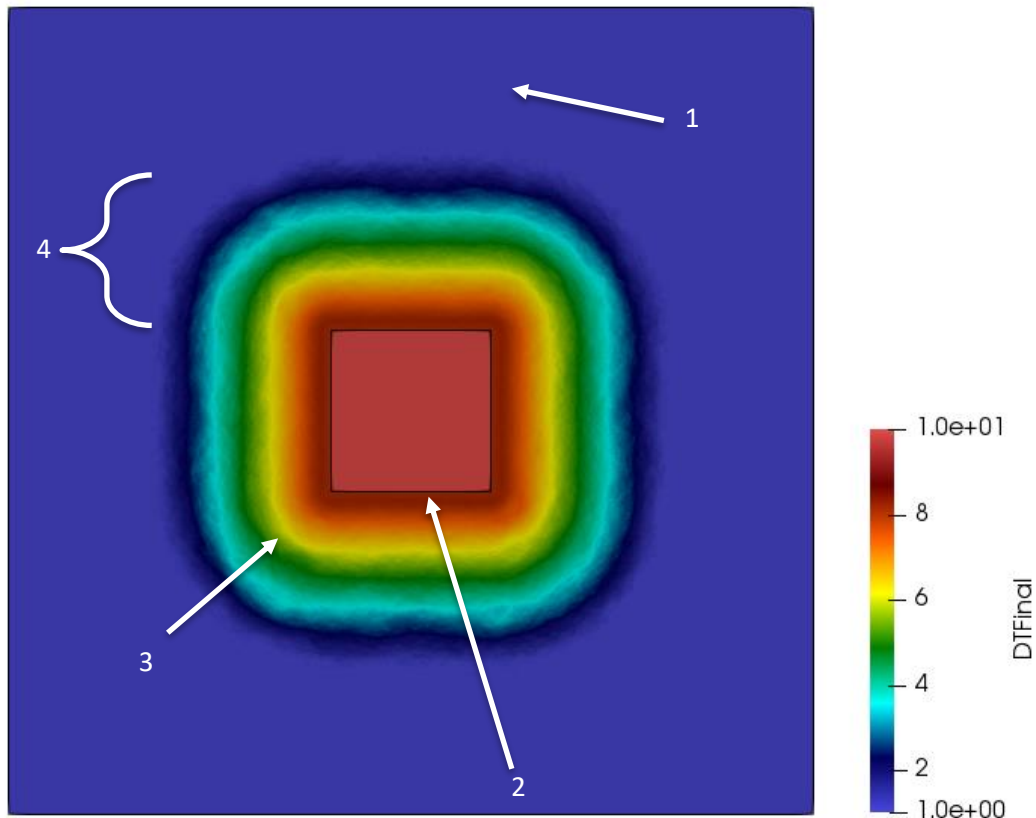
Τέλος, πριν οριστικοποιηθεί η τιμή της D_{Tfinal} για ένα κελί, υπάρχει έλεγχος της ζώνης που ανήκει το συγκεκριμένο κελί και βοηθάει ο διαχωρισμός που έχει γίνει αρχικά σε $matrixZone$ και $flakeZone$ για ολόκληρο το μοντέλο προσομοίωσης. Συγκεκριμένα, η τιμή D_{Tfinal} εισάγεται σε έναν βρόγχο συνθήκης (if – loop), που ελέγχεται σε ποια ζώνη ανήκει το κελί, αν ανήκει στην $flakeZone$ τότε η τιμή της D_{Tfinal} γίνεται ίση με την τιμή D_{Tflake} , ενώ αν το κελί ανήκει στην $matrixZone$ η τιμή D_{Tfinal} δεν αλλάζει, καθώς έχει την σωστή τιμή από την προηγούμενη διαδικασία.

$$D_{Tfinal} = \begin{cases} D_{Tflake}, & cellzone = flakeZone \\ D_{Tfinal}, & cellzone = matrixZone \end{cases} \quad (4.6)$$

όπου,

D_{Tfinal} , η τιμή που εισάγεται στην εξίσωση Laplace για επίλυση του θερμοκρασιακού πεδίου.

Για την καλύτερη κατανόηση της παραπάνω διαδικασίας, παρουσιάζεται μία εικόνα του πεδίου θερμικής αγωγιμότητας που υπολογιστική από τον solver, πριν συνεχίσει στον υπολογισμό του θερμοκρασιακού πεδίου.



Σχήμα 4.2: Πεδίο θερμικής διαχυτότητας υπολογισμένο από τον *LaplacianFoamF* με $N=1$, $\alpha=1$, $\alpha\phi=0,04$, $\theta=0$, $\varepsilon=0$, $D_{\text{flake}}=10$, $D_{\text{matrix}}=1$ και $W_{\text{Dist}}=0,2$ m. Στο σημείο με το μαύρο χρώμα διακρίνεται το τοίχωμα του flake.

Στο σχήμα 4.1 διακρίνονται τέσσερις περιοχές οι οποίες και αναλύονται παρακάτω:

Περιοχή 1: Σε αυτήν την περιοχή διακρίνεται το μητρικό υλικό (matrix)

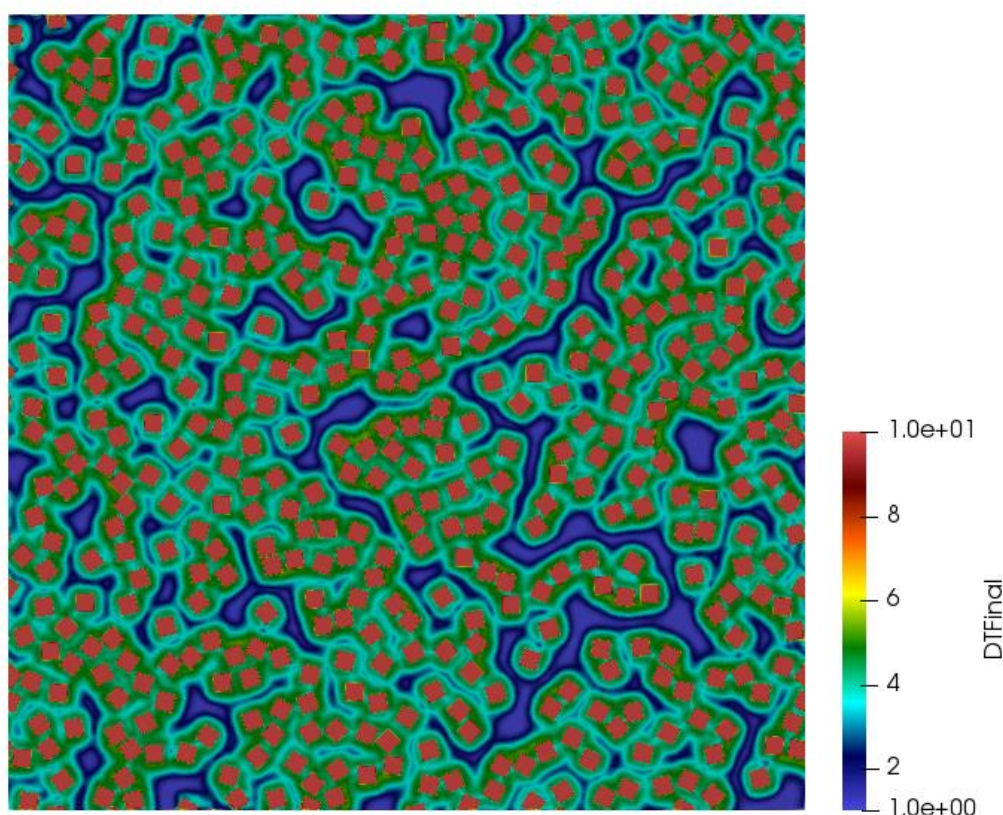
Περιοχή 2: Σε αυτήν την περιοχή υπάρχει το flake με διαφορετική θερμική αγωγιμότητα από αυτήν του matrix, όπως διακρίνεται από τον χρωματισμό του σχήματος. Το τοίχωμα του flake είναι η γραμμή με μαύρο χρώμα.

Περιοχή 3: Στην περιοχή αυτή διακρίνεται η γραμμική μεταβολή της θερμικής αγωγιμότητας γύρω από το τοίχωμα του flake που έχει υπολογιστεί βάσει της εξίσωσης (4.3) και αποτελεί την περιοχή της διεπαφής matrix – flake.

Περιοχή 4: Η απόσταση αυτή ορίζεται από την μεταβλητή W_{Dist} και καθορίζει την απόσταση που συντελείται η γραμμική μεταβολή και σε συνδυασμό με τις θερμικές αγωγιμότητες των δύο υλικών και την σχέση (4.4), ορίζεται η κλίση της ευθείας.

Σημαντικό ενδιαφέρον έχει η *περιοχή 3*, μιας και με την χρήση της υπορουτίνας *wallDist.H* του *Openfoam* που χρησιμοποιείται συνήθως για εφαρμογές ρευστοδυναμικής, είναι δυνατός ο υπολογισμός της απόστασης κάθε κελιού από το πλησιέστερο τοίχωμα. Συγκεκριμένα για να λειτουργήσει αυτή η επιλογή είναι απαραίτητο κατά τον ορισμό των οριακών συνθηκών, να γίνει ένας επιπλέον χαρακτηρισμός για τα τοιχώματα των flakes, ότι θα είναι τύπου *mappedWall*.

Η διαδικασία του υπολογισμού του πεδίου θερμικής αγωγιμότητας, αποτελεί έναν επαναληπτικό βρόγχο, με σκοπό την πλήρωση του μητρώου τιμών θερμικής αγωγιμότητας για κάθε ένα κελί του μοντέλου προσομοίωσης.

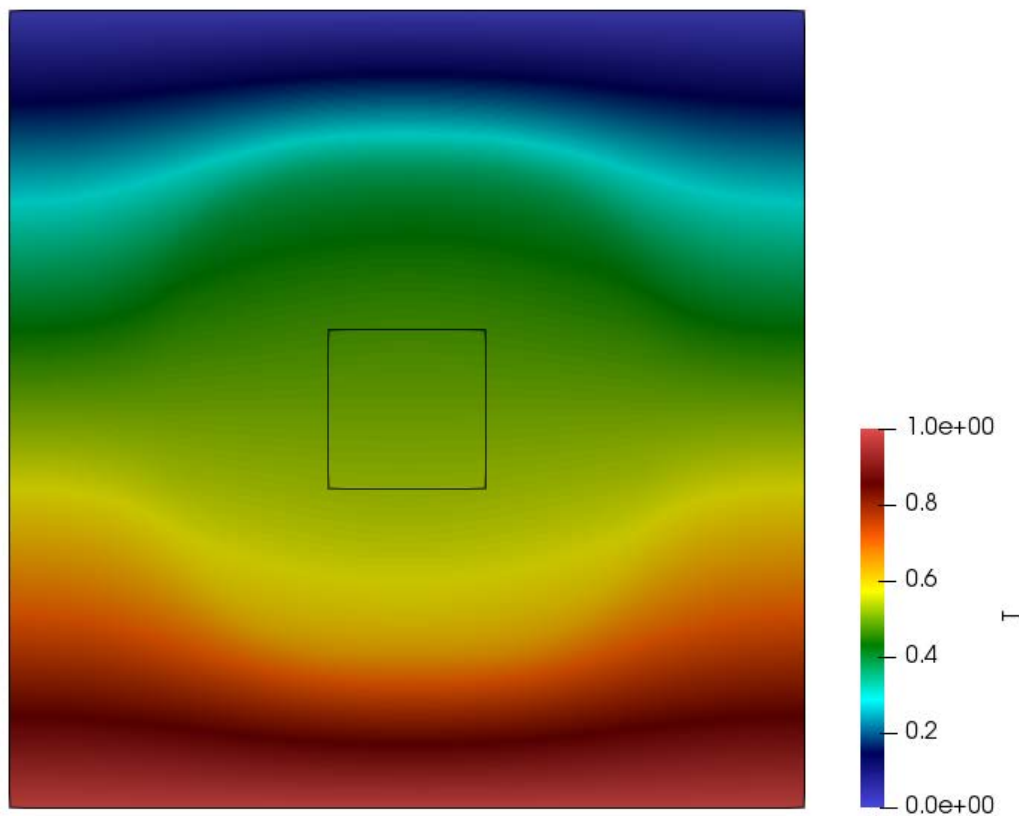


Σχήμα 4.3: Πεδίο θερμικής αγωγιμότητας σε γεωμετρία με $N=500$, $\alpha=1$, $\alpha\phi=0,25$, $\vartheta=0$, $\varepsilon=90$, $D_{Tflake}=10$, $D_{Tmatrix}=1$ και $W_{Dist}=0,02\text{ m}$.

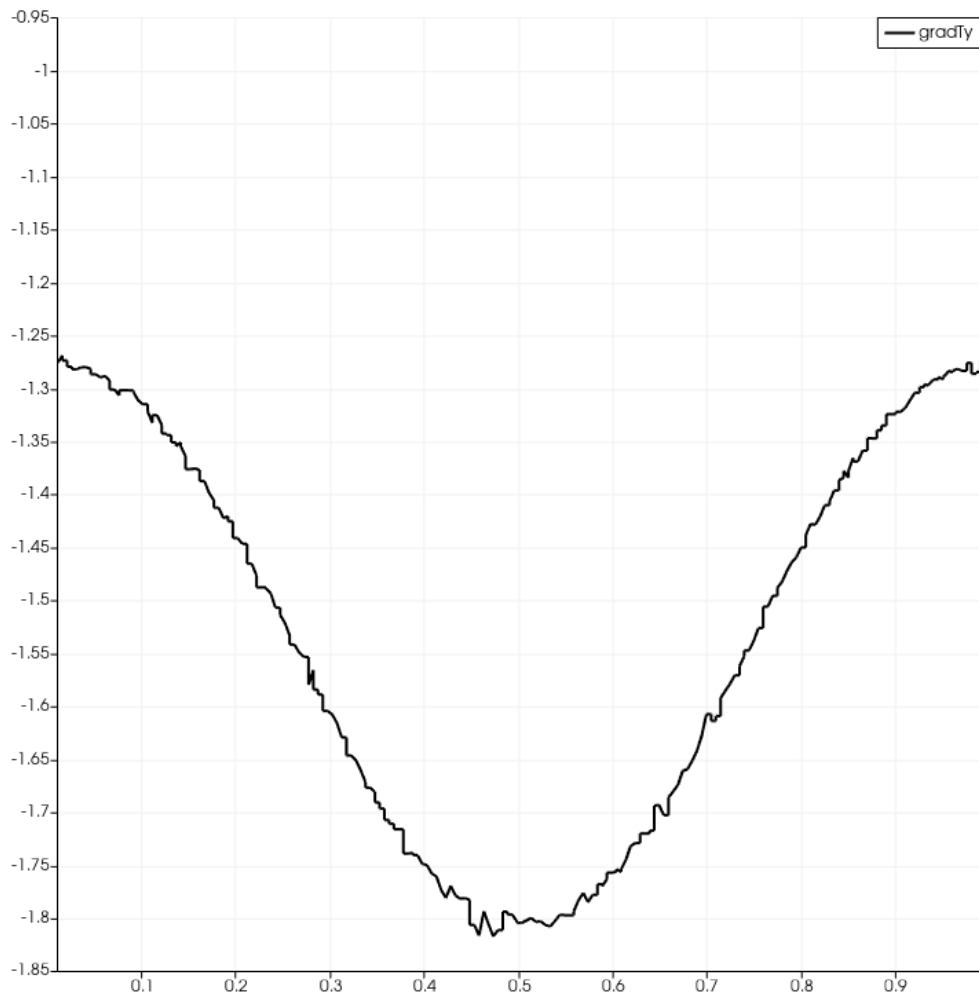
Εφόσον έχει δημιουργηθεί το πεδίο θερμικής αγωγιμότητας, το επόμενο στάδιο είναι η επίλυση της εξίσωσης Laplace. Συγκεκριμένα, η εξίσωση που λύνει είναι:

$$\nabla \cdot (D_{Tfinal} \nabla T) = 0 \quad (4.7)$$

Έπειτα, ακολουθεί η έξοδος όλων των μεταβλητών του προβλήματος σε επιμέρους αρχεία για περαιτέρω επεξεργασία.



Σχήμα 4.4: Θερμοκρασιακό πεδίο της περίπτωσης με $N=1$, $D_{Tflake}=10$, $D_{Tmatix}=1$ και $W_{Dist}=0,2$ m.



Σχήμα 4.5: Θερμοκρασιακή βαθμίδα της πάνω επιφάνειας της γεωμετρίας του σχήματος 4.3, όπου οι τιμές της είναι αρνητικές, αφού η θερμοροή γίνεται από την κάτω προς την επάνω επιφάνεια της γεωμετρίας.

Τελευταία διαδικασία για να ληφθεί το αποτέλεσμα της θερμικής αγωγιμότητας του σύνθετου πλέον υλικού k_{eff} , είναι ο υπολογισμός της θερμικής ροής στην πάνω ή κάτω επιφάνεια του υλικού και υπολογίζεται από την σχέση:

$$Q = -K \int_0^L \frac{\partial T}{\partial n} dx \quad (4.8)$$

Όπου, K η θερμική αγωγιμότητα του υλικού, L το μήκος του υλικού και n το μοναδιαίο διάνυσμα της γεωμετρίας, που είναι $n = y$, με y τον κατακόρυφο άξονα στο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων.

Βέβαια στην πάνω και κάτω επιφάνεια υπάρχουν flakes τα οποία επηρεάζουν την θερμική ροή, γι' αυτό ο υπολογισμός της σχέσης (4.8) γίνεται δύο φορές, μία φορά υπολογίζεται η θερμική ροή για την επιφάνεια του μητρικού υλικού και άλλη μία για την επιφάνεια των flakes. Στην συνέχεια, προστίθενται τα αποτελέσματα της (4.8) και σε συνδυασμό με την σχέση μεταφοράς θερμότητας με αγωγή (νόμος Fourier) εξάγεται η γενική σχέση (4.9) για την θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού:

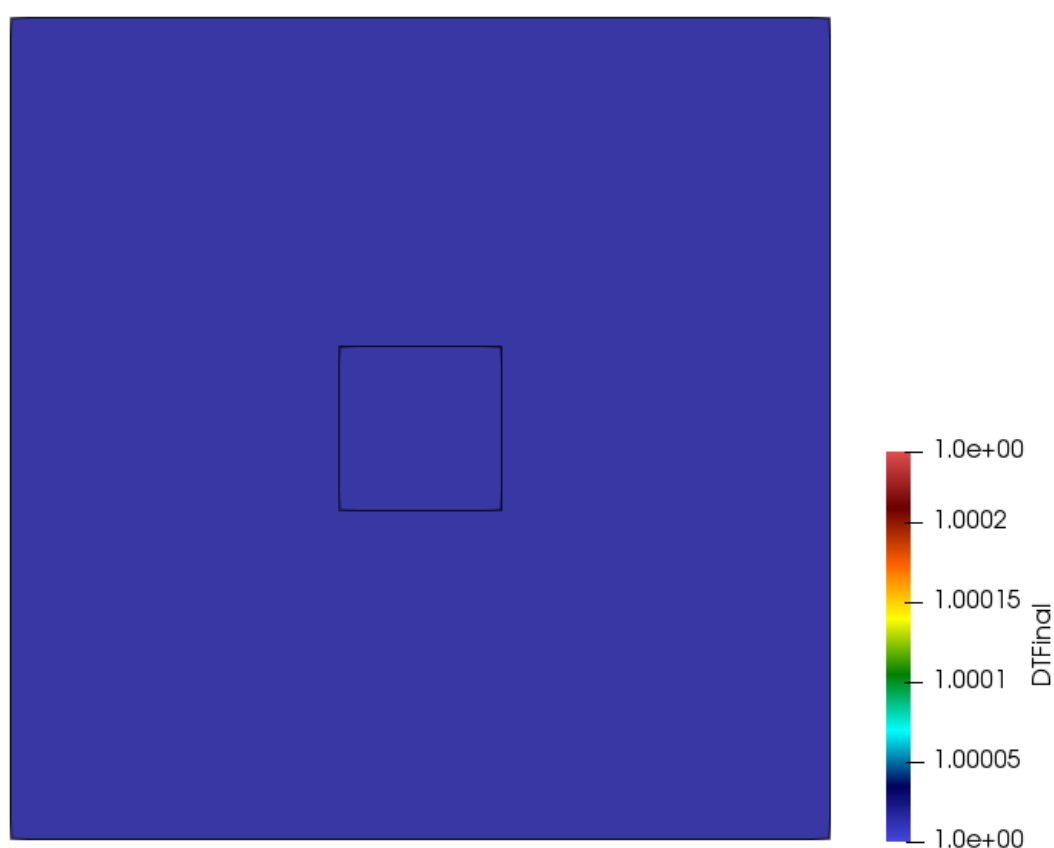
$$K_{eff} = \frac{H}{\Delta T \cdot L} (Q_{matrix} + Q_{flakes}) \quad (4.9)$$

Όπου K_{eff} η θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού, H και L οι διαστάσεις της γεωμετρίας, Q_{matrix} η θερμότητα για το μητρικό υλικό στην πάνω (ή κάτω) επιφάνεια, Q_{flakes} η θερμότητα για τα flakes στην πάνω (ή κάτω) επιφάνεια και ΔT η διαφορά θερμοκρασίας.

Σε αυτό το σημείο, ολοκληρώνεται η λειτουργία του λύτη *laplacianFoamF* και λαμβάνονται τα αποτελέσματα για επεξεργασία και ανάλυση. Τα παραπάνω σχήματα έχουν κατασκευαστεί από το λογισμικό οπτικοποίησης αποτελεσμάτων *Paraview*, που προσφέρει το περιβάλλον του *Openfoam*.

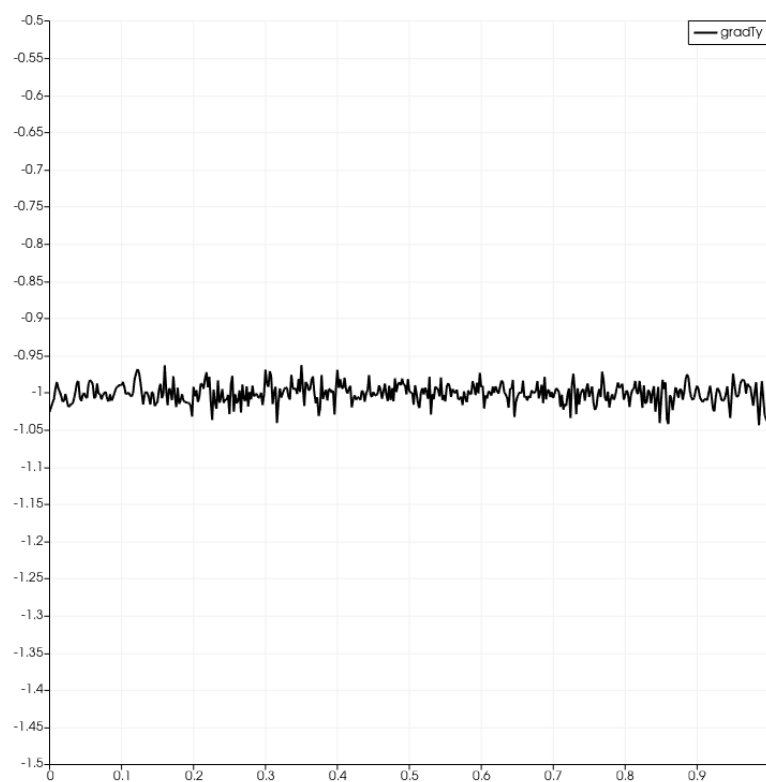
4.3 Πιστοποίηση του Solver

Στο σημείο αυτό, είναι αναγκαίο να πιστοποιηθεί ο λύτης για την ακεραιότητα των αποτελεσμάτων του. Αρχικά, η πρώτη δοκιμή που εκτελείτε είναι ένα μοντέλο που οι θερμικές αγωγιμότητες του μητρικού υλικού K_{matrix} και των φυλλιδίων ενίσχυσης K_{flake} είναι ίσες με την μονάδα. Το αναμενόμενο αποτέλεσμα από την επίλυση της προσομοίωσης, είναι η θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού K_{eff} να είναι κι αυτή ίση με την μονάδα.

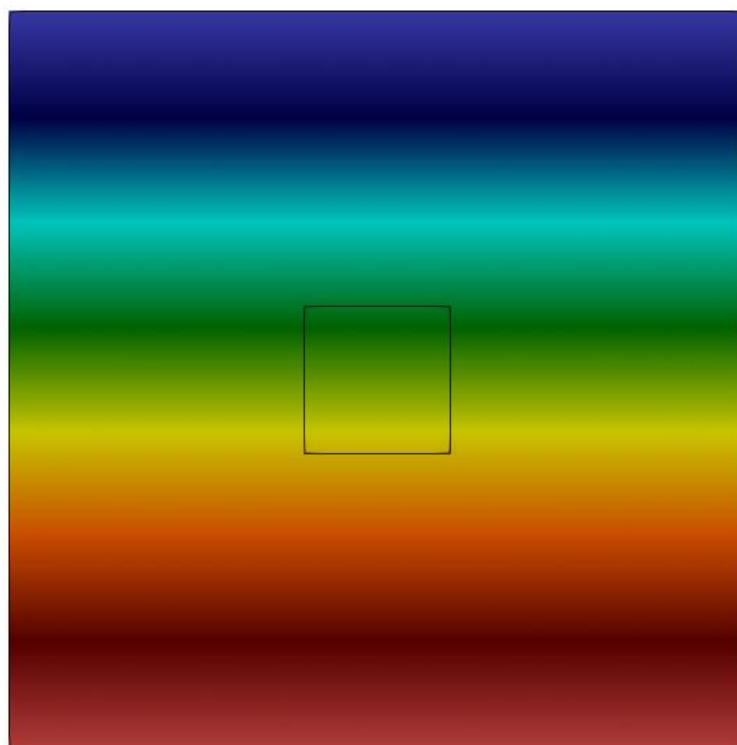


Σχήμα 4.6: Πεδίο θερμικής αγωγιμότητας με $D_{flake} = D_{matrix} = 1$.

Στο παραπάνω σχήμα 4.6, διακρίνεται το πεδίο θερμικής αγωγιμότητας που υπολογιστικό και το οπτικό αποτέλεσμα πιστοποιεί ότι δουλεύει σωστά η διαδικασία εισαγωγής των επιμέρους θερμικών αγωγιμοτήτων (matrix – flake), από το αρχείο *constant/transportProperties* του case. Αξίζει να σημειωθεί, πως στην συγκεκριμένη περίπτωση δεν επιδρά κάπου η τιμή του W_{dist} , αφού οι θερμικές αγωγιμότητες των δύο υλικών είναι ίσες και ο συντελεστής α μηδενίζεται.



Σχήμα 4.7: Θερμοκρασιακή βαθμίδα άνω επιφάνειας.



Σχήμα 4.8: Θερμοκρασιακό Πεδίο.

Στα παραπάνω σχήματα, απεικονίζονται η θερμοκρασιακή βαθμίδα στην πάνω επιφάνεια της γεωμετρίας και το θερμοκρασιακό πεδίο, παρατηρείται πως οι τιμές της θερμοκρασιακής βαθμίδας βρίσκονται στην περιοχή του -1. Αυτό το επιβεβαιώνει και το αποτέλεσμα που εξάγεται από το ολοκλήρωμα υπολογισμού της K_{eff} , το οποίο δίνει τιμή $K_{eff} = 1,00045782$, με μία απόκλιση της τάξης του 0.5%. Επομένως, πιστοποιήθηκε ότι δουλεύει σωστά ο solver κατά την εισαγωγή του αρχείου δεδομένων και το υπολογισμό του ολοκληρώματος για την K_{eff} με ένα σφάλμα που είναι μέσα στο όριο του $\pm 1\%$.

Τέλος έχει σειρά ο έλεγχος λειτουργίας του υπολογισμού του πεδίου θερμικής αγωγιμότητας. Πιο αναλυτικά, σε αυτήν την δοκιμή πιστοποιείται η αποτελεσματικότητα της γραμμικής μεταβολής και οι τιμές που παίρνει η θερμική αγωγιμότητα. Για τις ανάγκες της δοκιμής χρησιμοποιήθηκαν δύο μοντέλα με ίδια γεωμετρία, αλλά με διαφορετικές τιμές για το W_{dist} 0,1 m και 0,2 m, τα οποία συγκρίνονται με την θεωρητική γραμμική μεταβολή της αγωγιμότητας που αντιστοιχεί σε κάθε τιμή. Οι προσομοιώσεις έγιναν με $D_{Tflake} = 10$ και $D_{Tmatrix} = 1$, πλάτος flake 0,2 m και διαστάσεις μοντέλου 1 x 1 m.

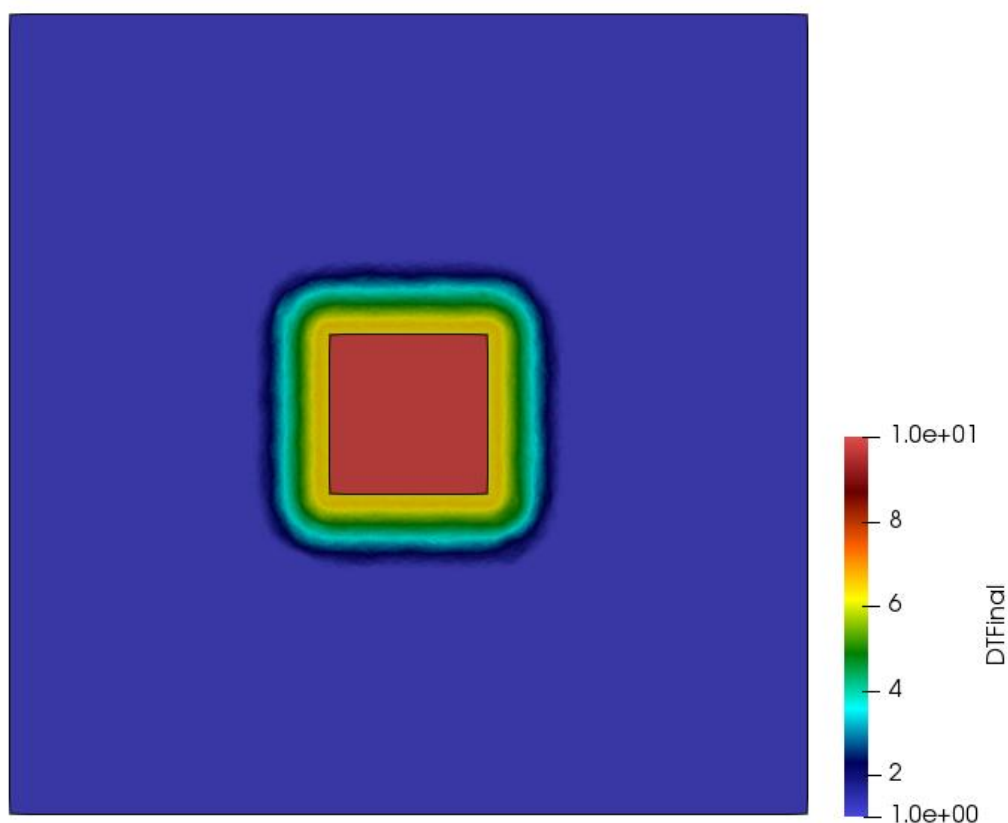
Θεωρητική Γραμμική Μεταβολή:

Για $W_{dist} = 0,1 \text{ m}$:

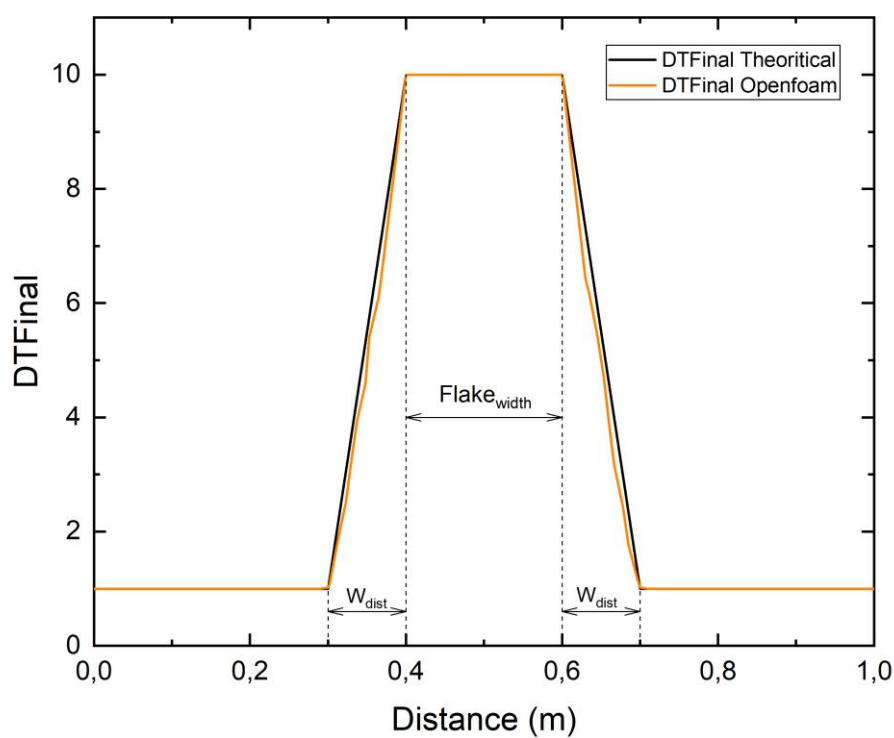
$$D_{Tfinal}(x) = \begin{cases} 1, & 0 \leq x < 0,3 \\ 10 - 90 \cdot Calc_{dist}, & 0,3 \leq x < 0,4 \\ 10, & 0,4 \leq x < 0,6 \\ 10 - 90 \cdot Calc_{dist}, & 0,6 \leq x < 0,7 \\ 1, & 0,7 \leq x < 1,0 \end{cases} \quad (4.10)$$

Για $W_{dist} = 0,2 \text{ m}$:

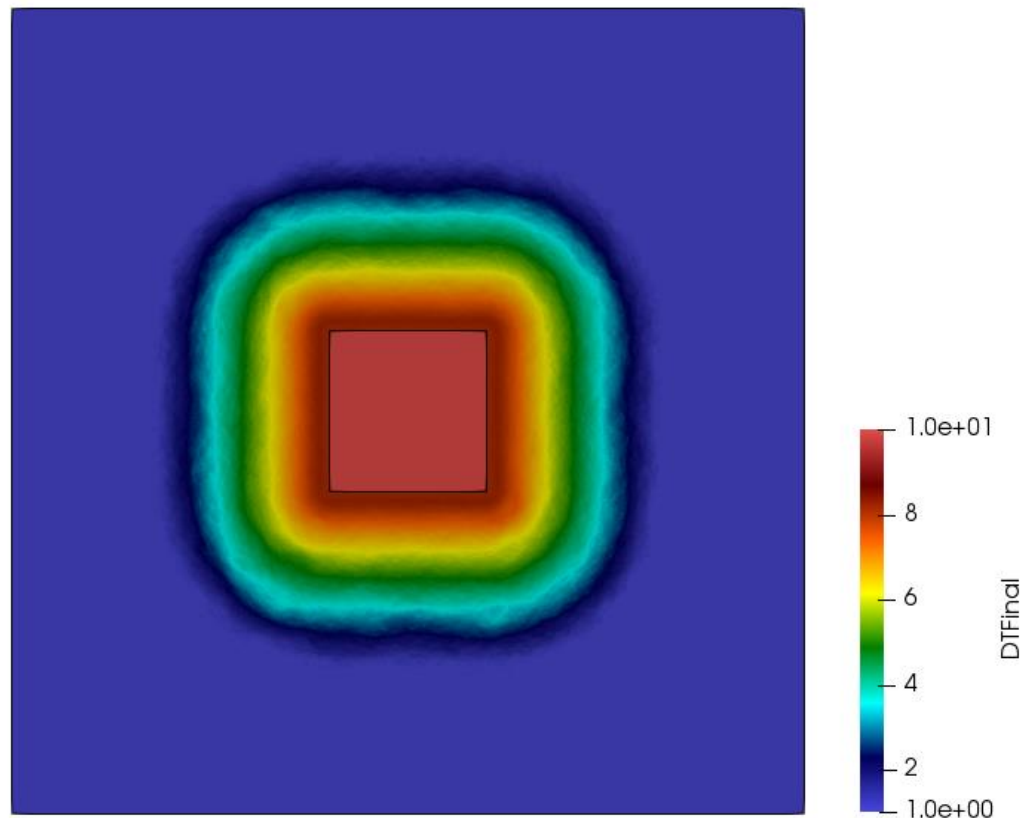
$$D_{Tfinal}(x) = \begin{cases} 1, & 0 \leq x < 0,2 \\ 10 - 45 \cdot Calc_{dist}, & 0,2 \leq x < 0,4 \\ 10, & 0,4 \leq x < 0,6 \\ 10 - 45 \cdot Calc_{dist}, & 0,6 \leq x < 0,8 \\ 1, & 0,8 \leq x < 1,0 \end{cases} \quad (4.11)$$



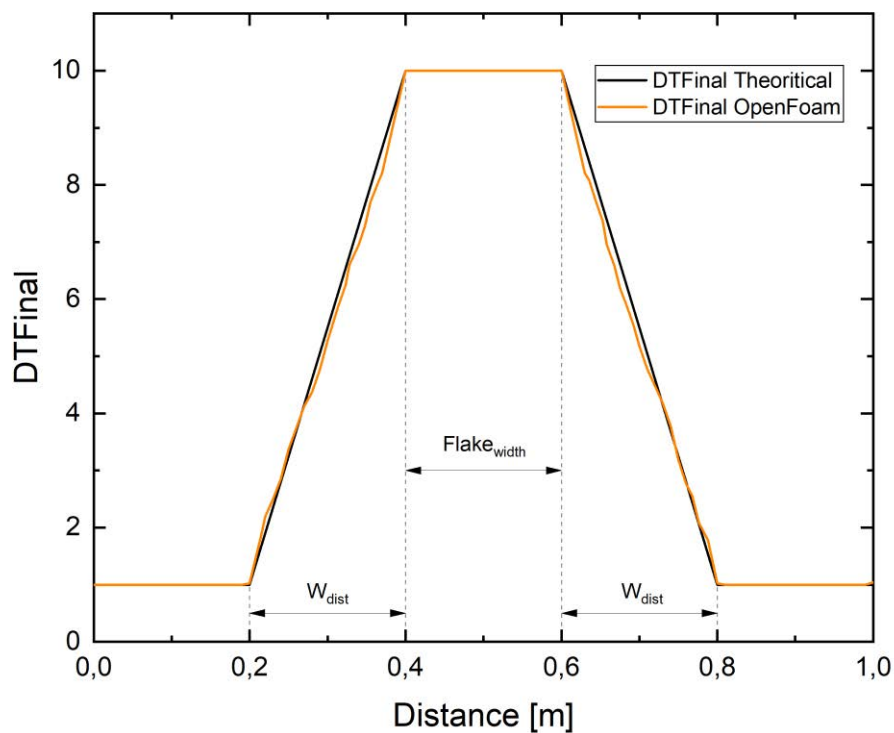
Σχήμα 4.9: Πεδίο θερμικής αγωγιμότητας υπολογισμένο από τον *LaplacianFoamF* με $N=1$, $\alpha=1$, $\vartheta=0$, $\varepsilon=0$, $D_{Tflake}=10$, $D_{Tmatix}=1$ και $W_{Dist}=0,1\text{ m}$.



Σχήμα 4.10: Σύγκριση της θερμικής αγωγιμότητας που υπολογίζει ο *solver* σε σχέση με το θεωρητικό μοντέλο της σχέσης (19) (τομή παράλληλη στον άξονα x και $y=0,5\text{ m}$ του σχήματος 4.9).



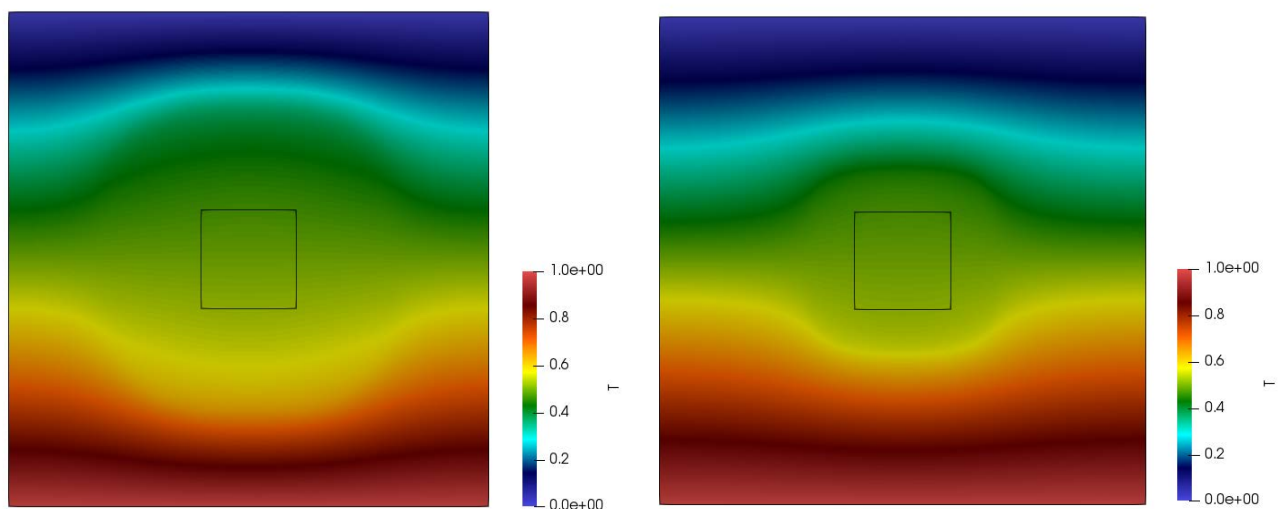
Σχήμα 4.11: Πεδίο θερμικής αγωγιμότητας υπολογισμένο από τον *laplacianFoamF* με $N=1$, $\alpha=1$, $\vartheta=0$, $\varepsilon=0$, $D_{\text{flake}} = 10$, $D_{\text{matrix}} = 1$ και $W_{\text{Dist}} = 0,2 \text{ m}$.



Σχήμα 4.12: Σύγκριση της θερμικής αγωγιμότητας που υπολογίζει ο *solver* σε σχέση με το θεωρητικό μοντέλο της σχέσης (20) (τομή παράλληλη στον άξονα x και $y = 0,5 \text{ m}$ του σχήματος 4.11).

Από τα αποτελέσματα των δύο δοκιμών εξάγονται τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στα παραπάνω σχήματα. Αρχικά, παρατηρείται ότι στις περιοχές που δεν υπάρχει γραμμική μεταβολή οι τιμές των προσομοιώσεων συμπίπτουν σχεδόν απόλυτα με τις τιμές των θεωρητικών μοντέλων. Τώρα, στην περιοχή της γραμμικής μεταβολής και στις δύο περιπτώσεις διακρίνεται ότι οι μεταβολές ακολουθούν την κλίση της ευθείας του θεωρητικού μοντέλου και υπάρχει ένα μικρό σφάλμα της τάξης του $\pm 1\%$ που οφείλεται στην υπολογιστική διαδικασία.

Συνοψίζοντας, με τους ελέγχους που πραγματοποιήθηκαν πιστοποιείται ότι ο λύτης `laplacianFoamF`, λειτουργεί επιτυχώς και εξάγει ασφαλή αποτελέσματα που ανταποκρίνονται με το θεωρητικό μοντέλο.



Σχήμα 4.13: Θερμοκρασιακά πεδία για τις γεωμετρίες των παραπάνω περιπτώσεων $W_{Dist} = 0.2 \text{ m}$ (αριστερά) και $W_{Dist} = 0.1 \text{ m}$ (δεξιά).

4.4 Εγκυρότητα Υπολογιστικού Πλέγματος

Η εγκυρότητα του υπολογιστικού πλέγματος (mesh validity) στο Openfoam αποτελεί κρίσιμο παράγοντα για την ακρίβεια και την αξιοπιστία των υπολογιστικών προσομοιώσεων. Το πλέγμα αποτελεί την διακριτοποίηση του υπολογιστικού μοντέλου σε μικρότερα στοιχεία (κελιά), που επιλύονται οι διαφορικές εξισώσεις που περιγράφουν το πρόβλημα. Η ποιότητα και η εγκυρότητα του πλέγματος επηρεάζουν άμεσα τη σταθερότητα των υπολογισμών, την ταχύτητα σύγκλισης και την ακρίβεια των αποτελεσμάτων.

Η γεωμετρική ακρίβεια του πλέγματος σχετίζεται με την ικανότητα του να αναπαράγει τα φυσικά όρια και τις ασυνέχειες της πραγματικής γεωμετρίας. Πλέγματα χαμηλής ανάλυσης ενδέχεται να παραλείψουν κρίσιμες γεωμετρικές λεπτομέρειες, ενώ πλέγματα υπερυψηλής ανάλυσης αυξάνουν σημαντικά το υπολογιστικό κόστος χωρίς απαραίτητα να προσφέρουν αποτελέσματα μεγαλύτερης ακρίβειας. Συνεπώς, απαιτείται ένας συμβιβασμός μεταξύ ακρίβειας και υπολογιστικής αποδοτικότητας, ο οποίος επιτυγχάνεται μέσω διαδικασίας δοκιμής – σφάλματος σε μια σειρά από πλέγματα.

Μια από της πιο αξιόπιστες μεθόδους αξιολόγησης της εξάρτησης του πλέγματος (mesh dependency) είναι η *παρεμβολή Richardson* [13] [14] (Richardson Extrapolation). Η παρεμβολή Richardson είναι μια αριθμητική τεχνική που χρησιμοποιείται για την εκτίμηση της ακριβούς λύσης ενός προβλήματος, βασιζόμενη σε υπολογισμούς με διαφορετικά μεγέθη πλέγματος. Η μέθοδος αυτή επιτρέπει την πρόβλεψη της τιμής που θα πρόκυπτε εάν το μέγεθος του πλέγματος τείνει στο μηδέν, δηλαδή στην ιδανική περίπτωση ενός άπειρα λεπτού πλέγματος.

Η βασική ιδέα της παρεμβολής Richardson είναι ότι, εάν γνωρίζουμε τις αριθμητικές λύσεις ενός προβλήματος για δύο ή περισσότερα διαφορετικά μεγέθη πλέγματος, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε αυτές τις πληροφορίες για να εκτιμηθεί η ακριβής λύση. Αυτό επιτυγχάνεται υποθέτοντας ότι το σφάλμα της αριθμητικής λύσης μειώνεται με έναν γνωστό ρυθμό καθώς το πλέγμα γίνεται πιο λεπτό.

Για να εκτιμηθεί η τιμή f που αντιστοιχεί σε μηδενική απόσταση πλέγματος, χρησιμοποιούνται τα αποτελέσματα που προκύπτουν από άλλα πλέγματα χαμηλότερης τάξης στην ακόλουθη σχέση,

$$f = f_{h=0} + g_1 h + g_2 h^2 + g_3 h^3 \quad (4.12)$$

όπου, $f_{h=0}$ είναι η τιμή συνεχούς για μηδενική απόσταση πλέγματος, οι συναρτήσεις g_1, g_2, g_3 είναι ανεξάρτητες από την απόσταση πλέγματος και h είναι η απόσταση πλέγματος. Η ποσότητα f θεωρείται δεύτερης τάξης αν $g_1 = 0$.

Για λύση δεύτερης τάξης, με υπολογισμό της f σε πλέγματα απόστασης h_1 και h_2 , που h_1 είναι το λεπτότερο πλέγμα, υπάρχουν δύο εξισώσεις που λύνουν για το $f_{h=0}$ για την εκτίμηση της τιμής συνεχούς πλέγματος,

$$f_{h=0} = f_1 + \frac{f_1 - f_2}{r^2 - 1} \quad (4.13)$$

Όπου, r η αναλογία βελτίωσης πλέγματος η οποία ορίζεται ως,

$$r = \frac{h_2}{h_1} \quad (4.14)$$

Το $f_{h=0}$ θεωρείται ότι είναι ακρίβειας τάξης $p + 1$ και για μεγάλο αριθμό προσομοιώσεων, όπως σε αυτήν την εργασία, το σφάλμα εκτιμάται στο λεπτότερο πλέγμα. Σε αυτήν την περίπτωση η παρεμβολή Richardson μπορεί να εκφραστεί ως,

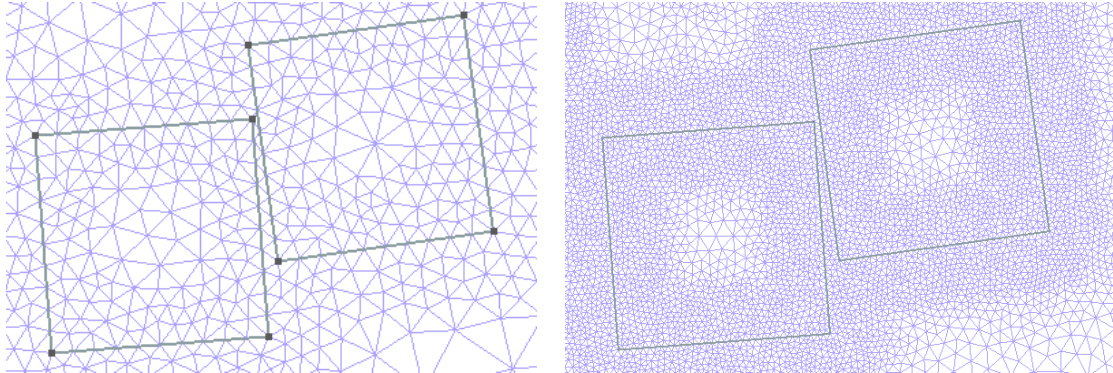
$$f_{h=0} = f_2 + \frac{(f_1 - f_2)r^p}{r^p - 1} \quad (4.15)$$

όπου p η σειρά σύγκλισης και για 3 επίπεδα απόστασης πλέγματος δίνεται από την έκφραση,

$$p = \frac{\ln \left(\frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1} \right)}{\ln(r)} \quad (4.16)$$

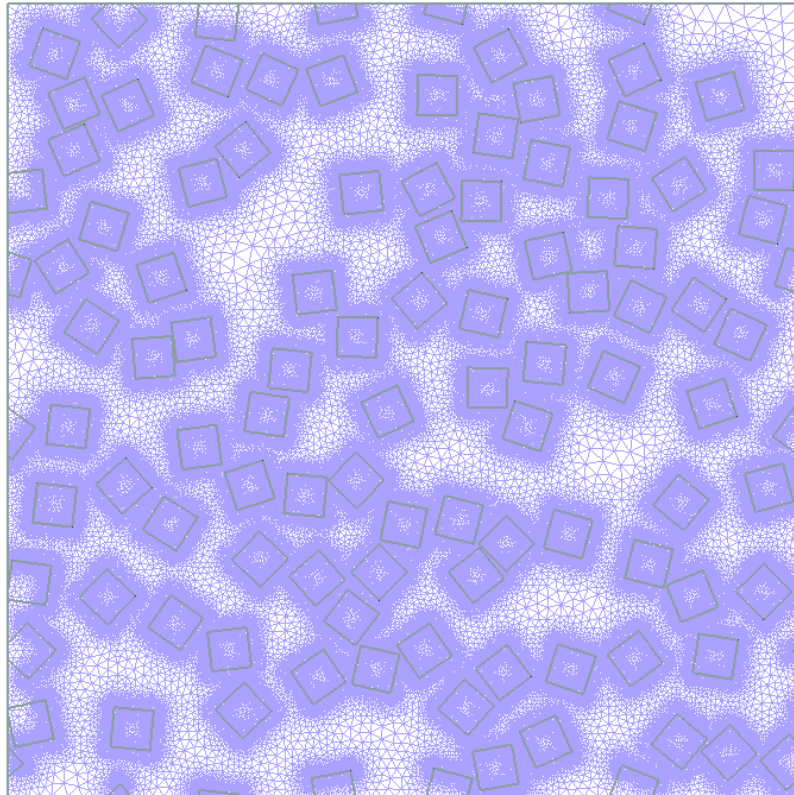
Η παρεμβολή Richardson βασίζεται στις σειρές Taylor και δεν μπορεί να εφαρμοστεί σε περιοχές που υπάρχουν ασυνέχειες, όμως μπορεί να εφαρμοστεί για συναρτήσεις που υπολογίζονται σε ολόκληρο το ροϊκό πεδίο.

Για την οπτικοποίηση της διακριτοποίησης του πλέγματος σε σχέση με την απόσταση των κελιών, αντιπαραβάλλονται δύο σχήματα που απεικονίζουν ένα πλέγμα με αραιή δομή και ένα πλέγμα με πυκνή δομή,



Σχήμα 4.14: Δομή αραιού υπολογιστικού πλέγματος (αριστερά) και πυκνού (δεξιά).

καθώς και ένα σχήμα που απεικονίζει το υπολογιστικό πλέγμα μιας ενδεικτικής γεωμετρίας ενός ολόκληρου μοντέλου,



Σχήμα 4.15: Υπολογιστικό πλέγμα γεωμετρίας με $N=100$, $\alpha=1$, $\theta=0$, $\epsilon=90$.

Με την μέθοδο αυτή μπορεί να προσδιοριστεί ο δείκτης σύγκλισης πλέγματος (Grid Convergence Index, GCI), ο οποίος παρέχει μια ποσοτική εκτίμηση του σφάλματος, που σχετίζεται με την διακριτοποίηση του πλέγματος και μια εκτίμηση ότι οι λύσεις του υπολογιστικού μοντέλου βρίσκονται σε ένα ασυμπτωτικό εύρος σύγκλισης. Ο συλλογισμός αυτής της μεθοδολογίας ανήκει στον Roache και η ιδέα είναι η προσέγγιση των αριθμητικών αποτελεσμάτων από οποιαδήποτε προσπάθεια βελτίωσης του υπολογιστικού πλέγματος με τα αποτελέσματα από ένα διπλασιασμό πλέγματος χρησιμοποιώντας μια μέθοδο δεύτερης τάξης. Μια επιπλέον ιδιότητα του GCI είναι η ένδειξη βελτίωσης της λύσης με μία ενδεχόμενη βελτιστοποίηση του πλέγματος. Επομένως, για να είναι η αριθμητική λύση εντός ασυμπτωτικού εύρους ο GCI πρέπει να λαμβάνει μικρές τιμές, ώστε με περαιτέρω βελτίωση του πλέγματος να μην μεταβάλλεται το αποτέλεσμα της προσομοίωσης.

Ο δείκτης GCI για το πιο πυκνό πλέγμα είναι,

$$GCI_{fine} = \frac{F_s |\varepsilon|}{r^p - 1} \quad (4.17)$$

Όπου, F_s ένας συντελεστής ασφαλείας που είναι ίσος με $F_s = 3$, για σύγκριση μεταξύ δύο πλεγμάτων και $F_s = 1.25$ για συγκρίσεις μεταξύ τριών ή περισσότερων πλεγμάτων. Το ε είναι το σχετικό σφάλμα για τα αποτελέσματα μεταξύ δύο διαδοχικών πλεγμάτων.

Ο δείκτης GCI για το πιο αραιό πλέγμα είναι,

$$GCI_{coarse} = \frac{F_s |\varepsilon| r^p}{r^p - 1} \quad (4.18)$$

Κάθε επίπεδο πλέγματος είναι απαραίτητο να έχει λύσεις που βρίσκονται στο ασυμπτωτικό εύρος σύγκλισης και μπορεί να ελεγχθεί με την σύγκριση δύο τιμών GCI που υπολογίζονται σε περίπτωση με τρία πλέγματα,

$$GCI_{2,3} = r^p GCI_{1,2} \quad (4.19)$$

Με τις δύο αυτές τιμές, είναι δυνατόν να υπολογιστεί ένα ασυμπτωτικό όριο σύγκλισης από την σχέση,

$$GCI_{2,3}/r^p GCI_{1,2} \quad (4.20)$$

Για να αποδειχθεί ότι τα τρία πλέγματα που εξετάστηκαν είναι κατάλληλα για την υπολογιστική ανάλυση, θα ήταν καλό το αποτέλεσμα της (28) να βρίσκεται κοντά στην μονάδα.

Η μεθοδολογία που παρουσιάστηκε προηγουμένως, εφαρμόζεται στα πλαίσια της παρούσας εργασίας για τον καθορισμό του πλήθους των κελιών, ώστε το αποτέλεσμα να βρίσκεται εντός του ασυμπτωτικού εύρους σύγκλισης. Για τις δοκιμές έγινε αλλαγή του συντελεστή μεγέθους των κελιών από το αρχείο γεωμετρίας μέσω του λογισμικού Gmsh. Οι προσομοιώσεις έγιναν με μοντέλο που αποτελούνταν από 500 τετραγωνικά φυλλίδια, σε τυχαίο προσανατολισμό και με $\alpha\Phi = 0.25$.

Τα πλέγματα που εξετάστηκαν είχαν την εξής αναλογία μεγέθους μεταξύ των πλεγμάτων τους:

$$h_3 = \sqrt{2}h_2 = 2h_1$$

προκύπτει ότι $r = \sqrt{2}$ και παρακάτω παρουσιάζεται πίνακας με τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων.

No Grid	Normalized Grid Spacing	K_{eff}
1	1	1,1469
2	$\sqrt{2}$	1,1553
3	2	1,1731

Από την σχέση (4.16) προσδιορίζεται η σειρά σύγκλισης,

$$p = 2,18564975$$

Η θεωρητική σειρά σύγκλισης είναι ίση με $p = 2$ και όποια πιθανή διαφορά υπάρχει οφείλεται σε διάφορους παράγοντες όπως η τάνυση του πλέγματος και η ποιότητά του [13].

Στην συνέχεια, από την (4.15) υπολογίζεται η τιμή $f_{h=0}$ για την θερμική αγωγιμότητα:

$$f_{h=0} = 1,13949$$

Η περίπτωση που εξετάζεται αποτελείται από τρία διαφορετικά πλέγματα, οπότε για τους υπολογισμούς του GCI χρησιμοποιείται $F_s = 1,25$.

Οι δείκτες GCI για τα πλέγματα που μελετώνται είναι:

$$GCI_{1,2} = 0,8181 \%$$

και

$$GCI_{2,3} = 1,7210 \%$$

Επιπλέον τα σχετικά σφάλματα μεταξύ των πλεγμάτων είναι:

$$\varepsilon_{1,2} = 0,0073$$

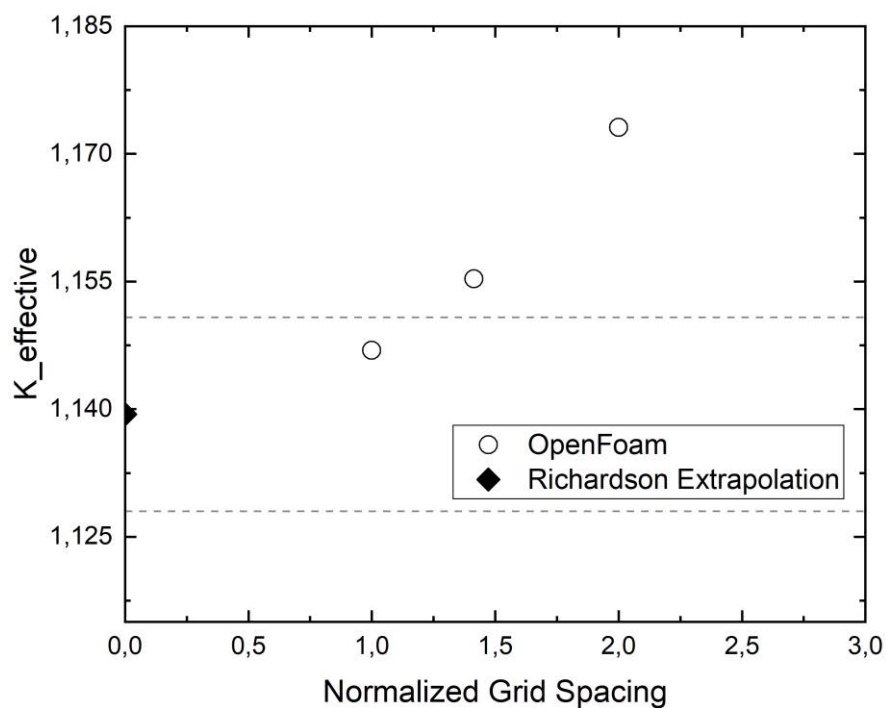
και

$$\varepsilon_{2,3} = 0,0154$$

Τέλος προσδιορίζεται αν τα αποτελέσματα βρίσκονται σε ασυμπτωτικό όριο σύγκλισης από την (4.20),

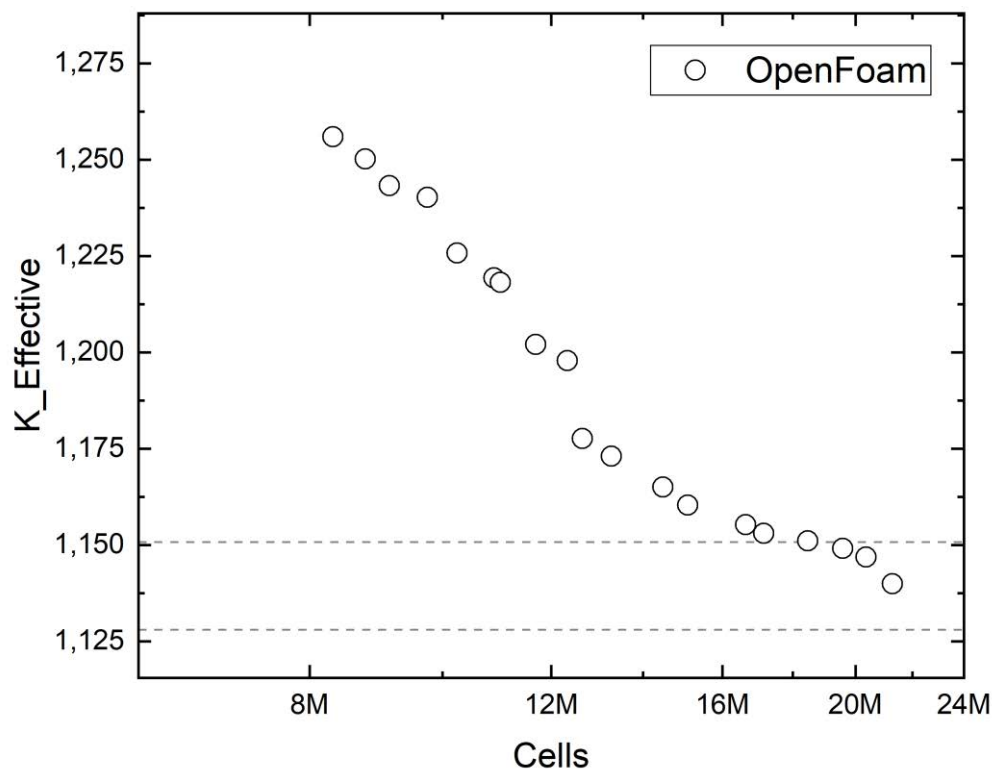
$$\frac{GCI_{2,3}}{r^p GCI_{1,2}} = 0,99273$$

όπου το αποτέλεσμα βρίσκεται κοντά στην μονάδα και ικανοποιεί τις συνθήκες βελτιστοποίησης πλέγματος.



Σχήμα 4.16: Αποτελέσματα *Richardson Extrapolation*. Οι διακεκομμένες γραμμές αποτελούν τα όρια αποδεκτού σφάλματος $\pm 1\%$.

Επομένως, βάσει του παραπάνω γραφήματος εξάγεται το συμπέρασμα ότι η προσομοίωση με το πυκνότερο πλέγμα, με κανονικοποιημένη απόσταση 1 με 21.000.000 υπολογιστικά κελιά ελαχιστοποιεί το σφάλμα που δίνει η ανάλυση Richardson.



Σχήμα 4.17: Μελέτη επίδρασης του πλήθους των κελιών στην γεωμετρία που εξετάστηκε στην παρεμβολή Richardson, ώστε η λύση να βρίσκεται εντός των ορίων του αποδεκτού σφάλματος $\pm 1\%$.

Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στο σχήμα 4.17 καταδεικνύουν πως για να βρίσκεται η θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού μέσα στο όριο σφάλματος $\pm 1\%$, θα πρέπει οι προσομοιώσεις να τρέχουν με ένα πλήθος κελιών άνω των 19 εκατομμυρίων.

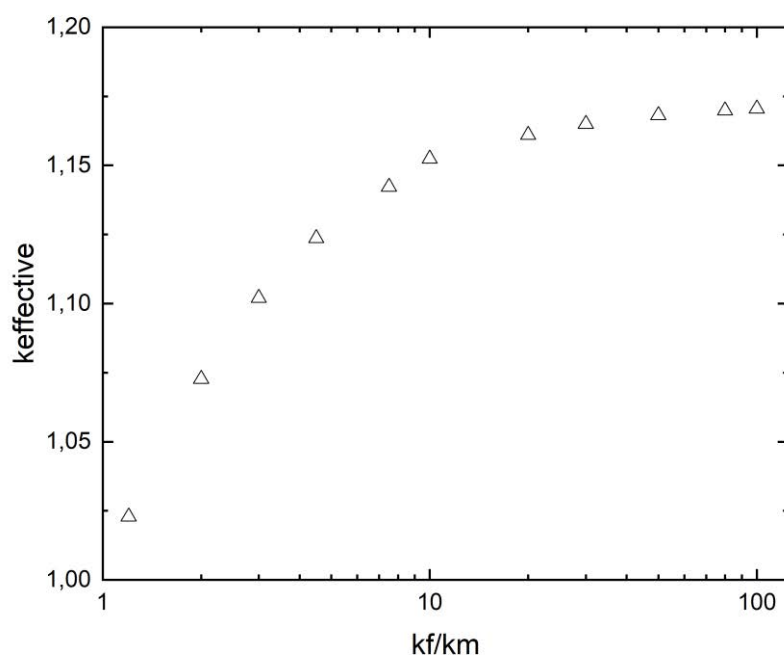
Συνοψίζοντας, η παρεμβολή Richardson είναι ένα ισχυρό εργαλείο για την εκτίμηση της ακριβούς λύσης ενός προβλήματος και την αξιολόγηση του σφάλματος που σχετίζεται με το μέγεθος του πλέγματος. Η κατανόηση και η εφαρμογή της μεθόδου αυτής είναι κρίσιμη για την επίτευξη αξιόπιστων αποτελεσμάτων σε προσομοιώσεις CFD.

Κεφάλαιο 5 Αποτελέσματα Υπολογιστικής Μελέτης

Στο παρών κεφάλαιο παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των δοκιμών που έγιναν για την επίδραση των παραμέτρων του μοντέλου στην θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού. Πιο αναλυτικά, έγινε μελέτη σε γεωμετρίες με φυλλίδια τα οποία έχουν λόγο διαστάσεων α ίσο με 4 και 8, πλήθος $N=500$ και ποικίλους συνδυασμούς προσανατολισμών.

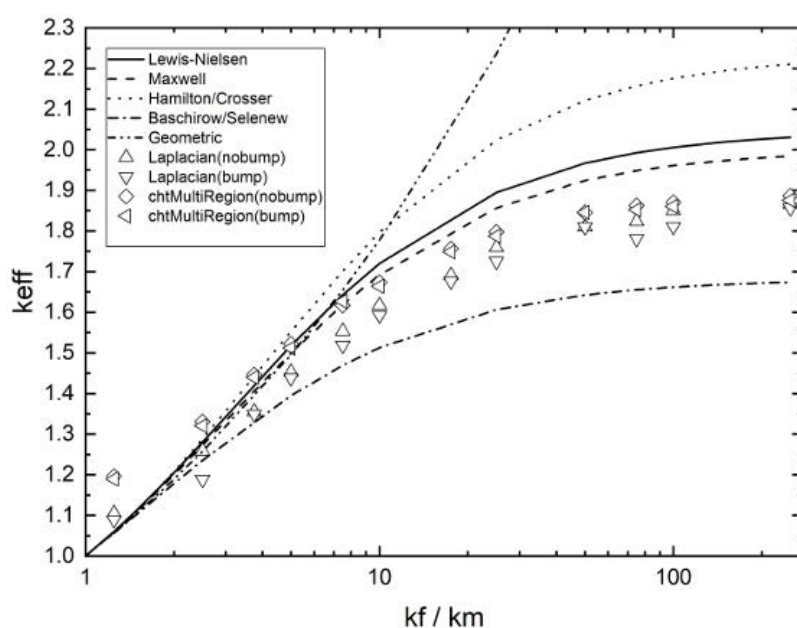
5.1 Επίδραση των ιδιοτήτων και του μεγέθους των σωματιδίων

Οι παράμετροι που εξετάζονται στην παρούσα ενότητα είναι ο λόγος της θερμικής αγωγιμότητας των σωματιδίων προς την θερμική αγωγιμότητα του μητρικού υλικού και το μέγεθος των φυλλιδίων (k_f/k_m) σε προσανατολισμό παράλληλο στον οριζόντιο άξονα ($\theta=0$, $\varepsilon=0$) και τυχαίο προσανατολισμό ($\theta=0$, $\varepsilon=90$). Για την επιλογή των τιμών του λόγου θερμικών αγωγιμοτήτων για τις οποίες θα τρέξουν οι προσομοιώσεις, έγινε χρήση της γεωμετρίας από την προηγούμενη ενότητα (Richardson Extrapolation) με $\alpha=1$, $N=500$, $\alpha\phi=0,25$ και τυχαίο προσανατολισμό, με τιμές του λόγου k_f/k_m από 1 έως 100.



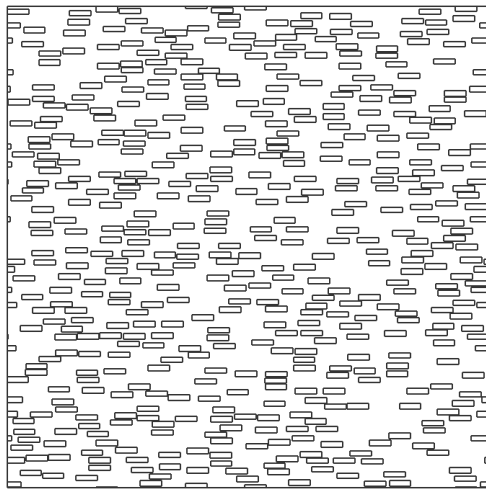
Σχήμα 5.1: Αποτελέσματα προσομοιώσεων για το k_{eff} συναρτήσει του k_f/k_m , για $\alpha=1$, $N=500$, $\alpha\phi=0,25$, $\theta=0$ και $\varepsilon=90$.

Το σχήμα 5.1 παρουσιάζει την θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού σε σχέση με τον λόγο kf/km και διαπιστώνεται ότι για τιμές μεγαλύτερες του 20 υπάρχει οριζοντιοποίηση των αποτελεσμάτων και δεν συμβάλουν σημαντικά στην περαιτέρω αύξηση της θερμικής αγωγιμότητας του σύνθετου. Το ίδιο αποτέλεσμα είχε εξαχθεί και στην περίπτωση της διπλωματικής εργασίας του κ. Γαϊτάνη [4], γι' αυτό τον λόγο το ενδιαφέρον τις παρούσας διπλωματικής εστιάζεται σε ένα εύρος τιμών από 1 έως 20 για το kf/km , εφόσον σε αυτήν την περιοχή παρατηρούνται τα πιο ενδιαφέροντα φαινόμενα.

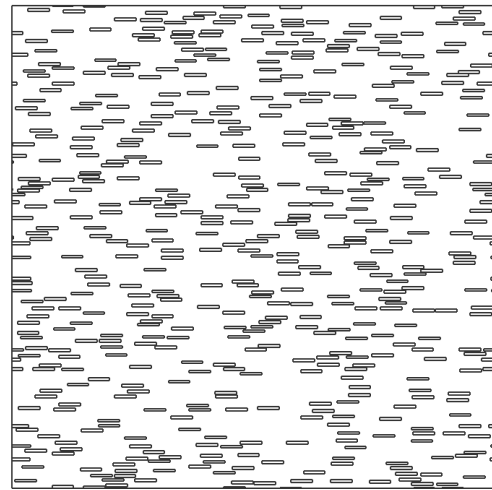


Σχήμα 5.2: Αποτελέσματα προσομοιώσεων για γεωμετρίες με $N=500$, $\alpha=1$, $\vartheta=0$, $\varepsilon=90$ και $\alpha\Phi=0,25$, από την διπλωματική εργασία του κ. Γαϊτάνη.

Ακόμα μία παράμετρος που ρυθμίζεται για την εκτέλεση των προσομοιώσεων είναι το πλάτος της επιφάνειας διεπαφής W_{Dist} , που χρησιμοποιείται από τον solver για την μοντελοποίηση αυτής της περιοχής. Συνήθως, το εύρος του πλάτους της περιοχής αυτής κυμαίνεται 1 έως 5 φορές το πλάτος του φυλλιδίου σύμφωνα με πειραματικές μελέτες σε φυσικά νανομοντέλα και εξαρτάται από την χημική φύση της διεπιφάνειας, την επιφανειακή λειτουργικοποίηση του πληρωτικού υλικού και τον περιορισμό της διάχυσης ενέργειας [15] [8]. Για τους σκοπούς της εργασίας, επιλέχθηκε η τιμή W_{Dist} να είναι ίση με 0,03 m, ώστε σε όλες τις προσομοιώσεις που έγιναν το πλάτος της διεπιφάνειας να είναι εντός του πειραματικού – θεωρητικού εύρους.

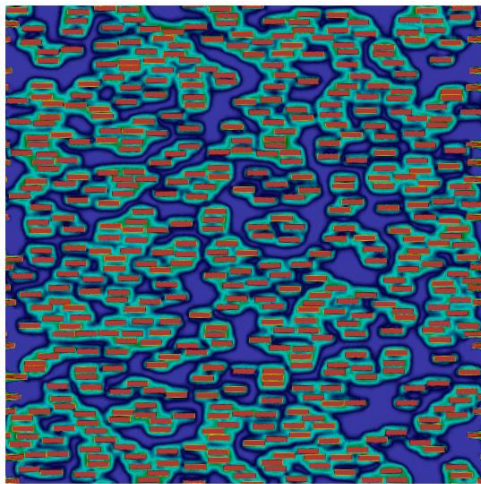


a

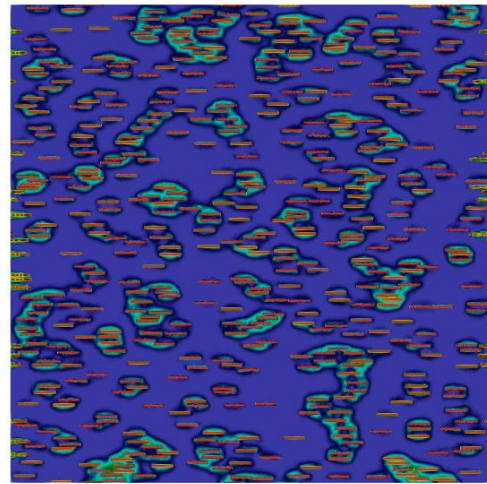


b

Σχήμα 5.3: Ενδεικτικές γεωμετρίες με φυλλίδια παράλληλα στον άξονα x , (a) $\alpha=4$, $N=500$, $\alpha\phi=1$, $\vartheta=0$, $\varepsilon=0$ και (b) $\alpha=8$, $N=500$, $\alpha\phi=1$, $\vartheta=0$, $\varepsilon=0$.

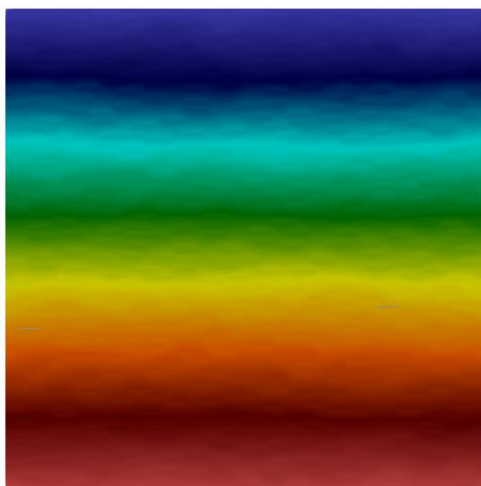


a

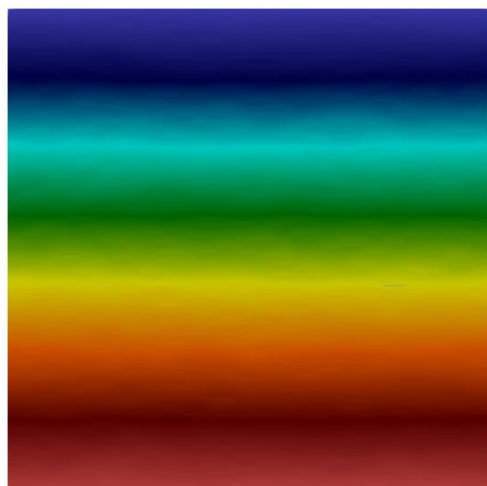


b

Σχήμα 5.4: Πεδία θερμικής αγωγιμότητας με $k_f/k_m=10$ και $W_{Dist} = 0,03$ m, για τα σχήματα 5.3.a και 5.3.b αντίστοιχα.



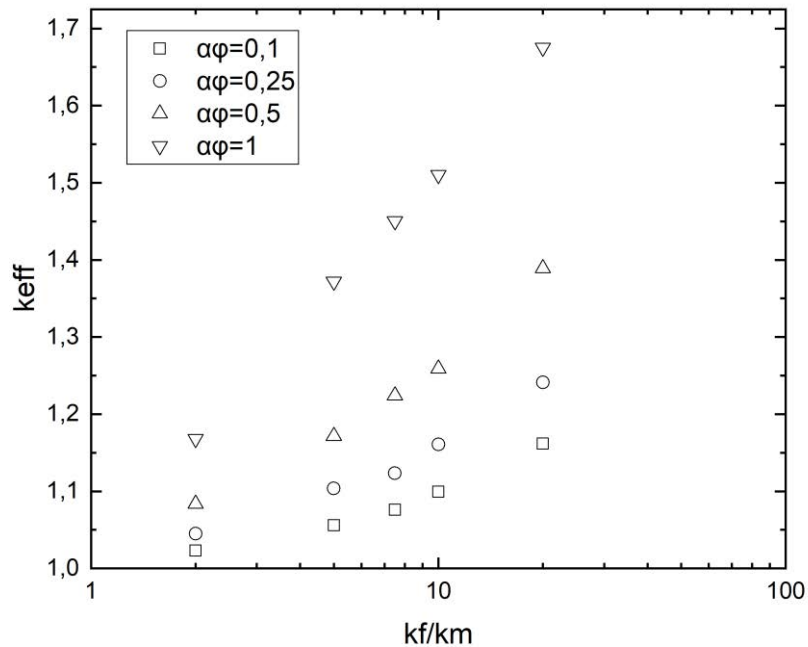
a



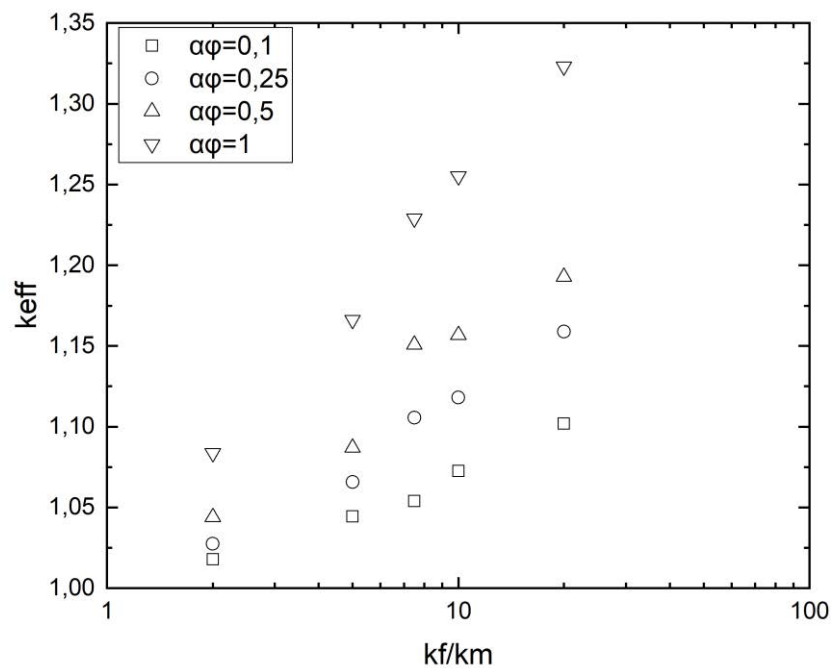
b

Σχήμα 5.5: Θερμοκρασιακά πεδία για τις περιπτώσεις των σχημάτων 5.4.a και 5.4.b αντίστοιχα.

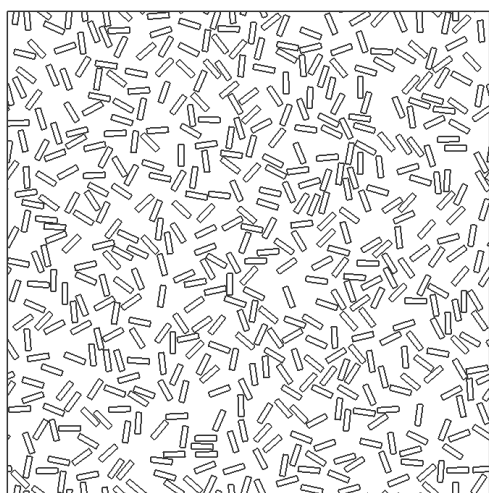
Στα σχήματα 5.6 και 5.7 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για γεωμετρίες με σωματίδια παράλληλα στον άξονα x .



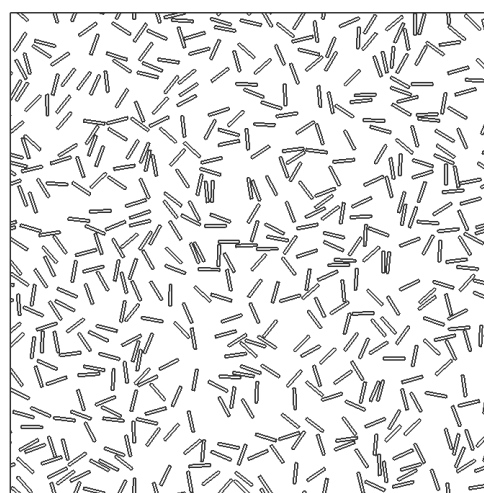
Σχήμα 5.6: Αποτελέσματα για το k_{eff} συναρτήσει του k_f/k_m για γεωμετρίες με $N=500$, $\alpha=4$ και σωματίδια παράλληλα στον άξονα x , για διάφορα $\alpha\phi$.



Σχήμα 5.7: Αποτελέσματα για το k_{eff} συναρτήσει του k_f/k_m για γεωμετρίες με $N=500$, $\alpha=8$ και σωματίδια παράλληλα στον άξονα x , για διάφορα $\alpha\phi$.

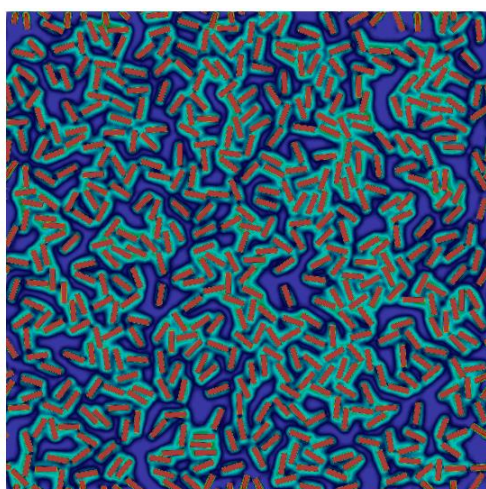


a

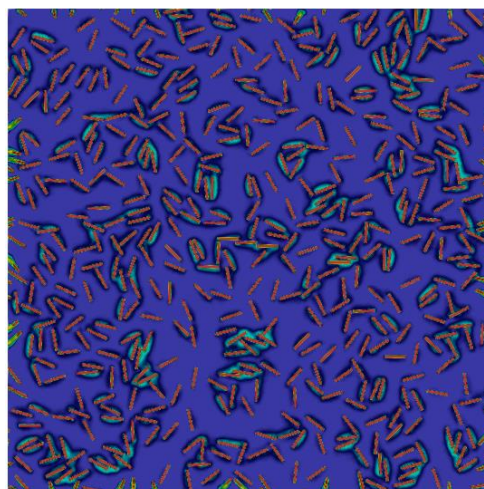


b

Σχήμα 5.8: Ενδεικτικές γεωμετρίες με φυλλίδια σε τυχαίο προσανατολισμό, (a) $\alpha=4$, $N=500$, $\alpha\phi=1$, $\vartheta=0$, $\varepsilon=90$ και (b) $\alpha=8$, $N=500$, $\alpha\phi=1$, $\vartheta=0$, $\varepsilon=90$.

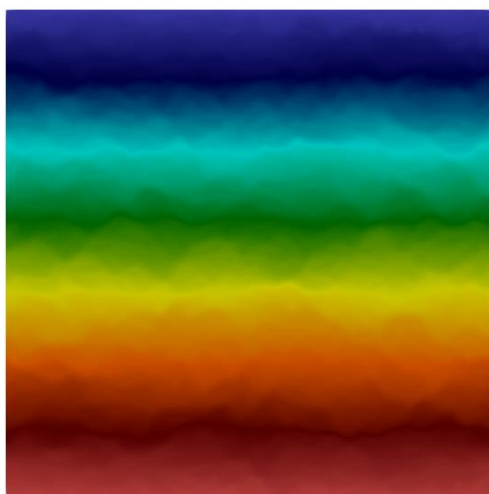


a

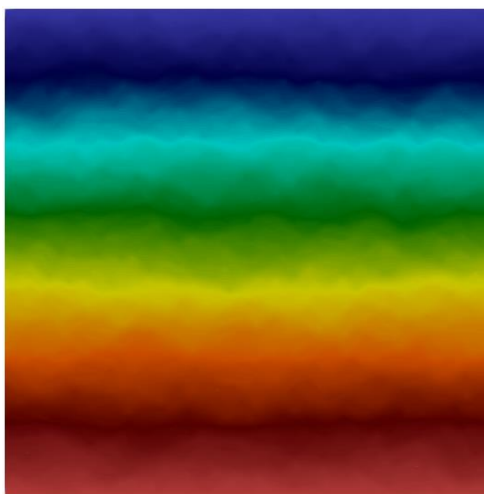


b

Σχήμα 5.9: Πεδία θερμικής αγωγιμότητας με $k_f/k_m=10$ και $W_{Dist} = 0,03$ m, για τις γεωμετρίες των σχημάτων 5.8.a και 5.8.b αντίστοιχα.



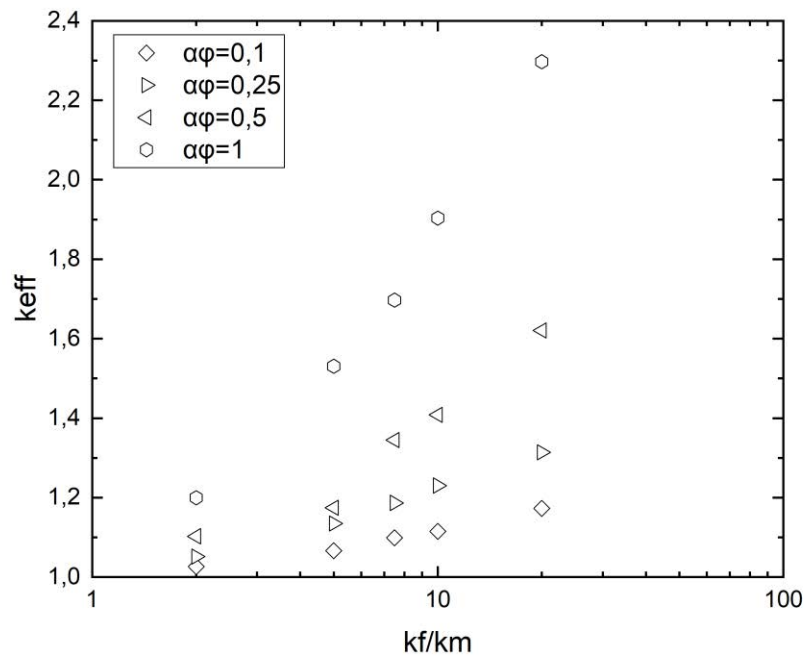
a



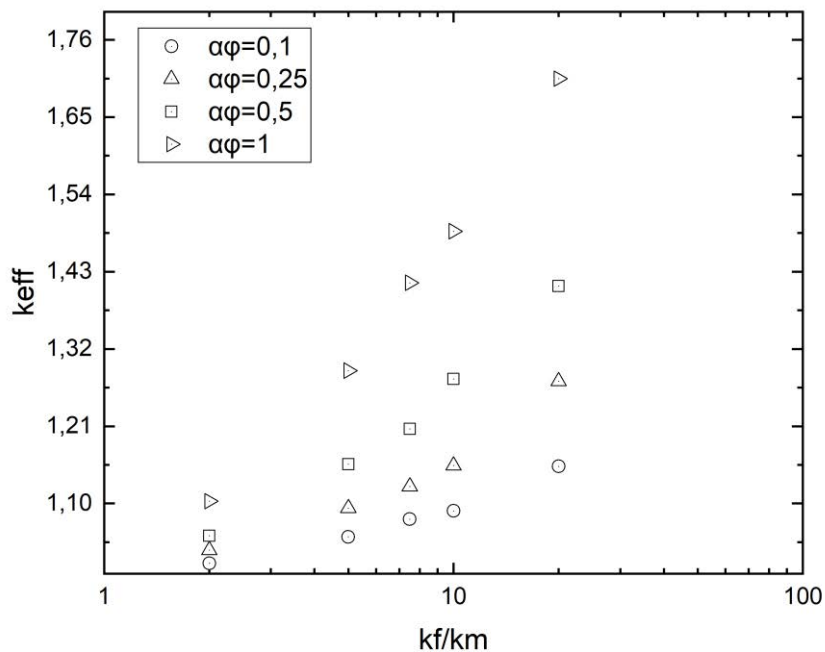
b

Σχήμα 5.10: Θερμοκρασιακά πεδία για τα σχήματα 5.9.a και 5.9.b αντίστοιχα.

Στα σχήματα 5.11 και 5.12 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για γεωμετρίες με σωματίδια σε τυχαίο προσανατολισμό.



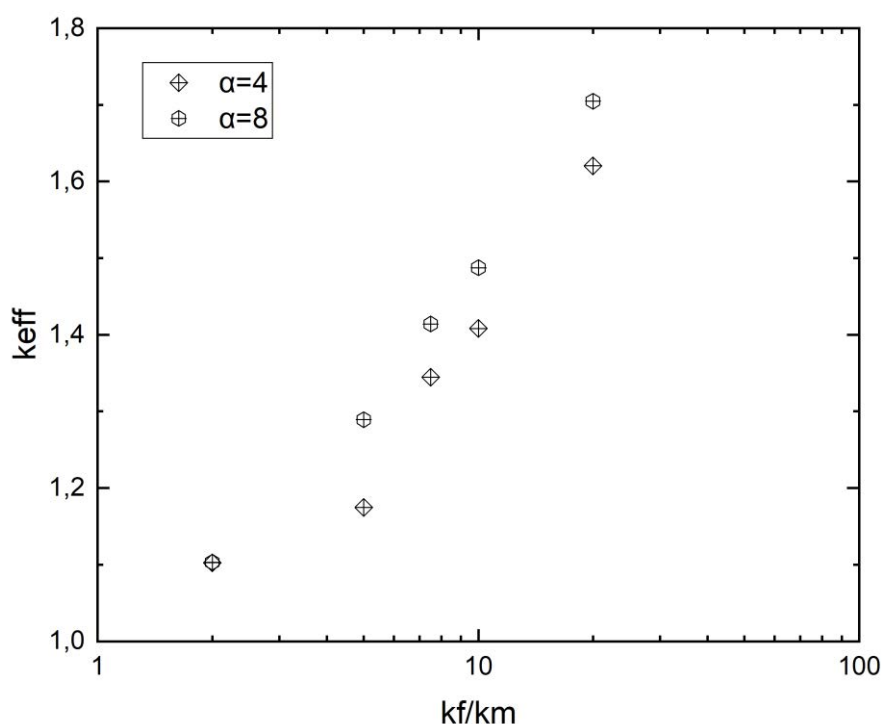
Σχήμα 5.11: Αποτελέσματα για το $keff$ συναρτήσει του kf/km , για γεωμετρίες με $\alpha=4$, $N=500$ και σωματίδια σε τυχαίο προσανατολισμό, για διάφορα $\alpha\phi$.



Σχήμα 5.12: Αποτελέσματα για το $keff$ συναρτήσει του kf/km , για γεωμετρίες με $\alpha=8$, $N=500$ και σωματίδια σε τυχαίο προσανατολισμό, για διάφορα $\alpha\phi$.

Από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων που παρουσιάζονται στα σχήματα 5.6, 5.7, 5.11 και 5.12 διαπιστώνεται ότι, η θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού αυξάνεται καθώς αυξάνεται ο λόγος kf/km και στις δύο περιπτώσεις προσανατολισμού. Έπειτα, παρατηρείται αύξηση την θερμικής αγωγιμότητας του σύνθετου καθώς αυξάνεται το κλάσμα όγκου των φυλλιδίων, εφόσον σε γεωμετρίες με μεγαλύτερα Φ δημιουργούνται σωματίδια μεγαλύτερων διαστάσεων, με αποτέλεσμα την αύξηση της επιφάνειας των φυλλιδίων που έχουν αυξημένη θερμική αγωγιμότητα σε σχέση με το μητρικό υλικό. Επίσης, διακρίνεται ότι, στις γεωμετρίες με τυχαία προσανατολισμένα σωματίδια η αποτελεσματική θερμική αγωγιμότητα $keff$ έχει αυξημένες τιμές κάτι το οποίο θα σχολιαστεί εκτενέστερα σε επόμενη ενότητα που γίνεται ανάλυση για την επίδραση του προσανατολισμού των σωματιδίων.

Με βάση τα παραπάνω αποτελέσματα αξίζει να σημειωθεί ότι, σε γεωμετρίες με κοινό Φ τα σωματίδια που έχουν μεγαλύτερο λόγο διαστάσεων, έχουν μεγαλύτερη επίδραση στην θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου και η σύγκριση αυτή παρουσιάζεται στο σχήμα 5.13, για $\alpha=4$ και $\alpha=8$ με $\Phi = 12,5\%$ και τυχαίο προσανατολισμό.



Σχήμα 5.13: Σύγκριση της $keff$ συναρτήσει του kf/km , σε γεωμετρίες με $\Phi = 12,5\%$ και τυχαίο προσανατολισμό για σωματίδια με λόγο διαστάσεων $\alpha=4$ και $\alpha=8$.

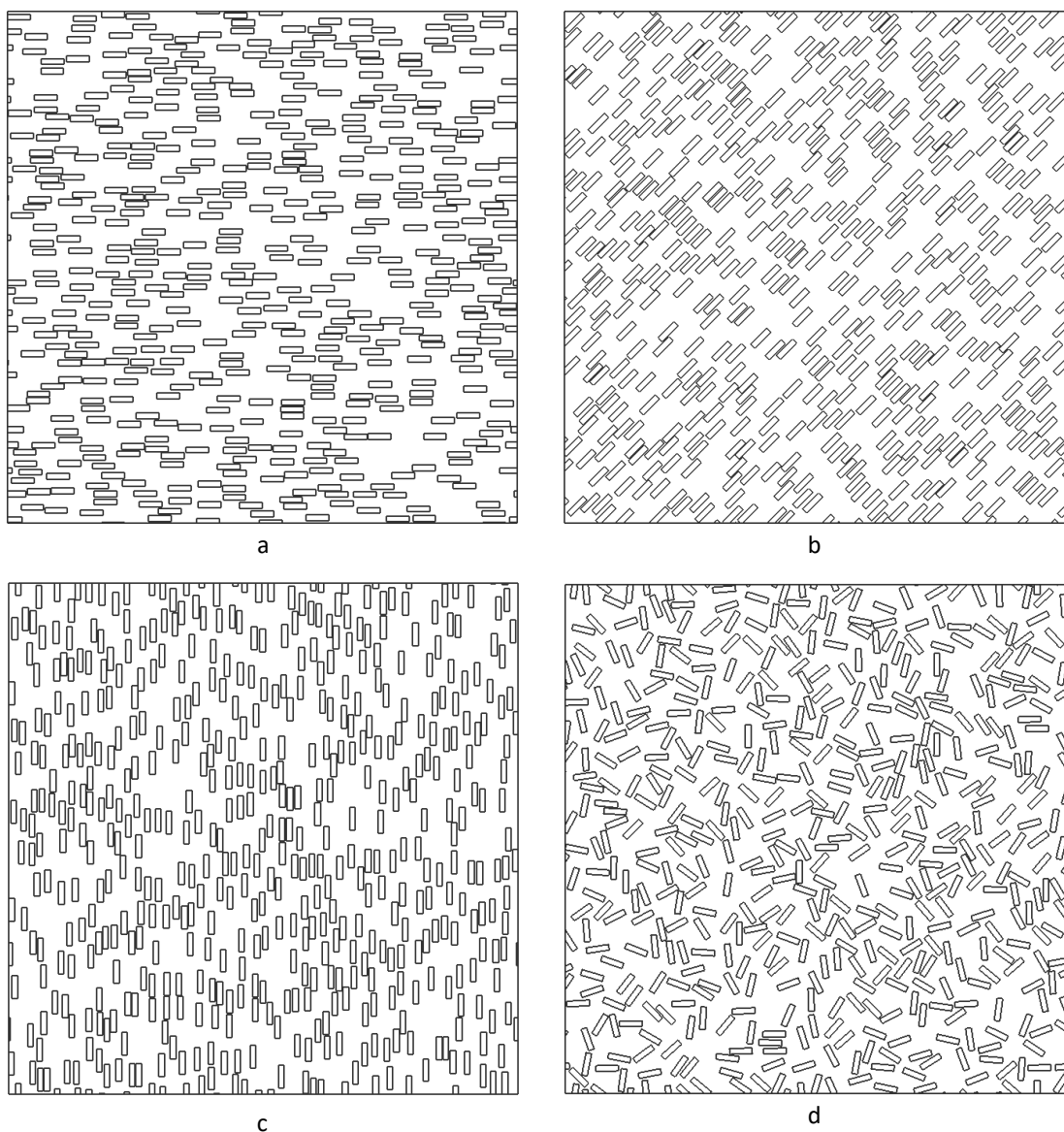
Από το σχήμα 5.13, εξάγεται το συμπέρασμα ότι για την κατασκευή σύνθετου υλικού είναι προτιμότερο να χρησιμοποιούνται σωματίδια με μεγαλύτερο λόγο μεγέθους, καθώς έχουν καλύτερη απόκριση στην θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου και αυτό οφείλεται κυρίως στην μεγαλύτερη επιφάνεια του φυλλιδίου, αλλά και στην αύξηση της διεπιφάνειας μεταξύ matrix – flake.

Τέλος, είναι αναγκαίο να επισημανθεί ότι, σε όλες τις προσομοιώσεις το $\alpha\varphi$ βρίσκεται στο εύρος $0,1 \leq \alpha\varphi \leq 1$, διότι σε αυτήν την περιοχή παρατηρούνται τα πιο ενδιαφέροντα αποτελέσματα, όπως επίσης και για $\alpha\varphi$ με τιμές άνω της μονάδας για τις οποίες είναι πιο δύσκολη η κατασκευή της γεωμετρίας δεδομένου ότι χρησιμοποιείται πυκνό υπολογιστικό πλέγμα και απαιτεί περισσότερους υπολογιστικούς πόρους.

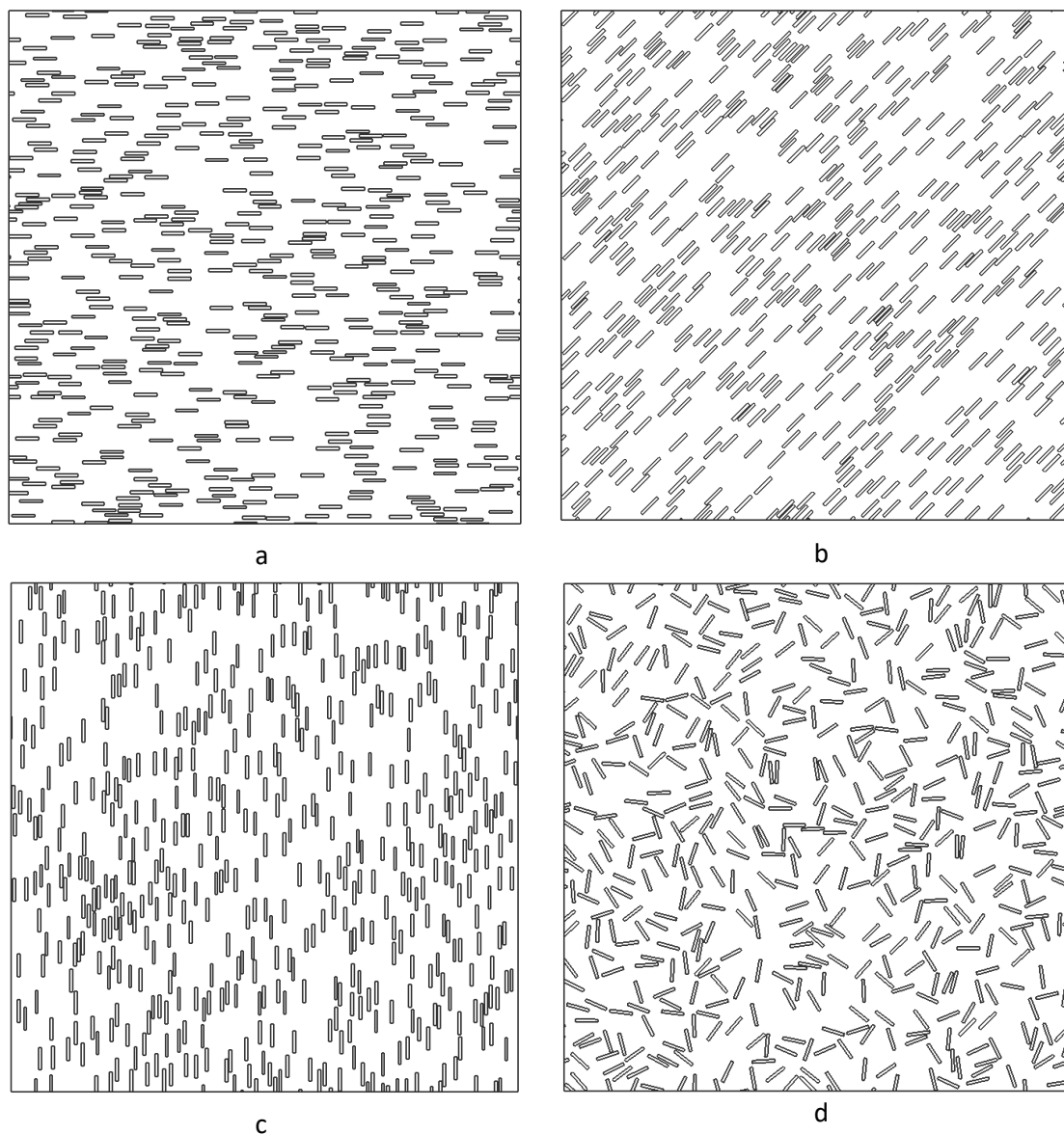
5.2 Επίδραση του προσανατολισμού των σωματιδίων

Σημαντικό παράγοντα στην αποτελεσματική θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού, αποτελεί ο προσανατολισμός τοποθέτησης των σωματιδίων ενίσχυσης στο μητρικό υλικό κατά την διαδικασία παραγωγής του και είναι αντιληπτό ότι σε συνθήκες παραγωγής υπάρχει δυσκολία για την ακριβή τοποθέτηση των φυλλιδίων υπό συγκεκριμένη γωνία. Πιο συγκεκριμένα, για να εξαχθούν συμπεράσματα για την επίδραση του προσανατολισμού γίνονται προσομοιώσεις με συγκεκριμένες γωνίες τοποθέτησης των φυλλιδίων (0° , 45° , 90°) και με εντελώς τυχαίο προσανατολισμό, σε γεωμετρίες με $N=500$ $\alpha=4$, $\alpha=8.0$

Στα σχήματα 5.14 και 5.15, παρουσιάζονται οι γεωμετρίες που προκύπτουν για κάθε γωνία προσανατολισμού ανάλογα με το α .

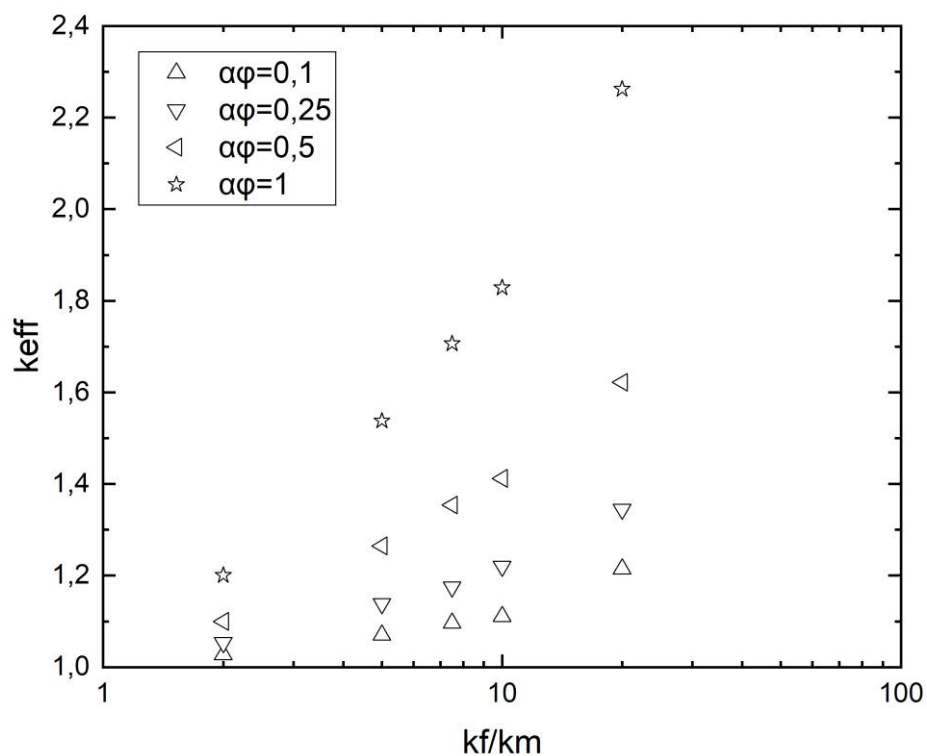


Σχήμα 5.14: Ενδεικτικές γεωμετρίες με $\alpha=4$ και $N=500$ για (a) $\vartheta=0$, $\varepsilon=0$, (b) $\vartheta=45$, $\varepsilon=0$, (c) $\vartheta=90$, $\varepsilon=0$ και (d) $\vartheta=0$, $\varepsilon=90$.

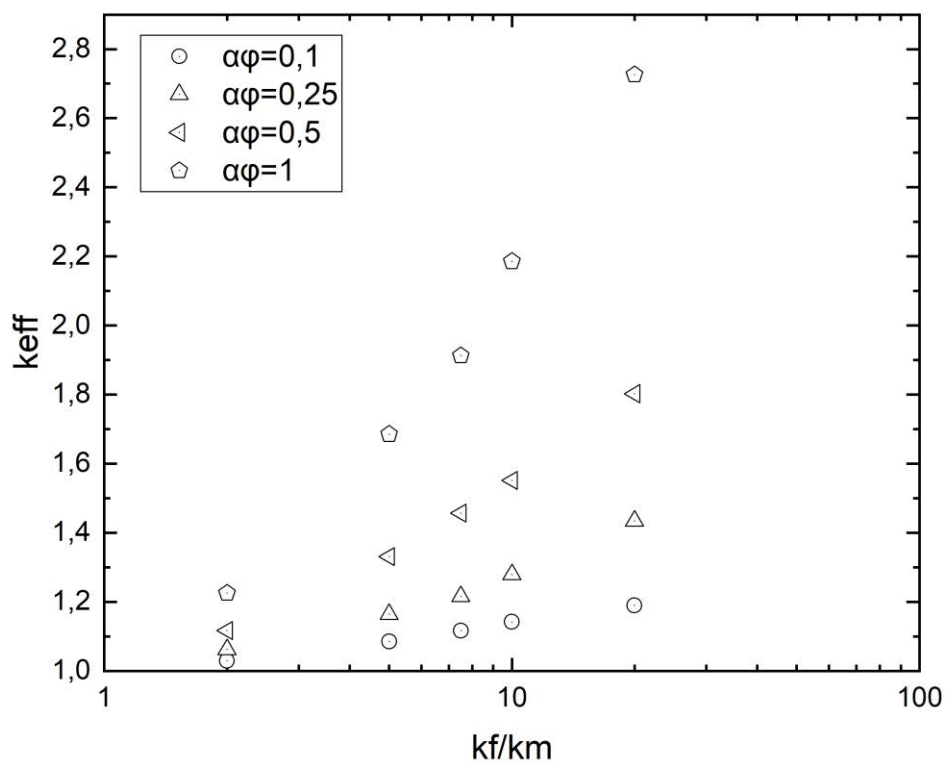


Σχήμα 5.15: Ενδεικτικές γεωμετρίες με $\alpha=8$ και $N=500$ για (a) $\theta=0$, $\varepsilon=0$, (b) $\theta=45$, $\varepsilon=0$, (c) $\theta=90$, $\varepsilon=0$ και (d) $\theta=0$, $\varepsilon=90$.

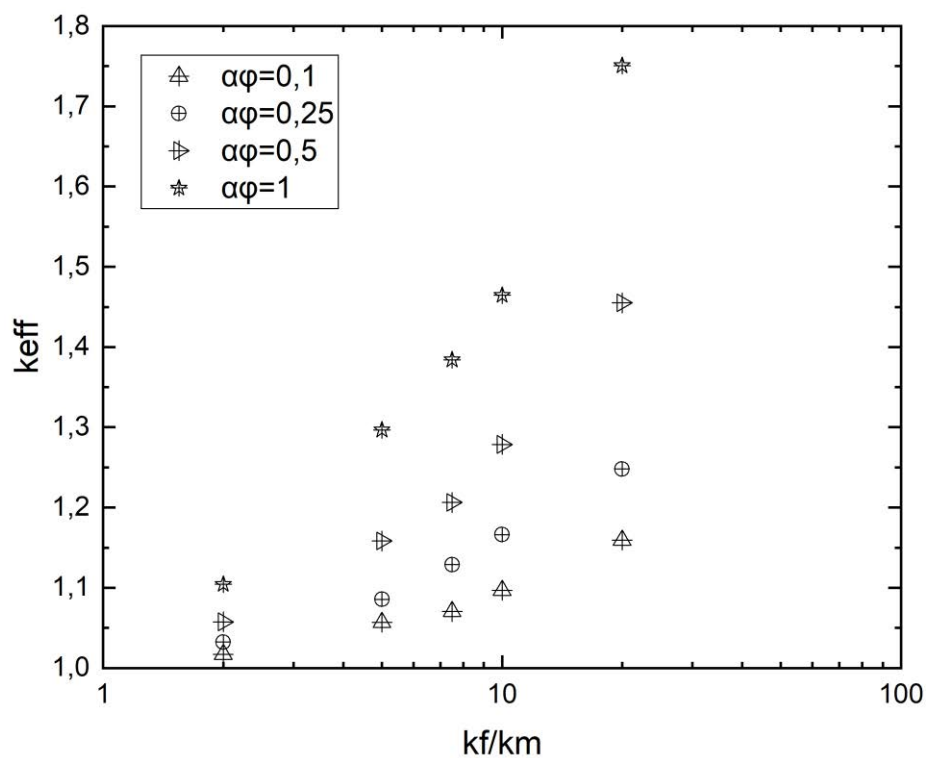
Τα σχήματα που ακολουθούν, παρουσιάζουν τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για προσανατολισμούς σωματιδίων $\theta=45$, $\varepsilon=0$ και $\theta=90$, $\varepsilon=0$ μιας και τα αποτελέσματα για τους $\theta=0$, $\varepsilon=0$ και $\theta=0$, $\varepsilon=90$ παρουσιάζονται στα σχήματα 5.6, 5.7, 5.11 και 5.12 στην προηγούμενη ενότητα.



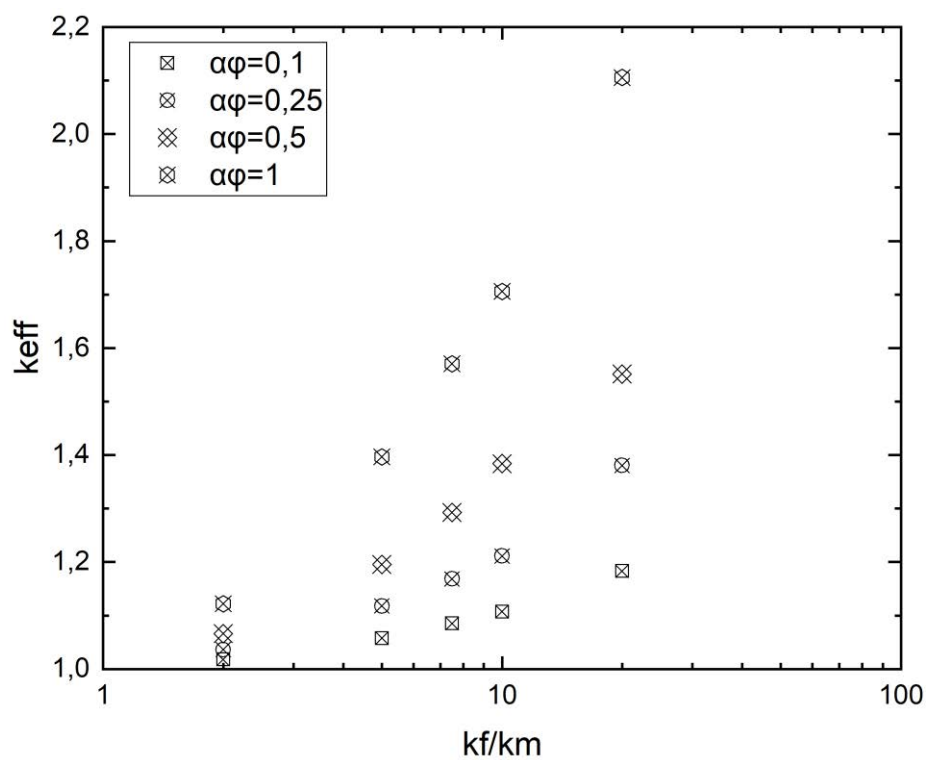
Σχήμα 5.16: Αποτελέσματα για το k_{eff} συναρτήσει του k_f/k_m , για γεωμετρία με $\alpha=4$, $N=500$ και προσανατολισμό φυλλιδίων $\vartheta=45^\circ$, $\varepsilon=0$.



Σχήμα 5.17: Αποτελέσματα για το k_{eff} συναρτήσει του k_f/k_m , για γεωμετρία με $\alpha=4$, $N=500$ και προσανατολισμό φυλλιδίων $\vartheta=90^\circ$, $\varepsilon=0$.

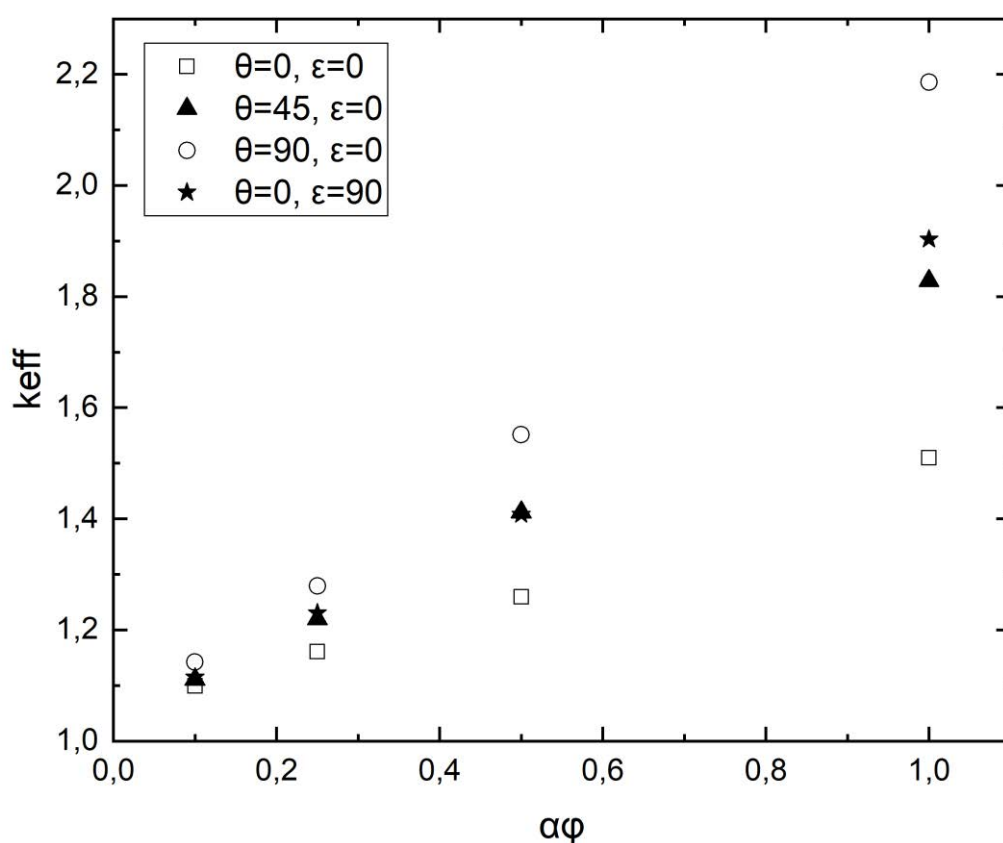


Σχήμα 5.18: Αποτελέσματα για το $keff$ συναρτήσει του kf/km , για γεωμετρία με $\alpha=8$, $N=500$ και προσανατολισμό $\vartheta=45$, $\varepsilon=0$.



Σχήμα 5.19: Αποτελέσματα για το $keff$ συναρτήσει του kf/km , για γεωμετρία με $\alpha=8$, $N=500$ και προσανατολισμό $\vartheta=90$, $\varepsilon=0$.

Από τα αποτελέσματα των σχημάτων 5.6, 5.7, 5.11, 5.12 και 5.16 έως 5.19, είναι φανερό πως ο προσανατολισμός των σωματιδίων έχει μεγάλη επίδραση στην θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού. Πιο συγκεκριμένα, οι εντονότερες διαφορές προκύπτουν ανάμεσα στις γεωμετρίες με γωνίες $\theta=0$, $\varepsilon=0$ και $\theta=90$, $\varepsilon=0$, καθώς στην πρώτη περίπτωση τα φυλλίδια είναι κάθετα στην διεύθυνση μεταφοράς της θερμότητας, ενώ στην δεύτερη είναι παράλληλα. Μια διαφορετική ερμηνεία αυτής της παρατήρησης είναι ότι, όταν τα σωματίδια είναι κάθετα στην θερμική ροή ουσιαστικά επιδρούν στην αύξηση της θερμικής αντίστασης του υλικού. Αντίθετα, στην περίπτωση που τα σωματίδια είναι παράλληλα με την θερμороή, ευνοείται ο σχηματισμός θερμικών καναλιών (thermal percolation paths), με αποτέλεσμα να μειώνεται η θερμική αντίσταση.



Σχήμα 5.20: Σύγκριση του $keff$ για $\alpha=4$ και $kf/km=10$, για κάθε περίπτωση προσανατολισμού.

Η σύγκριση που παρουσιάζεται στο σχήμα 5.20, βοηθά στην οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων της επίδρασης του προσανατολισμού στην θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου. Διακρίνεται ότι, ο πιο αποδοτικός τρόπος τοποθέτησης των σωματιδίων είναι αυτός της περίπτωσης με $\theta=90$ και $\varepsilon=0$, όμως στην βιομηχανική πρακτική αυτός ο προσανατολισμός είναι πολύ δύσκολο να επιτευχθεί. Συνήθως, ο προσανατολισμός που επιτυγχάνεται σε πραγματικές συνθήκες είναι ο τυχαίος και από την σύγκριση φαίνεται πως είναι ο επόμενος πιο αποδοτικός από την προηγούμενη περίπτωση. Τέλος σαν ποσοτικό συμπέρασμα τα φυλλίδια που είναι παράλληλα στην μετάδοση θερμότητας για ένα ενδεικτικό $\Phi = 25\%$, δίνουν 14% μεγαλύτερη θερμική αγωγιμότητα στο σύνθετο σε σχέση με τα φυλλίδια που βρίσκονται σε τυχαίο προσανατολισμό.

5.3 Επίδραση του υπολογισμού της διεπιφάνειας Matrix – Flake

Στην μελέτη – ανάλυση που πραγματοποιήθηκε στις προηγούμενες ενότητες η κύρια διαφοροποίηση, σε σχέση με προηγούμενες έρευνες, βρίσκεται στο σημείο της λεπτομερούς μοντελοποίησης της διεπιφάνειας μεταξύ matrix – flake και την ένταξη της μέσα τους υπολογισμούς για την θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού. Η διεπιφάνεια αυτή, ουσιαστικά επιδρά παράλληλα με την ύπαρξη των φυλλιδίων στην θερμική αντίσταση του υλικού και διευκολύνει την μεταφορά θερμότητας. Για την ποσοτικοποίηση της συμβολής της στην θερμική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού είναι αναγκαίο να γίνει σύγκριση των αποτελεσμάτων της παρούσας εργασίας, με αυτά που εξάχθηκαν από την διπλωματική εργασία του κ. Γαϊτανή [4], που είχε πραγματοποιηθεί παρόμοια μελέτη αλλά με την διαφορά ότι δεν λήφθηκε υπόψιν η προσφορά της διεπιφάνειας στα αποτελέσματα.

Πίνακας 1: Σύγκριση των αποτελεσμάτων για κοινές περιπτώσεις ανάμεσα στην παρούσα εργασία (laplacianFoamF) και της εργασίας του κ. Γαϊτάνη (laplacianFoamD), για προσομοιώσεις με $N=500$.

α/α	α	Φ	k_f/k_m	θ	ε	Keff_laplacian FoamD	Keff_laplacian FoamF	Μεταβολή
1	4	0,125	10	0	0	1,16	1,26	+9%
2	4	0,125	10	90	0	1,41	1,55	+10%
3	4	0,125	10	0	90	1,32	1,43	+8%
4	4	0,25	20	0	0	1,40	1,68	+20%
5	4	0,25	20	0	90	1,89	2,30	+22%
6	8	0,0625	10	0	0	1,08	1,16	+8%
7	8	0,0625	10	0	90	1,18	1,28	+9%
8	8	0,125	20	0	90	1,50	1,71	+15%

Με βάση τον πίνακα 1, συνάγεται το συμπέρασμα ότι η μοντελοποίηση της διεπιφάνειας συμβάλει στο αποτέλεσμα υπολογισμού της θερμικής αγωγιμότητας του σύνθετου υλικού και οι μεγαλύτερες μεταβολές εντοπίζονται στις προσομοιώσεις με μεγαλύτερο κλάσμα όγκου των φυλλιδίων.

Κεφάλαιο 6 Συμπεράσματα

Συνοψίζοντας, από την μελέτη αυτής της διπλωματικής εργασίας προκύπτουν ενδιαφέροντα αποτελέσματα τόσο από την επίδραση των ιδιοτήτων του πληρωτικού υλικού, όσο και από την ένταξη της διεπιφάνειας matrix – flake στον υπολογισμό της θερμικής αγωγιμότητας του σύνθετου υλικού. Το κύριο αντικείμενο μελέτης αυτής της εργασίας εντοπίζεται στην κατασκευή και πιστοποίηση του αλγορίθμου που μοντελοποιεί την διεπιφάνεια matrix – flake. Συγκεκριμένα, η κατασκευή του αλγόριθμου ξεκίνησε από μηδενική σχεδόν βάση, καθώς δεν είχε ξαναγίνει κάποια παρόμοια εφαρμογή στον τομέα της μετάδοσης θερμότητας στα σύνθετα υλικά και χρειάστηκε να προσαρμοσθούν ειδικές υπορουτίνες από άλλους τομείς της μηχανικής για να επιτευχθεί η μοντελοποίηση. Επιπλέον, για την περάτωση των προσομοιώσεων κρίθηκε αναγκαίο το υπολογιστικό πλέγμα να είναι αρκετά πυκνό, λόγω της ύπαρξης αυτής της μικρής περιοχής που διαφοροποιούνται οι ιδιότητες του υλικού.

Τώρα ως αναφορά, τις περιπτώσεις που μελετήθηκαν για την εξαγωγή αποτελεσμάτων από την επίδραση των παραγόντων που αναφέρθηκαν στο προηγούμενο κεφάλαιο, επιλέχθηκε το πλήθος των φυλλιδίων ενίσχυσης να είναι 500, εφόσον έχει χρησιμοποιηθεί σε προηγούμενες μελέτες και υπάρχει η ανάγκη σύγκρισης των αποτελεσμάτων. Επίσης, για το πλάτος της διεπιφάνειας επιλέχθηκε μία μέση τιμή $W_{Dist} = 0,03 \text{ m}$, καθώς από πραγματικές δοκιμές που έχουν γίνει από άλλες έρευνες έχει παρατηρηθεί ότι το πλάτος αυτό είναι περίπου 1-5 φορές το πλάτος του ενισχυτικού σωματιδίου.

Με βάση τα αποτελέσματα που παρουσιάστηκαν, φαίνεται ότι αυξάνοντας το κλάσμα όγκου των φυλλιδίων ή και το λόγο διαστάσεων, το υλικό έχει καλύτερη απόκριση στην αποτελεσματική μεταφορά θερμότητας, όπως και ότι είναι προτιμότερο ο προσανατολισμός των φυλλιδίων να είναι παράλληλος με την θερμική ροή, σε σχέση με τον τυχαίο. Όμως σε σχέση με προηγούμενες μελέτες, εδώ υπάρχει και η συμβολή της διεπιφάνειας στον μηχανισμό μεταφοράς θερμότητας και το σύστημα θα μπορούσε να ερμηνευθεί όπως ένα μοντέλο με θερμικές αντιστάσεις εν παραλλήλω.

Πιο συγκεκριμένα, οι περιοχές των διεπιφανειών δύναται να λογισθούν ως θερμογέφυρες στο σύνθετο υλικό, καθώς δρουν παράλληλα με την υπόλοιπη δομή (matrix, flakes). Τέλος από τα αποτελέσματα που εξάχθηκαν φάνηκε και ποσοτικά η μεταβολή στην θερμική αγωγιμότητα του συνθετου υλικού και συνάγεται το συμπέρασμα ότι όσο αυξάνονται το κλάσμα όγκου, ο λόγος διαστάσεων ή ο λόγος θερμικών αγωγιμοτήτων k_f/k_m η συμβολή αυτής της διεπιφάνειας είναι ακόμα μεγαλύτερη.

Κλείνοντας, η παρούσα μελέτη μπορεί να αποτελέσει βάση για μελλοντικές μελέτες στον τομέα μεταφοράς θερμότητας με θερμικά αγωγή ή μη σωματίδια ενίσχυσης, αλλά και στον τομέα μεταφοράς μάζας για την μελέτη των ιδιοτήτων φραγμού σύνθετων υλικών. Τέλος, εγείρει σημαντικό ενδιαφέρον η εκτέλεση μεγάλου πλήθους προσομοιώσεων από τον αλγόριθμο `laplacianFoamF`, με στόχο να εξαχθεί κάποια θεωρητική συσχέτιση για την πρόβλεψη της θερμικής αγωγιμότητας συμπεριλαμβάνοντας όλες τις παραμέτρους που εξετάζονται.

Παράρτημα Α

Στο παράρτημα αυτό παρουσιάζονται όλα τα αρχεία που χρειάζονται για την επίλυση μιας προσομοίωσης.

Πηγαία Αρχεία LaplacianFoamF

Αρχείο *createFields.H*, χρησιμοποιείται για την δήλωση των μεταβλητών.

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

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

volScalarField Calc_Dist
(
    IOobject
    (
        "Calc_Dist",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh,
    dimensionedScalar(dimensionSet(0,1,0,0,0,0,0),0)
);

volScalarField DTFinal
(
    IOobject
    (
        "DTFinal",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh,
    dimensionedScalar(dimensionSet(0,2,-1,0,0,0,0),0)
);
```

```

volScalarField DT_Calc
(
    IOobject
    (
        "DT_Calc",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh,
    dimensionedScalar(dimensionSet(0,2,-1,0,0,0,0),0)
);

volScalarField alpha
(
    IOobject
    (
        "alpha",
        runTime.timeName(),
        mesh,
        IOobject::NO_READ,
        IOobject::AUTO_WRITE
    ),
    mesh,
    dimensionedScalar(dimensionSet(0,1,-1,0,0,0,0),0)
);

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

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

```

```

Info<< "Reading Diffusivities of Flakes/Matrix and Wall Distance\n" << endl;

dimensionedScalar DTFlake = dimensionedScalar
(
    transportProperties.lookup("DTFlake")
);

dimensionedScalar DTMatrix = dimensionedScalar
(
    transportProperties.lookup("DTMatrix")
);

dimensionedScalar WDist = dimensionedScalar
(
    transportProperties.lookup("WDist")
);

#include "createFvModels.H"
#include "createFvConstraints.H"

```


Αρχείο *laplacianFoamF.C*, περιλαμβάνεται ο αλγόριθμος επίλυσης.

```
/*-----*\
=====
\\ / F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
\\ / O peration  | Website: https://openfoam.org
\\ / A nd        | Copyright (c) 2011-2021 OpenFOAM Foundation
\\ / M anipulation
-----*/

License
  This file is part of OpenFOAM.

  OpenFOAM is free software: you can redistribute it and/or modify it
  under the terms of the GNU General Public License as published by
  the Free Software Foundation, either version 3 of the license, or
  (at your option) any later version.

  OpenFOAM is distributed in the hope that it will be useful, but WITHOUT
  ANY WARRANTY; without even the implied warranty of MERCHANTABILITY or
  FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU General Public License
  for more details.

  You should have received a copy of the GNU General Public License
  along with OpenFOAM. If not, see <http://www.gnu.org/licenses/>.

Application
  laplacianFoamF runs on openfoam9

Description
  Solves a simple Laplace equation, e.g. for thermal diffusion in a solid.

/*-----*/

#include "wallDist.H" // υπορουτίνα που υπολογίζει απόσταση από τοιχώματα
#include "fvCFD.H"
#include "fvModels.H"
#include "fvConstraints.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 << "Available cellZones: " << mesh.cellZones().names() << endl;

    Info << "\Retrieving cellZones..." << endl;

    const label flakeZoneID = mesh.cellZones().findZoneID("Flake_vol"); // Ζώνη Flakes
    const label matrixZoneID = mesh.cellZones().findZoneID("Matrix_vol"); // Ζώνη Matrix

    if (flakeZoneID == -1 || matrixZoneID == -1)
    {
        FatalErrorInFunction
        << "Required cellZone (Flake_vol or Matrix_vol) not found in the mesh!" << endl // Έλεγχος ύπαρξης των δύο ζωνών
        << exit(FatalError);
    }

    const cellZone& flakeZone = mesh.cellZones()[flakeZoneID];
```

```

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

alpha= ((DTFlake-DTMatrix)/(WDist)); // Συντελεστής α, προσδιορίζει την κλίση της ευθείας

while (simple.loop(runTime))
{
    Info<< "Time = " << runTime.timeName() << nl << endl;

    fvModels.correct();

    Calc_Dist= wallDist::New(mesh).y(); // Υπολογισμός απόστασης από το τοίχωμα των Flakes με την υπορουτίνα wallDist.H

    DT_Calc= (DTFlake - alpha*Calc_Dist); // Εξίσωση ευθείας για την γραμμική μεταβολή

    DTFinal= Foam::max(DT_Calc,DTMatrix); // Έλεγχος τιμής DTFinal για περιοχή εκτός της περιοχής μεταβολής

    forAll(flakeZone,celli)
    {
        const label localCellID = flakeZone[celli];

        if (DTFinal[localCellID] != DTFlake.value()) // Έλεγχος για την τιμή DTFinal σε περίπτωση που το κελί
        {
            DTFinal[localCellID]=DTFlake.value(); // βρίσκεται στην ζώνη Flake, θα πάρει την τιμή DTFlake
        }
    }
}

while (simple.correctNonOrthogonal())
{
    fvScalarMatrix TEqn // Επίλυση εξίσωσης Laplace με βάση το πεδίο θερμικής διαχυτότητας
    ( // που κατασκευάστηκε με την προηγούμενη διαδικασία, με αποτέλεσμα το
        fvm::ddt(T) - fvm::laplacian(DTFinal, T) // θερμοκρασιακό πεδίο.
    ==
        fvModels.source(T)
    );

    fvConstraints.constrain(TEqn);
    TEqn.solve();
    fvConstraints.constrain(T);
}

#include "write.H"

Info<< "ExecutionTime = " << runTime.elapsedCpuTime() << " s"
    << " ClockTime = " << runTime.elapsedClockTime() << " s"
    << nl << endl;
}

Info<< "End\n" << endl;

return 0;
}

// ***** //

```

Αρχείο *write.H*, χρησιμοποιείται για την αποθήκευση των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης

```
if (runTime.writeTime())
{
    volVectorField gradT(fvc::grad(T));

    volScalarField gradTx
    (
        IOobject
        (
            "gradTx",
            runTime.timeName(),
            mesh,
            IOobject::NO_READ,
            IOobject::AUTO_WRITE
        ),
        gradT.component(vector::X)
    );

    volScalarField gradTy
    (
        IOobject
        (
            "gradTy",
            runTime.timeName(),
            mesh,
            IOobject::NO_READ,
            IOobject::AUTO_WRITE
        ),
        gradT.component(vector::Y)
    );

    volScalarField gradTz
    (
        IOobject
        (
            "gradTz",
            runTime.timeName(),
            mesh,
            IOobject::NO_READ,
            IOobject::AUTO_WRITE
        ),
        gradT.component(vector::Z)
    );

    runTime.write();
}
```

Αρχεία Προσομοίωσης

Folder O/T – Συνοριακές Συνθήκες

```
/*-----*- 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        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;
}
}

// ***** //

```

Folder *constant/transportProperties* – Ιδιότητες Σύνθετου Υλικού

```
/*-----*- C++ -*-----*/
|=====|
| \ \ / / | F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
| \ \ / / | O peration  | Version: 2.4.0
| \ \ / / | A nd        | Web:      www.OpenFOAM.org
| \ \ / / | M anipulation|
|=====|
/*-----*- C++ -*-----*/

FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "constant";
    object       transportProperties;
}
// *****

DTFlake          DTFlake [ 0 2 -1 0 0 0 0 ] 10.0;
DTMatrix         DTMatrix [ 0 2 -1 0 0 0 0 ] 1.0;
WDist            WDist [ 0 1 0 0 0 0 0 ] 0.1;

// *****
```

Folder System – Αρχεία ελέγχου της προσομοίωσης

Αρχείο *controlDict*

```
/*-----*- C++ -*/
|=====|
| \ \ / / | F ield | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
| \ \ / / | O peration | Version: 2.4.0
| \ \ / / | A nd | Web: www.OpenFOAM.org
| \ \ / / | M anipulation |
|-----|
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       controlDict;
}
// *****

application    laplacianFoamF;

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;
```

Αρχείο *fvSchemes*, περιέχει τα αριθμητικά σχήματα που χρησιμοποιεί ο solver για την επίλυση.

```

/*----- C++ -----*/
|=====|
| \ \ / / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
| \ \ / / O p e r a t i o n | Version: 2.4.0
| \ \ / / A n d | Web: www.OpenFOAM.org
| \ \ / / M a n i p u l a t i o n |
|-----|
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       fvSchemes;
}
// *****

ddtSchemes
{
    default      steadyState;
}

gradSchemes
{
    default      Gauss linear;
    grad(T)      Gauss linear;
}

divSchemes
{
    default      none;
}

laplacianSchemes
{
    default      none;
    laplacian(yPsi) Gauss linear uncorrected;
    laplacian(DTFinal,T) Gauss linear corrected;
}

interpolationSchemes
{
    default      linear;
}

snGradSchemes
{
    default      corrected;
}

fluxRequired
{
    default      yes;
    T            ;
}

wallDist
{
    method       Poisson;
}
// *****

```


Αρχείο *fvSolution*, παρέχει πληροφορίες για την επιθυμητή ακρίβεια των αριθμητικών σχημάτων.

```

/*-----*- C++ -*-----*/
|=====|
| \ \ / F ield | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
| \ \ / O peration | Version: 2.4.0
| \ \ / A nd | Web: www.OpenFOAM.org
| \ \ M anipulation |
|-----|
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    location     "system";
    object       fvSolution;
}
// *****

solvers
{
    T
    {
        preconditioner  FDIC;
        solver          GAMG;
        mergeLevels     1;
        smoother        GaussSeidel;
        agglomerator     faceAreaPair;
        nCellsInCoarsestLevel  2;
        nPreSweeps       3;
        nPostSweeps      2;
        nFinestSweeps    2;
        tolerance        1e-10;
        relTol           0;
    }

    yPsi
    {
        solver          smoothSolver;
        smoother        GaussSeidel;
        tolerance        1e-6;           // Decreased tolerance
        relTol           0.1;           // Decreased relative tolerance
    }
}

SIMPLE
{
    nNonOrthogonalCorrectors 2;
    consistent              yes;
    residualControl
    {
        T                  1e-9;
    }
}

```

Αρχείο *createPatchDict*, εδώ γίνεται ο ορισμός του τύπου των επιφανειών και η αρχικοποίηση των ζωνών flake και matrix.

```

/*----- C++ -----*/
|=====|
| \ \ / / F ield | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
| \ \ / / O peration | Version: 2.1.x
| \ \ / / A nd | Web: www.OpenFOAM.org
| \ \ / / M anipulation |
/*-----*/

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

pointSync false;

// Patches to create.
patches
(
    {
        // Name of new patch
        name backMatrix;
        patchInfo
        {
            type empty;
        }
        constructFrom patches;
        patches (back_matrix);
    }
    {
        // Name of new patch
        name frontMatrix;
        patchInfo
        {
            type empty;
        }
        constructFrom patches;
        patches (front_matrix);
    }
    {
        // Name of new patch
        name backFlake;
        patchInfo
        {
            type empty;
        }
        constructFrom patches;
        patches (back_flake);
    }
    {
        // Name of new patch

```

```

    name frontFlake;
    patchInfo
    {
        type empty;
    }
    constructFrom patches;
    patches (front_flake);
}
{
    // Name of new patch
    name topMatrix;
    patchInfo
    {
        type patch;
    }
    constructFrom patches;
    patches (top_matrix);
}
{
    // Name of new patch
    name topFlake;
    patchInfo
    {
        type patch;
    }
    constructFrom patches;
    patches (top_flake);
}
{
    // Name of new patch
    name bottomMatrix;
    patchInfo
    {
        type patch;
    }
    constructFrom patches;
    patches (bottom_matrix);
}
{
    // Name of new patch
    name bottomFlake;
    patchInfo
    {
        type patch;
    }
    constructFrom patches;
    patches (bottom_flake);
}
{
    // Name of new patch
    name leftMatrix;

    // Dictionary to construct new patch from
    patchInfo

```

```

    {
        type cyclicAMI;
        neighbourPatch rightMatrix;
        transform translational;
        separationVector (-1 0 0);
        matchTolerance 0.001;
    }

    constructFrom patches;
    patches (left_matrix);
}

    {
        // Name of new patch
        name leftFlake;

        // Dictionary to construct new patch from
        patchInfo
        {
            type cyclicAMI;
            neighbourPatch rightFlake;
            transform translational;
            separationVector (-1 0 0);
            matchTolerance 0.001;
        }

        constructFrom patches;
        patches (left_flake);
    }
{
    // Name of new patch
    name rightMatrix;

    // Dictionary to construct new patch from
    patchInfo
    {
        type cyclicAMI;
        neighbourPatch leftMatrix;
        transform translational;
        separationVector (1 0 0);
        matchTolerance 0.001;
    }

    constructFrom patches;
    patches (right_matrix);
}

    {
        // Name of new patch
        name rightFlake;

        // Dictionary to construct new patch from
        patchInfo
        {
            type cyclicAMI;
            neighbourPatch leftFlake;

```

```

        transform translational;
        separationVector (1 0 0);
        matchTolerance 0.001;
    }

    constructFrom patches;
    patches (right_flake);
}
{
    // Name of new patch
    name intMatrix;
    patchInfo
    {
        type            mappedWall;
        sampleMode       nearestPatchFace;
        sampleRegion     Flake_vol;
        samplePatch      intFlake;
    }
    constructFrom patches;
    patches (int_matrix);
}
{
    // Name of new patch
    name intFlake;
    patchInfo
    {
        type            mappedWall;
        sampleMode       nearestPatchFace;
        sampleRegion     Matrix_vol;
        samplePatch      intMatrix;
    }
    constructFrom patches;
    patches (defaultFaces);
}
};

// ***** //

```

Αρχείο *decomposeParDict*, δηλώνεται ο αριθμός των πυρήνων του επεξεργαστή του εργαστηριακού cluster.

```
/*----- C++ -----*\
=====
\\      / F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
\\      / O p e r a t i o n | Website: https://openfoam.org
\\      / A n d             | Version: 8
\\      / M a n i p u l a t i o n |
\*-----*/
FoamFile
{
    version      2.0;
    format       ascii;
    class        dictionary;
    note         "mesh decomposition control dictionary";
    location     "system";
    object       decomposeParDict;
}

// * * * * *

numberOfSubdomains 2;

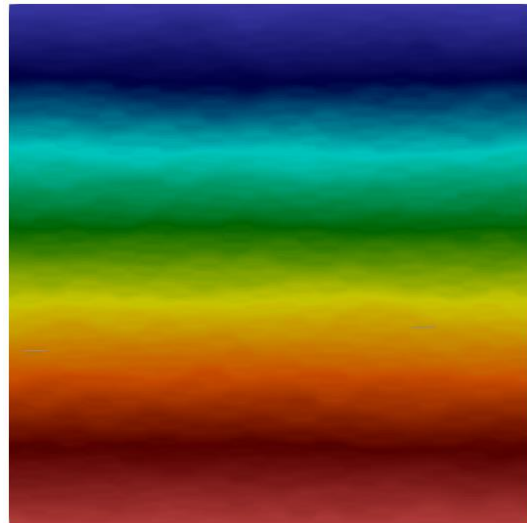
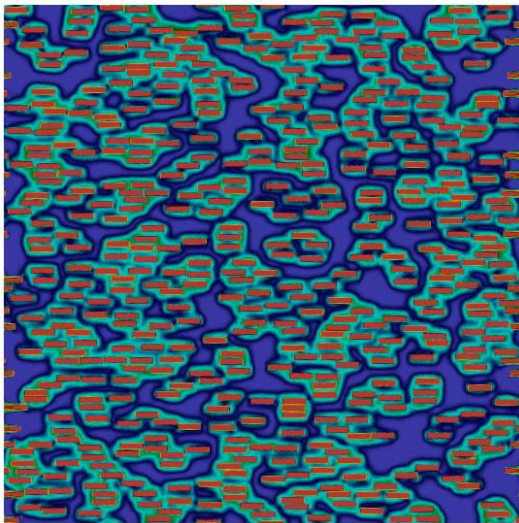
method            scotch;

// * * * * *
```

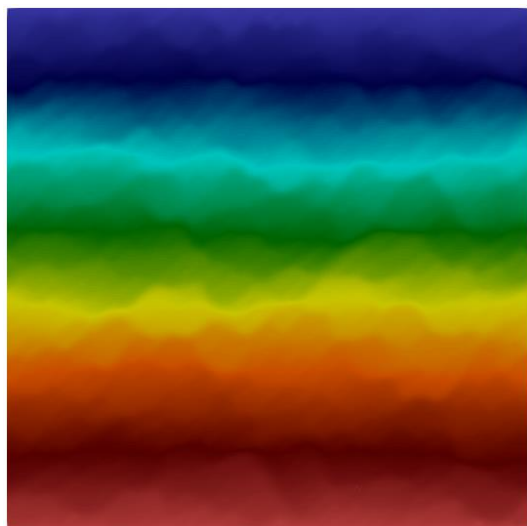
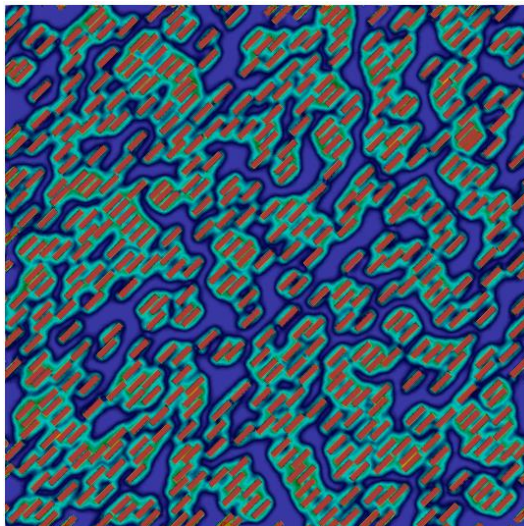
Παράρτημα Β

Στο παράρτημα αυτό παρουσιάζονται ενδεικτικά πεδία για την θερμική αγωγιμότητα και την θερμοκρασία, για τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν στο κεφάλαιο 5.

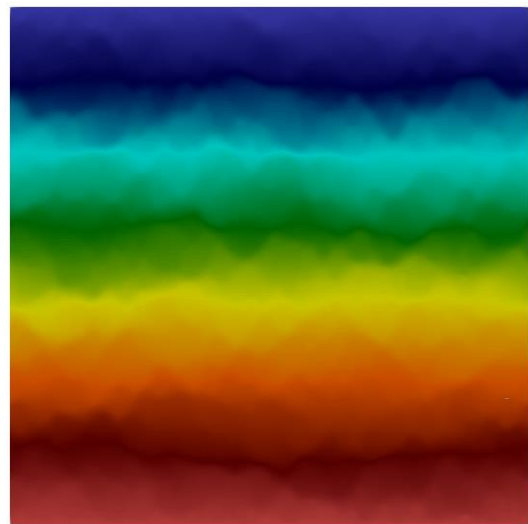
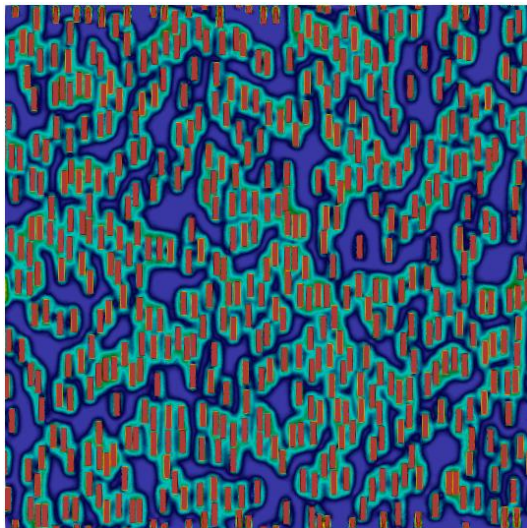
$\alpha=4$, $k_f/k_m=10$, $\alpha\phi=1$



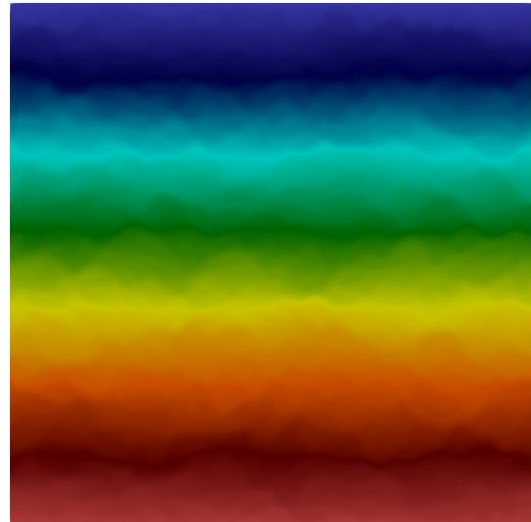
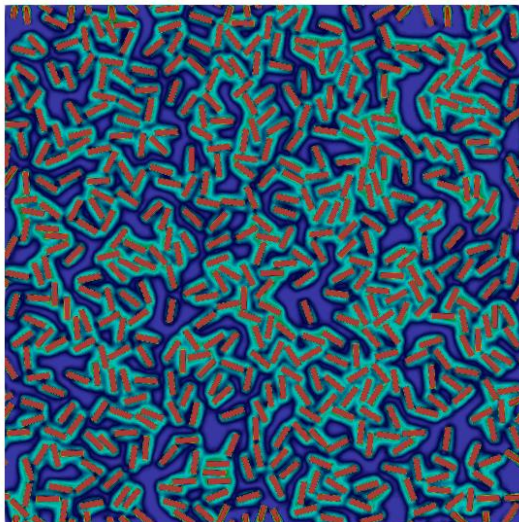
Γεωμετρία με προσανατολισμό $\theta=0$ και $\varepsilon=0$, πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (αριστερά) και θερμοκρασίας (δεξιά).



Γεωμετρία με προσανατολισμό $\theta=45$ και $\varepsilon=0$, πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (αριστερά) και θερμοκρασίας (δεξιά).

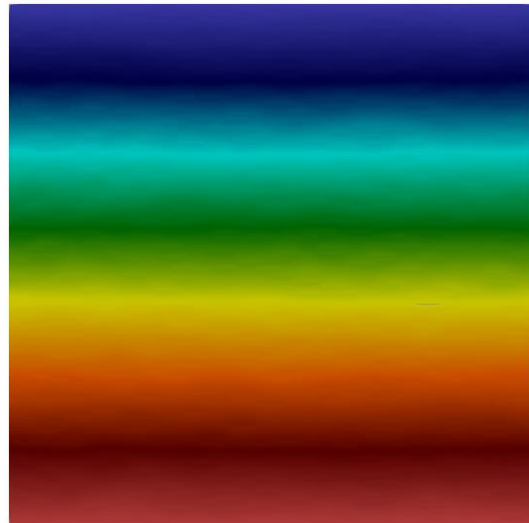
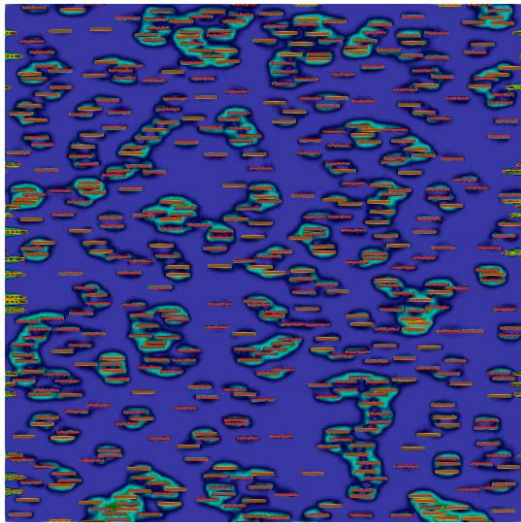


Γεωμετρία με προσανατολισμό $\theta=90$ και $\epsilon=0$, πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (αριστερά) και θερμοκρασίας (δεξιά).

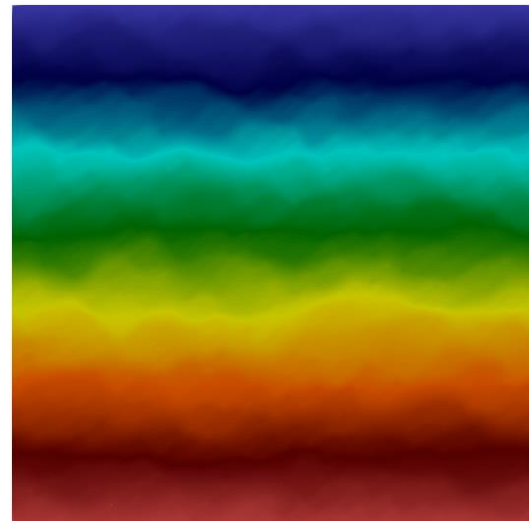
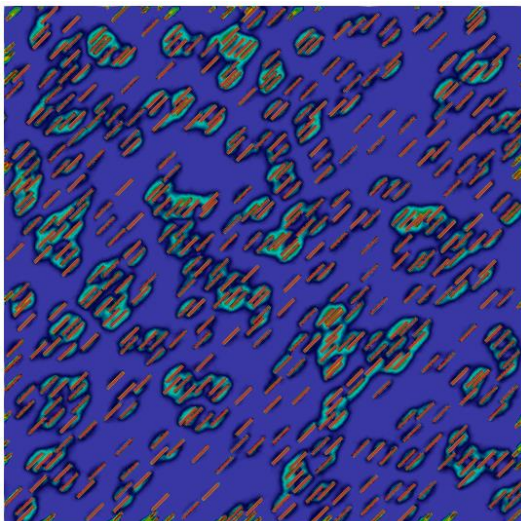


Γεωμετρία με προσανατολισμό $\theta=0$ και $\epsilon=90$, πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (αριστερά) και θερμοκρασίας (δεξιά).

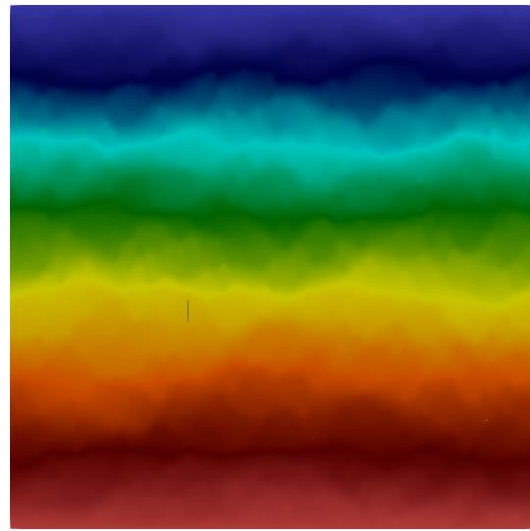
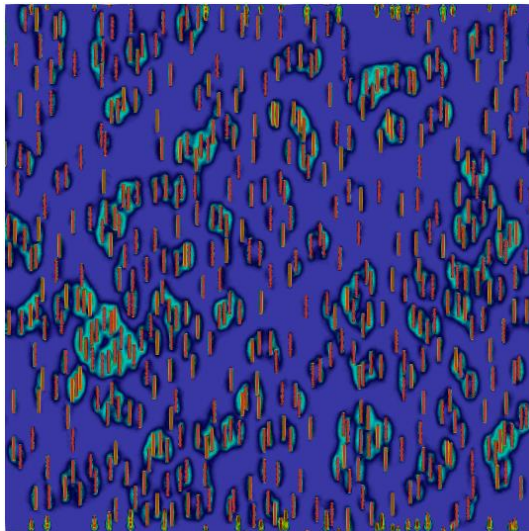
$\alpha=8$, $k_f/k_m=10$ και $\alpha\phi=1$



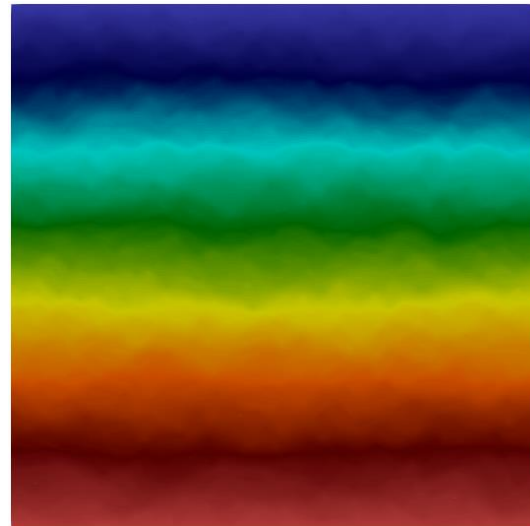
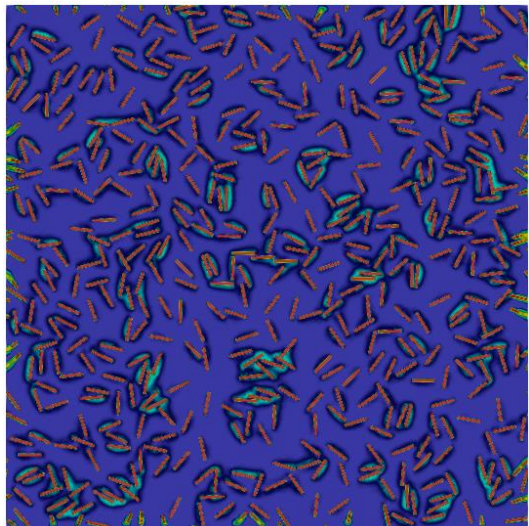
Γεωμετρία με προσανατολισμό $\theta=0$ και $\varepsilon=0$, πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (αριστερά) και θερμοκρασίας (δεξιά).



Γεωμετρία με προσανατολισμό $\theta=45$ και $\varepsilon=0$, πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (αριστερά) και θερμοκρασίας (δεξιά).



Γεωμετρία με προσανατολισμό $\theta=90$ και $\epsilon=0$, πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (αριστερά) και θερμοκρασίας (δεξιά).



Γεωμετρία με προσανατολισμό $\theta=0$ και $\epsilon=90$, πεδίο θερμικής αγωγιμότητας (αριστερά) και θερμοκρασίας (δεξιά).

Βιβλιογραφία

- [1] Κ. Παναγιώτου, Επιστήμη και Τεχνολογία Πολυμερών, Θεσσαλονίκη: Εκδόσεις Πήγασος, 2006.
- [2] A. Tsiantis και T. D. Papathanasiou, «A novel FastRSA algorithm: Statistical properties and evolution of microstructure,» *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, τόμ. 534, 2019.
- [3] A. Tsiantis, *Computational Study of Transport Phenomena in Flake Filled Composite Materials, PhD Thesis*, Volos, University of Thessaly, 2020.
- [4] Ν. Γαϊτάνης, «Διπλωματική Εργασία: Μετάδοση θερμότητας μέσω διφασικών στερεών υλικών - Υπολογιστική μελέτη,» Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Βόλος, 2022.
- [5] Oswald, Baur, Brinkmann, Oberbach και Schmachtenberg, *International Plastics Handbook*, Munich: Hanser Publishers, 2006.
- [6] D. R. Paul και L. M. Robeson, «Polymer nanotechnology: Nanocomposites,» *Polymer*, τόμ. 49, αρ. 15, pp. 3187-3204, 2008.
- [7] Y. A. Cengel και A. J. Ghajar, *Heat and Mass Transfer - Fundamentals and Applications*, New York: McGraw - Hill Education, 2015.
- [8] D. G. Cahill, P. V. Braun, G. Chen και a. et, «Nanoscale Thermal Transport II 2003-2012,» *Applied Physics Reviews*, τόμ. 1, αρ. 1, 2014.
- [9] A. J. Munnich και G. Chen, «Quantitative theory for interfacial thermal resistance,» *Applied Physics Letters*, τόμ. 91, αρ. 7, 2007.
- [10] C. Geuzaine και J. F. Remacle, «Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre and post processing facilities,» *Numerical methods in Engineering*, τόμ. 79, αρ. 11, 2009.
- [11] The OpenFoam Foundation, «<https://openfoam.org/>,» [Ηλεκτρονικό].
- [12] F. Moukalled , L. Mangani και M. Darwish, *The finite volume method in computational fluid dynamics: An advanced introduction with OpenFOAM and Matlab*, Switzerland: Springer , 2016.
- [13] P. J. Roache και P. M. Knupp, «Completed Richardson Extrapolation,» *Communications in Numerical Methods in Engineering*, τόμ. 9, αρ. 5, pp. 365-374, 1993.

- [14] P. J. Roache, *Fundamentals of computational fluid dynamics*, Albuquerque: Hermosa Publishers, 1998.
- [15] K. M. Shahil και A. A. Balandin, «Graphene - Multilayer Graphene nanocomposites as highly efficient thermal interphase materials,» *Nano Letters*, 1 2012.
- [16] A. Dobri, A. Tsiantis, T. D. Papathanasiou και Y. Wang, «Investigation of transient heat transfer in multi-scale PCM composites using a semi-analytical model,» *International Journal of Heat and Mass Transfer*, τόμ. 175, 2021.
- [17] J. Chen, X. Xu, J. Zhou και B. Li, «Interfacial thermal resistance: Past, present and future.,» *Reviews of Modern Physics*, τόμ. 94, 2022.
- [18] M. Ashby, H. Shercliff και D. Cebon, Υλικά: Μηχανική, Επιστήμη, Επεξεργασία και Σχεδιασμός, Αθήνα: Εκδόσεις Κλειδάριθμος, 2011.
- [19] A. Tsiantis και T. D. Papathanasiou, «A general scaling for the barrier factor of composites containing thin layered flakes of rectangular, circular and hexagonal shape,» *International Journal of Heat and Mass Transfer*, τόμ. 157, 2020.
- [20] T. D. Papathanasiou, A. Tsiantis και Y. Wang, «Obtaining the Dimensions and Orientation of 2D Rectangular Flakes from Sectioning Experiments in Flake Composites,» *Journal of Composites Science*, τόμ. 142, 2022.
- [21] F. Kargar, Z. Barani, R. Salgado, B. Debnath, J. S. Lewis, E. Aytan, R. K. Lake και A. A. Balandin, «Thermal percolation threshold and thermal properties of composites with high loading of graphene and boron nitride fillers,» *ACS Applied Materials and Interfaces*, αρ. 43, pp. 37555-37565, 10 2018.
- [22] T. D. Papathanasiou, A. Tsiantis και Y. Wang, «A novel method for the determination of the lateral dimensions of 2D rectangular flakes,» *Materials*, τόμ. 15, αρ. 4, 2 2022.
- [23] T. D. Papathanasiou, M. Diakonikolis και A. Tsiantis, «A gradient microstructure improves the barrier properties of flake - filled composite films: A computational study,» *Materials*, τόμ. 16, αρ. 4, 2023.
- [24] S. Zid, *Finite element modeling and experimental approach of gas transport in polymer-based multimaterials and complex systems*, Universite de Lyon, 2019.
- [25] J. Vlachopoulos και N. D. Polychronopoulos, *Understanding Rheology and Technology of Polymer Extrusion*, τόμ. 1, Canada: Polydynamics Inc., 2019.
- [26] A. Tarhini, A. Tehrani-Bagha, M. Kazan και B. Grady, «The effect of graphene flake size on the properties of graphene-based polymer composite films,» *Applied Polymer Science*, 8 2020.

- [27] Y. Zare και K. Y. Rhee, «Study on the effects of the Interphase Region on the network properties in polymer carbon nanotube nanocomposites,» *Polymers*, τόμ. 12, αρ. 1, 1 2020.
- [28] A. Bratovic, «Nanocomposite hydrogels reinforced by carbon nanotubes,» *Engineering Research & Applications*, τόμ. 10, αρ. 5, pp. 30-41, 5 2020.
- [29] R. K. Satankar, N. Sharma, P. V. Katariya και et al., «Computational modeling and analysis of thermoacoustic behavior of carbon nanotube-reinforced plant fibre epoxy composite - An extensive review,» *Materials Today Commynications*, τόμ. 36, 2023.
- [30] H. Kim, A. Abdala και C. W. Macosco, «Graphene/polymer nanocomposites,» *Macromolecules*, τόμ. 43, αρ. 16, pp. 6515-6530, 2010.
- [31] X. Zhou και et al., «High thermal conductivity polymer composites with low loading of boron nitride nanosheets,» *ACS Applied Materials & Interfaces*, τόμ. 5, αρ. 17, pp. 8381-8388, 2013.