



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
ΤΜΗΜΑ ΠΟΛΙΤΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**“Αριθμητικό μοντέλο διάδοσης ρωγμών σε υλικά με
τετραγωνικούς κρυσταλλίτες”**

ΝΙΚΟΛΑΟΣ ΝΑΣΙΚΑΣ

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μέρους των απαιτήσεων για την απόκτηση του Διπλώματος
Πολιτικού Μηχανικού

Βόλος, Ιούνιος 2018

© 2018 Νικόλαος Νασίκας

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

Εγκρίθηκε από τα Μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:

Πρώτος εξεταστής: Δρ. Θεόδωρος Καρακασίδης (Επιβλέπων)

Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Υπογραφή:

Δεύτερος εξεταστής: Δρ. Δημήτριος Σοφιανόπουλος

Καθηγητής, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Υπογραφή:

Τρίτος εξεταστής: Δρ. Χρήστος Παπακωνσταντίνου

Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Υπογραφή:

Ευχαριστίες

Πρώτα απ' όλα, θέλω να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα της διπλωματικής εργασίας μου, Αναπληρωτή Καθηγητή κ. Θεόδωρο Καρακασίδη, για την πολύτιμη βοήθεια και καθοδήγησή του κατά τη διάρκεια της δουλειάς μου. Επίσης, είμαι ευγνώμων στα υπόλοιπα μέλη της εξεταστικής επιτροπής της διπλωματικής εργασίας μου, Επίκουρο Καθηγητή κ. Χρήστο Παπακωνσταντίνου και Καθηγητή κ. Δημήτριο Σοφιανόπουλο για την προσεκτική ανάγνωση της εργασίας μου και για τις πολύτιμες υποδείξεις τους. Ευχαριστώ το συνάδελφο και φίλο μου Κωνσταντίνο Αναγνωστόπουλο, για τις εποικοδομητικές συζητήσεις και τις ενδιαφέρουσες ιδέες που αναλύαμε κατά τις συζητήσεις μας σχετικά με το επιστημονικό κομμάτι της διπλωματικής μας. Θα ήθελα να ευχαριστήσω και τη συνάδελφο και φίλη μου Αθηνά Αγγελή για την υποστήριξη της, ιδιαίτερα κατά τη διάρκεια του τελευταίου μήνα της προσπάθειας μου.

Επίσης ευχαριστώ τα αδέρφια μου Αλέξανδρο Νασίκα και Βασίλειο Νασίκα για την ηθική τους υποστήριξη και για την κατανόησή τους, ιδιαίτερα κατά τη διάρκεια των τελευταίων μηνών της προσπάθειας μου. Πάνω απ' όλα, είμαι ευγνώμων στους γονείς μου, Στέφανο Νασίκα και Ροδάνθη Σκούφα για την ολόψυχη αγάπη και υποστήριξή τους όλα αυτά τα χρόνια. Αφιερώνω αυτή την εργασία στην μητέρα μου και στον πατέρα μου.

Νικόλαος Νασίκας

Αριθμητικό μοντέλο διάδοσης ρωγμών σε υλικά με τετραγωνικούς κρυσταλλίτες

Νικόλαος Νασίκας

Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, 2018

Επιβλέπων Καθηγητής: Θεόδωρος Καρακασιδής, Αναπληρωτής Καθηγητής Εφαρμοσμένης Φυσικής, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, Π.Θ.

Περίληψη

Αντικείμενο της παρούσας εργασίας είναι η κατασκευή ενός αριθμητικού μοντέλου, πολλαπλών κλιμάκων, προσομοίωσης του φαινομένου της διάδοσης ρωγμών σε νανοσύνθετα υλικά (*nano – composite materials*). Το μοντέλο αποτελεί μία πρώτη προσέγγιση και έχει βασιστεί στη θεωρία ενός δυσδιάστατου αναλυτικού μοντέλου για τον τρόπο διάδοσης ρωγμών παρουσία προσμίξεων. Το μοντέλο αποτελείται από δύο αλγοριθμικές ροές οι οποίες κωδικοποιήθηκαν σε περιβάλλον Matlab. Αρχικά παρουσιάζεται αναλυτικά η μεθοδολογία που χρησιμοποιήθηκε για την κατασκευή του μοντέλου και η θεωρία στην οποία βασίστηκε. Στη συνέχεια έγινε στατιστική ανάλυση για τον έλεγχο ορθότητας του μοντέλου. Στα αποτελέσματα παρατηρήθηκε ο τρόπος με τον οποίο επιδρούν διάφορες παράμετροι στο μήκος και την ταχύτητα διάδοσης της ρωγμής. Τέλος παρουσιάζονται τα συμπεράσματα της εργασίας και διατυπώνονται προτάσεις για περαιτέρω έρευνα.

Numerical model of crack propagation in materials embedded with square inclusions

Nikolaos Nasikas

University of Thessaly, Department of Civil Engineering, 2018

Supervisor: Theodoros Karakasidis, Associate Professor of Applied Physics, Department of Civil Engineering, UTH

Abstract

The object of the present work is the construction of a multi-scale numerical model that simulates crack propagation in nano-composite materials. The current model is a first approximation and it is based on the theory of a 2D analytic model on the way cracks propagate in presence of inclusions. The model consists of two algorithmic flows, of whose the code has been written in Matlab. At first the methodology that has been used is presented, as well as the theory that the model has been based on. Furthermore some basic statistical analysis has been done to prove the statistical accuracy of the model. In the results section, the way some parameters of the model affect the length and the velocity of the crack, has been observed. In the final section the conclusion is being presented, as well as ideas and suggestions for further research.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

1.ΕΙΣΑΓΩΓΗ	- 1 -
2.ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ	- 4 -
2.1.ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑΣ ΨΗΦΙΑΚΟΥ ΔΟΚΙΜΙΟΥ.....	- 4 -
2.1.1.ΑΛΓΟΡΙΘΜΙΚΗ ΡΟΗ ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑΣ ΤΟΥ ΨΗΦΙΑΚΟΥ ΔΟΚΙΜΙΟΥ	- 8 -
2.2.ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΡΩΓΜΗΣ.....	- 10 -
2.2.1.ΑΛΓΟΡΙΘΜΙΚΗ ΡΟΗ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΤΗΣ ΡΩΓΜΗΣ	- 21 -
3.ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΟΣ ΕΛΕΓΧΟΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ	- 25 -
3.1.ΑΝΑΛΥΣΗ ΥΠΟΛΟΓΙΖΟΜΕΝΩΝ ΜΕΓΕΘΩΝ	- 25 -
3.2.1.ΕΛΕΓΧΟΣ ΣΥΓΚΛΙΣΗΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ	- 28 -
3.3.1.ΕΛΕΓΧΟΣ ΜΕΘΟΔΩΝ ΔΕΙΓΜΑΤΟΛΗΨΙΑΣ	- 34 -
3.4.1.ΕΛΕΓΧΟΣ ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΦΑΙΝΟΜΕΝΩΝ ΜΕΓΕΘΟΥΣ ΜΗΤΡΑΣ.....	- 36 -
3.5.ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΜΕΣΟΥ-ΕΝΕΡΓΟΥ ΜΗΚΟΥΣ ΚΑΙ ΜΕΣΗΣ-ΕΝΕΡΓΗΣ ΤΑΧΥΤΗΤΑΣ.....	- 41 -
4.ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ	- 49 -
4.1.ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ.....	- 50 -
4.2.ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΥ Pf	- 54 -
4.3.ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ	- 60 -
4.4.ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΕΝΕΡΓΕΙΩΝ ΣΥΝΔΕΣΗΣ.....	- 68 -
4.4.ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΜΕΓΕΘΟΥΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΤΩΝ.....	- 73 -
5.ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ-ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ	- 81 -
5.1.ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	- 81 -
5.2.ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ ΓΙΑ ΜΕΛΟΝΤΙΚΗ ΕΡΕΥΝΑ.....	- 87 -

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΣΧΗΜΑΤΩΝ

Ενότητα 2

Σχήμα 2.1 Κοντινή απεικόνιση ψηφιακού δοκιμίου.....	- 5 -
Σχήμα 2.2 Ροή αλγόριθμου δημιουργίας ψηφιακού δοκιμίου	- 9 -
Σχήμα 2.3 Πρώτη περίπτωση διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής.....	- 14 -
Σχήμα 2.4 Δεύτερη περίπτωση διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής	- 15 -
Σχήμα 2.5 Τρίτη περίπτωση διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής	- 16 -
Σχήμα 2.6 Κοντινή απεικόνιση διάδοσης ρωγμής μέσα από κρυσταλλίτη	- 19 -
Σχήμα 2.7 Αρχικές θέσεις εκκίνησης της διάδοσης της ρωγμής	- 21 -
Σχήμα 2.8 Ροή αλγόριθμου διάδοσης της ρωγμής.....	- 24 -

Ενότητα 3

Σχήμα 3.1 Σχηματική απεικόνιση του μέσου μήκους της πορείας μίας ρωγμής.....	- 26 -
--	--------

Ενότητα 4

Σχήμα 4.1 Transgranular διάδοση ρωγμής για θερμοκρασία $KT=1$	- 67 -
Σχήμα 4.2 Intergranular διάδοση ρωγμής για θερμοκρασία $KT=0.1$	- 67 -
Σχήμα 4.3 Διάδοση ρωγμής σε αδιατάρακτη ευθεία πορεία δια μέσου κρυστάλλων μεγέθους $s = 3$ και $s = 6$ τοποθετημένων σε σειρά.....	- 76 -

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

Ενότητα 2

Πίνακας 2.1 Παράμετροι εισόδου του αλγορίθμου δημιουργίας ψηφιακού δοκιμίου	- 5 -
Πίνακας 2.2 Υπολογιστικοί χρόνοι πειραμάτων προσομοίωσης.....	- 11 -
Πίνακας 2.3 Παράμετροι εισόδου αλγορίθμου διάδοσης της ρωγμής.....	- 11 -
Πίνακας 2.4 Πίνακας εξισώσεων πιθανοτήτων, πρώτης περίπτωσης διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής	- 15 -
Πίνακας 2.5 Πίνακας εξισώσεων πιθανοτήτων, δεύτερης περίπτωσης διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής	- 16 -
Πίνακας 2.6 Πίνακας εξισώσεων πιθανοτήτων, τρίτης περίπτωσης διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής	- 17 -

Ενότητα 3

Πίνακας 3.1 Υπολογιζόμενα μεγέθη του αλγορίθμου διάδοσης της ρωγμής.....	- 25 -
Πίνακας 3.2 Στοιχεία δοκιμών ελέγχου σύγκλισης.....	- 28 -
Πίνακας 3.3 Αποτελέσματα σύγκλισης μήκους και ταχύτητας για $s = 3, Pf = 0.5$	- 30 -
Πίνακας 3.4 Αποτελέσματα σύγκλισης μήκους και ταχύτητας για $s = 3, Pf = 0.9$	- 30 -
Πίνακας 3.5 Αποτελέσματα σύγκλισης μήκους και ταχύτητας για $s = 6, Pf = 0.5$	- 31 -
Πίνακας 3.6 Αποτελέσματα σύγκλισης μήκους και ταχύτητας για $s = 6, Pf = 0.9$	- 31 -
Πίνακας 3.7 Στοιχεία δοκιμών ελέγχου μεθόδων δειγματοληψίας	- 34 -
Πίνακας 3.8 Αποτελέσματα επίδρασης των μεθόδων δειγματοληψίας στο μέσο μήκος και τη μέση ταχύτητα.....	- 34 -
Πίνακας 3.9 Αποτελέσματα επίδρασης των μεθόδων δειγματοληψίας στο ενεργό μήκος και στην ενεργή ταχύτητα	- 34 -

Πίνακας 3.10 Στοιχεία δοκιμών ελέγχου επίδρασης φαινομένων μεγέθους μήτρας.....	- 36 -
Πίνακας 3.11 Αποτελέσματα επίδρασης φαινομένων μεγέθους μήτρας μήκος και στην ταχύτητα για $c = 5\%$, $Pf = 0.5$	- 37 -
Πίνακας 3.12 Αποτελέσματα επίδρασης φαινομένων μεγέθους μήτρας στο μήκος και στην ταχύτητα για $c = 15\%$, $Pf = 0.5$	- 37 -
Πίνακας 3.13 Αποτελέσματα επίδρασης φαινομένων μεγέθους μήτρας στο μήκος και στην ταχύτητα για $c = 25\%$, $Pf = 0.5$	- 38 -
Πίνακας 3.14 Αποτελέσματα επίδρασης φαινομένων μεγέθους μήτρας στο μήκος και στην ταχύτητα για $c = 5\%$, $Pf = 0.9$	- 38 -
Πίνακας 3.15 Αποτελέσματα επίδρασης φαινομένων μεγέθους μήτρας στο μήκος και στην ταχύτητα για $c = 15\%$, $Pf = 0.9$	- 39 -
Πίνακας 3.16 Αποτελέσματα επίδρασης φαινομένων μεγέθους μήτρας στο μήκος και στην ταχύτητα για $c = 25\%$, $Pf = 0.9$	- 39 -
Πίνακας 3.17 Αποτελέσματα z-test για μέσο και ενεργό μήκος	- 48 -
Πίνακας 3.18 Αποτελέσματα z-test για μέση και ενεργή ταχύτητα	- 48 -

Ενότητα 4

Πίνακας 4.1 Στοιχεία δοκιμών ελέγχου επίδρασης ενέργειας σύνδεσης στοιχείων	- 68 -
Πίνακας 4.2 Δεδομένα πειραματικών δοκιμών, επίδρασης μεγέθους κρυσταλλιτών στο μέσο μήκος διάδοσης της ρωγμής.....	- 73 -

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΩΝ

Ενότητα 3

Διάγραμμα 3.1 Σύγκλιση μέσου μήκους για $c = 30\%$, $s = 3$, $Pf = 0.5$	- 33 -
Διάγραμμα 3.2 Ιστόγραμμα μέσου μήκους.....	- 42 -
Διάγραμμα 3.3 Ιστόγραμμα ενεργού μήκους.....	- 42 -
Διάγραμμα 3.4 Ιστόγραμμα μέσης ταχύτητας.....	- 43 -
Διάγραμμα 3.5 Ιστόγραμμα ενεργής ταχύτητας.....	- 43 -
Διάγραμμα 3.6 QQ Plot μέσου μήκους.....	- 44 -
Διάγραμμα 3.7 QQ Plot ενεργού μήκους.....	- 45 -
Διάγραμμα 3.8 QQ Plot μέσης ταχύτητας.....	- 45 -
Διάγραμμα 3.9 QQ Plot ενεργής ταχύτητας	- 46 -

Ενότητα 4

Διάγραμμα 4.1 Μέσο μήκος προς συγκέντρωση για $Pf = 0.9$, $s = 6$, $KT = 1$, $p = 2$, $E = 1, 1.5, 2$	- 50 -
Διάγραμμα 4.2 Μέση ταχύτητα προς συγκέντρωση για $Pf = 0.9$, $s = 6$, $KT = 1$, $p = 2$, $E = 1, 1.5, 2$	- 51 -
Διάγραμμα 4.3 Ενεργό μήκος προς συγκέντρωση για $Pf = 0.9$, $s = 6$, $KT = 1$, $p = 2$, $E = 1, 1.5, 2$	- 52 -
Διάγραμμα 4.4 Ενεργή ταχύτητα προς συγκέντρωση για $Pf = 0.9$, $s = 6$, $KT = 1$, $p = 2$, $E = 1, 1.5, 2$	- 53 -
Διάγραμμα 4.5 Μέσο μήκος προς Pf για $s = 6$, $KT = 1$, $p = 1$, $E = 1, 1.5, 1.5$, $c = 30\%$	- 54 -
Διάγραμμα 4.6 Μέση ταχύτητα προς Pf για $s = 6$, $KT = 1$, $p = 1$, $E = 1, 1.5, 1.5$, $c = 30\%$	- 56 -
Διάγραμμα 4.7 Ενεργό μήκος προς Pf για $s = 6$, $KT = 1$, $p = 1$, $E = 1, 1.5, 1.5$, $c = 30\%$	- 57 -

Διάγραμμα 4.8 Ενεργή ταχύτητα προς Pf για $s = 6, KT = 1, p = 1, E = 1, 1.5, 1.5, c = 30\%$...	- 58 -
Διάγραμμα 4.9 Μέσο μήκος προς θερμοκρασία για $Pf = 0.9, s = 6, p = 1, c = 30\%, E = 1, 1.5, 1.5$ και $E = 1, 2, 3$	- 60 -
Διάγραμμα 4.10 Μέση ταχύτητα προς θερμοκρασία για $Pf = 0.9, s = 6, p = 1, c = 30\%, E = 1, 1.5, 1.5$ και $E = 1, 2, 3$	- 62 -
Διάγραμμα 4.11 Ενεργό μήκος προς θερμοκρασία για $Pf = 0.9, s = 6, p = 1, c = 30\%, E = 1, 1.5, 1.5$ και $E = 1, 2, 3$	- 63 -
Διάγραμμα 4.12 Ενεργή ταχύτητα προς θερμοκρασία για $Pf = 0.9, s = 6, p = 1, c = 30\%, E = 1, 1.5, 1.5$ και $E = 1, 2, 3$	- 64 -
Διάγραμμα 4.13 Μέσος όρος σπασμένων κρυσταλλιτών προς θερμοκρασία για $Pf = 0.9, s = 6, p = 1, c = 30\%,$ $E = 1, 1.5, 1.5$ και $E = 1, 2, 3$	- 66 -
Διάγραμμα 4.14 Μέσο μήκος προς $Einc$ και Egb	- 69 -
Διάγραμμα 4.15 Μέσο μήκος προς Egb	- 70 -
Διάγραμμα 4.16 Μέση ταχύτητα προς Egb	- 71 -
Διάγραμμα 4.17 Ενεργό μήκος προς Egb	- 71 -
Διάγραμμα 4.18 Ενεργή ταχύτητα προς Egb	- 72 -
Διάγραμμα 4.19 Μέσο μήκος προς μέγεθος κρυστάλλων για τα δεδομένα της 1 ^{ης} δοκιμής, $c = 30\%$, σταθερές ενέργειες.....	- 75 -
Διάγραμμα 4.20 Μέσο μήκος προς μέγεθος κρυστάλλων για τα δεδομένα της 2 ^{ης} δοκιμής, $c = 30\%$, μεταβλητές ενέργειες	- 77 -
Διάγραμμα 4.21 Μέσο μήκος προς μέγεθος κρυστάλλων για τα δεδομένα της 3 ^{ης} δοκιμής, $c = 10\%$, μεταβλητές ενέργειες	- 79 -
Διάγραμμα 4.22 Μέσο μήκος προς μέγεθος κρυστάλλων για τα δεδομένα της 4 ^{ης} δοκιμής, $c = 10\%$, μεταβλητές ενέργειες	- 80 -

1.ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Τα τελευταία χρόνια η μελέτη υλικών με προσμίξεις διαφορετικής σύστασης (*inclusions*) συγκεντρώνει μεγάλο ενδιαφέρον (Bitzek, Kermode & Gumbsch, 2015). Αυτό συμβαίνει διότι κοινά υλικά μπορούν να αποκτούν νέες μηχανικές ιδιότητες με την εισαγωγή των προσμίξεων, ενώ είναι εφικτή η κατασκευή υλικών με συγκεκριμένες επιθυμητές ιδιότητες. Σε πολλές περιπτώσεις οι διαστάσεις των προσμίξεων φτάνουν σε πολύ χαμηλή κλίμακα μερικών μικρομέτρων ή ακόμα πιο χαμηλή μερικών νανομέτρων, οπότε τα υλικά ονομάζονται νανοσύνθετα (*nano – composite materials*).

Έχει αποδειχθεί ότι αλλάζοντας τη μορφολογία και τη μικροδομή των υλικών με συγκεκριμένο τρόπο, αλλάζει και ο τρόπος θραύσης (Zhang, Sun, Fu & Du, 2005). Οι διαφορετικές μορφές θραύσης μπορούν να ερμηνευτούν και ως συγκεκριμένες μηχανικές ιδιότητες των υλικών, όπως η αντοχή και η σκληρότητα (Karakasidis & Charitidis, 2011). Ο κύριος συνδετικός κρίκος μεταξύ της θραύσης των υλικών και των μηχανικών ιδιοτήτων τους είναι το μήκος διάδοσης των ρωγμών.

Οι προσμίξεις μπορούν να επηρεάσουν σημαντικά το ενεργό και μέσο μήκος διάδοσης, αλλά και την ενεργή και μέση ταχύτητα διάδοσης βάσει δύο μηχανισμών. Οι συγκεκριμένοι μηχανισμοί έχουν να κάνουν με τη συνάντηση κρυσταλλιτών κατά μήκος της τροχιάς της ρωγμής. Η ρωγμή μπορεί είτε (α) να διαπεράσει την πρόσμιξη σπάζοντας τη (*transgranular propagation*), ή (β) να διαδοθεί δια μέσω της περιφέρειας της πρόσμιξης, οδηγώντας σε (*intergranular propagation*). Πιο συγκεκριμένα στην περίπτωση της (*intergranular*) διάδοσης, η ρωγμή τείνει να διαδοθεί κατά μήκος της διεπιφάνειας μεταξύ των προσμίξεων και της άμορφης μήτρας. Η συγκεκριμένη επιφάνεια (*grain boundary*) διαφοροποιείται συγκριτικά με την άμορφη μήτρα και τους κρυσταλλίτες, ως προς την ενέργεια σύνδεσης, και αποτελεί ξεχωριστή ζώνη (Karakasidis & Charitidis, 2011).

Οι τρόποι που μπορεί να μελετήσει κάποιος το συγκεκριμένο φαινόμενο είναι δύο. Πειραματικά χρησιμοποιούνται μέθοδοι διάδοσης ρωγμών όπως διάφορα τεστ σκληρομέτρησης όπως για παράδειγμα τύπου Vicker. Τα δοκίμια έχουν κατασκευαστεί στο εργαστήριο υπό ελεγχόμενες συνθήκες με συγκεκριμένες μορφολογικές, χημικές και ενεργειακές ιδιότητες. Ενώ χρησιμοποιούνται και διάφορες οπτικές μέθοδοι, όπως οπτική μικροσκοπία για την παρατήρηση του φαινομένου (Charitidis, Karakasidis, Kanouras & Karakostas, 2007).

Υπολογιστικά μοντέλα χρησιμοποιούνται επίσης για τη μελέτη του φαινομένου. Οι δύο κυρίαρχες κατηγορίες είναι τα μοντέλα πεπερασμένων στοιχείων και τα μοντέλα προσομοίωσης μοριακής δυναμικής σε ατομικό επίπεδο (Bitzek κ.ά., 2015). Τα πρώτα συναντούν προβλήματα κλίμακας, καθώς χρησιμοποιούν τη θεωρία του συνεχούς μέσου. Για το λόγο αυτό η κλίμακα που μπορούν να φτάσουν χωρίς να παραβιάζουν τις αρχές της θεωρίας αυτής δεν είναι πολύ ικανοποιητική σε ορισμένες περιπτώσεις, όπου η μελέτη του φαινομένου σε ατομικό επίπεδο είναι αναγκαία. Τα δεύτερα αν και είναι πολύ αναλυτικά και με μεγάλη ακρίβεια, παρουσιάζουν μεγάλο χρονικό και υπολογιστικό κόστος κατά την υλοποίησή τους (Bitzek κ.ά., 2015).

Σύμφωνα με τα παραπάνω προκύπτει η ανάγκη δημιουργίας αριθμητικών μοντέλων προσομοίωσης, όπου να είναι αποδοτικά ως προς το χρονικό και υπολογιστικό κόστος, αλλά και να μπορούν να λαμβάνουν υπόψη με ικανοποιητική ακρίβεια τη διαφορετική συμπεριφορά και τα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα σε μικρή χωρική κλίμακα μέσα στο δοκίμιο. Προσπάθειες έχουν γίνει για να ξεπεραστούν τα προβλήματα αυτά μέσω του συνδυασμού των πεπερασμένων στοιχείων και της μοριακής δυναμικής σε ένα ενιαίο μοντέλο, αλλά χωρίς ιδιαίτερα θετικά αποτελέσματα καθώς ο συνδυασμός των δύο προσεγγίσεων παρουσιάζει δυσκολίες. Για το λόγο αυτό υιοθετείται σε πολλές περιοχές η ιεραρχική προσέγγιση πολλαπλών κλιμάκων (Karakasidis & Charitidis, 2011).

Για την κατασκευή του υπολογιστικού μοντέλου της εργασίας χρησιμοποιήθηκε η θεωρία ενός αναλυτικού μοντέλου για τον τρόπο διάδοσης ρωγμών παρουσία προσμίξεων (Argyrakis & Kehr, 1992), το οποίο φαίνεται να συμφωνεί με τα πειραματικά δεδομένα (Charitidis κ.ά., 2007). Το μοντέλο συνδυάστηκε επίσης με ένα μοντέλο περιπατητή, στο οποίο λαμβάνεται υπόψη και η διαφορετική ενεργειακή συμπεριφορά των προσμίξεων, της μήτρας και της διεπιφάνειας αυτών των δύο.

Στόχος της παρούσας εργασίας ήταν, το μοντέλο που κατασκευάστηκε να μπορεί να χρησιμοποιεί στοιχεία που προκύπτουν από αναλυτικούς υπολογισμούς μεγάλης ακρίβειας σε νάνο-κλίμακα ως παραμέτρους και να εξάγει με ικανοποιητική ακρίβεια και ταχύτητα, αποτελέσματα που ανάγονται στη νάνο, αλλά και μακρο-κλίμακα. Για την κατασκευή του μοντέλου της εργασίας έγιναν με ασφάλεια προσεγγίσεις ως προς τη γεωμετρία του προβλήματος, αλλά και τις ενεργειακές παραμέτρους.

Στην **ενότητα 2** αναλύεται εκτενώς η μεθοδολογία του μοντέλου και οι όποιες προσεγγίσεις έχουν γίνει. Στη συνέχεια ακολουθεί η **ενότητα 3**, όπου το μοντέλο ελέγχεται ως προς τη στατιστική συμπεριφορά του. Ακολουθούν τα αποτελέσματα στην **ενότητα 4**. Επιπρόσθετα στην **ενότητα 5** γίνεται μία συνολική αποτίμηση των αποτελεσμάτων και διατυπώνονται τα σχετικά συμπεράσματα, ενώ γίνονται προτάσεις για πιθανές βελτιώσεις και εφαρμογές του μοντέλου στο μέλλον.

2.ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ

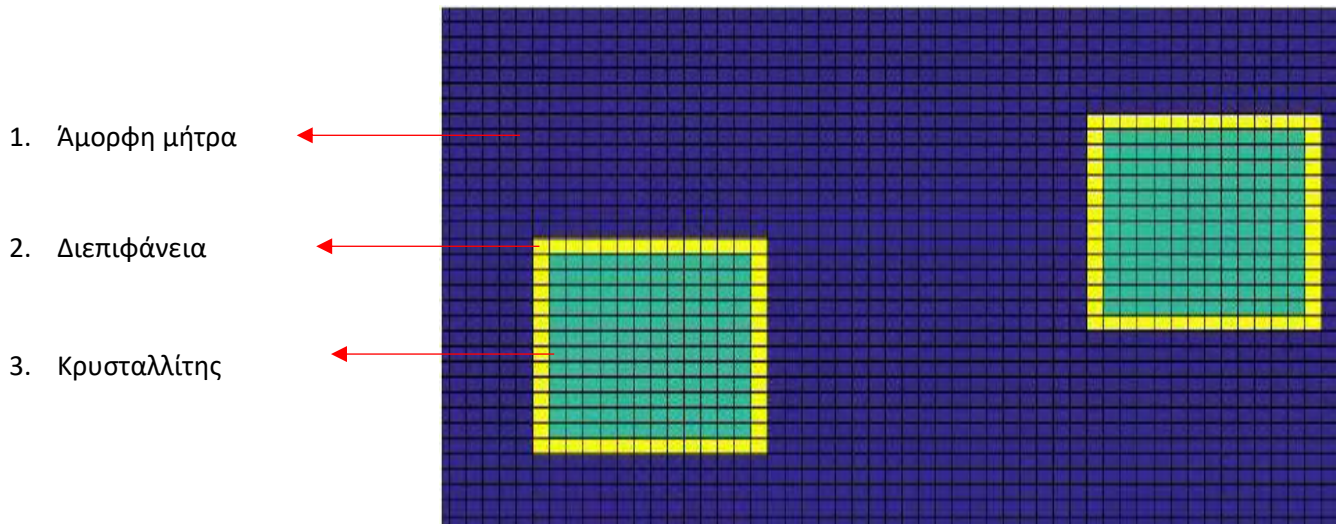
Στο πρώτο μέρος παρουσιάζεται ο αλγόριθμος που δημιουργεί τα ψηφιακά δοκίμια στα οποία γίνονται τα υπολογιστικά πειράματα προσομοίωσης, ενώ στο δεύτερο μέρος παρουσιάζεται λεπτομερώς ο αλγόριθμος διάδοσης της ρωγμής.

2.1.ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑΣ ΨΗΦΙΑΚΟΥ ΔΟΚΙΜΙΟΥ

Για την εκπόνηση της παρούσας εργασίας χρησιμοποιήθηκε το αριθμητικό υπολογιστικό περιβάλλον της Matlab, έκδοσης R2015a, χάριν πλεονεκτικότητας σε μητρικούς υπολογισμούς. Η λογική και η κωδικοποίηση των αλγορίθμων ξεκίνησε από το μηδέν χωρίς να υπάρχουν βοηθητικά στοιχεία από προηγούμενες σχετικές εργασίες. Το υπολογιστικό μοντέλο που κατασκευάστηκε αποτελείται από δύο αλγοριθμικές ροές. Η πρώτη χρησιμοποιήθηκε για να παρασκευαστούν τα ψηφιακά περιβάλλοντα διάδοσης ρωγμών, δηλαδή ψηφιακά δοκίμια και η δεύτερη για το φαινόμενο της διάδοσης των ρωγμών. Τα βασικά στοιχεία που μελετήθηκαν ήταν η επίδραση της θερμοκρασίας, της συγκέντρωσης και του μεγέθους των προσμίξεων στο ενεργό και μέσο μήκος διάδοσης της ρωγμής, αλλά και στην ενεργή και μέση ταχύτητα διάδοσης αυτής. Λόγο της πολυπλοκότητας του αλγορίθμου, αλλά και του μεγάλου υπολογιστικού όγκου, έγινε προσομοίωση ενός απλοποιημένου δυσδιάστατου μοντέλου (Charitidis κ.ά., 2007). Το ψηφιακό δοκίμιο προσομοιάστηκε με δυσδιάστατους τετραγωνικούς πίνακες, ενώ το κάθε δοκίμιο αποτελείται από τρεις κατηγορίες στοιχείων.

Κατά την ενσωμάτωση των προσμίξεων στο υλικό δημιουργούνται μικροί τετραγωνικοί κρύσταλλοι, διαστάσεων κάποιων νανομέτρων, ενώ παράλληλα δημιουργούνται και ζώνες στη διεπιφάνεια των κρυσταλλιτών αυτών και της άμορφης μήτρας. Βάση πειραματικών αποτελεσμάτων όπου οι κρυσταλλίτες φαίνεται να είχαν ρομβοειδές σχήμα (Charitidis κ.ά., 2007), αλλά και χάριν ευκολίας οι κρυσταλλίτες προσομοιάστηκαν σαν τετραγωνικοί. Κάθε ψηφιακό δοκίμιο αποτελείται από τρεις κωδικούς αριθμούς σε όλη την έκταση του, όπου ο καθένας αντιστοιχεί σε διαφορετικές ιδιότητες των στοιχείων που τα διέπουν. Μία σχηματική απεικόνιση του ψηφιακού δοκιμίου δίνεται στο *σχήμα 2.1*.

Ο αλγόριθμος κατασκευής των ψηφιακών δοκιμίων λαμβάνει υπόψιν βασικά χαρακτηριστικά που μπορούν να αναλυθούν και στην πραγματικότητα. Δηλαδή βάση των παραμέτρων που μπορούν να αλλάζουν κατά επιθυμία του ερευνητή, στην πραγματικότητα στο εργαστήριο, όπως επιθυμητό πάχος κρυστάλλων ή συγκέντρωση πρόσμιξης, στήθηκε και ο συγκεκριμένος αλγόριθμος (Charitidis κ.ά., 2007). Στον πίνακα 2.1 δίνονται αναλυτικά οι παράμετροι αυτοί.



Σχήμα 2.1 Κοντινή απεικόνιση ψηφιακού δοκιμίου

Πίνακας 2.1 Παράμετροι εισόδου του αλγορίθμου δημιουργίας ψηφιακού δοκιμίου

<i>n</i>	διάσταση ψηφιακού δοκιμίου
<i>c</i>	συγκέντρωση πρόσμιξης
<i>s</i>	πλάτος κρυστάλλου
<i>sd</i>	τυπική απόκλιση πλάτους κρυστάλλου
<i>p</i>	πλάτος διεπιφάνειας

Όπως και στην πραγματικότητα κατά την παραγωγή πειραματικών δοκιμίων είναι εφικτό το μέσο πάχος των κρυστάλλων να είναι συγκεκριμένο. Το μοντέλο δίνει τη δυνατότητα στο χρήστη να επιλέξει το κύριο μέγεθος κρυστάλλου που θέλει να επικρατεί ποσοστιαία μέσα στο δοκίμιο. Δηλαδή μπορεί να επιλέξει και την τυπική απόκλιση του πάχους των κρυστάλλων, αλλά και το ποσοστό της κάθε ομάδας διαφορετικού πάχους κρυστάλλου ως προς το σύνολο των κρυστάλλων, που θα υπάρχει μέσα στο δοκίμιο.

Η κατασκευή του ψηφιακού δοκιμίου όσο αφορά τις θέσεις τοποθέτησης των κρυσταλλιτών μέσα σε αυτό αλλά και το πάχος που θα έχουν κάθε φορά είναι πιθανοτικά δεσμευμένα γεγονότα, ως προς τις παραμέτρους που αναφέρθηκαν παραπάνω. Χρησιμοποιήθηκε η ενσωματωμένη συνάρτηση **rand(1)** του προγράμματος για την παραγωγή τυχαίων αριθμών. Η συγκεκριμένη συνάρτηση χρησιμοποιεί την ομοιόμορφη κατανομή πιθανοτήτων και παράγει αριθμούς μέσα στο διάστημα $0 \div 1$. Εξαιτίας της μεγάλης δέσμευσης και αλληλοεξάρτησης των τυχαίων γεγονότων το πρόβλημα παρουσιάστηκε πιο δύσκολο απ' ότι θα περίμενε κάποιος. Η δυσκολία ήταν να κατασκευαστεί ο πίνακας με τα επιθυμητά χαρακτηριστικά, όσο αφορά τα μεγέθη και τις αναλογίες των κρυσταλλιτών και των διεπιφανειών, σε σχέση με την επιθυμητή συγκέντρωση. Κανείς θα χρησιμοποιούσε μία απλοϊκή εξίσωση για τον έλεγχο τοποθέτησης κρυστάλλων της μορφής **if τυχαίος αριθμός $\leq c \rightarrow$ τοποθέτησε κρυσταλλίτη**. Μία τέτοια λύση όμως δεν έδινε το επιθυμητό αποτέλεσμα. Για το λόγο αυτό προτάθηκε η εξίσωση 2.1.

$$random \leq \left(\frac{c}{100} \right) \left(1 - \left(\frac{Numb_{inc} + Numb_{gb}}{n^2} \right) \right) \quad (2.1)$$

Όπου **random** είναι το αποτέλεσμα της συνάρτησης παραγωγής τυχαίων αριθμών που χρησιμοποιήθηκε, όπου **c** είναι η επιθυμητή συγκέντρωση, **n** η διάσταση του πίνακα-δοκιμίου, **Numb_{inc}** ο αριθμός των στοιχείων κρυσταλλίτη που υπάρχουν μέσα στο δοκίμιο σε κάθε βήμα και **Numb_{gb}** αντίστοιχα ο αριθμός των στοιχείων διεπιφάνειας.

Η εξίσωση αυτή λαμβάνει υπόψη τη δυναμικότητα του προβλήματος. Σε κάθε βήμα δηλαδή που τοποθετείται κρυσταλλίτης η συγκέντρωση που έχει το δοκίμιο αλλάζει. Παρ' όλα αυτά η τελική συγκέντρωση αν και διορθώθηκε αρκετά συγκριτικά της απλοϊκής εξίσωσης που χρησιμοποιήθηκε αρχικά, πάλι παρουσίαζε σημαντικές αποκλίσεις. Το πρόβλημα αποδόθηκε στην ισχυρή δέσμευση των πολλών πιθανοτικών γεγονότων. Καθώς το πρόβλημα ήταν αρκετά πολύπλοκο και απαιτούσε αναλυτική λύση, αλλά και επειδή θα χρειαζόταν αρκετός χρόνος για την επίλυση του, ενώ άλλα σημεία ήταν μείζονος σημασίας, εισήχθη ένας εμπειρικός συντελεστής μετασχηματίζοντας την *εξίσωση 2.1* στην *εξίσωση 2.2*.

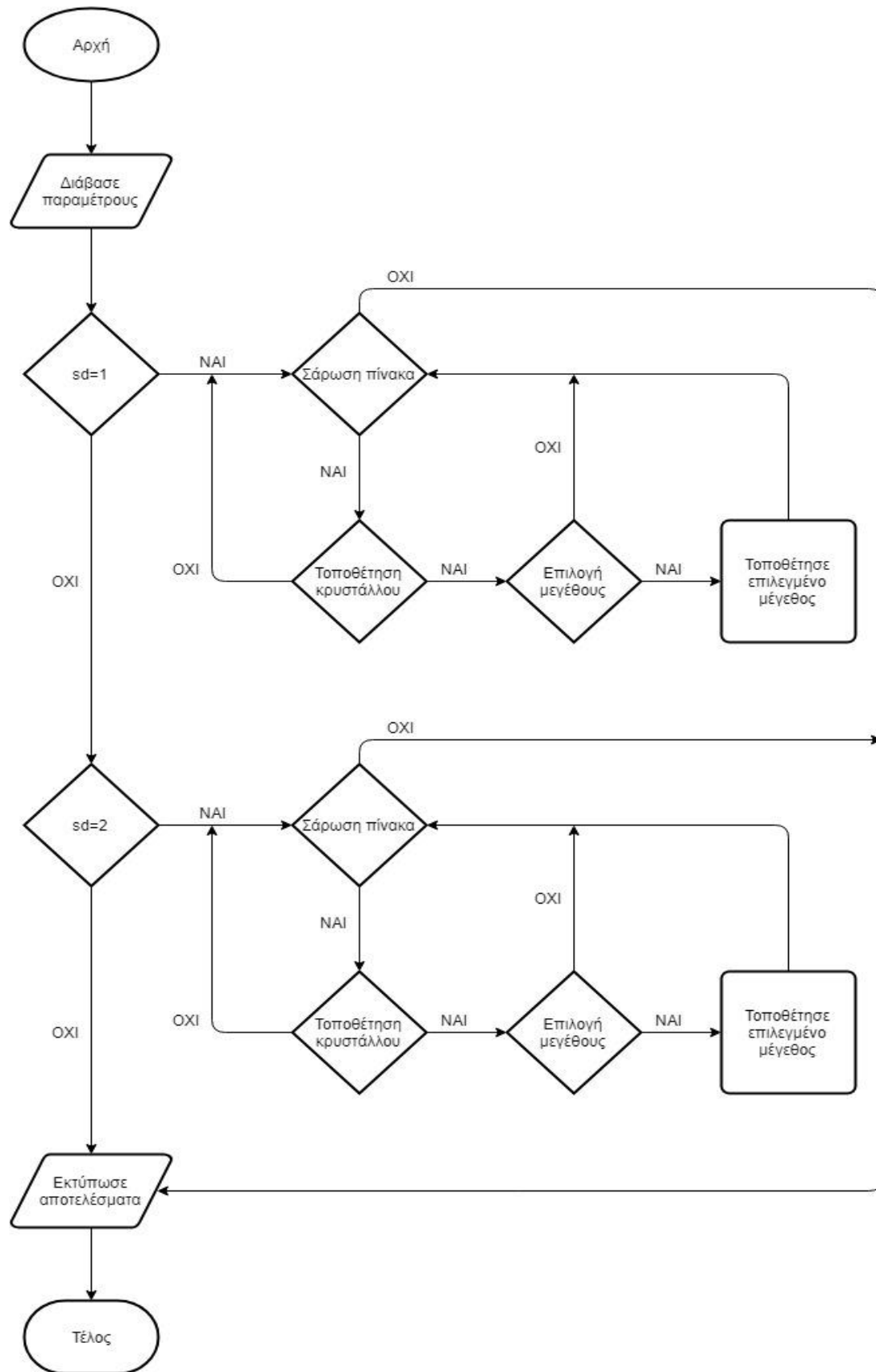
$$random \leq \frac{1}{a} \left(\frac{c}{100} \right) \left(1 - \left(\frac{Numb_{inc} + Numb_{gb}}{n^2} \right) \right) \quad (2.2)$$

Όπου *a* είναι ο εμπειρικός συντελεστής. Ο συντελεστής *a* αλλάζει για τις διάφορες παραμέτρους του πίνακα 2.1 που εισάγονται κάθε φορά στον αλγόριθμο και υπολογίζεται ξεχωριστά για κάθε περίπτωση ύστερα από μία σειρά δοκιμαστικών επαναληπτικών υλοποιήσεων και προσαρμογή των εκάστοτε δεδομένων.

2.1.1. ΑΛΓΟΡΙΘΜΙΚΗ ΡΟΗ ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑΣ ΤΟΥ ΨΗΦΙΑΚΟΥ ΔΟΚΙΜΙΟΥ

Η λογική της ροής του αλγόριθμου ξεκινάει με τη συγκέντρωση και ανάγνωση των παραμέτρων που έχει δώσει ο χρήστης. Στη συνέχεια χωρίζεται σε δύο βασικές διαδρομές βάση της παραμέτρου sd . Όπως αναφέρθηκε νωρίτερα η συγκεκριμένη παράμετρος δίνει την τυπική απόκλιση του πάχους των κρυσταλλινών που θα παρουσιάζονται μέσα στο δοκίμιο. Ο αλγόριθμος για τις ανάγκες της παρούσας εργασίας έχει γραφεί ώστε να δέχεται τιμές $sd = 1$ ή $sd = 2$. Εύκολα με μία μικρή προσαρμογή, ο κώδικας μπορεί να επεκταθεί ώστε να λαμβάνει οποιαδήποτε τιμή του συγκεκριμένου συντελεστή. Στη συνέχεια εισάγεται ένας βρόγχος σάρωσης του πίνακα και ακολουθεί ο επόμενος έλεγχος. Αρχικά παράγεται ένας τυχαίος αριθμός, βάση της ενσωματωμένης συνάρτησης που αναφέρθηκε προηγουμένως, ο οποίος συγκρίνεται με τη δυναμική συγκέντρωση, χρησιμοποιώντας την *εξίσωση 2.2* για να αποφασιστεί αν πρέπει να τοποθετηθεί ή όχι κρύσταλλος. Αν κριθεί ότι πρέπει να εισαχθεί κρύσταλλος ο αλγόριθμος συνεχίζει στον επόμενο έλεγχο μεγέθους. Αντιθέτως αν ο έλεγχος είναι αρνητικός ο αλγόριθμος επιστρέφει στην αρχή του βρόγχου. Στον έλεγχο μεγέθους ο αλγόριθμος συγκρίνει τα πιθανοτικά διαστήματα που έχουν οριστεί για τα πιθανά μεγέθη του κρυστάλλου με ένα δεύτερο τυχαίο αριθμό που παράγει. Ανάλογα το μέγεθος που επιλέγεται, ελέγχονται τα τοπικά σύνορα για το αν υπάρχει διαθέσιμος χώρος που δεν έχει ήδη καλυφθεί από κρύσταλλο και τοποθετεί τον αντίστοιχο κρύσταλλο. Αν ο έλεγχος κριθεί αρνητικός ο αλγόριθμος οδηγείται στην αρχή του βρόγχου, δηλαδή στη συνέχιση σάρωσης του πίνακα και στον έλεγχο της συγκέντρωσης. Με τον ίδιο ακριβώς τρόπο ο βρόγχος αυτός τρέχει και στην περίπτωση της τιμής $sd = 2$.

Τα παραγόμενα αποτελέσματα ποικίλουν ανάλογα με τις προτιμήσεις του χρήστη. Ο αλγόριθμος μπορεί να εμφανίζει την τελική συγκέντρωση του πίνακα που δημιούργησε για να υπάρχει σύγκριση αποτελέσματος σε σχέση με την επιθυμητή συγκέντρωση που δόθηκε αρχικά. Μπορεί επίσης να εμφανίζει το συνολικό αριθμό των κρυστάλλων, για τα διάφορα πάχη, που έχουν τοποθετηθεί. Μπορεί να αποθηκεύει το αποτέλεσμα σε αρχεία διαφορετικής μορφής. Τέλος υπάρχει η δυνατότητα γραφικής απεικόνισης του αποτελέσματος, αλλά και η παραγωγή βίντεο δημιουργίας του δοκιμίου βήμα προς βήμα. Το διάγραμμα ροής του αλγόριθμου δίνεται αναλυτικά στο *σχήμα 2.2*.



Σχήμα 2.2 Ροή αλγόριθμου δημιουργίας ψηφιακού δοκιμίου

2.2. ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΡΩΓΜΗΣ

Ο δεύτερος αλγόριθμος που δημιουργήθηκε χρησιμοποιεί τα αποτελέσματα του πρώτου αλγόριθμου και υλοποιεί τη διάδοση της ρωγμής. Η εξαγωγή των στατιστικών αποτελεσμάτων που ήταν στο ενδιαφέρον της παρούσας εργασίας εξήχθησαν βάση επαναληπτικών διαδικασιών. Οι επαναληπτικές αυτές διαδικασίες βασίστηκαν στη μελέτη διάδοσης πολλών ρωγμών σε ένα συγκεκριμένο δοκίμιο. Η ίδια διαδικασία μπορεί να ακολουθηθεί και για διάδοση μίας ρωγμής σε πολλά διαφορετικά δοκίμια ίδιας σύστασης και συγκέντρωσης, αλλά διαφορετικής διασποράς κρυστάλλων στο εσωτερικό τους. Η δεύτερη διαδικασία όντας πολύ χρονοβόρα μέχρι τα αποτελέσματα να φτάσουν σε σημείο σύγκλισης αποκλείστηκε. Εν κατακλείδι τα αποτελέσματα βασίστηκαν στην πρώτη επαναληπτική διαδικασία. Βέβαια για λόγους σύγκρισης και ελέγχου στατιστικής ασφάλειας, ότι το μοντέλο δουλεύει σωστά, έγινε μία επαναληπτική διαδικασία και με τις δύο παραπάνω προτάσεις. Η σύγκριση τους όπως ήταν αναμενόμενο έδειξε ότι τα αποτελέσματα συγκλίνουν και άρα η χρήση της πρώτης πρότασης είναι ασφαλής. Τα συγκριτικά αποτελέσματα δίνονται αναλυτικά στην **ενότητα 3.3.1**.

Υπολογιστικοί χρόνοι

Στο σημείο αυτό γίνεται κατανοητό ότι οι δυσκολίες της παρούσας εργασίας δεν περιοριζόταν μόνο στο κομμάτι της μοντελοποίησης, αλλά και στην υπολογιστική ισχύ που ήταν διαθέσιμη για τη διεξαγωγή των μεθόδων δειγματοληψίας. Καθώς δεν υπήρχε πρόσβαση σε ισχυρούς υπολογιστές, οι υπολογιστικοί χρόνοι αυξάνονται δραματικά όταν για μεγάλους χώρους δειγματοληψίας το μοντέλο λειτουργεί σε συμβατικούς υπολογιστές. Για το λόγο αυτό παρατίθεται ο πίνακας 2.2 όπου δίνονται ενδεικτικά οι υπολογιστικοί χρόνοι του μοντέλου. Στον πίνακα 2.2 δίνονται οι υπολογιστικοί χρόνοι κατασκευής ψηφιακών δοκιμών διαφόρων διαστάσεων για συγκέντρωση $c = 30\%$ και πλάτος κρυσταλλίτη $s = 6$, καθώς και ο χρόνος διάδοσης μίας ρωγμής. Να σημειωθεί εδώ ότι σε όλους τους πίνακες και γραφήματα που περιέχουν νούμερα, η υποδιαστολή συμβολίζεται με τελεία.

Πίνακας 2.2 Υπολογιστικοί χρόνοι πειραμάτων προσομοίωσης

		υπολογιστικοί χρόνοι
διάσταση ψηφιακών δοκιμίων	100x100	2 sec
	200x200	15 sec
	300x300	1 min
	500x500	5.2 min
	1000x1000	1.25 hr
	2000x2000	2.5 days
	3000x3000	12.4 days
διάδοση μίας ρωγμής		4.5 sec

Θεωρητικό υπόβαθρο αλγόριθμου διάδοσης ρωγμής

Ο αλγόριθμος διάδοσης ρωγμής βασίστηκε στη θεωρία ενός αναλυτικού μοντέλου που χρησιμοποιεί ενεργειακές και πιθανοτικές σχέσεις, σε συνδυασμό με ένα μοντέλο περιπατητή (Charitidis κ.ά., 2007). Πέρα από την επίδραση του μεγέθους των κρυσταλλιτών, της συγκέντρωσης και του πάχους της διεπιφάνειας στο μήκος και την ταχύτητα διάδοσης της ρωγμής, παίζουν ρόλο και άλλες παράμετροι (Charitidis κ.ά., 2007; Karakasidis & Charitidis, 2011; Falzone κ.ά., 2016). Για το σκοπό αυτό εισήχθησαν αυτές οι επιπρόσθετες παράμετροι, όπου είναι η θερμοκρασία, οι ενέργειες των στοιχείων του δοκιμίου και ο τρόπος διάδοσης της ρωγμής (Abraham & Gao, 2000; Bitzek κ.ά., 2015; Ovid'ko, 2015; Yaghmaee & Baghbaderani, 2017). Οι παράμετροι του μοντέλου διάδοσης της ρωγμής δίνονται στον πίνακα 2.3.

Πίνακας 2.3 Παράμετροι εισόδου αλγόριθμου διάδοσης της ρωγμής

E_{mat}	ενέργεια σύνδεσης στοιχείων άμορφης μήτρας
E_{gb}	ενέργεια σύνδεσης στοιχείων διεπιφάνειας
E_{inc}	ενέργεια σύνδεσης στοιχείων κρυσταλλίτη
E_{init}	αρχική ενέργεια ρωγμής
KT	θερμοκρασία
P_f	πιθανότητα διατήρησης πορείας

Οι ενέργειες των στοιχείων μπορούν να υπολογιστούν από πειράματα μοριακής φυσικής για την οποιαδήποτε χημική σύνθεση και να εφαρμοστούν στο μοντέλο. Επίσης λαμβάνοντας υπόψη ότι οι ενέργειες μεταξύ των δεσμών αλλάζουν σε σχέση με το πάχος των κρυσταλλιτών, χρησιμοποιήθηκε η εξίσωση 2.3, σύμφωνα με (Yaghmaee & Shokri, 2007).

$$E^{NP}(D) = \left(1 - \frac{d_a}{f_v D}\right) E_b(T) \quad (2.3)$$

Όπου E^{NP} είναι η ενέργεια σύνδεσης ενός νανο-σωματιδίου (NP), η οποία είναι συνάρτηση της διαμέτρου των σωματιδίων D . Ο συντελεστής d_a δηλώνει την ατομική διάμετρο του νανოსωματιδίου. Ο συντελεστής f_v είναι ο συντελεστής ατομικής πληρώσεως (*packing factor*) και E_b είναι η άμορφη ενέργεια σύνδεσης του νανο-σωματιδίου του υλικού σε μάκρο-κλίμακα (*bulk*) και είναι εξαρτημένη της θερμοκρασίας T . Επιπλέον δεδομένου ότι οι ατομικοί δεσμοί της διεπιφάνειας έχουν μία ενδιάμεση ενέργεια σύνδεσης σε σχέση με την ενέργεια της άμορφης μήτρας και των κρυσταλλινών (Yaghmaee & Baghbaderani, 2017), χρησιμοποιήθηκε η απλή εξίσωση 2.4 για τον υπολογισμό της.

$$E_{gb} = \left| \frac{E_{mat} + E_{inc}}{2} \right| \quad (2.4)$$

Πολλές φορές κατά τη διάδοση μίας ρωγμής είναι πιθανό να παρουσιαστεί το φαινόμενο της παγίδευσης (*bond trapping*). Το συγκεκριμένο περίπλοκο φαινόμενο αποτελεί μεγάλο κομμάτι μελέτης και δε θα αναλυθεί εδώ (Bitzek κ.ά., 2015). Κατά τη διάδοση της ρωγμής βάση του μοντέλου της εργασίας, υπήρχαν περιπτώσεις κατά τις οποίες το συγκεκριμένο φαινόμενο λάμβανε χώρα. Για το λόγο αυτό ήταν αναγκαία η χρήση της απλοποιημένης παραμέτρου P_f , όπου λαμβάνει υπόψη το φαινόμενο αυτό, ενώ η συγκεκριμένη παράμετρος έχει διπλό σκοπό, καθώς εξυπηρετεί με μεγαλύτερη βαρύτητα και την προσομοίωση του μηχανισμού διάδοσης (Ovid'ko, 2015). Για να έχει αξία η χρήση της συγκεκριμένης παραμέτρου μετασηματίστηκε ελαφρώς και ο αλγόριθμος του μοντέλου. Αυτό που έγινε ήταν να δίνεται η δυνατότητα η ρωγμή να μπορεί να περνάει πάνω από κελιά του ψηφιακού δοκιμίου που έχει ήδη περάσει. Η παράμετρος P_f δηλαδή καθορίζει το πόσο η διεύθυνση της ρωγμής θα διατηρηθεί σε μία συγκεκριμένη κατεύθυνση, που σχετίζεται με τους τρόπους διάδοσης, αλλά και έμμεσα μειώνει την εμφάνιση του φαινομένου παγίδευσης. Έμμεσα η παράμετρος P_f θα μπορούσε να συσχετιστεί με τους μηχανισμούς διάδοσης και τους τύπους ανάπτυξης ρωγμών (Abraham & Gao, 2000).

Το μοντέλο περιπατητή χρησιμοποιεί τις εξισώσεις που προτάθηκαν σύμφωνα με (Argyris & Kehr, 1992). Οι συγκεκριμένες εξισώσεις λαμβάνουν υπόψη τις διαφορετικές ενέργειες των στοιχείων του ψηφιακού δοκιμίου και μοιράζουν τις πιθανότητες κίνησης βάση των ενεργειών αυτών, χρησιμοποιώντας παράλληλα και την παράμετρο P_f . Στην ουσία σε κάθε βήμα διάδοσης της ρωγμής ο περιπατητής κινείται χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις καταμερισμού των πιθανοτήτων σε συνδιασμό με τις ενεργειακές εξισώσεις (Argyris & Kehr, 1992). Το αποτέλεσμα που προκύπτει φαίνεται στις δύο γενικές εξισώσεις 2.5 και 2.6.

$$P_{move_{main}} = P_f e^{\frac{-\Delta E}{KT}} \quad (2.5)$$

$$P_{move_{sec}} = \frac{(1 - P_f)}{(z - 1)} e^{\frac{-\Delta E}{KT}} \quad (2.6)$$

Όπου για $\Delta E = 0$, οι εξισώσεις 2.5 και 2.6 μετασχηματίζονται στις εξισώσεις 2.7 και 2.8.

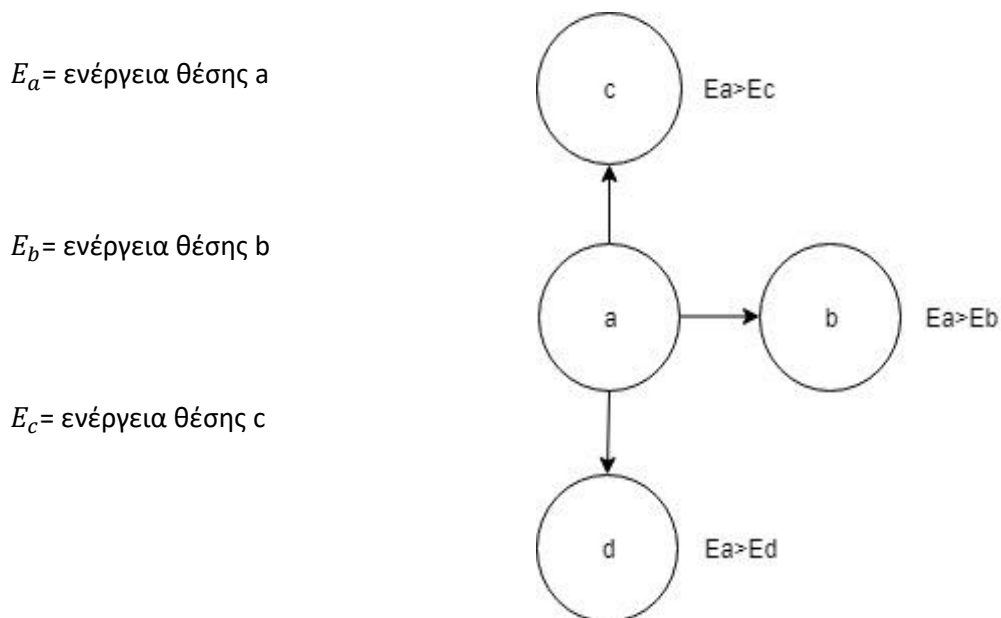
$$P_{move_{main}} = P_f \quad (2.7)$$

$$P_{move_{sec}} = \frac{(1 - P_f)}{(z - 1)} \quad (2.8)$$

Όπου $P_{move_{main}}$ είναι η πιθανότητα κίνησης στην κύρια κατεύθυνση και $P_{move_{sec}}$ είναι η πιθανότητα κίνησης σε μία δευτερεύουσα κατεύθυνση, ενώ z είναι ο αριθμός των πιθανών θέσεων κίνησης σε κάθε βήμα. Πλέον γίνεται και πιο κατανοητή η χρήση του συντελεστή P_f .

Δίνει στην ουσία μία κύρια κατευθυντικότητα στη διάδοση της ρωγμής και το γεγονός κίνησης προς μία κατεύθυνση δεν είναι εντελώς τυχηματικό, ενώ καθορίζεται και από την ίδια τη λογική του αλγόριθμου που εξηγείται πιο αναλυτικά στην **ενότητα 2.2.1**. Οι εξισώσεις 2.7 και 2.8 δείχνουν πως καταμερίζονται οι πιθανότητες κίνησης στις διάφορες κατευθύνσεις, ενώ στην περίπτωση όπου η ρωγμή πρέπει να περάσει σε θέση με μεγαλύτερη ενέργεια χρησιμοποιούνται οι εξισώσεις 2.5 και 2.6, όπου λαμβάνουν υπόψη τις ενεργειακές διαφορές που επηρεάζουν το φαινόμενο. Όπου KT είναι η θερμοκρασία και όπου ΔE είναι οι διαφορές ενεργειών μεταξύ της θέσης λήψης απόφασης και των εκάστοτε πιθανών θέσεων κίνησης. Εύκολα γίνεται κατανοητός ο τρόπος που επιδρά η θερμοκρασία στη διεξαγωγή του φαινομένου. Για υψηλές θερμοκρασίες τα ενεργειακά άλματα μπορούν να ξεπεραστούν πιο εύκολα. Επίσης θα περίμενε κανείς το μέσο μήκος της ρωγμής να αυξηθεί, όπως επίσης και η μέση ταχύτητα διάδοσης (Argyakis & Kehr, 1992; Yaghmaee & Baghbaderani, 2017). Για καλύτερη κατανόηση δίνονται τα σχήματα 2.3, 2.4 και 2.5, όπου αναπαρίστανται τρεις διαφορετικές περιπτώσεις κίνησης, ενώ παράλληλα δίνονται και οι αντίστοιχες εξισώσεις στους πίνακες 2.4, 2.5 και 2.6.

Πρώτη περίπτωση διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής



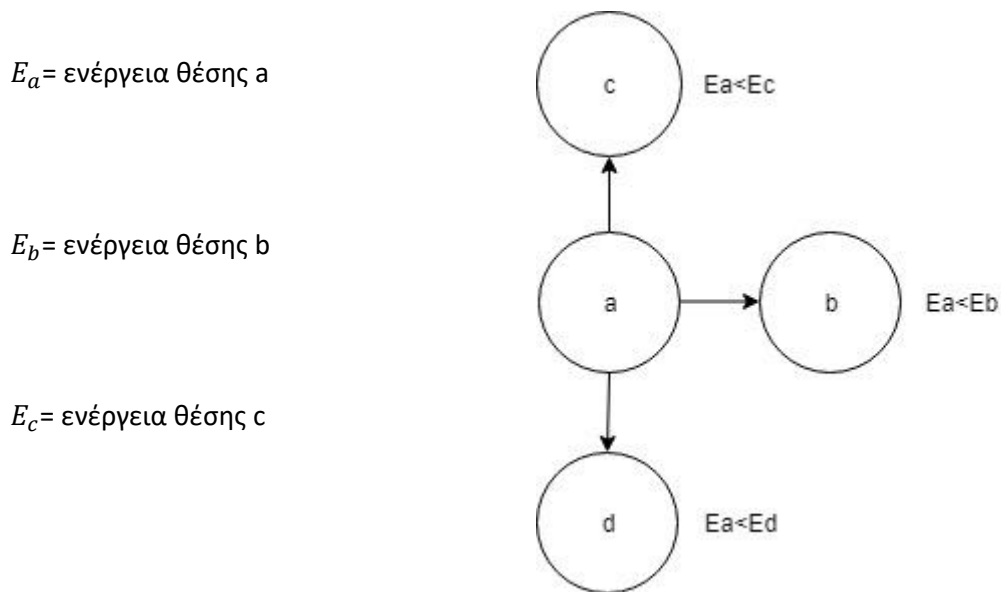
Σχήμα 2.3 Πρώτη περίπτωση διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής

Πίνακας 2.4 Πίνακας εξισώσεων πιθανοτήτων, πρώτης περίπτωσης διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής

$P_b = P_f$	(2.9)
$P_c = \frac{1 - P_f}{z - 1}$	(2.10)
$P_d = \frac{1 - P_f}{z - 1}$	(2.11)
$P_a = 1 - (P_b + P_c + P_d)$	(2.12)

P_b, P_c, P_d είναι οι πιθανότητες κίνησης στις συγκεκριμένες κατευθύνσεις, ενώ P_a είναι η πιθανότητα παραμονής στην ίδια θέση. Στη συγκεκριμένη περίπτωση οι ενέργειες των πιθανών θέσεων κίνησης είναι μικρότερες από αυτή της θέσης λήψης απόφασης. Επιπλέον η πιθανότητα παραμονής στην ίδια θέση εδώ είναι μηδενική.

Δεύτερη περίπτωση διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής



Σχήμα 2.4 Δεύτερη περίπτωση διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής

Πίνακας 2.5 Πίνακας εξισώσεων πιθανοτήτων, δεύτερης περίπτωσης διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής

$P_b = P_f * e^{\frac{-\Delta E_{ab}}{KT}}$	(2.13)
$P_c = \frac{1 - P_f}{z - 1} * e^{\frac{-\Delta E_{ac}}{KT}}$	(2.14)
$P_d = \frac{1 - P_f}{z - 1} * e^{\frac{-\Delta E_{ad}}{KT}}$	(2.15)
$P_a = 1 - (P_b + P_c + P_d)$	(2.12)

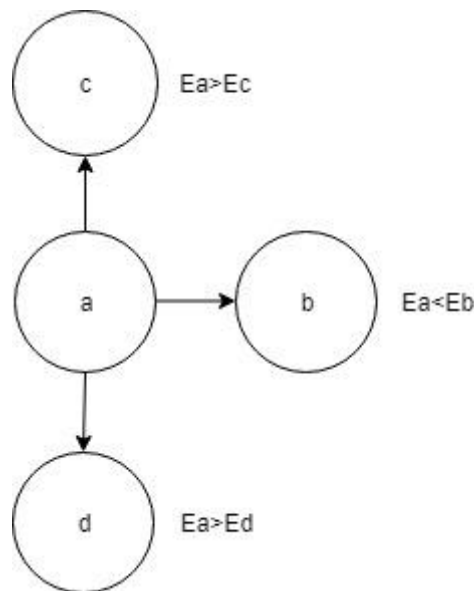
Στη συγκεκριμένη περίπτωση όλες οι πιθανές θέσεις κίνησης έχουν ενέργεια μεγαλύτερη από αυτή της θέσης λήψης απόφασης. Η ρωγμή λοιπόν σε μία τέτοια περίπτωση καλείται να ξεπεράσει αυτά τα ενεργειακά άλματα. Καθώς τα ενεργειακά αυτά άλματα δρουν μειονεκτικά ως προς τη διάδοση της ρωγμής, δηλαδή θα πρέπει να δαπανηθεί περισσότερη ενέργεια ώστε να γίνει κάποια κίνηση, η πιθανότητα προς αυτές τις κατευθύνσεις μειώνεται εκθετικά σύμφωνα με τις εξισώσεις του πίνακα 2.5. Επίσης εδώ η πιθανότητα παραμονής στην ίδια θέση είναι διάφορη του μηδέν.

Τρίτη περίπτωση διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής

E_a = ενέργεια θέσης a

E_b = ενέργεια θέσης b

E_c = ενέργεια θέσης c



Σχήμα 2.5 Τρίτη περίπτωση διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής

Πίνακας 2.6 Πίνακας εξισώσεων πιθανοτήτων, τρίτης περίπτωσης διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής

$P_b = P_f * e^{\frac{-\Delta E_{ab}}{KT}}$	(2.16)
$P_c = \frac{1 - P_f}{z - 1}$	(2.17)
$P_d = \frac{1 - P_f}{z - 1}$	(2.18)
$P_a = 1 - (P_b + P_c + P_d)$	(2.12)

Στην τρίτη περίπτωση διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής, φαίνεται ο συνδυασμός των περιπτώσεων 1 και 2, όπου κάποιες από τις πιθανές θέσεις κίνησης έχουν μεγαλύτερη ενέργεια από τη θέση λήψης απόφασης, ενώ άλλες έχουν μικρότερη. Εδώ και πάλι η πιθανότητα P_a είναι διάφορη του μηδενός.

Ανάλυση παραμέτρου P_f και φαινομένου παγίδευσης

Αρχικά ο αλγόριθμος διαβάζει το δοκίμιο που έχει δημιουργηθεί και τοποθετεί σε δεύτερη διάσταση του πίνακα σε κάθε κελί, την τιμή της ενέργειας που αντιστοιχεί στο ανάλογο στοιχείο. Στη συνέχεια ξεκινάει η διάδοση της ρωγμής. Η κίνηση του περιπατητή όπως αναφέρθηκε και στην ενότητα 2.2 είναι πιθανοτικά δεσμευμένη της παραμέτρου P_f και των διαφορετικών ενεργειών που υπάρχουν μέσα στο δοκίμιο σύμφωνα με τις εξισώσεις 2.5 και 2.6.

Μία από τις αρχικές παραμέτρους που είχε οριστεί στο μοντέλο, ήταν η ρωγμή να είναι δυνατό να διαδίδεται μόνο δια μέσω θέσεων που δεν έχουν σπάσει ακόμα. Παρατηρώντας τις πρώτες δοκιμές λειτουργίας του αλγόριθμου παρατηρήθηκε ότι η ρωγμή δε κινούνταν εν γένει προς μία κύρια συγκεκριμένη κατεύθυνση, ενώ η διάδοση της διακοπτόταν καταλήγοντας σε παγίδευση (*bond trapping*). Στην ουσία το φαινόμενο της διάδοσης ήταν τελείως τυχατικό. Με βάση την παρατήρηση αυτή, αλλά και βάση των (Bitzek κ.ά., 2015; Onid'ko, 2015) ο αλγόριθμος τροποποιήθηκε ώστε οι πιθανότητες να δεσμευτούν και να δημιουργηθούν συνθήκες μίας πιο ρεαλιστικής διεξαγωγής του φαινομένου.

Όπως αναφέρθηκε και στην ενότητα 2.2, η εισαγωγή της παραμέτρου P_f έδωσε λύση στο πρόβλημα της κύριας κατεύθυνσης, ενώ το φαινόμενο της παγίδευσης ξεπεράστηκε με την τροποποίηση του αλγόριθμου. Σύμφωνα με (Bitzek κ.ά., 2015) δόθηκε η ιδιότητα στη ρωγμή να μπορεί να περνάει μέσα από στοιχεία σπασμένου υλικού, όταν αυτά έχουν πάχος μίας στιβάδας. Δηλαδή πιο συγκεκριμένα για το μοντέλο της εργασίας, η ρωγμή μπορεί να ξεπερνά φαινόμενα παγίδευσης μέσω της διάδοσης της από σπασμένο υλικό πάχους ενός κελιού. Η χρήση αυξημένων τιμών της P_f μπορεί να αιτιολογηθεί και ενεργειακά.

Τέλος για να λαμβάνεται πλήρως υπόψη το φαινόμενο σύμφωνα με τα παραπάνω, ο αλγόριθμος τροποποιήθηκε περαιτέρω. Αυτή η τροποποίηση είχε να κάνει με τον προσανατολισμό της ρωγμής ως προς την κύρια κατεύθυνση. Δηλαδή ποια κατεύθυνση να ορίζεται κάθε φορά ως η κύρια. Αυτό υλοποιήθηκε λαμβάνοντας υπόψη τη παρούσα θέση λήψης απόφασης κατεύθυνσης, σε σχέση με την προηγούμενη θέση της. Αν δηλαδή για μία παρούσα θέση της ρωγμής που πρέπει να ληφθεί απόφαση κίνησης εμφανιστεί ότι η ακριβώς προηγούμενη θέση της ήταν αριστερά της σημαίνει ότι έγινε κίνηση προς τα δεξιά και άρα ο αλγόριθμος αμέσως καταλαβαίνει ότι αυτή είναι η κύρια κατεύθυνση που πρέπει να ακολουθηθεί. Στη συγκεκριμένη επόμενη κίνηση λοιπόν θα δοθεί η παράμετρος P_f προς τα δεξιά. Η διεξαγωγή του φαινομένου ολοκληρώνεται όταν θα εξαντληθεί η αρχική ενέργεια που έχει δοθεί στη ρωγμή. Σε κάθε βήμα η αρχική ενέργεια διάδοσης μειώνεται όσο και η ενέργεια των στοιχείων των κελιών που σπάνε κάθε φορά.

Στο πρώτο βήμα δεν υπάρχει κάποια συγκεκριμένη κύρια κατεύθυνση διάδοσης ρωγμής. Για το λόγο αυτό οι πιθανότητες που δίνονται είναι ισοπίθανες. Σε περίπτωση όμως συνάντησης ενεργειακής διαφοράς η πιθανότητα κίνησης προς τη συγκεκριμένη κατεύθυνση μειώνεται σύμφωνα με την εξίσωση 2.5 που προτάθηκε στην ενότητα 2.2. Βέβαια η εξίσωση αυτή μετασχηματίζεται με τη σειρά της ελαφρώς, λαμβάνοντας υπόψη την έλλειψη κύριας κατεύθυνσης στο βήμα αυτό και μόνο, καθώς η κίνηση είναι ισοπίθανη σε όλες τις κατευθύνσεις και άρα η παράμετρος P_f θα αντικατασταθεί με την τιμή $1/4$, όπως φαίνεται στην εξίσωση 2.19.

$$P_{move} = \frac{1}{4} e^{\frac{-\Delta E}{kT}} \quad (2.19)$$

Στη συνέχεια τα βήματα συνεχίζονται κανονικά χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις 2.5 και 2.6. Βάση των εξισώσεων αυτών γίνεται αντιληπτό ότι σε κάθε βήμα υπάρχουν πιθανότητες κίνησης και ίσως πιθανότητα παραμονής στην ίδια θέση, ανάλογα με την περίπτωση, όπως αναλύθηκε παραπάνω. Σε οποιαδήποτε περίπτωση το άθροισμα όλων αυτών των πιθανοτήτων ισούται με τη μονάδα. Η δυνατότητα κίνησης της ρωγμής διαμέσου σπασμένου υλικού, δίνεται στον αλγόριθμο μόνο στην περίπτωση όπου το πρώτο κελί για τη μελετώμενη κατεύθυνση είναι κατελημμένο από ρωγμή και το αμέσως επόμενο είναι διαθέσιμο. Για καλύτερη κατανόηση του συγκεκριμένου φαινομένου δίνεται παρακάτω το *σχήμα 2.6*.

→ στοιχείο άμορφης μήτρας

→ στοιχείο κρυσταλλίτη

→ στοιχείο διεπιφάνειας

→ ήδη σπασμένο υλικό - «ρωγμή»

→ πιθανές θέσεις κίνησης

→ σύστημα συντεταγμένων

	A	B	C	D	E	F
1	Blue	Blue	Red	Blue	Blue	Blue
2	Blue	Black	Red	Yellow	Yellow	Blue
3	Red	Black	Red	Black	Yellow	Blue
4	Red	Red	Red	Green	Yellow	Blue
5	Blue	Black	Yellow	Yellow	Yellow	Blue
6	Blue	Blue	Blue	Blue	Blue	Blue

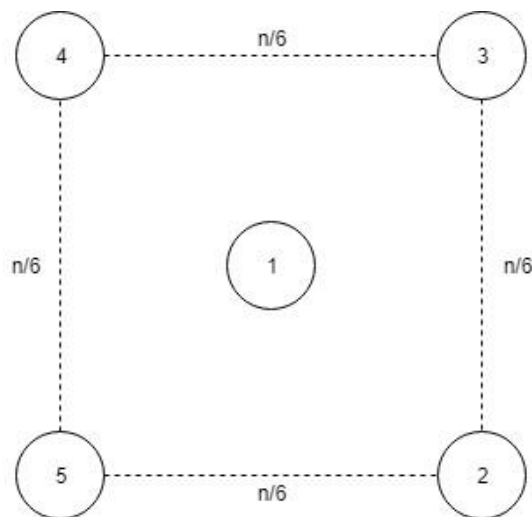
Σχήμα 2.6 Κοντινή απεικόνιση διάδοσης ρωγμής μέσα από κρυσταλλίτη

Με μπλέ χρώμα είναι κελιά στοιχείου άμορφης μήτρας, όπου πράσινο είναι κελιά στοιχείου κρυσταλλίτη, όπου πορτοκαλί είναι στοιχεία διεπιφάνειας και όπου κόκκινο είναι σπασμένοι δεσμοί, δηλαδή ρωγμή. Επίσης στα γραμμοσκιασμένα με γκριζο χρώμα κελιά δίνεται ένα ενδεικτικό σύστημα αναφοράς για καλύτερη επεξήγηση των σχημάτων. Έστω ότι η ρωγμή αρχικά είναι στη θέση **C1** και διαδίδεται μέχρι τη θέση **B3** σύμφωνα με το *σχήμα 2.6*.

Έστω ότι υπάρχει ακόμα διαθέσιμη ενέργεια διάδοσης. Υπάρχουν τρεις πιθανές θέσεις στις οποίες η ρωγμή μπορεί να συνεχίσει την πορεία της και φαίνονται στο *σχήμα 2.6* με μαύρο χρώμα και συντεταγμένες **D3**, **B2**, **B5** (*αριστερόστροφα*). Η κύρια κατεύθυνση είναι προς τα δεξιά, και η ρωγμή μπορεί να συνεχίσει στο κελί **D3** περνώντας πάνω από το σπασμένο κελί **C3**. Θα χρησιμοποιηθούν λοιπόν κανονικά οι εξισώσεις που προτάθηκαν για την εξέλιξη του φαινομένου και οι πιθανές θέσεις κίνησης είναι τρεις, όπου η μία θέση δεν είναι σε γειτνιάζον κελί της θέσης λήψης απόφασης κίνησης, αλλά απέχει ένα κελί. Με τον τρόπο αυτό το φαινόμενο εξελίσσεται σε κάθε χρονική στιγμή.

2.2.1. ΑΛΓΟΡΙΘΜΙΚΗ ΡΟΗ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΤΗΣ ΡΩΓΜΗΣ

Πιο αναλυτικά σχετικά με τη λογική του αλγόριθμου, χρησιμοποιούνται τυχαίοι αριθμοί με βάση τη συνεχή ομοιόμορφη κατανομή από το μηδέν έως το ένα. Αρχικά ο χρήστης εισάγει τις επιθυμητές παραμέτρους του πίνακα 2.1, καθώς επίσης επιλέγει και το ψηφιακό δοκίμιο πάνω στο οποίο θα εκτελεστεί η διάδοση της ρωγμής, το οποίο έχει δημιουργηθεί και αποθηκευτεί από τον πρώτο αλγόριθμο. Στη συνέχεια το σημείο εκκίνησης της ρωγμής ορίζεται το κέντρο του δοκιμίου, ενώ ταυτόχρονα η ενέργεια του κελιού αυτού αφαιρείται από τη συνολική διαθέσιμη ενέργεια διάδοσης. Έπειτα για να είναι ακόμα πιο τυχηματικό το γεγονός, μιας και όπως προαναφέρθηκε τα πειράματα γίνονται σε συγκεκριμένα δοκίμια, σε κάθε επανάληψη το δοκίμιο στρέφεται κατά γωνία 90° . Επίσης το σημείο εκκίνησης κάθε φορά αλλάζει τυχαία. Τα διάφορα σημεία εκκίνησης είναι τα κελιά με συντεταγμένες τις γωνίες ενός τετραγώνου, που έχει κέντρο το κέντρο του δοκιμίου και το μήκος των πλευρών του είναι ίσο με $n/6$, όπως φαίνεται στο σχήμα 2.7.



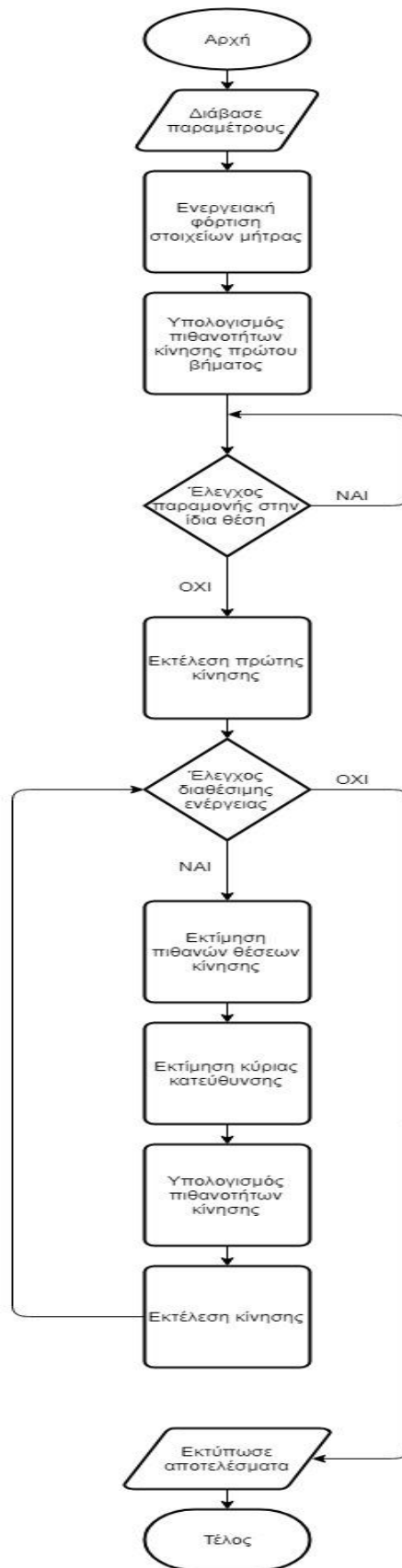
Σχήμα 2.7 Αρχικές θέσεις εκκίνησης της διάδοσης της ρωγμής

Ακολουθεί το πρώτο βήμα λήψης απόφασης κίνησης όπως περιγράφηκε παραπάνω. Δηλαδή καθώς στο σημείο αυτό δεν υπάρχει κάποια κύρια κατεύθυνση, οι πιθανές θέσεις κίνησης είναι 4. Σε περίπτωση απουσίας ενεργειακών διαφορών και στις 4 θέσεις τα γεγονότα είναι ισοπίθανα. Σε διαφορετική περίπτωση οι πιθανότητες μειώνονται βάσει των ενεργειακών διαφορών και εμφανίζεται και πιθανότητα παραμονής στην ίδια θέση. Εν γένη χρησιμοποιείται η εξίσωση 2.19 στο βήμα αυτό. Αφού οριστούν οι πιθανότητες κίνησης, όπως και στο μοντέλο δημιουργίας του ψηφιακού δοκιμίου, χρησιμοποιείται η ενσωματωμένη συνάρτηση παραγωγής τυχαίων αριθμών *rand*(1). Σε κάθε βήμα η συγκεκριμένη συνάρτηση χρησιμοποιείται για τη δημιουργία πιθανοτικών διαστημάτων κίνησης. Ο παραγόμενος τυχαίος αριθμός συγκρίνεται με τα πιθανοτικά διαστήματα που έχουν οριστεί και γίνεται η λήψη της απόφασης. Το βήμα αυτό είναι μέσα σε ένα μικρό βρόγχο, όπου επαναλαμβάνεται μόνο σε περίπτωση που ο τυχαίος αριθμός συμπίπτει στο πιθανοτικό διάστημα που αντιστοιχεί στην παραμονή στην ίδια θέση. Σε διαφορετική περίπτωση γίνεται έξοδος από το βρόγχο επανάληψης.

Με την ολοκλήρωση του πρώτου βήματος ο αλγόριθμος οδηγείται στον επόμενο μεγάλο βρόγχο επανάληψης. Αυτός ο βρόγχος συνεχίζεται έως ότου η αρχική δοθείσα ενέργεια εξαντληθεί. Αρχικά ο αλγόριθμος εντοπίζει σε κάθε βήμα τις ακριβείς πιθανές θέσεις κίνησης. Το συγκεκριμένο σημείο χρειάστηκε ιδιαίτερη προσοχή, καθώς είναι το σημείο υπολογισμού της παραμέτρου *z*. Η συγκεκριμένη παράμετρος όπως αναφέρθηκε είναι μεταβλητό μέγεθος και η τιμή της υπολογίζεται σε κάθε βήμα κίνησης της ρωγμής. Παρατηρώντας τη γενική εξίσωση 2.6, σε περιπτώσεις όπου η πιθανή θέση κίνησης είναι μόνο μία και αυτή η θέση δεν είναι στην κύρια κατεύθυνση διάδοσης, η πιθανότητα απειρίζεται. Ο αλγόριθμος λοιπόν μετασχηματίστηκε ώστε όταν το συγκεκριμένο γεγονός συμβαίνει να χρησιμοποιείται η εξίσωση 2.5. Δηλαδή δίνεται η κύρια κατευθυντικότητα στη μοναδική διαθέσιμη θέση κίνησης.

Έπειτα ο αλγόριθμος με βάση την κύρια κατεύθυνση διακλαδίζεται σε μία σειρά λογικών ελέγχων. Τα τμήματα της διακλάδωσης είναι τέσσερα και χωρίζονται ανάλογα με την κύρια κατεύθυνση της ρωγμής. Ανάλογα δηλαδή αν η κύρια κατεύθυνση είναι δεξιά, πάνω, αριστερά ή κάτω, ως προς το καθολικό σύστημα αναφοράς, ο αλγόριθμος οδηγείται στο κομμάτι λογικών ελέγχων της συγκεκριμένης κύριας κατεύθυνσης, ενώ τα υπόλοιπα κομμάτια ελέγχων για τις άλλες κύριες κατευθύνσεις αυτομάτως αποκλείονται.

Ως καθολικό σύστημα αναφοράς, εννοείται το σύστημα συντεταγμένων που δημιουργείται από τις γραμμές και τις στήλες του ψηφιακού δοκιμίου. Αφού ο αλγόριθμος εισέλθει σε ένα κλάδο κύριας κατεύθυνσης, υπολογίζονται οι πιθανότητες κίνησης για τις διάφορες πιθανές θέσεις κίνησης, όπου για την κύρια κατεύθυνση χρησιμοποιείται η *εξίσωση 2.5* και για τις δευτερεύουσες η *εξίσωση 2.6*. Ακολουθεί η παραγωγή τυχαίου αριθμού με την ενσωματωμένη συνάρτηση όπως περιγράφηκε παραπάνω. Ο αριθμός αυτός συγκρίνεται με τα πιθανοτικά διαστήματα που έχουν δημιουργηθεί και με βάση αυτού του λογικού ελέγχου η κίνηση υλοποιείται. Σε περιπτώσεις εμφάνισης του φαινομένου παγίδευσης, ο αλγόριθμος οδηγείται σε έξοδο από το βρόγχο. Μετά τη λήξη του μεγάλου αυτού βρόγχου διάδοσης της ρωγμής, επέρχεται και ο τερματισμός του αλγόριθμου. Στο *σχήμα 2.8* δίνεται η ροή του αλγόριθμου διάδοσης της ρωγμής.



Σχήμα 2.8 Ροή αλγόριθμου διάδοσης της ρωγμής

3.ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΟΣ ΕΛΕΓΧΟΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ

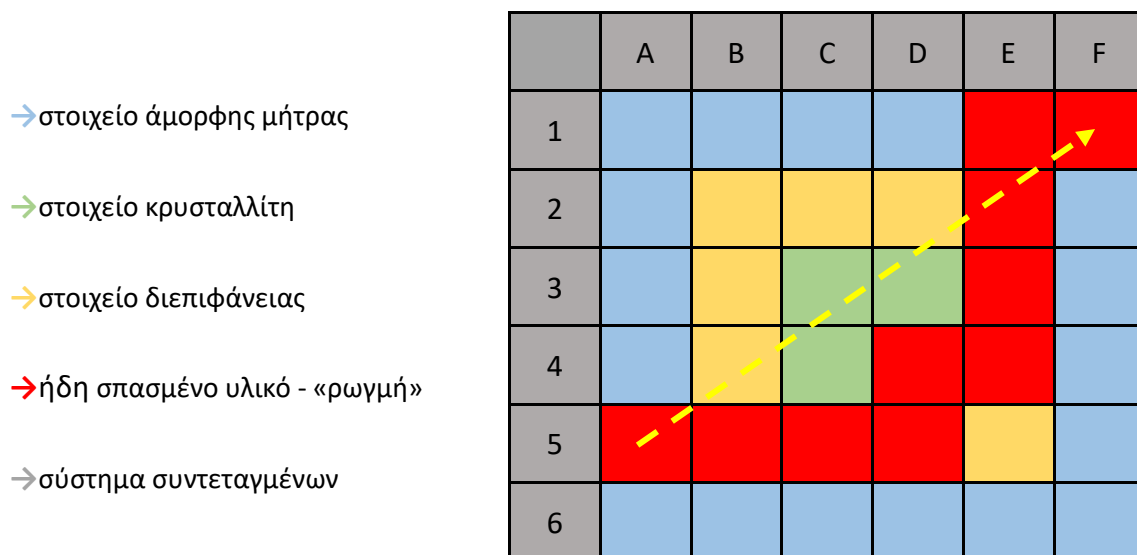
3.1.ΑΝΑΛΥΣΗ ΥΠΟΛΟΓΙΖΟΜΕΝΩΝ ΜΕΓΕΘΩΝ

Ο χρήστης μπορεί να επιλέξει την εμφάνιση και αποθήκευση των καταγραφόμενων ποσοτήτων που φαίνονται αναλυτικά στον πίνακα 3.1. Πέρα από τα αποτελέσματα αυτά ο αλγόριθμος παράγει γραφική απεικόνιση της ρωγμής, καθώς και βίντεο εξέλιξης του φαινομένου βήμα προς βήμα.

Πίνακας 3.1 Υπολογιζόμενα μεγέθη του αλγόριθμου διάδοσης της ρωγμής

$Length_{avg}$	μέσο μήκος ρωγμής
$Length_{eff}$	ενεργό μήκος ρωγμής
$Velocity_{avg}$	μέση ταχύτητα ρωγμής
$Velocity_{eff}$	ενεργή ταχύτητα ρωγμής
$Crack_{inc}$	σπασμένοι κρυσταλλίτες
$Move_{times}$	βήματα κίνησης
$Stay_{times}$	αριθμός στάσεων
$Crack_{inc_{cells}}$	σπασμένα κελιά κρυσταλλιτών
$Crack_{gb_{cells}}$	σπασμένα κελιά διεπιφάνειας
$Crack_{mat_{cells}}$	σπασμένα κελιά άμορφης μήτρας

Σχετικά με τα μεγέθη του πίνακα 3.1, το μέγεθος $Crack_{inc_{cells}}$ αναφέρεται στο σύνολο των κελιών του ψηφιακού δοκιμίου που έχουν σπάσει και αντιστοιχούσαν σε κελιά κρυσταλλίτη. Αντίστοιχα το μέγεθος $Crack_{gb_{cells}}$ αναφέρεται στα κελιά διεπιφάνειας και το μέγεθος $Crack_{inc_{cells}}$ στα κελιά άμορφης μήτρας. Το μέγεθος $Crack_{inc}$ δίνει τον αριθμό των κρυσταλλιτών που σπάνε κατά τη διάδοση μίας ρωγμής. Το μέγεθος $Length_{eff}$ είναι το ενεργό μήκος, δηλαδή το μήκος της συνολικής πορείας που διένυσε η ρωγμή. Το μέγεθος $Length_{avg}$ είναι το μέσο μήκος διάδοσης, δηλαδή το μήκος που ορίζεται από τη διακεκομμένη κίτρινη ευθεία γραμμή που ενώνει την αρχή με το τέλος της διαδρομής της ρωγμής, όπως φαίνεται στο σχήμα 3.1. Επειδή το μοντέλο της εργασίας στην παρούσα φάση δεν είναι πλήρως βαθμονομημένο, οι μονάδες του μήκους δε μπορούν να οριστούν βάση του (S. I.) και εκφράζονται ως αριθμός κελιών του πίνακα. Έτσι και το μέσο μήκος στο σχήμα 3.1 ορίζεται ως ο μέσος αριθμός κελιών που θα κάλυπταν τη διακεκομμένη γραμμή αν ήταν κανονικά στοιχισμένα, βάση του πυθαγόρειου θεωρήματος, χρησιμοποιώντας τις συντεταγμένες των κελιών αρχής και τέλους, που όπως προαναφέρθηκε μετρούνται σε συντεταγμένες γραμμών και στηλών του πίνακα.



Σχήμα 3.1 Σχηματική απεικόνιση του μέσου μήκους της πορείας μίας ρωγμής

Με τη σειρά τους τα μεγέθη $Move_{times}$ και $Stay_{times}$ αντιστοιχούν σε μονάδες χρόνου. Στην ουσία είναι ο αριθμός βημάτων κίνησης και ο αριθμός στάσεων μίας ρωγμής, αλλά μπορούν να εκφραστούν και ως μεγέθη προσδιορισμού χρόνου. Το άθροισμα των δύο αυτών μεγεθών είναι ο συνολικός χρόνος που διήρκεσε το φαινόμενο. Και πάλι οι μονάδες χρόνου δε μπορούν να οριστούν με ακρίβεια στο (S.I.) και για το λόγο αυτό στη συγκεκριμένη περίπτωση το άθροισμα τους χρησιμοποιήθηκε σαν εμπειρικό μέγεθος που εκφράζει χρόνο σε βήματα διεξαγωγής του φαινομένου.

Τέλος χρησιμοποιώντας τα παραπάνω μεγέθη υπολογίστηκαν και τα μεγέθη $Velocity_{avg}$ και $Velocity_{eff}$ που είναι μεγέθη ταχύτητας. Ομοίως είναι εμπειρικά μεγέθη και η μονάδα μέτρησης τους ορίζεται αντίστοιχα βάση των μονάδων των μεγεθών $Length_{avg}$ και $Length_{eff}$ προς τις μονάδες χρόνου του αθροίσματος των μεγεθών $Move_{times}$ και $Stay_{times}$. Εν γέννη η μονάδα μέτρησης είναι ο αριθμός των κελιών που έχουν σπάσει προς τα βήματα διεξαγωγής του φαινομένου. Τα μεγέθη των ταχυτήτων υπολογίζονται σύμφωνα με τις εξισώσεις 3.1 και 3.2.

$$Velocity_{avg} = \frac{Length_{avg}}{Move_{times} + Stay_{times}} \quad (3.1)$$

$$Velocity_{eff} = \frac{Length_{eff}}{Move_{times} + Stay_{times}} \quad (3.2)$$

3.2.1.ΕΛΕΓΧΟΣ ΣΥΓΚΛΙΣΗΣ ΜΟΝΤΕΛΟΥ

Το πρώτο βήμα αφού στήθηκε το μοντέλο, όπως περιγράφηκε στην **ενότητα 2**, ήταν να γίνουν διάφορες δοκιμές στατιστικών ελέγχων των εξαγόμενων αποτελεσμάτων, αλλά και έλεγχος ορθότητας του ίδιου του μοντέλου. Σκοπός της στατιστικής ανάλυσης των μεγεθών αυτών και του μοντέλου, ήταν να εξαχθούν συμπεράσματα σχετικά με τη συμπεριφορά τους, αλλά και να ελεγχθούν διάφορα προβλήματα που μπορεί να υπάρχουν. Τέτοια είναι η σύγκλιση των αποτελεσμάτων, τα φαινόμενα επίδρασης μεγέθους μήτρας και οι διαφορετικές μέθοδοι δειγματοληψίας.

Βασικό εμπόδιο κατά την εξαγωγή αποτελεσμάτων ήταν το κόστος του υπολογιστικού χρόνου. Έτσι κρίθηκε μείζονος σημασίας να διασαφηνιστεί ο ελάχιστος αριθμός επαναλήψεων, ώστε τα αποτελέσματα να συγκλίνουν με ασφάλεια. Αρχικά η διαδικασία παραγωγής αποτελεσμάτων βασίστηκε στη διάδοση πολλών διαφορετικών ρωγμών σε ένα δοκίμιο, εκ νέου κάθε φορά. Έγιναν 4 δοκιμαστικά τεστ για το σκοπό αυτό, όπως φαίνονται στον *πίνακα 3.2*.

Πίνακας 3.2 Στοιχεία δοκιμών ελέγχου σύγκλισης

ΤΕΣΤ 1	$c = 30\%$	$s = 3$	$P_f = 0.5$	10000 επαναλήψεις
ΤΕΣΤ 2	$c = 30\%$	$s = 3$	$P_f = 0.9$	10000 επαναλήψεις
ΤΕΣΤ 3	$c = 30\%$	$s = 6$	$P_f = 0.5$	10000 επαναλήψεις
ΤΕΣΤ 4	$c = 30\%$	$s = 6$	$P_f = 0.9$	10000 επαναλήψεις

Τα μεγέθη που ελέγχθηκαν ως προς τη σύγκλιση τους ήταν το μέσο και ενεργό μήκος διάδοσης και η μέση και ενεργή ταχύτητα διάδοσης. Υπολογίστηκε για το κάθε μέγεθος το σωρευτικό άθροισμα για τις 10000 επαναλήψεις και ελέγχθηκε το κριτήριο του *Cauchy*, ανά διαστήματα επαναλήψεων όπως φαίνεται στα αποτελέσματα των πινάκων 3.3÷3.6. Στους πίνακες αποτελεσμάτων της ενότητας αυτής έχει γίνει στρογγυλοποίηση των τιμών του μέσου και ενεργού μήκους διάδοσης, κρατώντας ένα δεκαδικό ψηφίο, και των τιμών της μέσης και ενεργής ταχύτητας διάδοσης, κρατώντας δύο δεκαδικά ψηφία. Αυτό έγινε γιατί η τυπική απόκλιση του μήκους ήταν σημαντική ως προς το ακέραιο κομμάτι του αριθμού, ενώ η τυπική απόκλιση της ταχύτητας ήταν σημαντική ως προς το δεύτερο δεκαδικό ψηφίο του αριθμού. Οι τιμές του μεγέθους r περιέχουν και τα τέσσερα δεκαδικά ψηφία, όπως υπολογίστηκαν, καθώς η τιμή του είναι σημαντική και συγκρίσιμη ως προς το τέταρτο δεκαδικό ψηφίο. Η σχέση του κριτηρίου αυτού δίνεται στην *εξίσωση 3.3*.

$$r = \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{|a_n|} \quad (3.3)$$

Όπου $\left\{ \begin{array}{l} r < 1 \text{ το αποτέλεσμα συγκλίνει} \\ r = 1 \text{ το αποτέλεσμα έχει άγνωστη συμπεριφορά} \\ r > 1 \text{ το αποτέλεσμα αποκλίνει} \end{array} \right.$

Πίνακας 3.3 Αποτελέσματα σύγκλισης μήκους και ταχύτητας για $s = 3$, $P_f = 0.5$

ΤΕΣΤ 1								
$s = 6$ $P_f = 0.5$	μέσο μήκος	r μέσου μήκους	μέση ταχύτητα	r μέσης ταχύτητας	ενεργή ταχύτητα	r ενεργής ταχύτητας	ενεργό μήκος	r ενεργού μήκους
2000 Επαναλήψεις	8.1	1.0049	0.27	1.0032	0.85	1.0037	24.8	1.0054
4000 Επαναλήψεις	8.2	1.0026	0.27	1.0018	0.84	1.0020	24.9	1.0029
6000 Επαναλήψεις	8.2	1.0018	0.27	1.0012	0.84	1.0014	24.9	1.0020
8000 Επαναλήψεις	8.2	1.0014	0.27	1.0010	0.84	1.0011	24.9	1.0015
10000 Επαναλήψεις	8.2	1.0011	0.27	1.0008	0.84	1.0009	24.9	1.0012

Πίνακας 3.4 Αποτελέσματα σύγκλισης μήκους και ταχύτητας για $s = 3$, $P_f = 0.9$

ΤΕΣΤ 2								
$s = 6$ $P_f = 0.5$	μέσο μήκος	r μέσου μήκους	μέση ταχύτητα	r μέσης ταχύτητας	ενεργή ταχύτητα	r ενεργής ταχύτητας	ενεργό μήκος	r ενεργού μήκους
2000 Επαναλήψεις	16.1	1.0052	0.55	1.0035	0.86	1.0037	25.4	1.0054
4000 Επαναλήψεις	16.0	1.0028	0.54	1.0019	0.86	1.0020	25.4	1.0029
6000 Επαναλήψεις	16.0	1.0019	0.54	1.0013	0.86	1.0014	25.4	1.0020
8000 Επαναλήψεις	16.0	1.0015	0.54	1.0010	0.86	1.0011	25.4	1.0015
10000 Επαναλήψεις	16.0	1.0012	0.54	1.0009	0.86	1.0009	25.4	1.0012

Πίνακας 3.5 Αποτελέσματα σύγκλισης μήκους και ταχύτητας για $s = 6$, $P_f = 0.5$

ΤΕΣΤ 3								
$s = 6$ $P_f = 0.5$	μέσο μήκος	r μέσου μήκους	μέση ταχύτητα	r μέσης ταχύτητας	ενεργή ταχύτητα	r ενεργής ταχύτητας	ενεργό μήκος	r ενεργού μήκους
2000 Επαναλήψεις	10.0	1.0050	0.23	1.0031	0.77	1.0037	36.2	1.0056
4000 Επαναλήψεις	10.0	1.0027	0.23	1.0017	0.77	1.0020	36.4	1.0030
6000 Επαναλήψεις	10.0	1.0018	0.23	1.0012	0.77	1.0014	36.3	1.0021
8000 Επαναλήψεις	10.1	1.0014	0.23	1.0009	0.77	1.0011	36.3	1.0016
10000 Επαναλήψεις	10.1	1.0012	0.23	1.0008	0.77	1.0009	36.3	1.0013

Πίνακας 3.6 Αποτελέσματα σύγκλισης μήκους και ταχύτητας για $s = 6$, $P_f = 0.9$

ΤΕΣΤ 4								
$s = 6$ $P_f = 0.9$	μέσο μήκος	r μέσου μήκους	μέση ταχύτητα	r μέσης ταχύτητας	ενεργή ταχύτητα	r ενεργής ταχύτητας	ενεργό μήκος	r ενεργού μήκους
2000 Επαναλήψεις	14.7	1.0052	0.43	1.0034	0.74	1.0037	26.8	1.0055
4000 Επαναλήψεις	14.7	1.0027	0.43	1.0019	0.74	1.0020	26.9	1.0029
6000 Επαναλήψεις	14.7	1.0019	0.43	1.0013	0.74	1.0014	27	1.0020
8000 Επαναλήψεις	14.7	1.0015	0.43	1.0010	0.74	1.0011	26.9	1.0015
10000 Επαναλήψεις	14.7	1.0012	0.43	1.0008	0.74	1.0009	26.9	1.0013

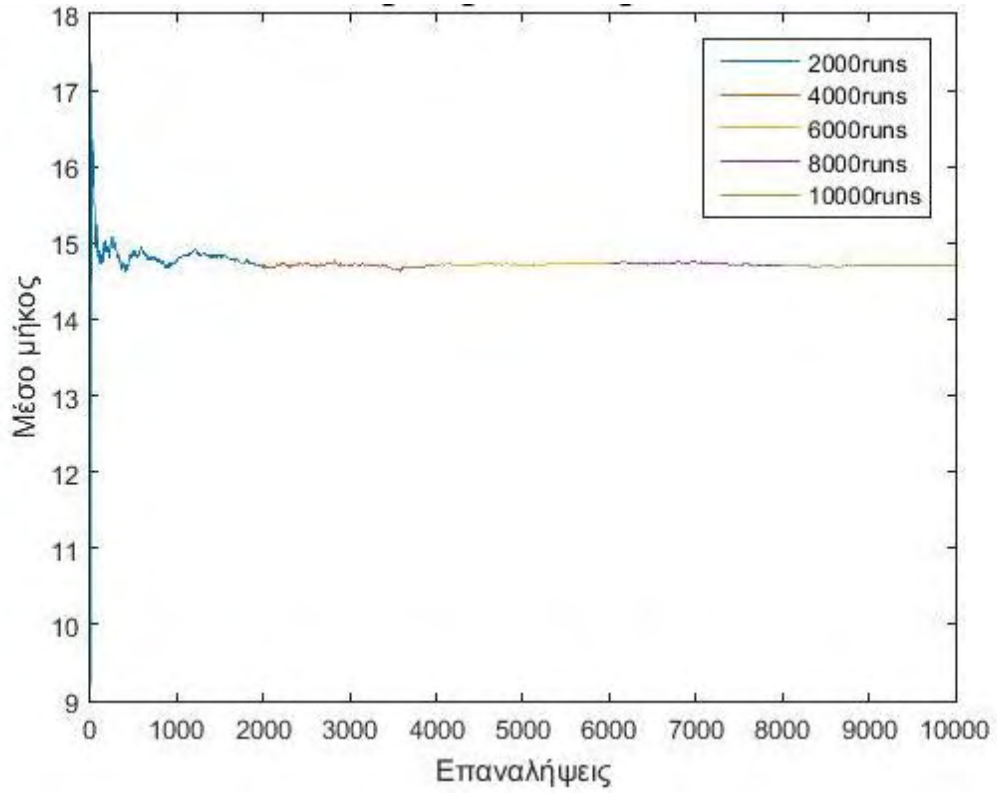
Σχόλια-Παρατηρήσεις

Σχετικά με τον έλεγχο σύγκλισης των μεγεθών, παρατηρείται ότι το κριτήριο του *Cauchy* έχει σχεδόν την ίδια τιμή σε όλα τα τεστ. Αυτό σημαίνει ότι η σύγκλιση είναι ανεξάρτητη των διαφορετικών παραμέτρων. Είτε δηλαδή το πείραμα αφορά μικρούς ή μεγάλους κρυσταλλίτες, είτε αφορά διαφορετικούς τρόπου διάδοσης, δηλαδή για διάφορες τιμές P_f .

Σε δεύτερη φάση παρατηρείται ότι στις 2000 επαναλήψεις η τιμή του κριτηρίου είναι σχεδόν ίση με τη μονάδα. Σύμφωνα με το κριτήριο *Cauchy* αυτό σημαίνει ότι δε μπορεί κάποιος να είναι απόλυτα σίγουρος για τη σύγκλιση του αποτελέσματος. Δηλαδή μπορεί να συγκλίνει, αλλά μπορεί και όχι. Καθώς οι επαναλήψεις αυξάνονται παρατηρείται ότι ο συντελεστής μειώνεται, αλλά με πολύ αργό ρυθμό και τείνει προς τη μονάδα. Επίσης οι τιμές των αποτελεσμάτων έχουν ελάχιστες αποκλίσεις, έως μηδαμινές στο σύνολο αυτών των τεστ. Συμπερασματικά υπάρχει σύγκλιση με πολύ αργό ρυθμό σε μία συγκεκριμένη τιμή. Βάση των τεστ και συγκρίνοντας τον αριθμό των επαναλήψεων, μπορεί κάποιος να πει ότι ο αριθμός των 2000 επαναλήψεων είναι ασφαλής για να σταματήσει κάποιος το πείραμα. Επιπλέον παρατηρείται ότι όσο αφορά τα μεγέθη του μέσου μήκους και μέσης ταχύτητας τείνουν να συγκλίνουν πιο γρήγορα από τα μεγέθη του ενεργού μήκους και της ενεργής ταχύτητας. Επίσης τα μεγέθη των ταχυτήτων φαίνεται να συγκλίνουν πιο γρήγορα από τα μεγέθη των μηκών.

Για το εύρος των τιμών των διαφόρων παραμέτρων που ελέγχθηκαν και χρησιμοποιούνται στην παρούσα εργασία, συμπεραίνεται ότι τα αποτελέσματα συγκλίνουν για τις 2000 επαναλήψεις και η σύγκλιση είναι ανεξάρτητη της αλλαγής των τιμών των παραμέτρων εισόδου του αλγόριθμου. Για μεγαλύτερη εποπτεία παρατίθεται ενδεικτικά το *διάγραμμα 3.1*, όπου απεικονίζει τη σύγκλιση του *TEST 1*.

Διάγραμμα 3.1 Σύγκλιση μέσου μήκους για $c = 30\%$, $s = 3$, $P_f = 0.5$



3.3.1.ΕΛΕΓΧΟΣ ΜΕΘΟΔΩΝ ΔΕΙΓΜΑΤΟΛΗΨΙΑΣ

Όπως αναφέρθηκε και στην **ενότητα 2**, η πρώτη δειγματοληπτική μέθοδος του μοντέλου της εργασίας είναι να μπορεί να δημιουργεί ρωγμές σε ένα συγκεκριμένο ψηφιακό δοκίμιο πολλές φορές από την αρχή και προτιμάται λόγω καλύτερης υπολογιστικής ταχύτητας, ενώ η δεύτερη δειγματοληπτική μέθοδος είναι να παράγει πολλά διαφορετικά ψηφιακά δοκίμια ίδιας σύστασης, και σε κάθε ένα από αυτά να εκτελεί το πείραμα μία μόνο φορά, όπως γίνεται και στην πραγματικότητα στο εργαστήριο.

Ο έλεγχος που παρουσιάζεται εδώ έχει ως στόχο να διασαφηνίσει πιθανές επιπτώσεις στα αποτελέσματα, που μπορεί να υπήρχαν εξαιτίας της μεθόδου δειγματοληψίας. Τα τεστ που έγιναν παρουσιάζονται αναλυτικά στον πίνακα 3.14, ενώ στους πίνακες 3.15 και 3.16 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των δοκιμών που έγιναν. Όσο αφορά τα τεστ 2 και 3 οι επαναλήψεις που έγιναν δεν είναι 2000. Αυτό έγινε εξαιτίας αδύναμου υπολογιστικού μηχανήματος που ήταν διαθέσιμο για τη διεξαγωγή των δοκιμών αυτών.

Πίνακας 3.7 Στοιχεία δοκιμών ελέγχου μεθόδων δειγματοληψίας

ΤΕΣΤ 1	2000 ρωγμές σε ένα δοκίμιο	$s = 6$	$c = 30\%$	$KT = 1$ $P_f = 0.9$	$E_{mat} = 1$ $E_{gb} = 1.5$ $E_{inc} = 2$
ΤΕΣΤ 2	1287 δοκίμια με μία ρωγμή	$s = 6$			
ΤΕΣΤ 3	2000 ρωγμές σε ένα δοκίμιο	$s = 3$			
ΤΕΣΤ 4	1377 δοκίμια με μία ρωγμή	$s = 3$			

Πίνακας 3.8 Αποτελέσματα επίδρασης των μεθόδων δειγματοληψίας στο μέσο μήκος και τη μέση ταχύτητα

	μέσο μήκος	r μέσου μήκους	απόκλιση μέσου μήκους	μέση ταχύτητα	r μέσης ταχύτητας	απόκλιση μέσης ταχύτητας
ΤΕΣΤ 1	21.2	1.0053	2.6%	0.5528	1.0035	1.4%
ΤΕΣΤ 2	20.6	1.0079		0.5449	1.0051	
ΤΕΣΤ 3	19.5	1.0053	1.4%	0.5546	1.0035	0.4%
ΤΕΣΤ 4	19.2	1.0074		0.5571	1.0048	

Πίνακας 3.9 Αποτελέσματα επίδρασης των μεθόδων δειγματοληψίας στο ενεργό μήκος και στην ενεργή ταχύτητα

	ενεργό μήκος	r ενεργού μήκους	απόκλιση ενεργού μήκους	ενεργή ταχύτητα	r ενεργής ταχύτητας	απόκλιση ενεργής ταχύτητας
ΤΕΣΤ 1	37.1390	1.0056	0.8%	0.96	1.0038	0.5%
ΤΕΣΤ 2	36.8446	1.0084		0.97	1.0056	
ΤΕΣΤ 3	33.1890	1.0056	0.3%	0.95	1.0038	1%
ΤΕΣΤ 4	33.1002	1.0078		0.94	1.0052	

Σχόλια-Παρατηρήσεις

Όπως φαίνεται στους πίνακες 3.15 και 3.16 τα τελικά αποτελέσματα των μελετώμενων μεγεθών συγκλίνουν ικανοποιητικά στις ίδιες τιμές με πολύ μικρές αποκλίσεις. Συμπεραίνεται λοιπόν ότι για το εύρος των τιμών των μεγεθών που έχουν μελετηθεί μπορεί να χρησιμοποιηθεί με ασφάλεια η πρώτη πειραματική μέθοδος. Δηλαδή η διάδοση πολλών ρωγμών σε ένα συγκεκριμένο δοκίμιο εκ νέου. Το συγκεκριμένο συμπέρασμα που προκύπτει από τον έλεγχο αυτό είναι πολύ θετικό, καθώς η πρώτη μέθοδος είναι πολύ πιο γρήγορη υπολογιστικά σε σχέση με τη δεύτερη.

3.4.1.ΕΛΕΓΧΟΣ ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΦΑΙΝΟΜΕΝΩΝ ΜΕΓΕΘΟΥΣ ΜΗΤΡΑΣ

Ο δεύτερος έλεγχος ήταν σχετικός με πιθανά φαινόμενα επίδρασης του μεγέθους της μήτρας. Δηλαδή ελέγχθηκε αν για την ίδια δοθείσα αρχική ενέργεια διάδοσης ρωγμής τα αποτελέσματα θα ήταν τα ίδια σε δοκίμια με τα ίδια χαρακτηριστικά, όπως συγκέντρωση, μεγέθη κρυστάλλων κ.λπ. αλλά οι διαστάσεις του πίνακα του δοκιμίου να διαφέρουν. Επίσης στο συγκεκριμένο έλεγχο, πέρα από τον έλεγχο του αυτονόητου μεγέθους n που έχει επίδραση στο φαινόμενο μεγέθους μήτρας, έγινε έλεγχος και της πιθανής επιρροής των τιμών της συγκέντρωσης και της παραμέτρου P_f στο φαινόμενο αυτό.

Τα τεστ διεξήχθησαν για πλάτος κρυσταλλιτών $s = 6$ και τυπική απόκλιση μεγέθους $sd = 1$. Το πλάτος της διεπιφάνειας ήταν $p = 2$, ενώ οι τιμές των ενεργειών σύνδεσης των στοιχείων ήταν $E_{mat} = 1$, $E_{gb} = 1.5$ και $E_{inc} = 2$. Επίσης τα τεστ έγιναν για τρεις διαφορετικές τιμές συγκέντρωσης $c = 5\%$, $c = 15\%$ και $c = 25\%$ και για τρεις διαφορετικές διαστάσεις του ψηφιακού δοκιμίου $n = 100$, $n = 200$ και $n = 300$. Αναλυτικότερα τα τεστ έγιναν σύμφωνα με τον πίνακα 3.7, ενώ στους πίνακες 3.8÷3.13 παρουσιάζονται τα σχετικά αποτελέσματα.

Πίνακας 3.10 Στοιχεία δοκιμών ελέγχου επίδρασης φαινομένων μεγέθους μήτρας

ΤΕΣΤ 1	Δοκίμιο 100x100	$P_f = 0.5$	$c = 5\%$
ΤΕΣΤ 2	Δοκίμιο 100x100	$P_f = 0.9$	$c = 5\%$
ΤΕΣΤ 3	Δοκίμιο 200x200	$P_f = 0.5$	$c = 5\%$
ΤΕΣΤ 4	Δοκίμιο 200x200	$P_f = 0.9$	$c = 5\%$
ΤΕΣΤ 5	Δοκίμιο 300x300	$P_f = 0.5$	$c = 5\%$
ΤΕΣΤ 6	Δοκίμιο 300x300	$P_f = 0.9$	$c = 5\%$
ΤΕΣΤ 7	Δοκίμιο 100x100	$P_f = 0.5$	$c = 15\%$
ΤΕΣΤ 8	Δοκίμιο 100x100	$P_f = 0.9$	$c = 15\%$
ΤΕΣΤ 9	Δοκίμιο 200x200	$P_f = 0.5$	$c = 15\%$
ΤΕΣΤ 10	Δοκίμιο 200x200	$P_f = 0.9$	$c = 15\%$
ΤΕΣΤ 11	Δοκίμιο 300x300	$P_f = 0.5$	$c = 15\%$
ΤΕΣΤ 12	Δοκίμιο 300x300	$P_f = 0.9$	$c = 15\%$
ΤΕΣΤ 13	Δοκίμιο 100x100	$P_f = 0.5$	$c = 25\%$
ΤΕΣΤ 14	Δοκίμιο 100x100	$P_f = 0.9$	$c = 25\%$
ΤΕΣΤ 15	Δοκίμιο 200x200	$P_f = 0.5$	$c = 25\%$
ΤΕΣΤ 16	Δοκίμιο 200x200	$P_f = 0.9$	$c = 25\%$
ΤΕΣΤ 17	Δοκίμιο 300x300	$P_f = 0.5$	$c = 25\%$
ΤΕΣΤ 18	Δοκίμιο 300x300	$P_f = 0.9$	$c = 25\%$

Πίνακας 3.11 Αποτελέσματα επίδρασης φαινομένων μεγέθους μήτρας μήκος και στην ταχύτητα για $c = 5\%$, $P_f = 0.5$

$c = 5\%$ $P_f = 0.5$	μέσο μήκος	<i>max</i> απόκλιση μέσου μήκους	μέση ταχύτητα	<i>max</i> απόκλιση μέσης ταχύτητας	ενεργή ταχύτητα	<i>max</i> απόκλιση ενεργής ταχύτητας	ενεργό μήκος	<i>max</i> απόκλιση ενεργού μήκους
ΤΕΣΤ 1 δοκίμιο 100x100	12.5	6.9% Τεστ 1-5	0.23	1.7% Τεστ 1-5	0.97	1.17% Τεστ 1-5	52.6	5.3% Τεστ 1-5
ΤΕΣΤ 3 δοκίμιο 200x200	12.4		0.23		0.96		52.3	
ΤΕΣΤ 5 δοκίμιο 300x300	11.8		0.23		0.96		49.8	

Πίνακας 3.12 Αποτελέσματα επίδρασης φαινομένων μεγέθους μήτρας στο μήκος και στην ταχύτητα για $c = 15\%$, $P_f = 0.5$

$c = 15\%$ $P_f = 0.5$	μέσο μήκος	<i>max</i> απόκλιση μέσου μήκους	μέση ταχύτητα	<i>max</i> απόκλιση μέσης ταχύτητας	ενεργή ταχύτητα	<i>max</i> απόκλιση ενεργής ταχύτητας	ενεργό μήκος	<i>max</i> απόκλιση ενεργού μήκους
ΤΕΣΤ 7 δοκίμιο 100x100	11.7	13.1% Τεστ 9-11	0.24	9.8% Τεστ 9-11	0.94	0.9% Τεστ 9-11	47.1	21.7% Τεστ 9-11
ΤΕΣΤ 9 δοκίμιο 200x200	11.7		0.23		0.95		48.2	
ΤΕΣΤ 11 δοκίμιο 300x300	10.4		0.26		0.94		37.7	

Πίνακας 3.13 Αποτελέσματα επίδρασης φαινομένων μεγέθους μήτρας στο μήκος και στην ταχύτητα για $c = 25\%$, $P_f = 0.5$

$c = 25\%$ $P_f = 0.5$	μέσο μήκος	<i>max</i> απόκλιση μέσου μήκους	μέση ταχύτητα	<i>max</i> απόκλιση μέσης ταχύτητας	ενεργή ταχύτητα	<i>max</i> απόκλιση ενεργής ταχύτητας	ενεργό μήκος	<i>max</i> απόκλιση ενεργού μήκους
ΤΕΣΤ 13 δοκίμιο 100x100	10.6	1.4% Τεστ 13-15	0.24	4.7% Τεστ 13-15	0.92	1.25% Τεστ 13-15	40.9	5.1% Τεστ 13-15
ΤΕΣΤ 15 δοκίμιο 200x200	10.4		0.25		0.93		38.8	
ΤΕΣΤ 17 δοκίμιο 300x300	10.6		0.25		0.93		39.8	

Πίνακας 3.14 Αποτελέσματα επίδρασης φαινομένων μεγέθους μήτρας στο μήκος και στην ταχύτητα για $c = 5\%$, $P_f = 0.9$

$c = 5\%$ $P_f = 0.9$	μέσο μήκος	<i>max</i> απόκλιση μέσου μήκους	μέση ταχύτητα	<i>max</i> απόκλιση μέσης ταχύτητας	ενεργή ταχύτητα	<i>max</i> απόκλιση ενεργής ταχύτητας	ενεργό μήκος	<i>max</i> απόκλιση ενεργού μήκους
ΤΕΣΤ 2 δοκίμιο 100x100	25.1	1.5% Τεστ 2-6	0.52	1.9% Τεστ 4-6	1.01	0.5% Τεστ 2-6	49.1	3.1% Τεστ 2-6
ΤΕΣΤ 4 δοκίμιο 200x200	24.7		0.51		1.01		49.0	
ΤΕΣΤ 6 δοκίμιο 300x300	24.7		0.52		1.01		47.6	

Πίνακας 3.15 Αποτελέσματα επίδρασης φαινομένων μεγέθους μήτρας στο μήκος και στην ταχύτητα για $c = 15\%$, $P_f = 0.9$

$c = 15\%$ $P_f = 0.9$	μέσο μήκος	<i>max</i> απόκλιση μέσου μήκους	μέση ταχύτητα	<i>max</i> απόκλιση μέσης ταχύτητας	ενεργή ταχύτητα	<i>max</i> απόκλιση ενεργής ταχύτητας	ενεργό μήκος	<i>max</i> απόκλιση ενεργού μήκους
ΤΕΣΤ 8 δοκίμιο 100x100	22.6	8.4% Τεστ 10-12	0.53	8.7% Τεστ 10-12	0.99	0.75% Τεστ 8-12	42.6	15.9% Τεστ 10-12
ΤΕΣΤ 10 δοκίμιο 200x200	22.9		0.52		0.99		44.2	
ΤΕΣΤ 12 δοκίμιο 300x300	21.1		0.56		0.99		37.2	

Πίνακας 3.16 Αποτελέσματα επίδρασης φαινομένων μεγέθους μήτρας στο μήκος και στην ταχύτητα για $c = 25\%$, $P_f = 0.9$

$c = 25\%$ $P_f = 0.9$	μέσο μήκος	<i>max</i> απόκλιση μέσου μήκους	μέση ταχύτητα	<i>max</i> απόκλιση μέσης ταχύτητας	ενεργή ταχύτητα	<i>max</i> απόκλιση ενεργής ταχύτητας	ενεργό μήκος	<i>max</i> απόκλιση ενεργού μήκους
ΤΕΣΤ 14 δοκίμιο 100x100	21.0	2.8% Τεστ 14-16	0.55	2.4% Τεστ 14-16	0.97	0.87% Τεστ 14-16	37.2	4% Τεστ 14-16
ΤΕΣΤ 16 δοκίμιο 200x200	20.4		0.56		0.98		35.7	
ΤΕΣΤ 18 δοκίμιο 300x300	20.5		0.55		0.97		36.4	

Σχόλια-Παρατηρήσεις

Παρατηρείται ότι τα ποσοστά απόκλισης των μεγεθών που εξετάστηκαν δεν είναι ιδιαίτερα μεγάλα και γενικά είναι αποδεκτά, δηλαδή αποκλίσεις τιμών μέχρι **10%** περίπου. Εξαιρέση αποτελεί η περίπτωση των δοκιμών για τιμές της παραμέτρου $P_f = 0.5$ και $P_f = 0.9$ και για συγκέντρωση $c = 15\%$. Στις περιπτώσεις αυτές παρατηρείται ότι οι αποκλίσεις των μεγεθών αυξάνονται μέσα στα επιτρεπτά όρια, εκτός του ενεργού μήκους. Αυτό δίνει ενδείξεις ότι σε ενδιάμεσες τιμές συγκέντρωσης το φαινόμενο μεγέθους μήτρας είναι έντονο και αποδίδεται στη διασπορά των κρυστάλλων μέσα στο χώρο της μήτρας, αλλά και στις αποστάσεις μεταξύ των κρυσταλλιτών που συνδέονται με το γεγονός αυτό (Falzone κ.ά., 2016).

Σύμφωνα με τα παραπάνω αποτελέσματα συμπεραίνεται ότι δεν υφίστανται φαινόμενα μεγέθους κατά τη διεξαγωγή των πειραμάτων για ακραίες τιμές συγκέντρωσης, δηλαδή για $c = 5\%$ και $c = 25\%$, και άρα μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη δειγματοληψία ακόμη και δοκίμια διάστασης $n = 100$.

Τα αποτελέσματα του συγκεκριμένου ελέγχου είναι πολύ θετικά, καθώς το μοντέλο φαίνεται να είναι ικανό να εξάγει ικανοποιητικά αποτελέσματα, ξεπερνώντας το πρόβλημα του υπολογιστικού χρόνου που επεξηγήθηκε στις προηγούμενες ενότητες, χρησιμοποιώντας μικρούς χώρους δειγματοληψίας. Με ασφάλεια μπορεί να πει κάποιος, ότι για πολύ μικρές και πολύ υψηλές τιμές συγκέντρωσης ότι τα φαινόμενα μεγέθους μήτρας δεν υπάρχουν. Βάση του κριτηρίου αυτού επιλέχθηκε η χρήση διάστασης πίνακα $n = 300$ για τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στην **ενότητα 4**. Όσο αφορά τις ενδιάμεσες συγκεντρώσεις χρειάζεται να γίνει περαιτέρω ανάλυση. Επίσης στην **ενότητα 4.4** σε κάποια από τις δοκιμές χρησιμοποιείται συγκέντρωση $c = 10\%$ για διάσταση δοκιμίου $n = 300$. Στην περίπτωση αυτή, καθώς στην **ενότητα 4.4** μελετάται μόνο το μέσο μήκος, που όπως δείχθηκε από τον παραπάνω έλεγχο δεν επηρεάζεται σα μέγεθος από φαινόμενα μεγέθους μήτρας, είναι η χρήση πίνακα $n = 300$ για ενδιάμεσες συγκεντρώσεις είναι ασφαλής.

3.5.ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΜΕΣΟΥ-ΕΝΕΡΓΟΥ ΜΗΚΟΥΣ ΚΑΙ ΜΕΣΗΣ-ΕΝΕΡΓΗΣ ΤΑΧΥΤΗΤΑΣ

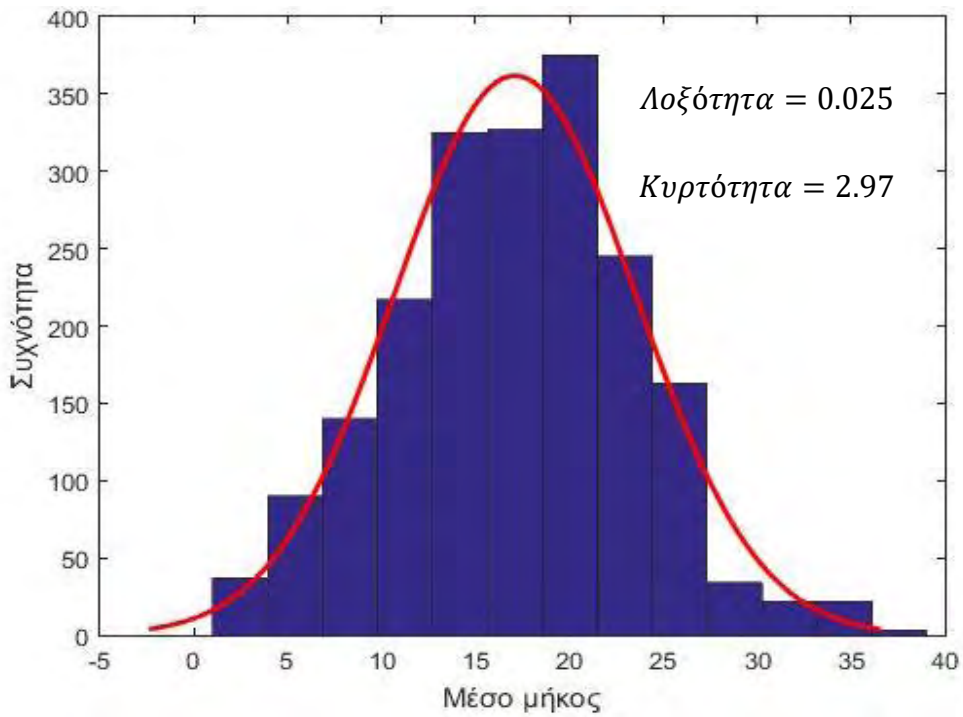
Στα διαγράμματα που παρουσιάζονται στην **ενότητα 4**, χρησιμοποιούνται οι τυπικές αποκλίσεις των μεγεθών. Για το λόγο αυτό κρίθηκε σκόπιμο να γίνει μια σύντομη στατιστική ανάλυση των τεσσάρων σημαντικών μεγεθών που μελετώνται στην εργασία αυτή, δηλαδή του μέσου και ενεργού μήκους, καθώς και της μέσης και ενεργής ταχύτητας διάδοσης της ρωγμής, όπως παρουσιάζονται στην ενότητα αυτή.

Η στατιστική ανάλυση που έγινε, αποτελεί μία πρώτη εκτίμηση, καθώς ο στόχος της εργασίας δεν ήταν αυτός. Αυτό έγινε απλά για να διασαφηνιστεί ότι μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο όρος της τυπικής απόκλισης για τα αποτελέσματα αυτά και να δειχθεί ότι τα μεγέθη αυτά ακολουθούν κάποια συγκεκριμένη κατανομή. Πιο εκτενή και ακριβή στατιστική ανάλυση των αποτελεσμάτων, ώστε να εξαχθούν πιθανά συμπεράσματα για τη συμπεριφορά των μεγεθών, μπορούν να αποτελέσουν κομμάτι μελλοντικής έρευνας.

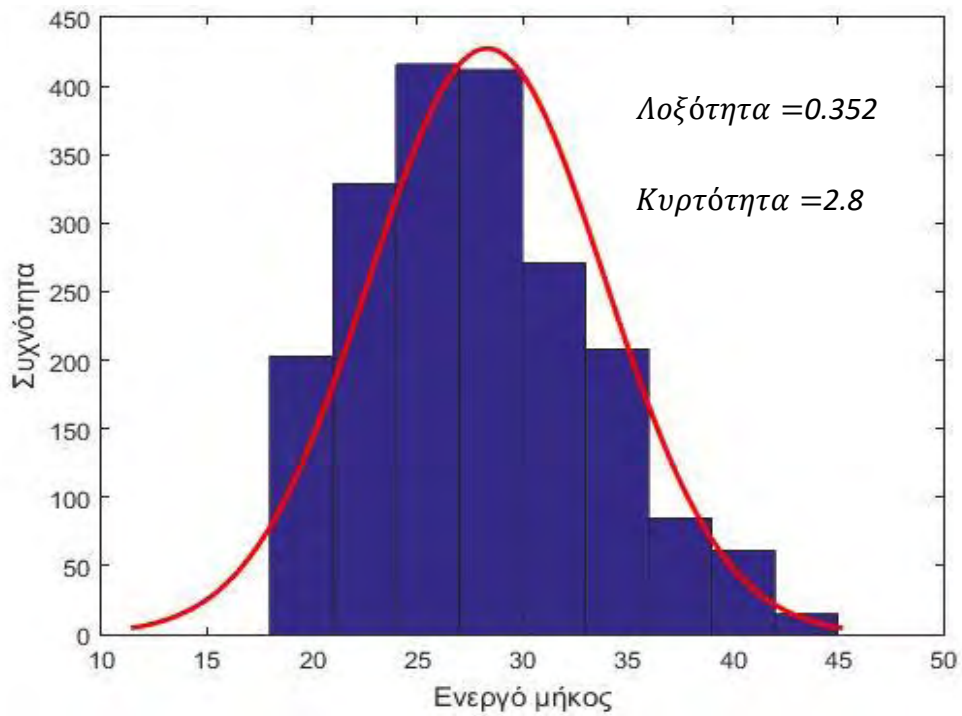
Ενδεικτικά θα παρουσιαστεί η στατιστική ανάλυση του μήκους και της ταχύτητας για μία από τις περιπτώσεις δοκιμών που παρουσιάζονται στην **ενότητα 4**. Η περίπτωση αυτή είναι για τις ενέργειες σύνδεσης των στοιχείων ίσες με $E_{mat} = 1$, $E_{gb} = 2$, $E_{inc} = 3$, ενώ τα χαρακτηριστικά του δοκιμίου ήταν, συγκέντρωση ίση με $c = 30\%$, το μέγεθος των κρυσταλλιτών ίσο με $s = 6$ και η τυπική απόκλιση μεγέθους $sd = 1$, ενώ το πλάτος της διεπιφάνειας ήταν $p = 1$. Η τιμή της θερμοκρασίας ήταν ίση με $KT = 1$ και οι δοκιμές έγιναν για $P_f = 0.9$

Αρχικά παρουσιάζονται τα ιστογράμματα των μεγεθών στα *διαγράμματα 3.2÷3.5*, καθώς και οι τιμές της κύρτωσης και λοξότητας, ώστε να γίνει μία πρώτη εκτίμηση της κανονικότητας της κατανομής των μεγεθών.

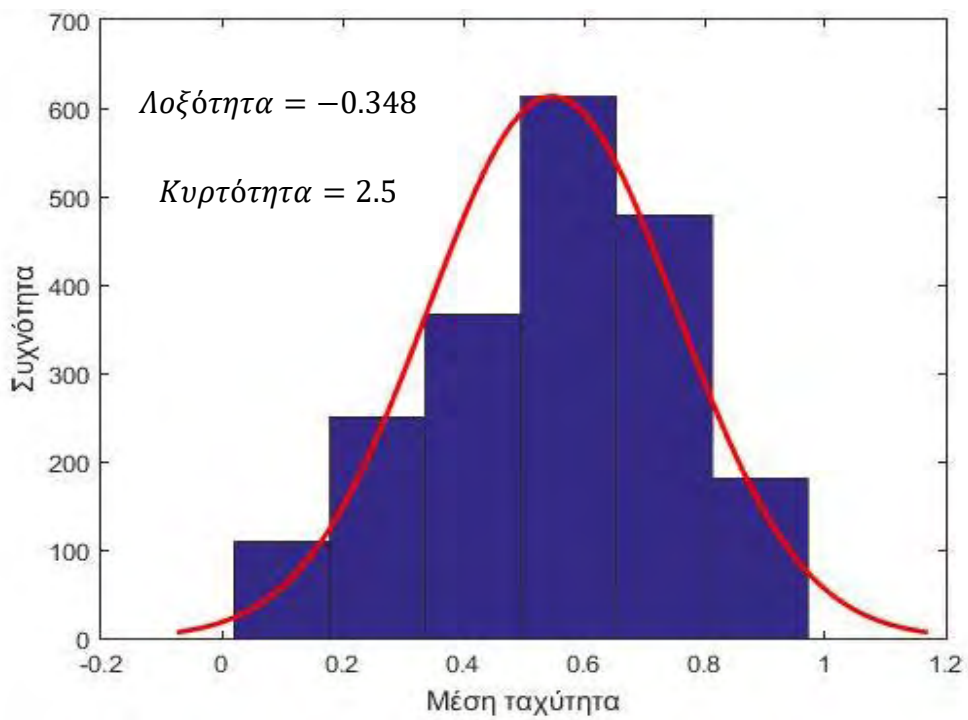
Διάγραμμα 3.2 Ιστόγραμμα μέσου μήκους



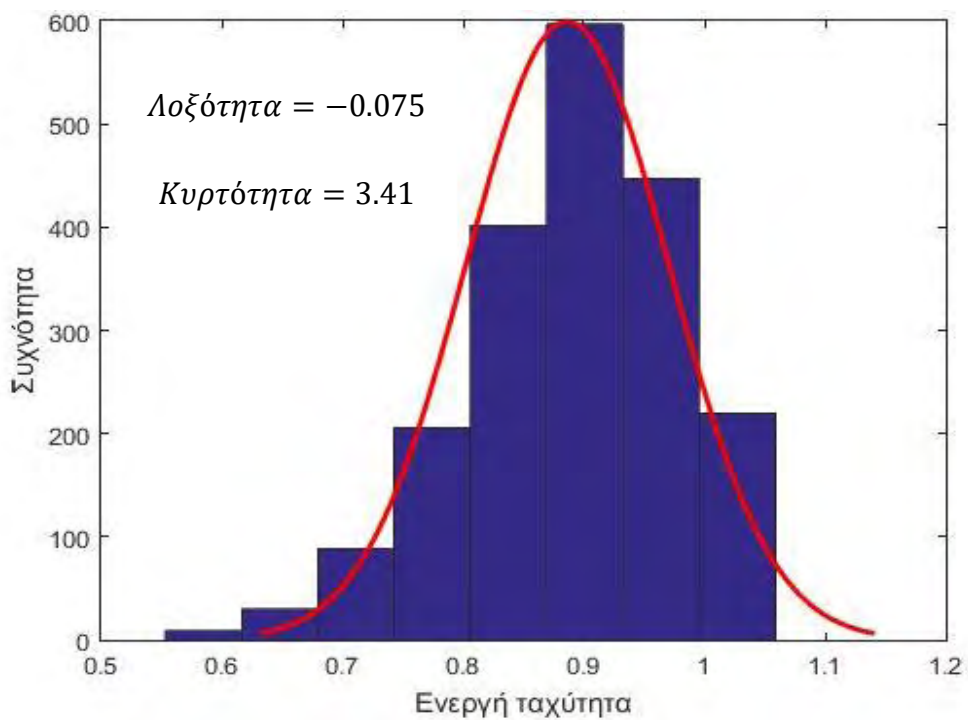
Διάγραμμα 3.3 Ιστόγραμμα ενεργού μήκους



Διάγραμμα 3.4 Ιστόγραμμα μέσης ταχύτητας



Διάγραμμα 3.5 Ιστόγραμμα ενεργής ταχύτητας

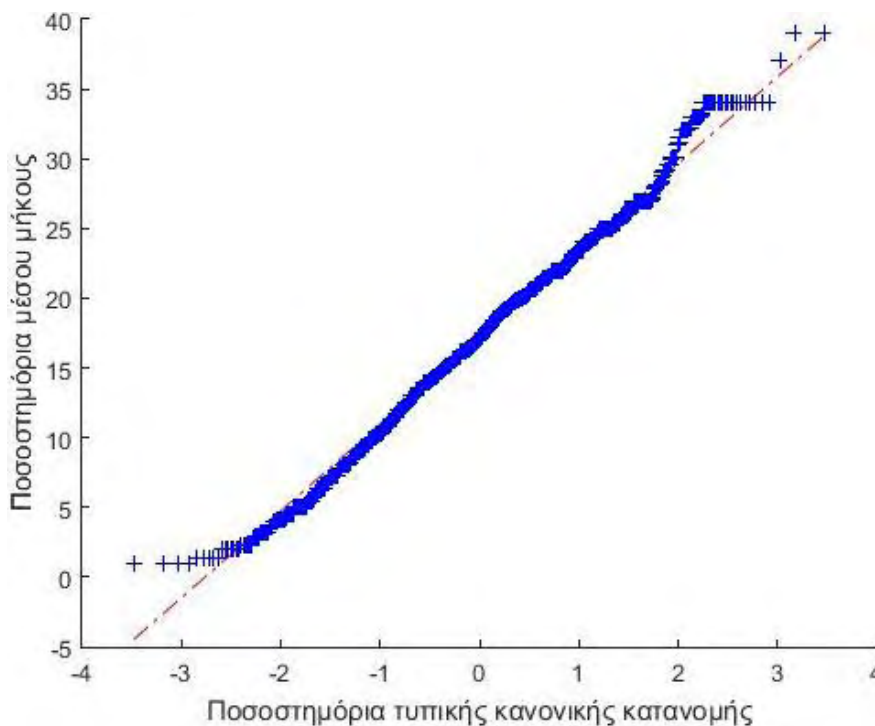


Παρατηρώντας τα ιστογράμματα των μεγεθών, φαίνεται ότι η κατανομή τους είναι αρκετά κοντά με την κανονική κατανομή. Οι τιμές της λοξότητας σε όλες τις περιπτώσεις είναι $-2 < \text{λοξότητα} < 2$, ενώ η τιμή της κύρτωσης είναι περίπου ίση με τρία. Τα στοιχεία αυτά δίνουν ενδείξεις ότι η κατανομή των μεγεθών ακολουθεί κατά προσέγγιση την κανονική κατανομή με μία μικρή λοξότητα.

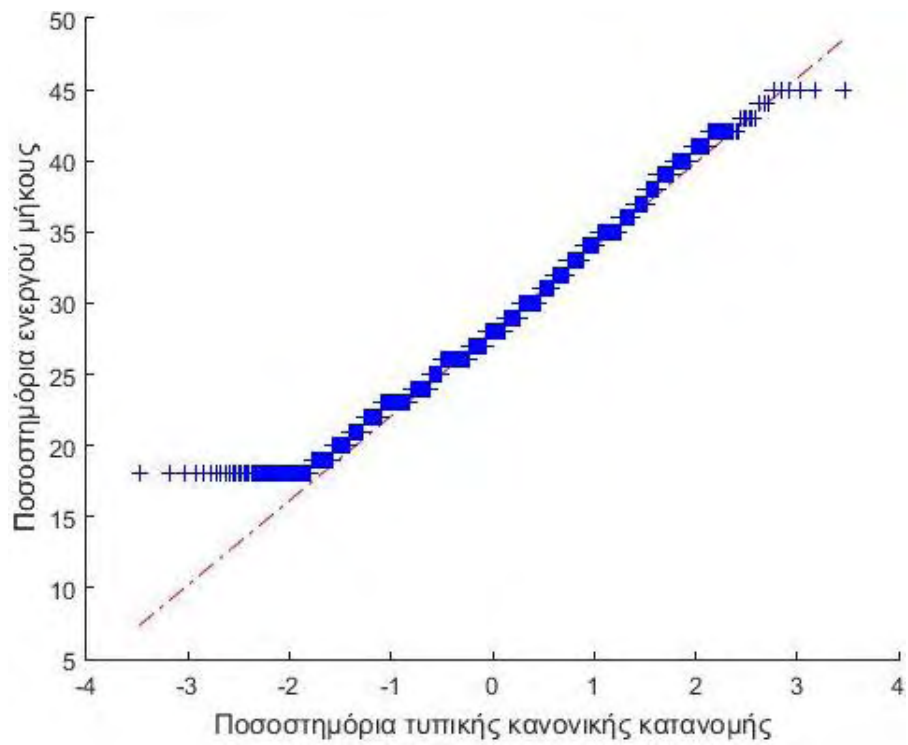
Q-Q Plots

Για να ενισχυθούν οι ενδείξεις αυτές γίνεται ο εμπειρικός έλεγχος του $Q - Q \text{ plot}$. Ο έλεγχος αυτός δεν αποτελεί ασφαλές στατιστικό κριτήριο για να αποδειχθεί ότι η κατανομή των δεδομένων ακολουθεί την κανονική κατανομή, αλλά μπορεί γραφικά να εκτιμηθεί αν η απόκλιση είναι μεγάλη ή όχι ώστε η ανάλυση να συνεχιστεί στο επόμενο στάδιο. Τα διαγράμματα που προκύπτουν από τον έλεγχο αυτό είναι διαγράμματα πιθανότητας, όπου σχεδιάζονται τα ποσοστημόρια της τυπικής κανονικής κατανομής με μέση τιμή το μηδέν, ως προς τα ποσοστημόρια του δείγματος. Όσο πιο κοντά στην διακεκομμένη ευθεία που ορίζεται από τα ποσοστημόρια της τυπικής κανονικής κατανομής, τείνουν να είναι τα σημεία που ορίζονται από τα ποσοστημόρια του δείγματος, τόσο τα δεδομένα του δείγματος φαίνεται να ακολουθούν την κανονική κατανομή. Τα αποτελέσματα του ελέγχου δίνονται στα διαγράμματα 3.6÷3.9.

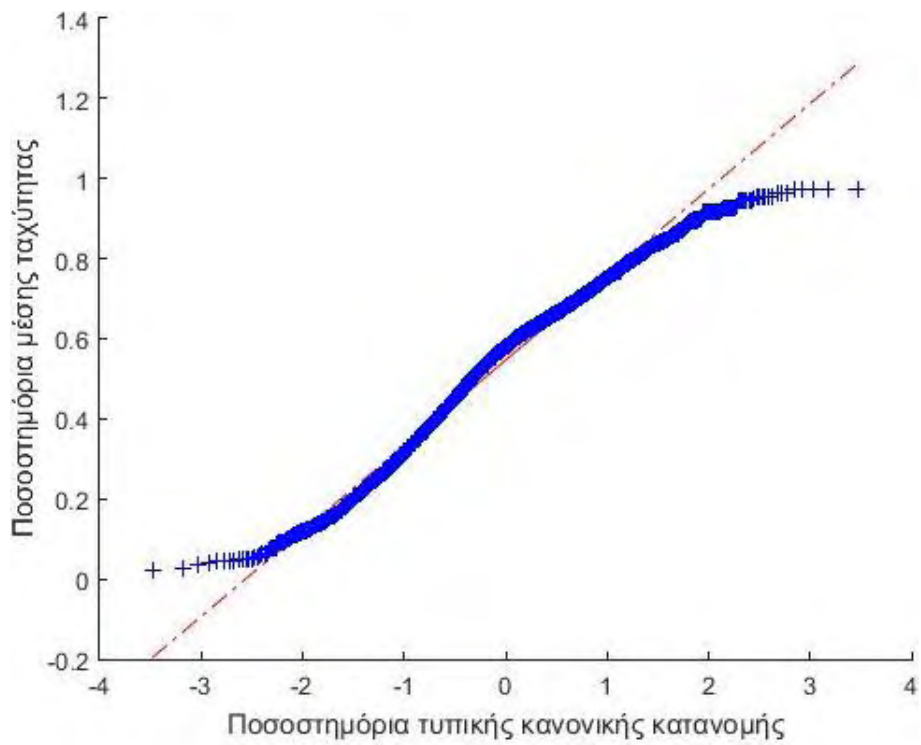
Διάγραμμα 3.6 QQ Plot μέσου μήκους



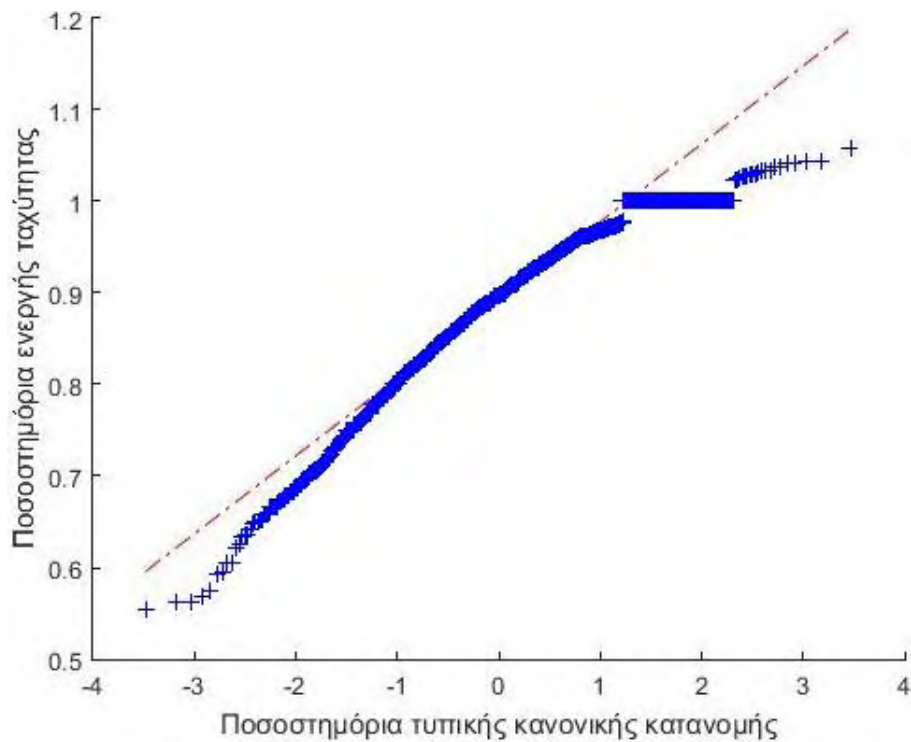
Διάγραμμα 3.7 QQ Plot ενεργού μήκους



Διάγραμμα 3.8 QQ Plot μέσης ταχύτητας



Διάγραμμα 3.9 QQ Plot ενεργής ταχύτητας



Παρατηρώντας το *διαγράμματα 3.6÷3.9* φαίνεται ότι σε όλες τις περιπτώσεις τα ποσοστημότητα των δεδομένων πλησιάζουν αρκετά σε αυτά της κανονικής κατανομής. Σχετικά με τα δεδομένα της μέσης και ενεργής ταχύτητας, φαίνεται ότι υπάρχουν μεγαλύτερες αποκλίσεις σε σχέση με τα αντίστοιχα διαγράμματα των μηκών, αλλά το μεγαλύτερο εύρος των τιμών τους πλησιάζει την ευθεία της κανονικής κατανομής.

Βάση των παρατηρήσεων αυτών, συμπεραίνεται ότι πλέον όλα τα μεγέθη μάλλον ακολουθούν την κανονική κατανομή και άρα η ανάλυση συνεχίζεται με τον έλεγχο του *z – test* ώστε το κριτήριο αυτό να γίνει πιο ισχυρό.

Z-test

Τα δείγματα των μεγεθών αποτελούνται από 2000 τιμές και άρα η χρήση του *z – test* φαίνεται ως η πλέον κατάλληλη σε σύγκριση με άλλα παρόμοια τεστ της βιβλιογραφίας, καθώς δίνει πολύ καλά αποτελέσματα για μεγάλα δείγματα. Επίσης το συγκεκριμένο τεστ δίνει τη δυνατότητα θεώρησης μηδενικής υπόθεσης με συγκεκριμένη μέση τιμή και τυπική απόκλιση.

Τα τεστ έγιναν για διάστημα εμπιστοσύνης 95% και η μηδενική υπόθεση που έγινε, ώστε να προκύψει θετικό αποτέλεσμα, ήταν τα δεδομένα να ακολουθούν κανονική κατανομή με μέσο όρο και τυπική απόκλιση ίση με το μέσο όρο και την τυπική απόκλιση των δεδομένων. Συνεπώς το τεστ θα προκύπτει θετικό για τιμές της $p - value > 5\%$. Η τιμή του 5% προκύπτει, καθώς έχει επιλεγεί διάστημα εμπιστοσύνης 95%. Η παράμετρος $p - value$ είναι η πιθανότητα να ισχύει η μηδενική υπόθεση. Δηλαδή για το τεστ έχει δοθεί 5% πιθανότητα απόκλισης όπου η μηδενική υπόθεση δε θα ισχύει. Οπότε για τιμές μεγαλύτερες από 5%, η πιθανότητα να ισχύει η μηδενική υπόθεση δε μπορεί να απορριφθεί.

Όσο αφορά το μέσο και το ενεργό μήκος η τιμή της πιθανότητας είναι $p - value = 1$. Αυτό σημαίνει ότι η υπόθεση ότι τα δεδομένα των μεγεθών αυτών ακολουθούν την κανονική κατανομή είναι ισχυρή και δε μπορεί να απορριφθεί. Για τη μέση ταχύτητα το τεστ έδωσε τιμή της πιθανότητας $p - value = 1$ και άρα και για το μέγεθος αυτό η υπόθεση ότι ακολουθεί την κανονική κατανομή είναι ισχυρή. Τέλος η τιμή της πιθανότητας για την ενεργή ταχύτητα είναι ίση με $p - value = 0.3$ και μεγαλύτερη από 5% και άρα και το μέγεθος αυτό είναι αρκετά πιθανό να ακολουθεί την κανονική κατανομή.

Για να δειχθεί ότι τα δεδομένα των μεγεθών που μελετώνται ακολουθούν την κανονική, για το εύρος τιμών των διαφόρων παραμέτρων που χρησιμοποιούνται στην εργασία, έγιναν κάποιες επιπλέον δοκιμές. Οι τιμές των παραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν για τις δοκιμές αυτές ήταν ίδιες με πριν. Δηλαδή ενέργειες σύνδεσης στοιχείων ίσες με $E_{mat} = 1$, $E_{gb} = 2$, $E_{inc} = 3$, συγκέντρωση ίση με $c = 30\%$, μέγεθος κρυσταλλιτών ίσο με $s = 6$ και τυπική απόκλιση μεγέθους $sd = 1$, ενώ το πλάτος της διεπιφάνειας ήταν $p = 1$. Η τιμή της θερμοκρασίας ήταν ίση με $KT = 1$ και οι δοκιμές έγιναν για $P_f = 0.9$. Η διαφορά όμως που υπήρχε σε αυτές τις δοκιμές με πριν, ήταν ότι σε κάθε τεστ άλλαζε η τιμή μίας μόνο από τις παραμέτρους ώστε να ελεγχθεί η υπόθεση για το εύρος τιμών όλων των παραμέτρων που χρησιμοποιούνται στα αποτελέσματα. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν παρουσιάζονται στους πίνακες 3.17 και 3.18. Σε κάθε γραμμή παρουσιάζονται τα στατιστικά αποτελέσματα των μεγεθών για όλες τις τιμές των παραμέτρων ίδιες με αυτές που δόθηκαν παραπάνω και διαφορετική την τιμή της παραμέτρου της γραμμής όπως φαίνεται.

Πίνακας 3.17 Αποτελέσματα z-test για μέσο και ενεργό μήκος

	Λοξότητα μέσου μήκους	Κυρτότητα μέσου μήκους	$p - value$ μέσου μήκους	Λοξότητα ενεργού μήκους	Κυρτότητα ενεργού μήκους	$p - value$ ενεργού μήκους
$E = 1, 1.5, 1.5$	-0.2176	2.4163	1	0.3821	3.1773	1
$KT = 0.1$	0.5288	2.5396	1	-1.2376	5.4679	1
$s = 3$	-0.3888	2.7526	1	0.6521	4.0947	1
$P_f = 0.5$	0.2873	2.5981	1	0.0069	2.1748	1

Πίνακας 3.18 Αποτελέσματα z-test για μέση και ενεργή ταχύτητα

	Λοξότητα μέσης ταχύτητας	Κυρτότητα μέσης ταχύτητας	$p - value$ μέσης ταχύτητας	Λοξότητα ενεργής ταχύτητας	Κυρτότητα ενεργής ταχύτητας	$p - value$ ενεργής ταχύτητας
$E = 1, 1.5, 1.5$	-0.2633	2.3396	1	-1.5457	9.0517	1
$KT = 0.1$	1.137	4.4655	1	-0.2719	3.2225	0.25
$s = 3$	-0.3319	2.5762	1	-0.443	2.8401	0.6
$P_f = 0.5$	0.4857	3.1148	1	-0.4243	3.2216	1

Όπως φαίνεται από τους πίνακες των αποτελεσμάτων τα $z - test$ έδωσαν θετικά αποτελέσματα σε όλες τις περιπτώσεις, που σημαίνει ότι για τα εύρη τιμών που χρησιμοποιούνται και μελετώνται στην παρούσα εργασία μπορεί να αποφανθεί με ασφάλεια ότι τα δεδομένα των πειραμάτων για τα μεγέθη μήκους και ταχύτητας ακολουθούν την κανονική κατανομή.

4.ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Το φαινόμενο της διάδοσης μίας ρωγμής είναι ένα περίπλοκο φαινόμενο. Είναι ένα πολυπαραμετρικό πρόβλημα που καθιστά τη μελέτη του ιδιαίτερα δύσκολη, τόσο σε επίπεδο θεωρητικής ανάλυσης, όσο και σε επίπεδο υπολογιστικών μοντέλων προσομοίωσης. Όπως αναφέρθηκε και στην εισαγωγή της εργασίας, το υπολογιστικό μοντέλο που παρουσιάζεται στην παρούσα εργασία, προέκυψε χρησιμοποιώντας τη θεωρία ενός αναλυτικού μοντέλου (Charitidis κ.ά., 2007) σε συνδυασμό με ένα μοντέλο περιπατητή και αποτελεί μία πρώτη προσέγγιση, καθώς ακόμα και η κωδικοποίηση του αλγόριθμου ξεκίνησε από το μηδέν. Στα πλαίσια του διαθέσιμου χρόνου διεκπεραίωσης της εργασίας το μοντέλο ελέγχθηκε ως προς τη στατιστική του ορθότητα και ως προς την επίδραση κάποιων φυσικών μεγεθών που είχαν στα ελεγχόμενα μεγέθη.

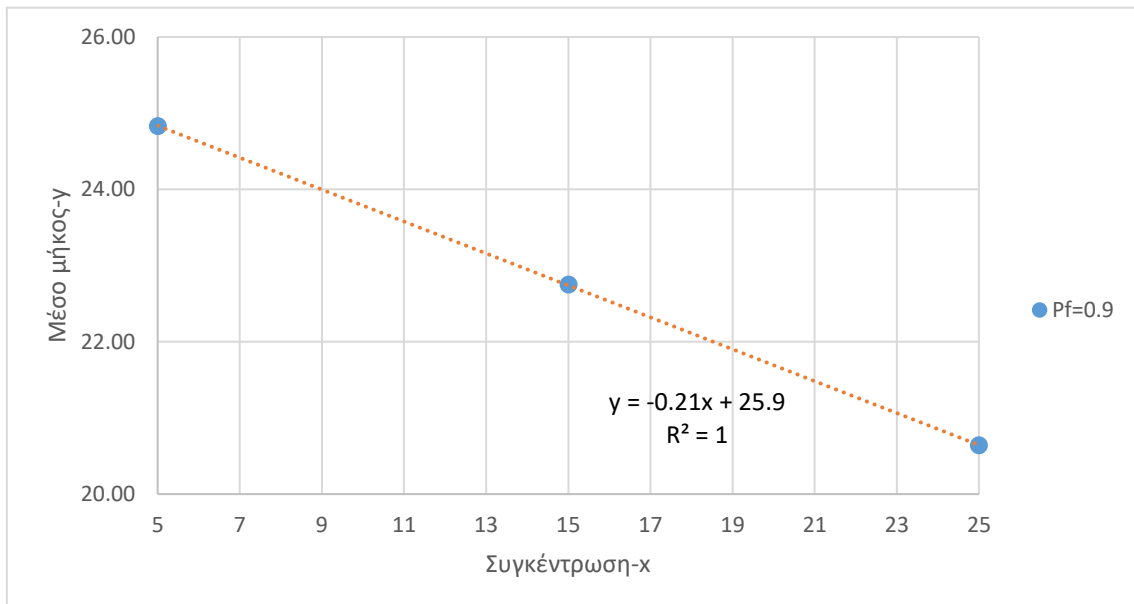
Τα αποτελέσματα, και ο τρόπος που επιδρούν οι αλλαγές των τιμών των φυσικών παραμέτρων σε αυτά, φαίνεται να έρχονται σε συμφωνία με τη βιβλιογραφία. Δεδομένου των θετικών αποτελεσμάτων που παρουσιάζονται στην παρούσα ενότητα και της στατιστικής τους ορθότητας που ελέγχθηκαν στην **ενότητα 3**, το μοντέλο θα μπορούσε να δώσει τη λύση στο ερώτημα που τέθηκε στην εισαγωγή. Δηλαδή θα μπορούσε να καλύψει την ανάγκη ύπαρξης ενός μοντέλου που να χρησιμοποιεί δεδομένα που προέκυψαν από αναλυτικούς υπολογισμούς ή αναλυτικά μοντέλα σε μικροκλίμακα, όπως οι ενέργειες σύνδεσης των στοιχείων, και να εξάγει με μικρό υπολογιστικό κόστος ακριβή αποτελέσματα σε μικρο και μακρο κλίμακα. Ωστόσο προς το παρόν το μοντέλο, καθώς και μέρη των αποτελεσμάτων που παρουσιάζονται, χρήζουν περαιτέρω έρευνας και βελτίωσης. Όλα αυτά τα ζητήματα αναλύονται εκτενώς στην **ενότητα 5**.

4.1.ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ

Κατά τον έλεγχο του φαινομένου μεγέθους μήτρας στην **ενότητα 3.3.1** παρατηρήθηκε ότι με την αύξηση της συγκέντρωσης τα μελετώμενα μεγέθη επηρεάζονται και μεταβάλλονται με συγκεκριμένο τρόπο. Για το λόγο αυτό χρησιμοποιήθηκαν τα δεδομένα των πινάκων 3.8÷3.13. Βάση των δεδομένων αυτών και για τα χαρακτηριστικά των δοκιμών όπως έχουν δοθεί στην **ενότητα 3.3.1** σχεδιάστηκαν τα **διαγράμματα 4.1÷4.4**. Τα συγκεκριμένα διαγράμματα απεικονίζουν το μέσο και ενεργό μήκος και τη μέση και ενεργή ταχύτητα ως προς τη συγκέντρωση για τιμή παραμέτρου $P_f = 0.9$. Οι τιμές της συγκέντρωσης είναι $c = 5\%$, $c = 15\%$ και $c = 25\%$. Οι τιμές των μεγεθών στα διαγράμματα προέκυψαν ως ο μέσος όρος των τιμών των πινάκων 3.8÷3.13 για τις διάφορες διαστάσεις της μήτρας. Σε όσες περιπτώσεις η απόκλιση των τιμών ήταν μεγαλύτερη από **10%** δε λήφθηκαν υπόψιν στο μέσο όρο των τιμών. Στο σημείο αυτό να σημειωθεί επίσης ότι όλα τα σημεία που φαίνονται στα διαγράμματα των αποτελεσμάτων είναι διακριτά και οι διακεκομμένες γραμμές αντιστοιχούν στις γραμμές τάσης.

Σχολιασμός μέσου μήκους-συγκέντρωσης

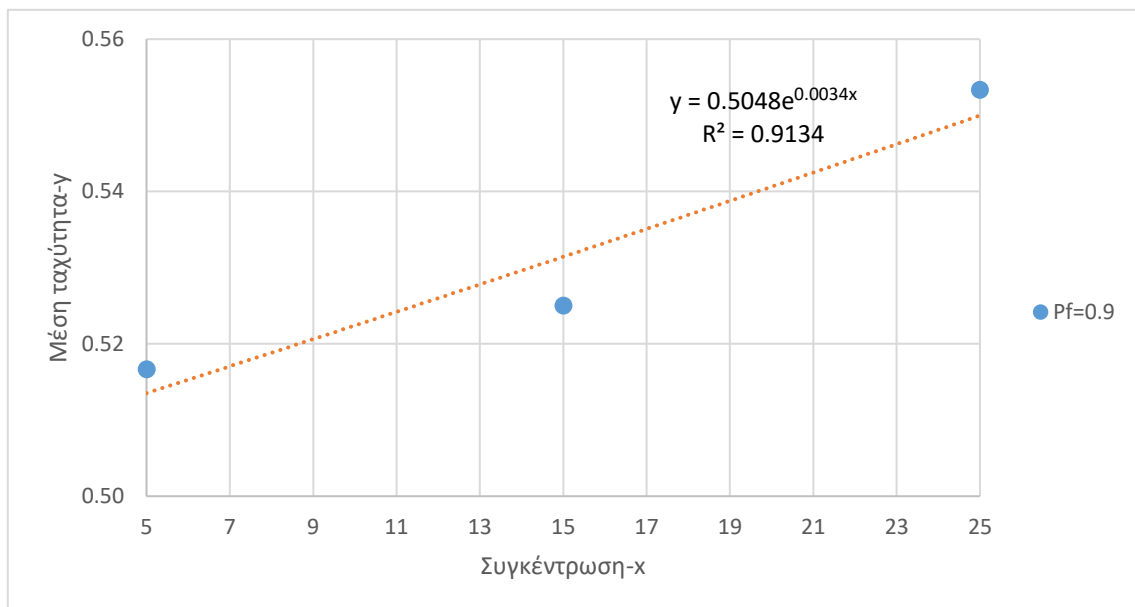
Διάγραμμα 4.1 Μέσο μήκος προς συγκέντρωση για $P_f = 0.9$, $s = 6$, $KT = 1$, $p = 2$, $E = 1, 1.5, 2$



Παρατηρώντας το *διάγραμμα 4.1* φαίνεται ότι για το εύρος τιμών που υπάρχουν δεδομένα, το μέσο μήκος μειώνεται γραμμικά όσο η συγκέντρωση αυξάνει. Το αποτέλεσμα είναι λογικό, καθώς όσο η συγκέντρωση αυξάνει τόσο περισσότεροι κρυσταλλίτες θα υπάρχουν μέσα στη μήτρα. Άρα για τη δεδομένη ενέργεια σύνδεσης των στοιχείων της διεπιφάνειας και των κρυσταλλιτών που είναι μεγαλύτερη της ενέργειας σύνδεσης της μήτρας σημαίνει ότι η ρωγμή θα συναντά περισσότερους κρυσταλλίτες στην πορεία της που θα είναι πιο σκληροί από τα στοιχεία της μήτρας και άρα λαμβάνοντας υπόψιν και την *εξίσωση 2.5* το μέσο μήκος της ρωγμής θα μειώνεται, καθώς η ενέργεια που θα δαπανάται σε υψηλές συγκεντρώσεις για τους λόγους αυτούς θα είναι περισσότερη.

Σχολιασμός μέσης ταχύτητας-συγκέντρωσης

Διάγραμμα 4.2 Μέση ταχύτητα προς συγκέντρωση για $P_f = 0.9$, $s = 6$, $KT = 1$, $p = 2$, $E = 1, 1.5, 2$

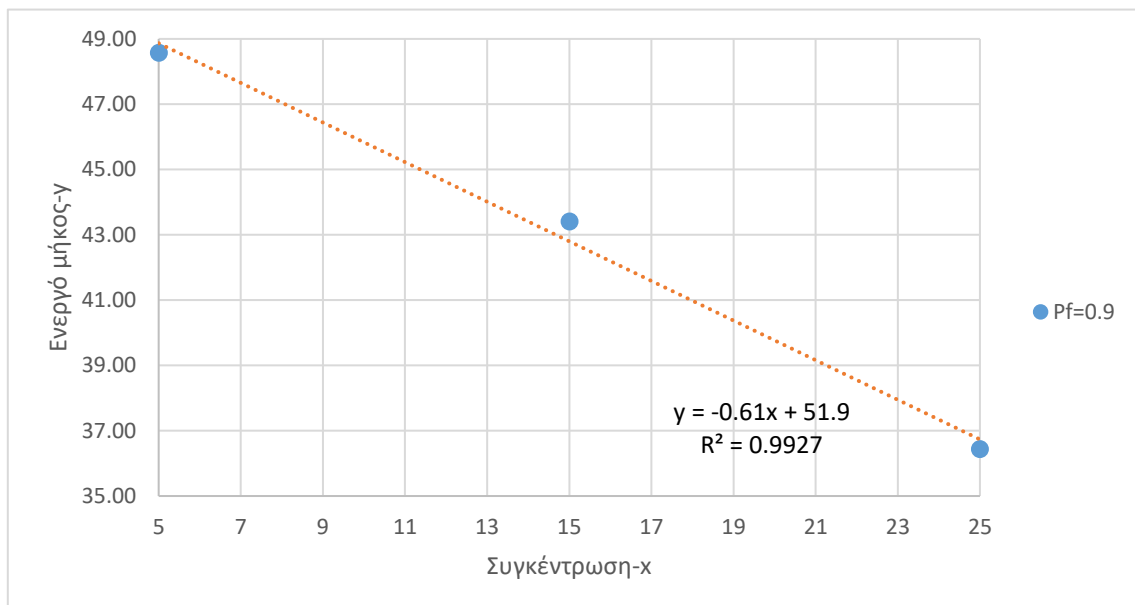


Σχετικά με το *διάγραμμα 4.2* φαίνεται ότι με μία πρόχειρη εκτίμηση, η μέση ταχύτητα αυξάνει εκθετικά όσο η συγκέντρωση αυξάνει, για τα δεδομένα που υπάρχουν. Αυτό φαίνεται με πρώτη ματιά κάπως παράδοξο, καθώς το μέσο μήκος για τις αντίστοιχες συγκεντρώσεις μειώνεται. Θα περίμενε λοιπόν κανείς και η μέση ταχύτητα να μειώνεται αντίστοιχα. Αυτό ωστόσο δε συμβαίνει. Η εξήγηση έγκειται στο πως μεταβάλλεται ο χρόνος διεξαγωγής του φαινομένου, όσο η συγκέντρωση αυξάνει.

Λαμβάνοντας υπόψιν την εξίσωση 3.1 για να συμβαίνει κάτι τέτοιο, πρέπει όσο η συγκέντρωση αυξάνει ο χρόνος διάδοσης της ρωγμής να μειώνεται σημαντικά σε σχέση με τη μείωση του μέσου μήκους, όπως και συμβαίνει. Ενδεικτικά για $c = 5\%$ ο χρόνος διάδοσης της ρωγμής όπως έχει οριστεί στην **ενότητα 3.1** είναι περίπου ίσος με $Move_{times} + Stay_{times} = 48.5$, ενώ για $c = 25\%$ ο χρόνος είναι περίπου ίσος με $Move_{times} + Stay_{times} = 37.6$. Με την απλή διαίρεση των μέσων μηκών του **διαγράμματος 4.1** για τις αντίστοιχες συγκεντρώσεις προκύπτουν οι τιμές της μέσης ταχύτητας του **διαγράμματος 4.2**.

Σχολιασμός ενεργού μήκους-συγκέντρωσης

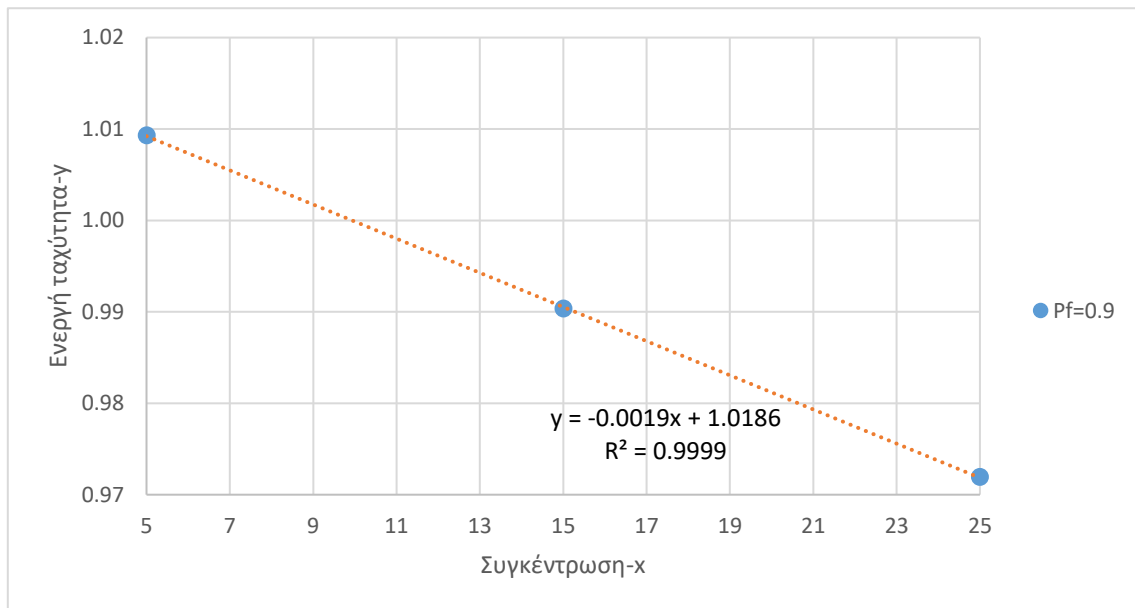
Διάγραμμα 4.3 Ενεργό μήκος προς συγκέντρωση για $P_f = 0.9, s = 6, KT = 1, p = 2, E = 1, 1.5, 2$



Σύμφωνα με το **διάγραμμα 4.3**, όσο η συγκέντρωση αυξάνει, το ενεργό μήκος μειώνεται γραμμικά. Η παρατήρηση αυτή συνδυάζεται και με τα σχόλια για το χρόνο διάδοσης που έγιναν παραπάνω. Γίνεται εύκολα αντιληπτό λοιπόν ότι η ρωγμή για ένα μικρότερο ενεργό μήκος, χρειάζεται λιγότερο χρόνο για να καλύψει την απόσταση αυτή και άρα οι χρόνοι διάδοσης στις υψηλές συγκεντρώσεις μειώνονται.

Σχολιασμός ενεργής ταχύτητας-συγκέντρωσης

Διάγραμμα 4.4 Ενεργή ταχύτητα προς συγκέντρωση για $P_f = 0.9$, $s = 6$, $KT = 1$, $p = 2$, $E = 1, 1.5, 2$



Όσo παρατηρώντας το *διάγραμμα 4.4* η ενεργή ταχύτητα μειώνεται γραμμικά όσο η συγκέντρωση αυξάνει σε αντίθεση με τη μέση ταχύτητα. Αυτό σημαίνει ότι ο χρόνος διάδοσης δε μειώνεται σημαντικά σε σχέση με τη μείωση που δέχεται το ενεργό μήκος και άρα η ενεργή ταχύτητα θα μειωθεί.

Αυτό φαίνεται εύκολα στα *διαγράμματα 4.1* και *4.3*, όπου το μέσο μήκος για τις ακραίες τιμές της συγκέντρωσης μειώνεται κατά 4 μονάδες περίπου, ενώ το ενεργό μήκος κατά 10 περίπου μονάδες. Άρα λοιπόν, όσο η συγκέντρωση των κρυσταλλιτών αυξάνει, φαίνεται ότι το μέσο μήκος των ρωγμών μειώνεται και οι ρωγμές διαδίδονται πιο αργά, όπως φανερώνει η ενεργή ταχύτητα (*πραγματική ταχύτητα*).

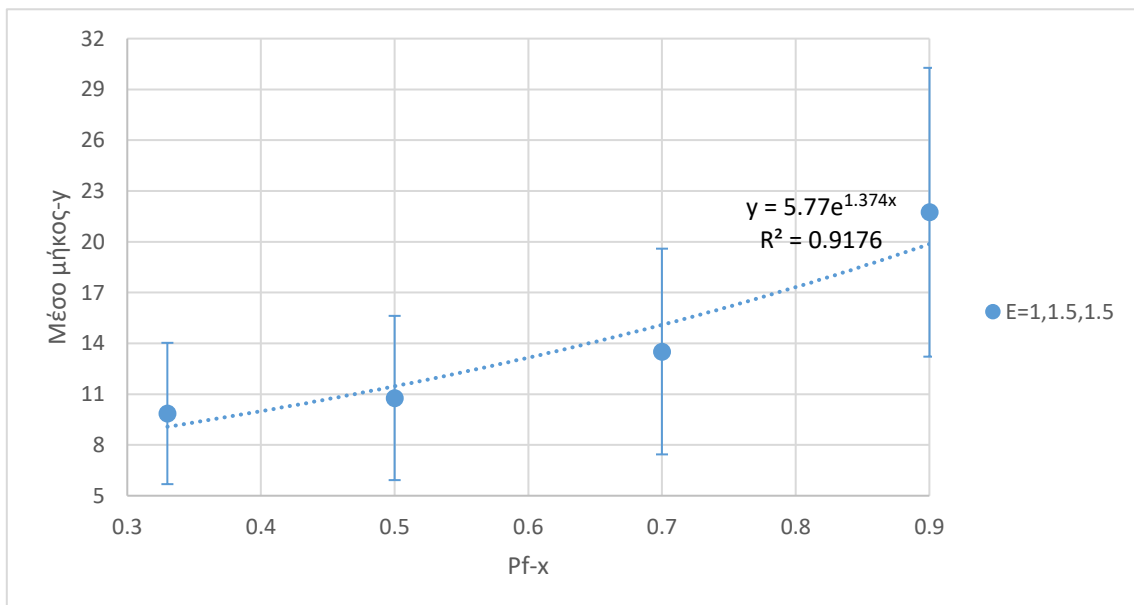
4.2.ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΥ P_f

Στην ενότητα αυτή αναλύεται η επίδραση της παραμέτρου P_f στα μελετώμενα μεγέθη. Αυτή η έμφαση δίνεται στο σημείο αυτό, διότι κατά τη διεξαγωγή των πειραμάτων φάνηκε να υπάρχει κάποια σχέση μεταξύ αυτών των μεγεθών και ίσως η κατανόηση της σχέσης αυτής, συνυπολογιζόμενου του γεγονότος ότι η παράμετρος P_f στην παρούσα εργασία δεν είναι καλά και πλήρως ορισμένη, δώσει στοιχεία που θα βοηθήσουν στη βελτίωση του μοντέλου στο μέλλον.

Οι πειραματικές δοκιμές για τον υπολογισμό των αποτελεσμάτων της παρούσας ενότητας έγιναν για δοκίμια με συγκέντρωση ίση με $c = 30\%$. Το μέγεθος των κρυσταλλιτών ήταν ίσο με $s = 6$ και τυπική απόκλιση μεγέθους $sd = 1$, ενώ το πλάτος της διεπιφάνειας ήταν $p = 1$. Τέλος η θερμοκρασία ήταν ίση με $KT = 1$. Οι δοκιμές έγιναν για διάφορες τιμές της $P_f = 0.33, 0.5, 0.7, 0.9$, ενώ οι ενέργειες σύνδεσης ήταν $E_{mat} = 1, E_{gb} = 1.5, E_{inc} = 1.5$. Για ευκολία στο υπόμνημα των διαγραμμάτων οι ενέργειες σύνδεσης των στοιχείων της κάθε δοκιμής αναγράφονται ως $E = \alpha, \beta, \gamma$, όπου $\alpha = E_{mat}, \beta = E_{gb}$ και $\gamma = E_{inc}$. Τα αποτελέσματα φαίνονται στα διαγράμματα 4.5÷4.8.

Σχολιασμός μέσου μήκους- P_f

Διάγραμμα 4.5 Μέσο μήκος προς P_f για $s = 6, KT = 1, p = 1, E = 1, 1.5, 1.5, c = 30\%$

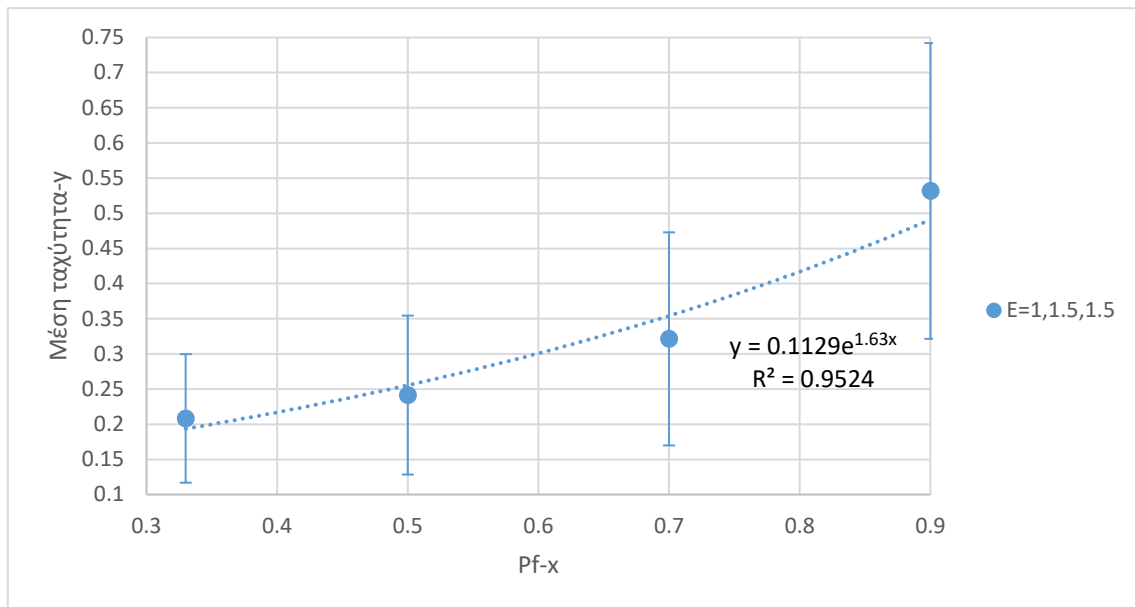


Σύμφωνα με το *διάγραμμα 4.5* το μέσο μήκος τείνει να αυξάνει εκθετικά όσο η παράμετρος P_f αυξάνει. Το αποτέλεσμα φαίνεται απόλυτα λογικό, καθώς όσο η παράμετρος αυξάνει τόσο πιο εύκολα μπορούν να ξεπεραστούν τα ενεργειακά άλματα βάση της *εξίσωσης 2.5* και *2.6*. Προς το παρόν η παράμετρος P_f δίνει στη ρωγμή κύρια κατευθυντικότητα και υπερνικά το φαινόμενο της παγίδευσης στις περισσότερες περιπτώσεις. Αυτό πρακτικά σημαίνει ότι για μικρές τιμές της παραμέτρου η ρωγμή δεν έχει ξεκάθαρη κύρια κατεύθυνση και άρα οι πιθανότητες κίνησης είναι μικρές. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα η ρωγμή να κάνει κύκλους σε μία συγκεκριμένη περιοχή χάνοντας όμως παράλληλα ενέργεια και άρα να έχει ως αποτέλεσμα ένα μικρότερο μέσο μήκος διάδοσης όπως επαληθεύεται και από το *διάγραμμα 4.5*.

Επίσης παρατηρείται ότι όσο το μέσο μήκος αυξάνει, η τυπική απόκλιση των τιμών του αυξάνει επίσης. Αυτό συμβαίνει διότι αυξάνεται το εύρος των τιμών του δείγματος. Αυτό εξηγείται γιατί για μικρές τιμές της παραμέτρου P_f η ρωγμή δεν έχει κύρια κατευθυντικότητα και άρα κάθε φορά θα διαδίδεται μέσα σε ένα μικρό κύκλο με κέντρο το σημείο εκκίνησης της, καθώς η πιθανότητα να διαδοθεί σε μία ευθεία γραμμή είναι πολύ μικρή. Άρα το εύρος τιμών του δείγματος δε θα είναι πολύ μεγάλο και άρα η τυπική απόκλιση θα είναι μικρή. Για μεγάλες όμως τιμές της παραμέτρου P_f η ρωγμή έχει περισσότερες πιθανότητες να διαδοθεί σε ευθεία σύμφωνα με τις *εξισώσεις 2.5* και *2.6*. Καθώς όμως η πιθανότητα αυτή δεν είναι απόλυτη, δίνεται ένα πιθανοτικό διάστημα κατά το οποίο η πορεία της μπορεί να αλλάξει. Όταν αυτό το γεγονός συμβαίνει έχει ως αποτέλεσμα μεγάλες αλλαγές στο τελικό μέσο μήκος διάδοσης. Αυτό σημαίνει ότι μπορεί σε περιπτώσεις που το γεγονός συνέβη πολλές φορές και με τρόπο που να κάνει τη ρωγμή να επιστρέφει πίσω, το τελικό μέσο μήκος να είναι πολύ μικρό, ενώ σε αντίθετη περίπτωση όπου αυτό το γεγονός δε συμβαίνει, η ρωγμή διαδίδεται σχεδόν τελείως ευθεία και άρα έχει ως αποτέλεσμα το τελικό μέσο μήκος διάδοσης να είναι πολύ μεγάλο. Συμπερασματικά αυτός είναι και ο λόγος που η τυπική απόκλιση για τις μεγάλες τιμές της παραμέτρου P_f είναι μεγαλύτερη από ότι για τις μικρές τιμές αυτής.

Σχολιασμός μέσης ταχύτητας- P_f

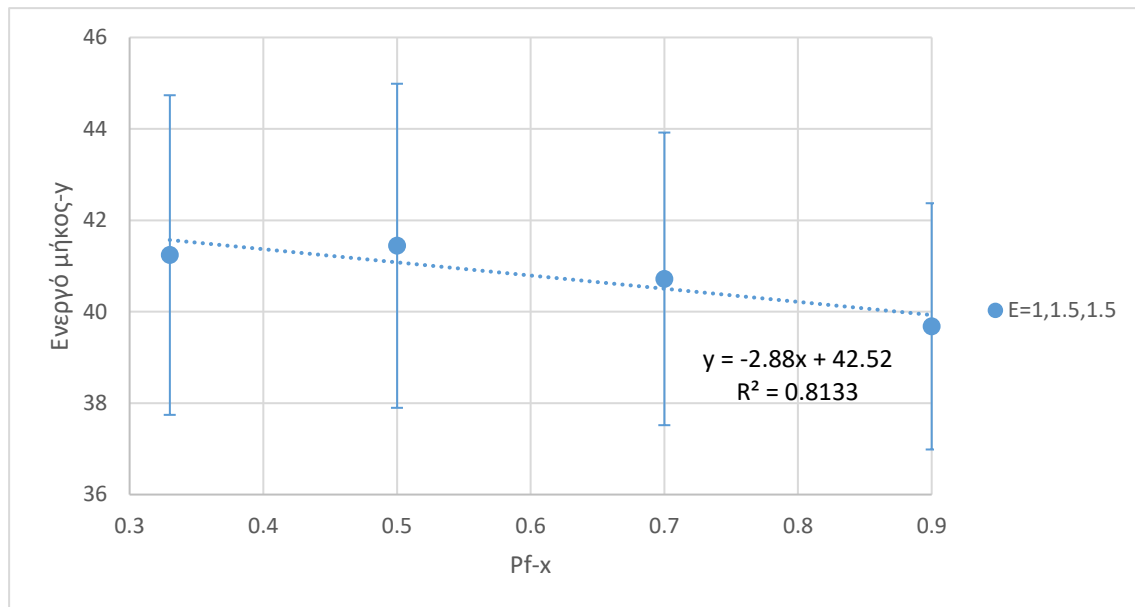
Διάγραμμα 4.6 Μέσο ταχύτητα προς P_f για $s = 6$, $KT = 1$, $p = 1$, $E = 1, 1.5, 1.5$, $c = 30\%$



Στο *διάγραμμα 4.6* φαίνεται ότι η μέση ταχύτητα αυξάνεται εκθετικά καθώς η παράμετρος P_f αυξάνει. Επίσης η τυπική απόκλιση των τιμών της μέσης ταχύτητας αυξάνει για μεγαλύτερες τιμές, όπως συμβαίνει και για το μέσο μήκος. Το αποτέλεσμα αυτό ήταν αναμενόμενο, καθώς λαμβάνοντας υπόψιν την *εξίσωση 3.1*, και εφόσον το μέσο μήκος αυξάνει εκθετικά με την αύξηση της P_f , με τον ίδιο τρόπο θα συμπεριφέρεται και η μέση ταχύτητα. Με βάση τα σχόλια που έγιναν πριν για την αυξανόμενη τυπική απόκλιση του μέσου μήκους και συνδιασμό με την *εξίσωση 3.1* που ορίζει τη μέση ταχύτητα, εξηγείται η αυξανόμενη τυπική απόκλιση και για τη μέση ταχύτητα.

Σχολιασμός ενεργού μήκους- P_f

Διάγραμμα 4.7 Ενεργό μήκος προς P_f για $s = 6$, $KT = 1$, $p = 1$, $E = 1, 1.5, 1.5$, $c = 30\%$

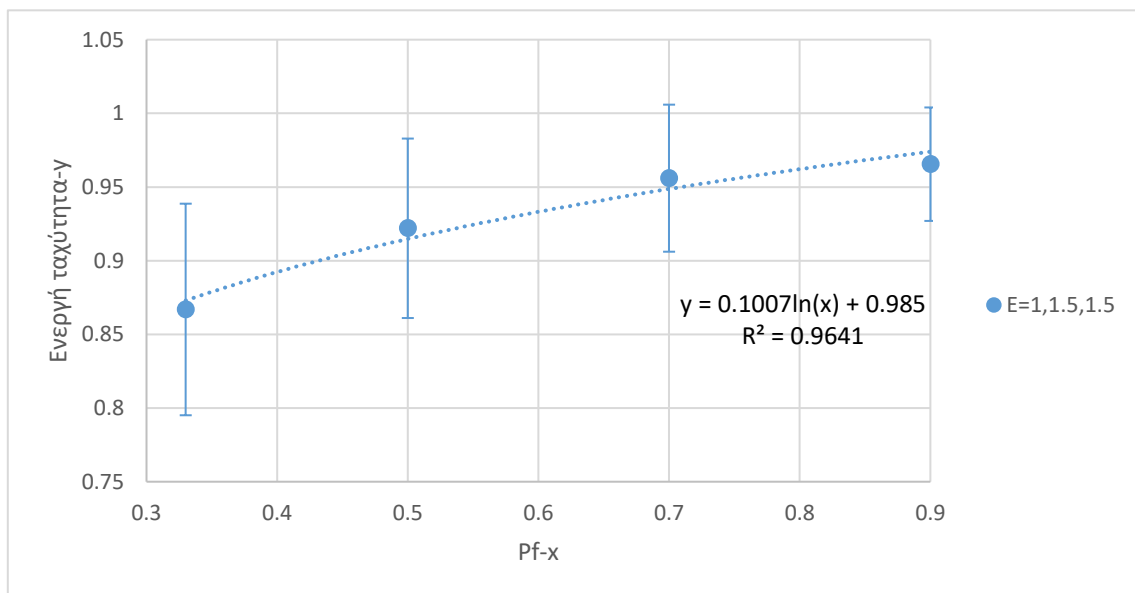


Κανείς θα περίμενε, ότι αφού η δοθείσα αρχική ενέργεια είναι ίδια σε όλες τις περιπτώσεις, όπως και οι ενέργειες σύνδεσης των στοιχείων, η ενεργή ταχύτητα να μένει περίπου σταθερή. Στο *διάγραμμα 4.7* όμως φαίνεται ότι το ενεργό μήκος τείνει να μειώνεται γραμμικά ως προς την παράμετρο P_f . Το γεγονός αυτό μπορεί εύκολα να εξηγηθεί κατανοώντας το πως ορίζεται το μέγεθος του ενεργού μήκους. Ως ενεργό μήκος στην **ενότητα 3.1** ορίστηκε το μήκος της συνολικής πορείας που διένυσε η ρωγμή. Μέσα όμως στο μήκος αυτό υπολογίζονται και τα βήματα που η ρωγμή έχει περάσει πάνω από σπασμένα κελιά στοιχείου, που κατά τη διαδικασία αυτή δε δαπανάται ενέργεια. Χρησιμοποιώντας επίσης τα σχόλια που έγιναν για το μέσο μήκος στην παρούσα ενότητα, γίνεται κατανοητό ότι για μικρές τιμές της παραμέτρου P_f το φαινόμενο της παγίδευσης συμβαίνει πολύ περισσότερες φορές από ότι για μεγάλες τιμές της παραμέτρου, βάση και των εξισώσεων 2.5 και 2.6. Ως αποτέλεσμα στις περιπτώσεις αυτές όπου το φαινόμενο της παγίδευσης είναι έντονο, η ρωγμή κατά την πορεία της οδηγείται πολλές φορές στο να περάσει μέσα από ήδη σπασμένο υλικό και άρα το τελικό ενεργό μήκος να είναι μεγαλύτερο, καθώς όπως προαναφέρθηκε για τα βήματα αυτά δε δαπανάται ενέργεια.

Επίσης φαίνεται ότι η τυπική απόκλιση του ενεργού μήκους τείνει να μειώνεται όσο η P_f αυξάνει. Αυτό συμβαίνει διότι για υψηλές τιμές της παραμέτρου, το ενδεχόμενο να χρειαστεί να περάσει η ρωγμή μέσα από σπασμένο υλικό γίνονται πολύ σπάνια και άρα το εύρος τιμών που θα προκύψει δε θα είναι πολύ μεγάλο. Αντιθέτως όμως για μικρές τιμές της παραμέτρου, το ενδεχόμενο αυτό είναι πολύ πιο συχνό και άρα δημιουργείται αυτομάτως μεγαλύτερη ποικιλία αποτελεσμάτων που μπορούν να προκύψουν, που σημαίνει ότι η τυπική απόκλιση αυξάνει.

Σχολιασμός ενεργής ταχύτητας- P_f

Διάγραμμα 4.8 Ενεργή ταχύτητα προς P_f για $s = 6$, $KT = 1$, $p = 1$, $E = 1, 1.5, 1.5$, $c = 30\%$



Όσο το ενεργό μήκος μειώνεται σύμφωνα με το *διάγραμμα 4.7*, η ενεργή ταχύτητα θα έπρεπε να μειώνεται αν ο χρόνος διάδοσης της ρωγμής παρέμενε σταθερός. Παρατηρώντας όμως το *διάγραμμα 4.8*, φαίνεται ότι η ενεργή ταχύτητα αυξάνει λογαριθμικά ως προς την παράμετρο P_f . Αυτό συμβαίνει διότι ο χρόνος διάδοσης της ρωγμής δε παραμένει ίδιος. Όσο η παράμετρος P_f αυξάνει, ο χρόνος διάδοσης μειώνεται κατά πολύ, διότι όπως αναφέρθηκε πιο πριν, για μικρές τιμές της P_f , το φαινόμενο της παγίδευσης βάση των *εξισώσεων 2.5 και 2.6* συμβαίνει πολύ συχνά. Αυτό σημαίνει ότι οι φορές που η ρωγμή θα παραμείνει στην ίδια θέση αυξάνονται. Καθώς στη σχέση υπολογισμού της ενεργής ταχύτητας όπως ορίστηκε από την *εξίσωση 3.2* στην *ενότητα 3.1* ο χρόνος αναφέρεται στο χρόνο που πραγματοποιείται κίνηση, αλλά και στο χρόνο που η ρωγμή παραμένει στην ίδια θέση, τα παραπάνω γίνονται πιο κατανοητά.

Επίσης παρατηρείται και εδώ ότι η τυπική απόκλιση της ενεργής ταχύτητας μειώνεται. Η εξήγηση της παρατήρησης αυτής είναι η ίδια με αυτή που δόθηκε για το ενεργό μήκος, μιας και τα δύο αυτά μεγέθη είναι άμεσα συνδεδεμένα. Δηλαδή για τιμή της $P_f = 0.9$, το φαινόμενο της παγίδευσης γίνεται σπάνια και άρα ο χρόνος παραμονής στην ίδια θέση είναι πολύ μικρότερος από την περίπτωση τιμής της $P_f = 0.33$.

Επίσης φαίνεται ότι η καμπύλη του *διαγράμματος 4.8* τείνει να φτάσει σε ένα πλατό. Αυτό φαίνεται να γίνεται, γιατί όπως προαναφέρθηκε για μεγάλες τιμές της P_f η παγίδευση γίνεται πολύ σπάνια και η ρωγμή αποκτά κύρια κατεύθυνση. Αυτό σημαίνει ότι ο χρόνος διάδοσης τείνει να φτάνει σε μία συγκεκριμένη τιμή, όπως επίσης και το ενεργό μήκος. Αν δηλαδή δινόταν στην παράμετρο η τιμή της μονάδας η ρωγμή θα πήγαινε μόνο ευθεία. Έστω στην περίπτωση αυτή ότι συναντούσε ακριβώς τους ίδιους κρυσταλλίτες με το ίδιο μέγεθος και ενέργειες, μετά από 2000 δοκιμές η τυπική απόκλιση του ενεργού μήκους και της ενεργής ταχύτητας θα ήταν μηδέν. Δηλαδή κάθε φορά το αποτέλεσμα θα ήταν το ίδιο.

Άρα λοιπόν για το εύρος των δεδομένων που αναλύθηκαν στην παρούσα ενότητα, όσο η παράμετρος P_f αυξάνει, το μέσο μήκος της ρωγμής φαίνεται να μεγαλώνει. Επίσης η διάδοση της ρωγμής γίνεται πιο γρήγορα και η ταχύτητα φτάνει σε κάποιο πλατό. Δηλαδή αν η παράμετρος αυτή μπορούσε κατά μία θεωρητική έννοια να συνδυαστεί και με τον τρόπο διάδοσης της ρωγμής, φαίνεται ότι όσο αυξάνει φτάνει σε ένα πλατό που όσο και να αυξηθεί παραπάνω, η ενεργή ταχύτητα διάδοσης δεν αλλάζει (Abraham & Gao, 2009). Οι παραπάνω παρατηρήσεις αναλύονται περισσότερο και στην *ενότητα 5*.

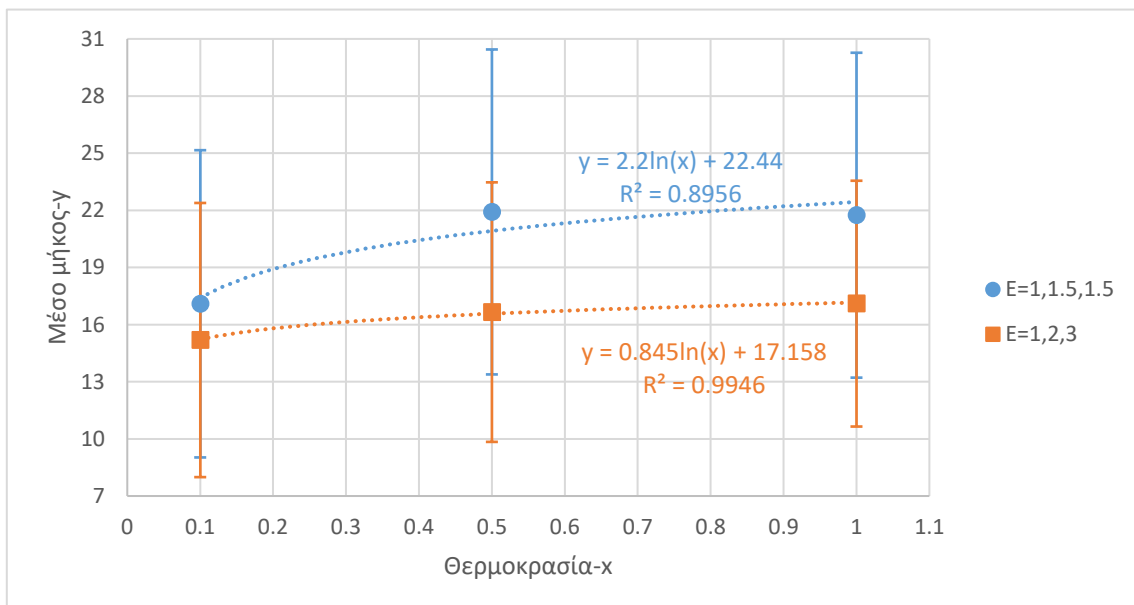
4.3.ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

Σύμφωνα με τη βιβλιογραφία η θερμοκρασία έχει άμεση επίδραση στο μέσο μήκος και την ενεργή ταχύτητα διάδοσης της ρωγμής (Abraham & Gao, 2000; Bitzek κ.ά., 2015; Yaghmaee & Baghbaderani, 2017). Για το λόγο αυτό υπολογίστηκε το μέσο και ενεργό μήκος και η μέση και ενεργή ταχύτητα για τρεις διαφορετικές τιμές θερμοκρασίας, σε δύο διαφορετικές περιπτώσεις δοκιμών. Οι περιπτώσεις δοκιμών έχουν όλα τα χαρακτηριστικά τους ίδια, εκτός της ενέργειας σύνδεσης των στοιχείων τους. Αυτό έγινε για να φανεί αν υπάρχει κάποια συσχέτιση και της ενέργειας σύνδεσης των στοιχείων του υλικού.

Η συγκέντρωση των δοκιμών ήταν ίση με $c = 30\%$. Το μέγεθος των κρυσταλλιτών ήταν ίσο με $s = 6$ και τυπική απόκλιση μεγέθους $sd = 1$, ενώ το πλάτος της διεπιφάνειας ήταν $p = 1$. Οι τιμές της θερμοκρασίας ήταν ίσες με $KT = 1$, $KT = 0.5$ και $KT = 0.1$. Οι δοκιμές έγιναν για $P_f = 0.9$, ενώ οι ενέργειες σύνδεσης ήταν $E_{mat} = 1$, $E_{gb} = 1.5$, $E_{inc} = 1.5$ στην πρώτη δοκιμή και $E_{mat} = 1$, $E_{gb} = 2$, $E_{inc} = 3$ για τη δεύτερη δοκιμή. Τα αποτελέσματα φαίνονται στα διαγράμματα 4.9÷4.12.

Σχολιασμός μέσου μήκους-θερμοκρασίας

Διάγραμμα 4.9 Μέσο μήκος προς θερμοκρασία για $P_f = 0.9$, $s = 6$, $p = 1$, $c = 30\%$, $E = 1, 1.5, 1.5$ και $E = 1, 2, 3$



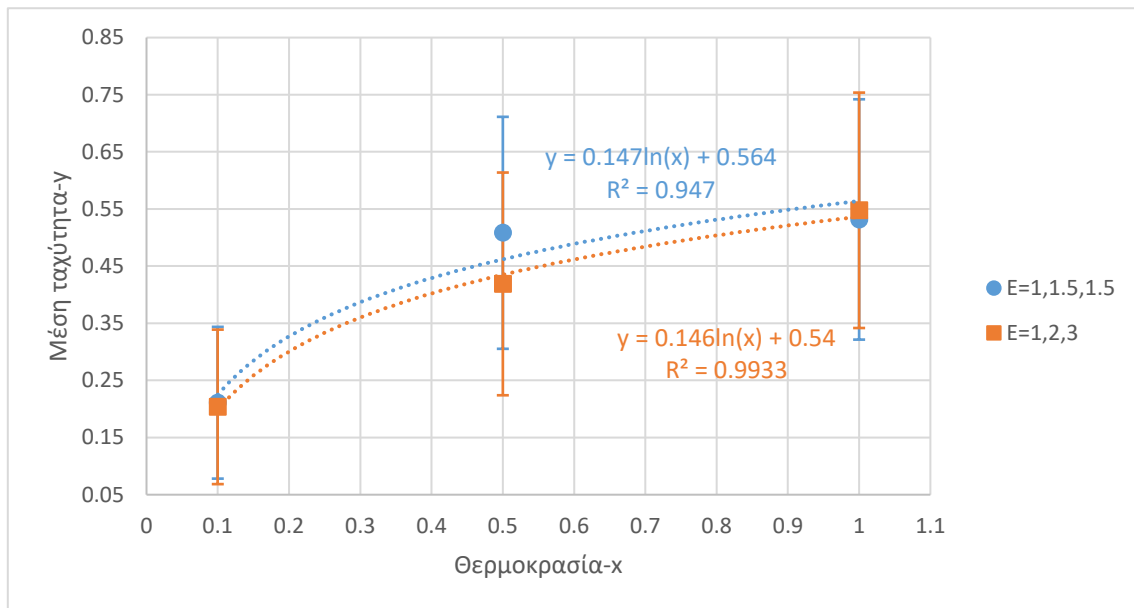
Σύμφωνα με το *διάγραμμα 4.9* το μέσο μήκος φαίνεται να αυξάνει λογαριθμικά ως προς τη θερμοκρασία και για τα δύο υλικά. Επίσης για το πιο σκληρό υλικό φαίνεται ότι η θερμοκρασία δεν έχει τόσο μεγάλη επίδραση γιατί αφού το υλικό είναι πιο σκληρό, οι πιθανότητες κίνησης των *εξισώσεων 2.5* και *2.6* θα είναι πιο μικρές σε σχέση με το μαλακό υλικό και άρα το μέσο μήκος θα αυξάνει πιο αργά με την αύξηση της θερμοκρασίας.

Επίσης παρατηρείται και για τις δύο καμπύλες ότι τείνουν να πλησιάζουν σε ένα πλατό. Το πλατό μπορεί να εξηγηθεί και πάλι με τις *εξισώσεις 2.5* και *2.6*. Καθώς η θερμοκρασία βρίσκεται στον παρονομαστή του εκθετικού μέρους των *εξισώσεων*, εύκολα γίνεται κατανοητό ότι όσο η τιμή της θερμοκρασίας αυξάνει, ο όρος $e^{\frac{-\Delta E}{KT}}$ τείνει να γίνει μονάδα. Αυτό σημαίνει ότι όταν αυτό συμβαίνει τα ενεργειακά άλματα μηδενίζονται. Οπότε πρακτικά υπάρχει μία κρίσιμη τιμή. Όσο δηλαδή η θερμοκρασία αυξάνει πάνω από αυτή την τιμή, θα είναι σα να ισχύει η ίδια περίπτωση κάθε φορά, όπου το υλικό δε θα προβάλλει καμία αντίσταση στη διάδοση της ρωγμής. Όπως παρουσιάστηκε στην **ενότητα 2.2** δηλαδή, η δεύτερη και τρίτη περίπτωση διαχωρισμού πιθανοτήτων κίνησης της ρωγμής, καταλήγουν να μετατρέπονται στην πρώτη περίπτωση όπου δεν υφίστανται ενεργειακές διαφορές για τιμές της θερμοκρασίας μεγαλύτερες της κρίσιμης. Αυτή η κρίσιμη τιμή για το εύρος των δεδομένων που έχουν αναλυθεί στην παρούσα εργασία είναι η μονάδα. Για το λόγο αυτό φαίνεται πέρα από αυτή την τιμή της θερμοκρασίας να πιάνουν οι καμπύλες του μέσου μήκους πλατό.

Επίσης όπως και στις προηγούμενες ενότητες έτσι και εδώ η αύξηση της τυπικής απόκλισης εξηγείται με τον ίδιο τρόπο. Η μεγάλη θερμοκρασία μειώνει τα ενεργειακά άλματα και άρα η ρωγμή αποκτά μεγαλύτερο μέσο μήκος διάδοσης. Επομένως το εύρος των πιθανών αποτελεσμάτων αυξάνεται.

Σχολιασμός μέσης ταχύτητας-θερμοκρασίας

Διάγραμμα 4.10 Μέση ταχύτητα προς θερμοκρασία για $P_f = 0.9$, $s = 6$, $p = 1$, $c = 30\%$, $E = 1, 1.5, 1.5$ και $E = 1, 2, 3$

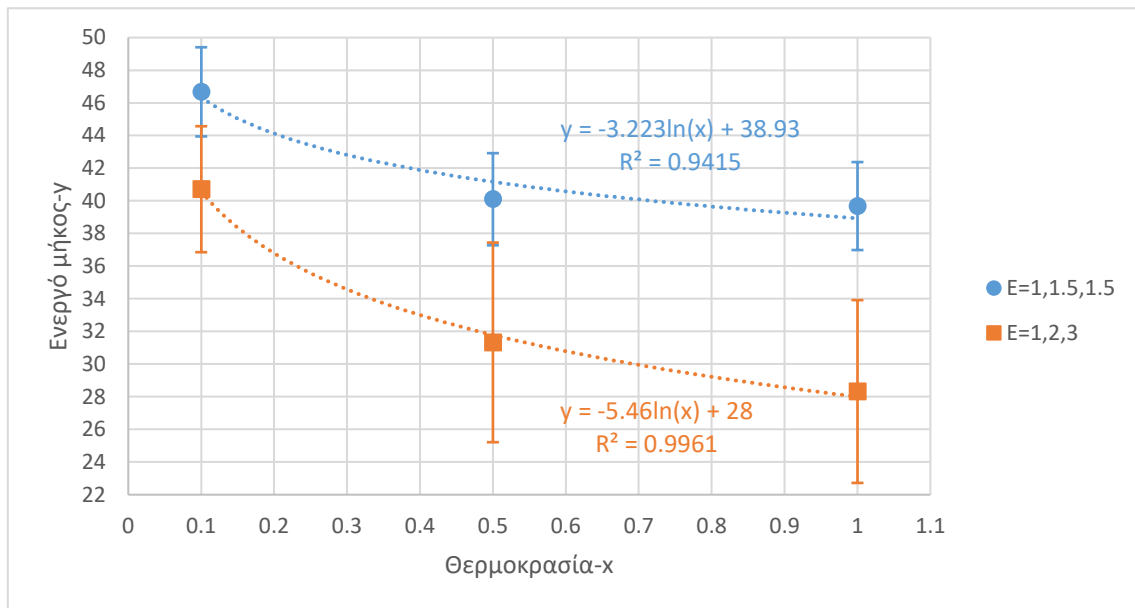


Στο *διάγραμμα 4.10* φαίνεται ότι η μέση ταχύτητα και για τα δύο υλικά αυξάνει λογαριθμικά όσο η θερμοκρασία αυξάνει. Το αποτέλεσμα αυτό ήταν αναμενόμενο, καθώς όπως παρουσιάστηκε πριν με ίδιο τρόπο συμπεριφέρονται και οι καμπύλες του μέσου μήκους. Ωστόσο εδώ παρατηρείται ότι οι κλίσεις των καμπυλών έχουν αυξηθεί, ενώ επίσης και πάλι το πιο σκληρό υλικό έχει χαμηλότερες τιμές μέσης ταχύτητας από το μαλακό υλικό. Αυτό συμβαίνει διότι οι καμπύλες αυτές προέκυψαν από το μέσο μήκος διαιρεμένο με το χρόνο διάδοσης της ρωγμής. Για μικρές τιμές της θερμοκρασίας βάση των *εξισώσεων 2.5* και *2.6* οι πιθανότητες κίνησης μειώνονται πολύ και άρα τα βήματα στάσης της ρωγμής αυξάνουν κατά πολύ. Επομένως η τιμή της μέσης ταχύτητας για μικρές θερμοκρασίες θα είναι πιο χαμηλή από ότι για υψηλές θερμοκρασίες, όχι μόνο διότι το μέσο μήκος συμπεριφέρεται έτσι αλλά και επειδή στις χαμηλές θερμοκρασίες ο συνολικός χρόνος διάδοσης της ρωγμής είναι πολύ μεγαλύτερος. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα τη μεγάλη κλίση των καμπυλών.

Επιπλέον και εδώ οι καμπύλες φαίνεται να πιάνουν πλατό για τιμές θερμοκρασίας πάνω από τη μονάδα. Επίσης η τυπική απόκλιση αυξάνει όμοια με αυτή του μέσου μήκους. Λογικές παρατηρήσεις που συμβαίνουν για τους λόγους που εξηγήθηκαν στο *διάγραμμα 4.9* για το μέσο μήκος.

Σχολιασμός ενεργού μήκους-θερμοκρασίας

Διάγραμμα 4.11 Ενεργό μήκος προς θερμοκρασία για $P_f = 0.9$, $s = 6$, $p = 1$, $c = 30\%$, $E = 1, 1.5, 1.5$ και $E = 1, 2, 3$



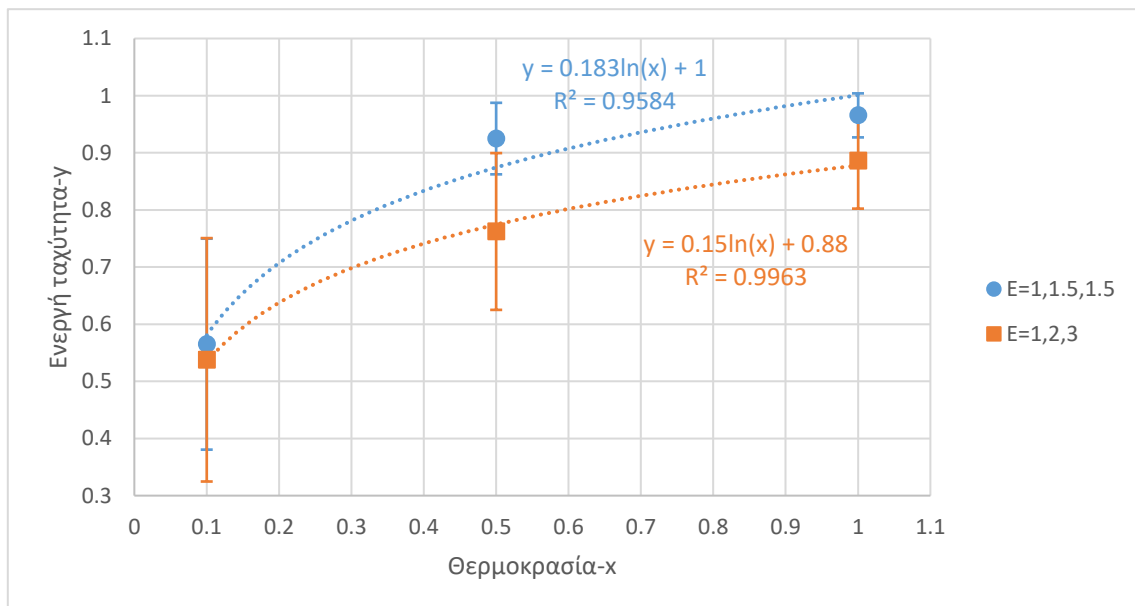
Σύμφωνα με το *διάγραμμα 4.11* το ενεργό μήκος φαίνεται να μειώνεται λογαριθμικά όσο η θερμοκρασία αυξάνει. Αυτό συμβαίνει διότι όπως προαναφέρθηκε για μικρές τιμές της θερμοκρασίας οι πιθανότητες κίνησης που δίνονται από τις εξισώσεις 2.5 και 2.6 μειώνονται κατά πολύ. Αυτό έχει ως επακόλουθο η ρωγμή παρά το γεγονός ότι της έχει δοθεί η παράμετρος $P_f = 0.9$, να χάνει την κύρια κατευθυντικότητα της. Ως επακόλουθο η ρωγμή συμπεριφέρεται όπως στην *ενότητα 4.2* για χαμηλές τιμές της P_f και άρα το φαινόμενο της παγίδευσης συμβαίνει πιο συχνά. Ως αποτέλεσμα τα βήματα κίνησης στις χαμηλές θερμοκρασίες αυξάνονται, καθώς αυξάνονται κατά πολύ τα βήματα όπου η ρωγμή περνάει μέσα από σπασμένο υλικό χωρίς να χάνει ενέργεια.

Επιπλέον και εδώ οι καμπύλες φαίνεται να πιάνουν κάποιο πλατό για τιμές θερμοκρασίας μεγαλύτερες από τη μονάδα. Αυτό συμβαίνει και πάλι γιατί όπως προαναφέρθηκε για μεγάλες τιμές της θερμοκρασίας το φαινόμενο τείνει να καταλήγει σε μία περίπτωση και μόνο, όπου τα ενεργειακά άλματα τείνουν να μηδενίζονται, όπως και τα φαινόμενα παγίδευσης. Άρα το ενεργό μήκος που θα δίνεται θα είναι περίπου ίδιο για τιμές της θερμοκρασίας μεγαλύτερες της μονάδας.

Επίσης το πιο σκληρό υλικό φαίνεται να έχει μικρότερες τιμές ενεργού μήκους και οι διαφορές αυτές να είναι πιο έντονες για θερμοκρασία ίση με τη μονάδα. Αυτό συμβαίνει γιατί για τη συγκεκριμένη τιμή θερμοκρασίας, όπως προαναφέρθηκε τα βήματα της ρωγμής μέσα από σπασμένο υλικό δε συμβαίνουν τόσο συχνά και άρα δεν επηρεάζουν την τιμή του ενεργού μήκους. Επομένως στην περίπτωση αυτή το σκληρό υλικό θα έχει πιο χαμηλές τιμές ενεργού μήκους διότι όταν η ρωγμή περνάει από στοιχείο διεπιφάνειας ή στοιχείο κρυσταλλίτη, χάνει στο διάβα της περισσότερη ενέργεια από ότι στο μαλακό υλικό και άρα το τελικό ενεργό μήκος θα είναι μικρότερο.

Σχολιασμός ενεργής ταχύτητας-θερμοκρασίας

Διάγραμμα 4.12 Ενεργή ταχύτητα προς θερμοκρασία για $P_f = 0.9$, $s = 6$, $p = 1$, $c = 30\%$, $E = 1, 1.5, 1.5$ και $E = 1, 2, 3$



Στο **διάγραμμα 4.12** παρατηρείται ότι το μέγεθος της ενεργής ταχύτητας αυξάνεται λογαριθμικά καθώς η θερμοκρασία αυξάνει. Αυτό γίνεται, διότι παρά το γεγονός ότι το ενεργό μήκος μειώνεται όσο η θερμοκρασία αυξάνει, ο χρόνος διάδοσης της ρωγμής δε παραμένει ο ίδιος. Εφόσον για μεγάλες θερμοκρασίες το φαινόμενο της παγίδευσης εξαλείφεται, τα βήματα στάσης τείνουν να μηδενίζονται. Άρα όσο η θερμοκρασία αυξάνει ο χρόνος διάδοσης της ρωγμής τείνει να μειώνεται πολύ πιο σημαντικά από ότι μειώνεται το ενεργό μήκος. Ως αποτέλεσμα η ενεργή ταχύτητα αυξάνει.

Οι καμπύλες του *διαγράμματος 4.12* φαίνεται ότι και εδώ τείνουν να φτάσουν σε ένα πλατό. Αυτό γίνεται εύκολα κατανοητό, διότι όπως εξηγήθηκε στο *διάγραμμα 4.11* η ενεργή ταχύτητα τείνει να πιάσει πλατό, ενώ επίσης και οι χρόνοι διάδοσης τείνουν να κάνουν το ίδιο. Ως επακόλουθο η ενεργή ταχύτητα θα συμπεριφέρεται με τον ίδιο τρόπο.

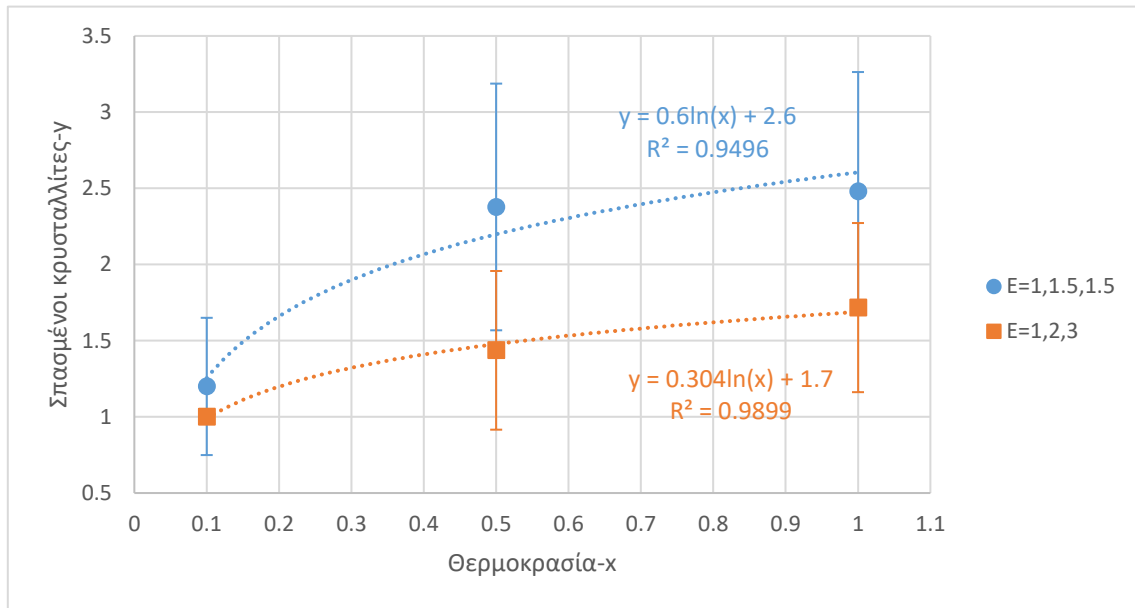
Βάση των παραπάνω σχολίων γίνεται κατανοητό και γιατί όσο η θερμοκρασία αυξάνει η τυπική απόκλιση της ενεργής ταχύτητας μειώνεται. Καθώς το φαινόμενο τείνει να εξομαλύνεται, το εύρος τιμών που θα προκύπτουν θα είναι μικρό και άρα οι αποκλίσεις θα μειώνονται.

Σχολιασμός *transgranular* – *intergranular* διάδοσης της ρωγμής

Πέρα από τα παραπάνω, ενώ στις δοκιμές της ενότητας αυτής μελετήθηκε ο τρόπος επιρροής της θερμοκρασίας στο μέσο και ενεργό μήκος και τη μέση και ενεργή ταχύτητα διάδοσης της ρωγμής, παρατηρήθηκε και ότι όσο η θερμοκρασία αυξάνει το φαινόμενο της (*transgranular*) διάδοσης, δηλαδή διάδοση της ρωγμής κυρίως μέσα από κρυστάλλους, ευνοείται. Αυτή φαίνεται μία πολύ σημαντική παρατήρηση διότι σύμφωνα με (Morrell, 1996; Charitidis κ.ά., 2007), ο τρόπος διάδοσης συνδέεται άμεσα με το μέσο μήκος διάδοσης και κατ' επέκταση με τις μηχανικές ιδιότητες του υλικού, δηλαδή αντοχή και σκληρότητα.

Για να δειχθούν τα παραπάνω, υπολογίστηκε η παράμετρος *Crack_{inc}*, όπως ορίστηκε στην **ενότητα 3.1**, για τις δοκιμές που έγιναν στην παρούσα ενότητα. Δηλαδή για την περίπτωση ενεργειών σύνδεσης των στοιχείων $E = 1, 1.5, 1.5$ και για την περίπτωση ενεργειών σύνδεσης των στοιχείων $E = 1, 2, 3$. Η συγκεκριμένη παράμετρος υπολογίζει σε κάθε δοκιμή το μέσο όρο των κρυσταλλιτών που έχουν σπάσει. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο *διάγραμμα 4.13*.

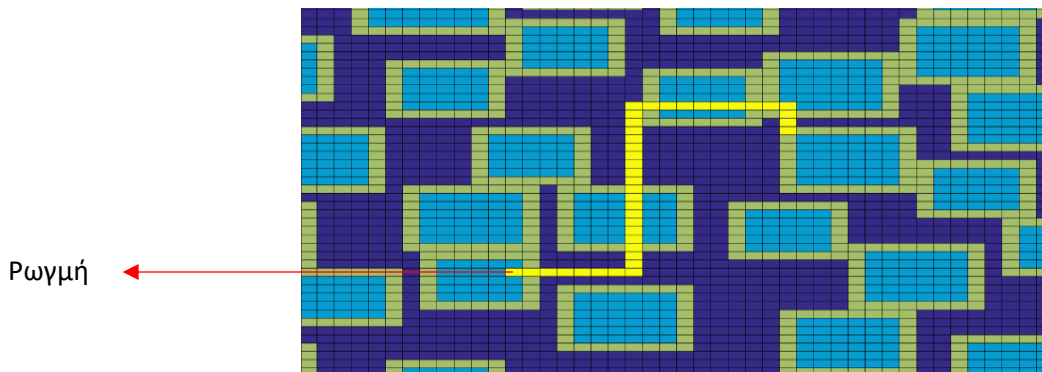
Διάγραμμα 4.13 Μέσος όρος σπασμένων κρυσταλλιτών προς θερμοκρασία για $P_f = 0.9$, $s = 6$, $p = 1$, $c = 30\%$, $E = 1, 1.5, 1.5$ και $E = 1, 2, 3$



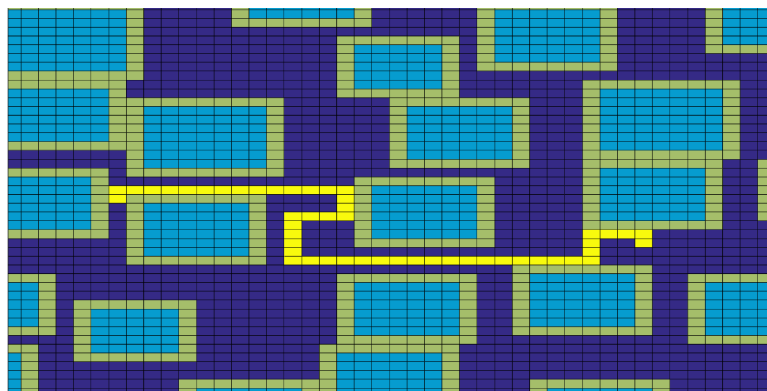
Σύμφωνα με το *διάγραμμα 4.13* παρατηρείται ότι με την αύξηση της θερμοκρασίας, ο μέσος όρος των κρυσταλλιτών που σπάνε αυξάνεται λογαριθμικά. Αυτό σημαίνει ότι με την αύξηση της θερμοκρασίας η (*transgranular*) διάδοση της ρωγμής ευνοείται. Το συγκεκριμένο φαινόμενο εύκολα εξηγείται όπως και πριν βάση των *εξισώσεων 2.5 και 2.6*. Όπως προαναφέρθηκε για τα μεγέθη που μελετήθηκαν παραπάνω στην ενότητα αυτή, για τιμές της θερμοκρασίας μεγαλύτερες της κρίσιμης, ο όρος $e^{\frac{-\Delta E}{kT}}$ τείνει να γίνεται μονάδα. Επομένως τα ενεργειακά άλματα αρχίζουν να μηδενίζονται και το φαινόμενο να καταλήγει σε μία μόνο περίπτωση. Δηλαδή η διάδοση της ρωγμής να είναι ανεξάρτητη των ενεργειών σύνδεσης των στοιχείων που υπάρχουν μέσα στο δοκίμιο. Άρα όσο η θερμοκρασία αυξάνεται ο παραπάνω όρος αυξάνει επίσης, και άρα δίνεται μεγαλύτερη πιθανότητα η ρωγμή να ξεπεράσει τα πιθανά ενεργειακά άλματα που συναντά και να σπάσει κάποιο κρύσταλλο. Για τους λόγους αυτούς φαίνεται ότι και εδώ οι καμπύλες του διαγράμματος τείνουν να πιάσουν κάποιο πλατό, ενώ και η συμπεριφορά της τυπικής απόκλισης εξηγείται βάση των σχολίων που έχουν γίνει για τη συμπεριφορά των υπόλοιπων μεγεθών της ενότητα αυτής.

Τέλος παρατηρείται ότι το φαινόμενο της (*transgranular*) διάδοσης είναι πιο έντονο στο μαλακό υλικό, δηλαδή για τα σημεία με ενέργειες σύνδεσης $E = 1, 1.5, 1.5$, διότι στο μαλακό υλικό οι ενεργειακές διαφορές είναι μικρότερες και άρα η αύξηση της θερμοκρασίας στον παραπάνω όρο θα έχει πιο έντονη επίδραση.

Για λόγους εποπτείας δίνεται το *σχήμα 4.1* στο οποίο φαίνεται για την περίπτωση $E = 1, 1.5, 1.5$ η (*transgranular*) διάδοση μίας ρωγμής όπως υλοποιήθηκε από το μοντέλο για θερμοκρασία $KT = 1$, ενώ στο *σχήμα 4.2* απεικονίζεται για την ίδια περίπτωση $E = 1, 1.5, 1.5$ η (*intergranular*) διάδοση μίας ρωγμής όπως υλοποιήθηκε από το μοντέλο για θερμοκρασία $KT = 0.1$.



Σχήμα 4.1 *Transgranular* διάδοση ρωγμής για θερμοκρασία $KT=1$



Σχήμα 4.2 *Intergranular* διάδοση ρωγμής για θερμοκρασία $KT=0.1$

4.4.ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΕΝΕΡΓΕΙΩΝ ΣΥΝΔΕΣΗΣ

Σύμφωνα με τη βιβλιογραφία (Abraham & Gao, 2000; Bitzek κ.ά., 2015; Ovid'ko, 2015; Falzone κ.ά., 2016), αλλά και σύμφωνα με τις παρατηρήσεις της **ενότητας 4.3**, οι ενέργειες σύνδεσης των στοιχείων φαίνεται να παίζουν καθοριστικό ρόλο στον τρόπο που συμπεριφέρεται το μήκος και η ταχύτητα της ρωγμής. Για το λόγο αυτό στην ενότητα αυτή παρουσιάζονται τα αποτελέσματα κάποιων δοκιμών για περαιτέρω ενέργειες σύνδεσης των στοιχείων, που έγιναν με σκοπό να δειχθεί η συσχέτιση των ενεργειών σύνδεσης των στοιχείων με το μέσο και ενεργό μήκος και τη μέση και ενεργή ταχύτητα διάδοσης της ρωγμής.

Οι δοκιμές έγιναν για την ίδια συγκέντρωση δοκιμίων και ίση με $c = 30\%$. Το μέγεθος των κρυσταλλιτών ήταν ίσο με $s = 6$ και τυπική απόκλιση μεγέθους $sd = 1$, ενώ το πλάτος της διεπιφάνειας ήταν $p = 1$. Επίσης η τιμή της θερμοκρασίας ήταν ίση με $KT = 1$ και οι δοκιμές έγιναν για $P_f = 0.9$. Οι περιπτώσεις των ενεργειών σύνδεσης δίνονται στον *πίνακα 4.1*.

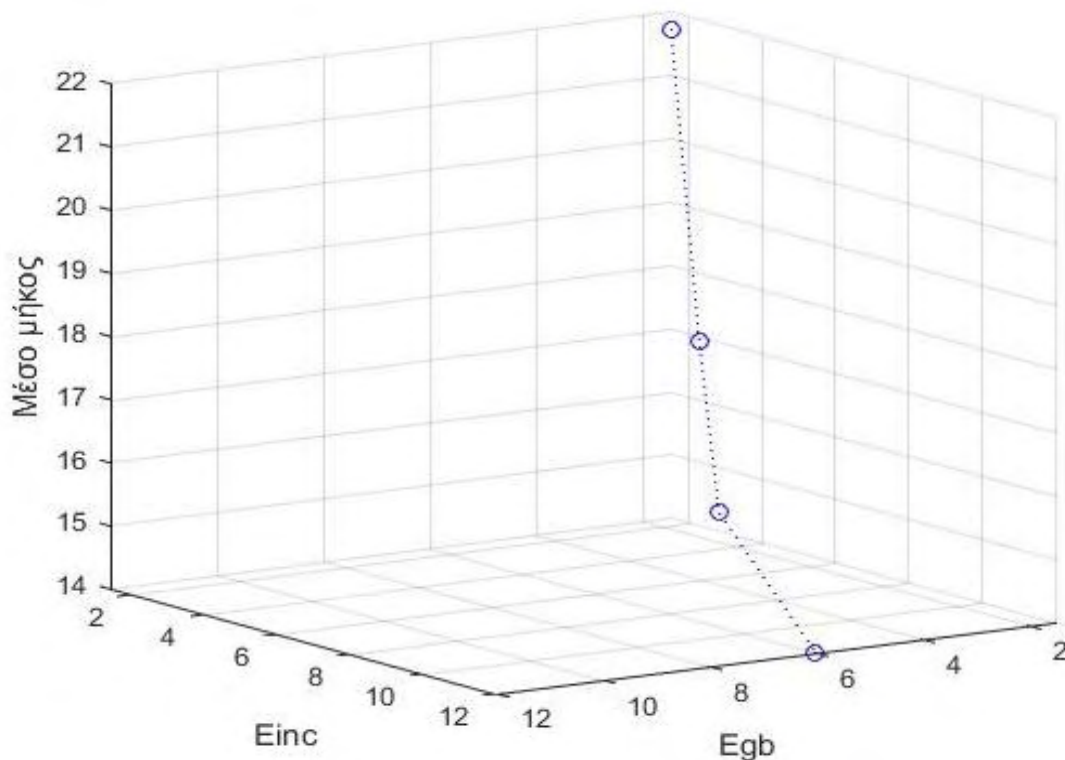
Πίνακας 4.1 Στοιχεία δοκιμών ελέγχου επίδρασης ενέργειας σύνδεσης στοιχείων

1^η Δοκιμή	$E = 1, 1.5, 1.5$
2^η Δοκιμή	$E = 1, 2, 3$
3^η Δοκιμή	$E = 1, 3, 5$
4^η Δοκιμή	$E = 1, 6, 12$

Παρατηρώντας τον *πίνακα 4.1* εύκολα γίνεται κατανοητό ότι τα μεγέθη που αλλάζουν ανά τις δοκιμές είναι δύο. Η ενέργεια σύνδεσης των στοιχείων της διεπιφάνειας και η ενέργεια σύνδεσης των στοιχείων των κρυσταλλιτών. Επομένως το πρόβλημα γίνεται διπαραμετρικό. Τα διαγράμματα λοιπόν των μελετώμενων μεγεθών θα είναι καμπύλες στο χώρο. Ωστόσο η σχεδίαση καμπυλών στο χώρο, δε προσφέρει χρήσιμες πληροφορίες ως προς το πως συμπεριφέρεται το μελετώμενο μέγεθος βάση των δύο παραμέτρων. Ένα χρήσιμο γράφημα θα ήταν η σχεδίαση της επιφάνειας του προβλήματος στο χώρο. Καθώς όμως δεν υπήρχε η υπολογιστική ισχύ να γίνουν οι επιπλέον δοκιμές που θα δώσουν τα απαραίτητα δεδομένα για τη σχεδίαση των επιφανειών, τα δεδομένα είναι ελλιπή.

Για το λόγο αυτό ήταν δυνατή η σχεδίαση μόνο μίας καμπύλης στο χώρο για κάθε μελετώμενο μέγεθος. Τα διαγράμματα λοιπόν που παρουσιάζονται στη συνέχεια είναι οι προβολές των καμπυλών ως προς ένα κάθετο επίπεδο του χώρου. Δηλαδή το ένα επίπεδο ορίζεται από την ενέργεια σύνδεσης των στοιχείων της διεπιφάνειας και το μελετώμενο μέγεθος, ενώ το δεύτερο επίπεδο ορίζεται από την ενέργεια σύνδεσης των στοιχείων των κρυσταλλιτών και το μελετώμενο μέγεθος. Για λόγους εποπτείας στο *διάγραμμα 4.14* δίνεται η καμπύλη του μέσου μήκους στο χώρο.

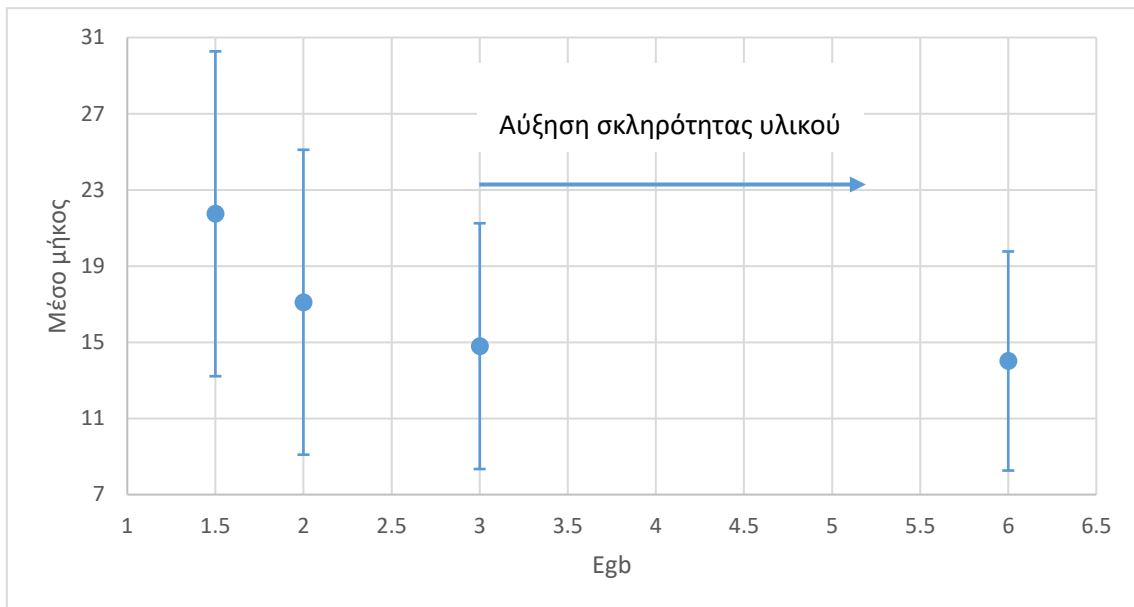
Διάγραμμα 4.14 Μέσο μήκος προς E_{inc} και E_{gb}



Στη συνέχεια παρατίθενται τα δυσδιάστατα διαγράμματα του μέσου και ενεργού μήκους και της μέσης και ενεργής ταχύτητας, ως οι προβολές των καμπυλών στο επίπεδο που ορίζει η παράμετρος E_{gb} και το αντίστοιχο μέγεθος που μελετάται κάθε φορά. Το συγκεκριμένο επίπεδο επιλέχθηκε γιατί το εύρος των τιμών της παραμέτρου E_{gb} είναι πιο μικρό σε σχέση με της παραμέτρου E_{inc} και άρα η κλίμακα στον οριζόντιο άξονα των διαγραμμάτων θα ήταν πιο καλή. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στα *διαγράμματα 4.15÷4.18* τα οποία δίνουν μία ποιοτική εικόνα του πως συμπεριφέρονται τα μεγέθη του μήκους και της ταχύτητας όσο το υλικό γίνεται πιο σκληρό.

Σχολιασμός μέσου μήκους- E_{gb}

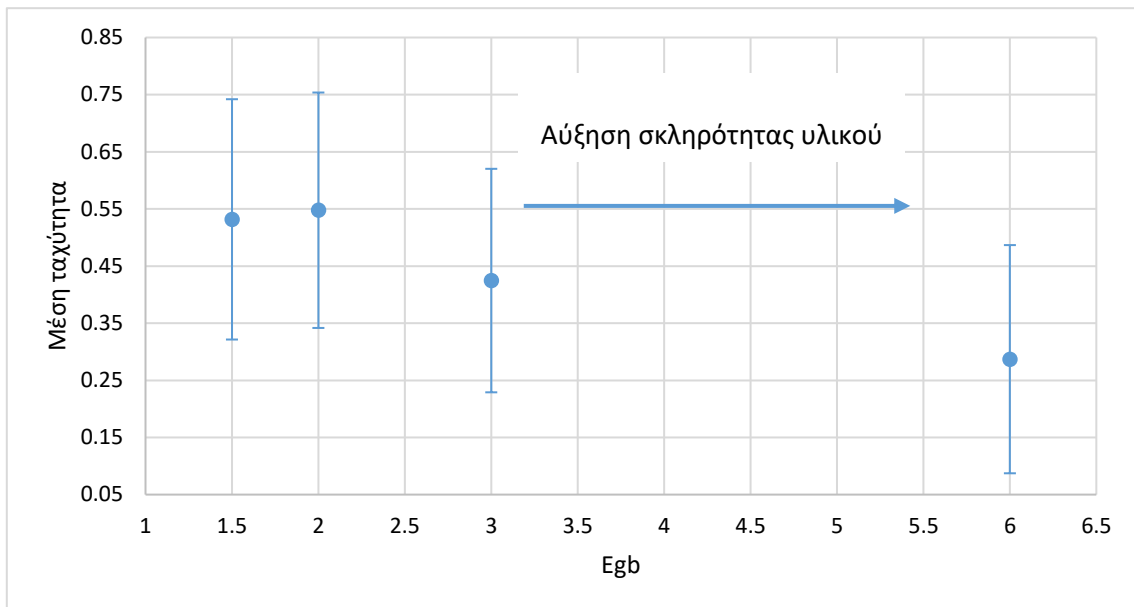
Διάγραμμα 4.15 Μέσο μήκος προς E_{gb}



Σύμφωνα με το *διάγραμμα 4.15* φαίνεται ότι όσο το υλικό γίνεται πιο σκληρό το μέσο μήκος μειώνεται, κάτι το οποίο ήταν αναμενόμενο σύμφωνα με τις παρατηρήσεις της **ενότητας 4.3**. Επίσης φαίνεται ότι όσο αφορά την παράμετρο E_{gb} , η αύξηση της από 3 σε 6 δεν επιφέρει σημαντική μείωση του μέσου μήκους. Ίσως αυτή η παρατήρηση αποτελεί σημαντική πληροφορία σχετικά με τη βαθμονόμηση των πειραμάτων αυτών. Το συγκεκριμένο σημείο αναλύεται περισσότερο στην **ενότητα 5**. Περαιτέρω πληροφορίες σχετικά με τον τρόπο που μειώνεται το μέσο μήκος δε μπορούν να εξαχθούν, καθώς το διάγραμμα αποτελεί ποιοτική απεικόνιση.

Σχολιασμός μέσης ταχύτητας- E_{gb}

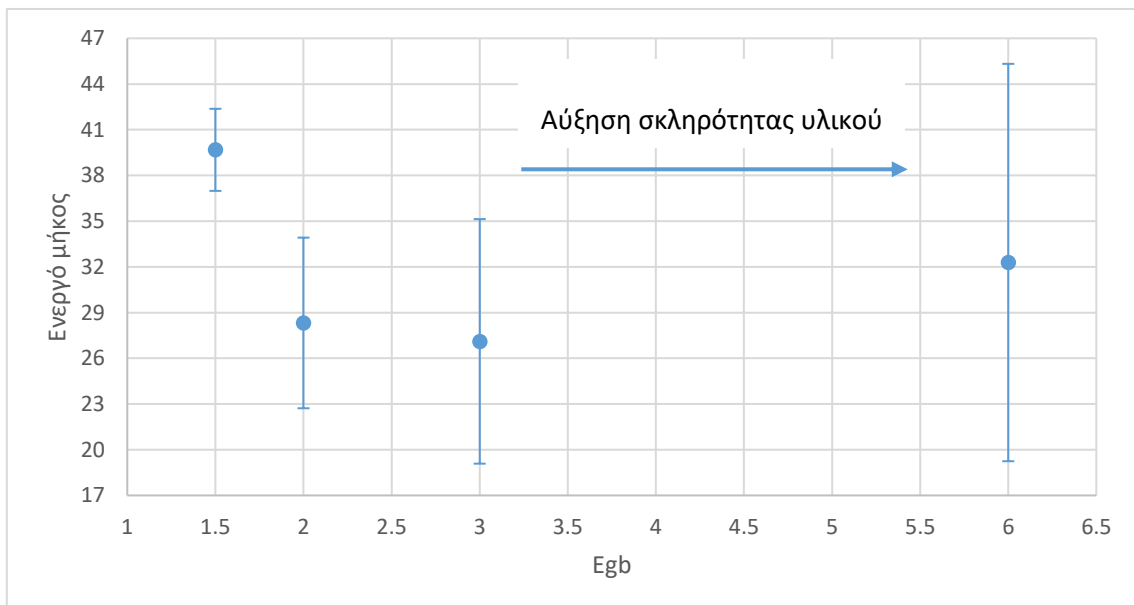
Διάγραμμα 4.16 Μέση ταχύτητα προς E_{gb}



Όμοια συμπεριφορά φαίνεται να έχει και η μέση ταχύτητα σύμφωνα με το *διάγραμμα 4.16*.

Σχολιασμός ενεργού μήκους- E_{gb}

Διάγραμμα 4.17 Ενεργό μήκος προς E_{gb}

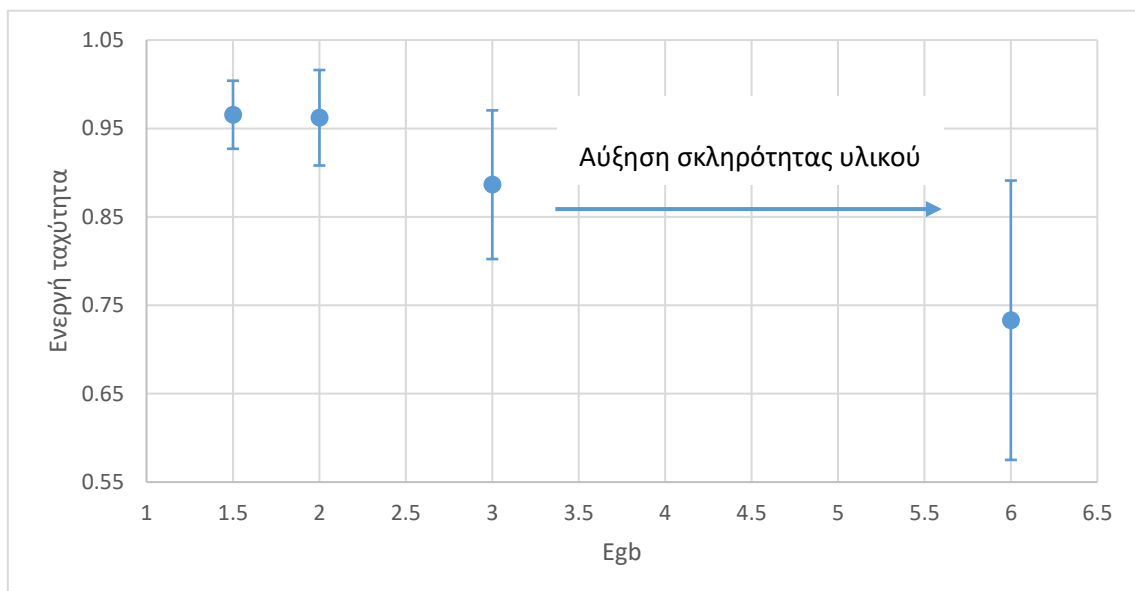


Στο *διάγραμμα 4.17* φαίνεται ότι και το ενεργό μήκος τείνει να μειώνεται όσο το υλικό γίνεται πιο σκληρό. Με εξαίρεση όμως την ακραία τιμή της $E_{gb} = 6$ όπου φαίνεται ότι το ενεργό μήκος αυξάνει.

Αυτό μπορεί να συμβαίνει για δύο λόγους. Ο πρώτος ίσως είναι ότι για τη συγκεκριμένη τιμή το υλικό είναι πολύ σκληρό και άρα οι πιθανότητες κίνησης που προκύπτουν από τις εξισώσεις 2.5 και 2.6 είναι πολύ μικρές, με αποτέλεσμα να είναι πολύ έντονο το φαινόμενο της παγίδευσης. Ως αποτέλεσμα η ρωγμή αναγκάζεται να περνάει πολλές φορές μέσα από υλικό που έχει σπάσει και όπως έχει σχολιαστεί και στις προηγούμενες ενότητες το συνολικό ενεργό μήκος αυξάνεται, αφού για τα βήματα αυτά δε δαπανάται ενέργεια. Ο δεύτερος λόγος είναι ότι η τιμή είναι ακραία και το πρόβλημα έγκειται στην προσεγγιστική βαθμονόμηση των παραμέτρων αυτών, όπως σχολιάστηκε και στο *διάγραμμα 4.15*.

Σχολιασμός ενεργής ταχύτητας- E_{gb}

Διάγραμμα 4.18 Ενεργή ταχύτητα προς E_{gb}



Τέλος παρατίθεται και το *διάγραμμα 4.18*, στο οποίο φαίνεται ότι και η ενεργή ταχύτητα τείνει να μειώνεται όσο το υλικό σκληραίνει. Γενικά φαίνεται ότι για τιμές $E_{gb} > 3$ το υλικό γίνεται τόσο σκληρό που η ρωγμή δε θα μπορεί να διαπερνά κανένα κρυσταλλίτη. Φαίνεται λοιπόν να υπάρχει ένας κρίσιμος συνδυασμός τιμών E_{gb} και E_{inc} πέρα από τον οποίο το υλικό όσο σκληρό και αν γίνει θα έχει την ίδια επίδραση στα μεγέθη μήκους και ταχύτητας της ρωγμής. Δηλαδή πρακτικά η επίδραση των μικροκρυσταλλιτών και της διεπιφάνειας όταν ξεπεράσουν μία τιμή σκληρότητας, δηλαδή ενέργειας σύνδεσης, επιφέρουν την ίδια επίδραση στο μέσο μήκος της ρωγμής και γενικότερα στη συμπεριφορά του υλικού.

4.4.ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΜΕΓΕΘΟΥΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΤΩΝ

Στην ενότητα αυτή δόθηκε περισσότερη σημασία στον τρόπο με τον οποίο επιδρά το μέγεθος των κρυσταλλιτών στο μέσο μήκος διάδοσης της ρωγμής. Σύμφωνα με (Charitidis κ.ά., 2007), το μέγεθος των κρυσταλλιτών παίζει σημαντικό ρόλο στον τρόπο με τον οποίο διεξάγεται το φαινόμενο της διάδοσης της ρωγμής. Συγκεκριμένα πειραματικά δεδομένα (Charitidis κ.ά., 2007) έχουν δείξει ότι όσο το μέγεθος των κρυσταλλιτών αυξάνεται, τόσο το μέσο μήκος της ρωγμής μειώνεται.

Σύμφωνα με (Yaghmaee & Shokri, 2007), έχει αποδειχθεί σε θεωρητικό επίπεδο ότι η ενέργεια σύνδεσης των στοιχείων των κρυσταλλιτών είναι εξαρτημένη του μεγέθους των κρυσταλλιτών, σύμφωνα με την εξίσωση 2.3 που διατυπώθηκε στην **ενότητα 2.2**. Σύμφωνα με την εξίσωση αυτή η ενέργεια σύνδεσης των στοιχείων των κρυσταλλιτών αυξάνεται όσο η διάμετρος των κρυσταλλιτών αυξάνει. Ωστόσο τα πειραματικά δεδομένα που υπάρχουν στην βιβλιογραφία (Yaghmaee & Shokri, 2007) δεν είναι επαρκή για να αποδείξουν ότι κάτι τέτοιο ισχύει στην πραγματικότητα.

Για το λόγο αυτό έγιναν κάποιες πειραματικές δοκιμές ώστε να δειχθεί αν το μοντέλο ανταποκρίνεται σύμφωνα με την παραπάνω θεωρία. Οι δοκιμές έγιναν όπως παρουσιάζονται στον **πίνακα 4.2**.

Πίνακας 4.2 Δεδομένα πειραματικών δοκιμών, επίδρασης μεγέθους κρυσταλλιτών στο μέσο μήκος διάδοσης της ρωγμής

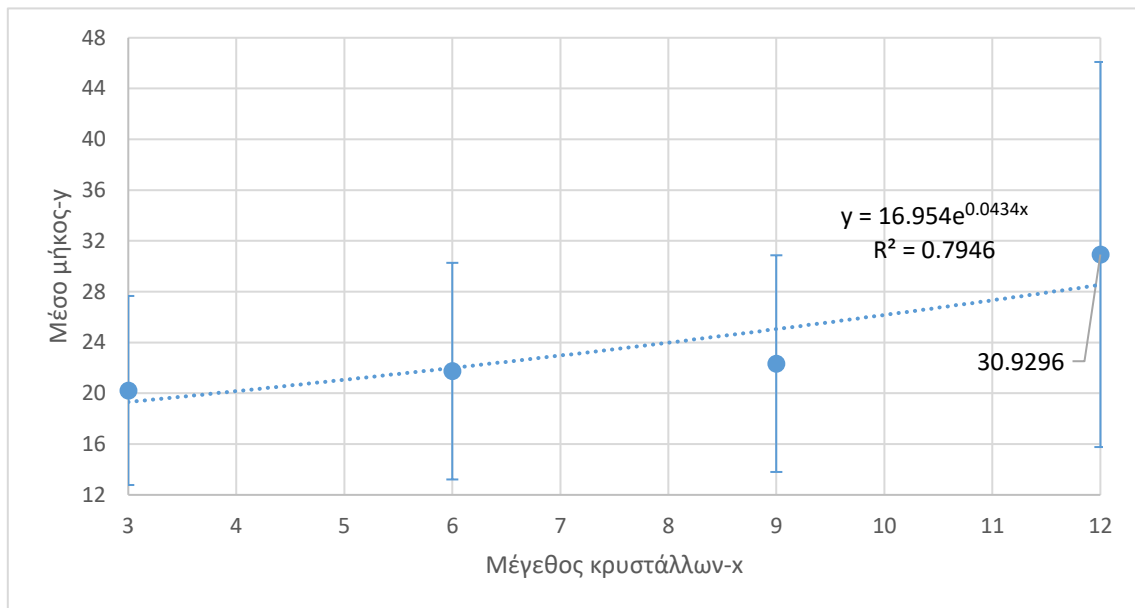
	c	p	KT	P_f	s	E_{mat}	E_{gb}	E_{inc}	E_{init}
1^η Δοκιμή	30%	1	1	0.9	3, 6, 9, 12	1	1.5	1.5	$50 * E_{mat}$
2^η Δοκιμή	30%	1	1	0.9	3, 6, 9, 12	1	Εξίσωση 2.4	Εξίσωση 2.3 $E_{bulk} = 1.5$	$50 * E_{mat}$
3^η Δοκιμή	10%	1	1	0.9	3, 6, 9, 12	1	Εξίσωση 2.4	Εξίσωση 2.3 $E_{bulk} = 1.5$	$6 * 50 * E_{mat}$
4^η Δοκιμή	10%	1	1	0.9	3, 6, 9, 12	0.25	Εξίσωση 2.4	Εξίσωση 2.3 $E_{bulk} = 1.5$	$6 * 50 * E_{mat}$

Πριν παρουσιαστούν τα αποτελέσματα των δοκιμών, θα γίνει ο σχολιασμός των δεδομένων που χρησιμοποιήθηκαν κυρίως ως προς τις ενέργειες σύνδεσης των στοιχείων. Στην πρώτη δοκιμή, όπως φαίνεται και στον πίνακα, οι ενέργειες σύνδεσης για κάθε μέγεθος κρυσταλλίτη ήταν ίδιες. Στις υπόλοιπες δοκιμές η ενέργεια σύνδεσης των στοιχείων της μήτρας συνεχίζει να παραμένει σταθερή σε όλες τις περιπτώσεις διαφορετικού μεγέθους κρυσταλλιτών. Ωστόσο η ενέργεια σύνδεσης των στοιχείων της διεπιφάνειας για τις υπόλοιπες δοκιμές, ορίζεται από την *εξίσωση 2.4* όπως αυτή ορίστηκε με τη σειρά της στην **ενότητα 2.2** και είναι μεταβλητή για κάθε μέγεθος κρυσταλλίτη, καθώς επίσης για τις υπόλοιπες δοκιμές είναι και η ενέργεια σύνδεσης των στοιχείων των κρυστάλλων μεταβαλλόμενη. Η ενέργεια σύνδεσης των στοιχείων των κρυσταλλιτών μεταβάλλεται ως προς το μέγεθος τους σύμφωνα με την *εξίσωση 2.3*. Πιο συγκεκριμένα στην *εξίσωση 2.3* ο συντελεστής ατομικής πληρώσεως έχει οριστεί ίσος με $f_v = 0.55$, ο συντελεστής ατομικής διαμέτρου του νανοσωματιδίου τέθηκε ίσος με $d_a = 1$ και η άμορφη ενέργεια σύνδεσης του νάνο-σωματιδίου του υλικού σε μακρο-κλίμακα (*bulk*) τέθηκε ίση με $E_b = 1.5$. Οι προσεγγίσεις αυτές έγιναν ώστε να είναι όσο το γίνεται πιο κοντά στα πειραματικά δεδομένα (Charitidis κ.ά., 2007) για κεραμική μήτρα.

Έχοντας αναλύσει τα δεδομένα των δοκιμών του πίνακα 4.2, τώρα μπορούν να παρουσιαστούν τα αποτελέσματα. Σύμφωνα με τον πίνακα 4.2 αρχικά ελέγχθηκε, αν η ενέργεια σύνδεσης των στοιχείων είναι δεδομένη και ίδια για όλα τα μεγέθη των κρυσταλλιτών, τι επίδραση θα είχε το μέγεθος των κρυσταλλιτών στο μέσο μήκος διάδοσης της ρωγμής. Τα αποτελέσματα της 1^{ης} δοκιμής φαίνονται στο *διάγραμμα 4.19*.

Σχολιασμός μέσου μήκους 1^{ης} δοκιμής

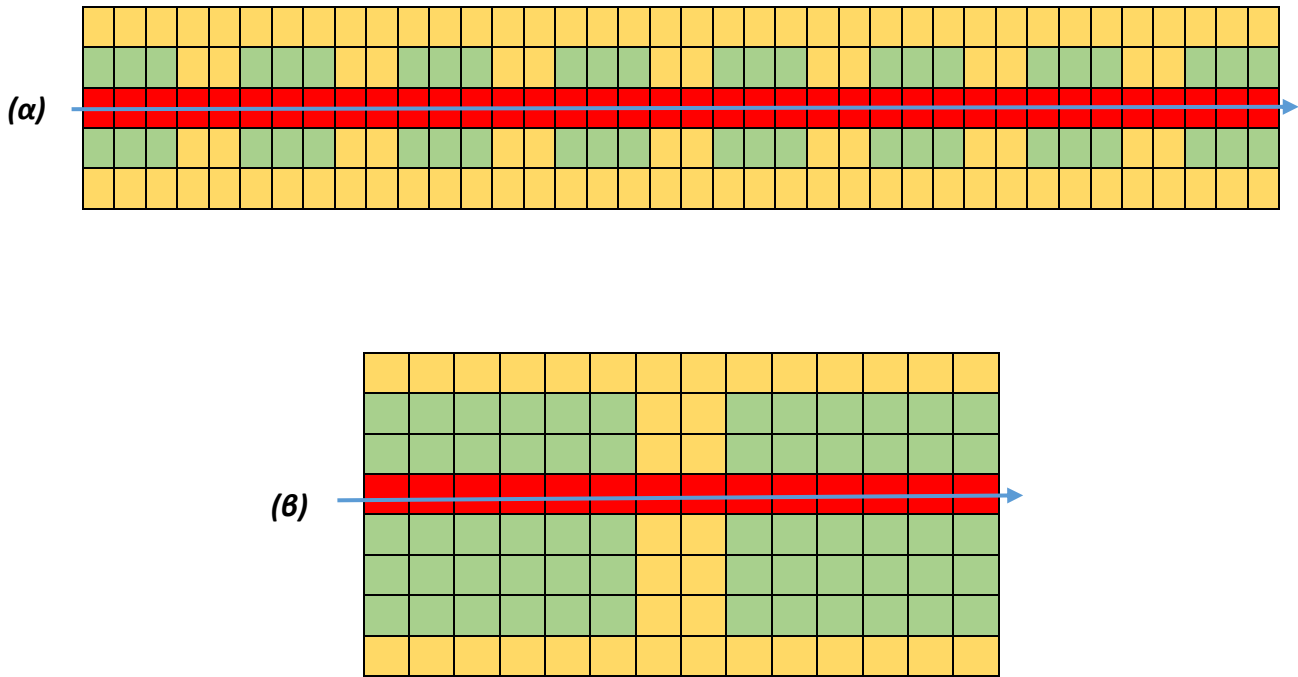
Διάγραμμα 4.19 Μέσο μήκος προς μέγεθος κρυστάλλων για τα δεδομένα της 1^{ης} δοκιμής, $c = 30\%$, σταθερές ενέργειες



Σύμφωνα με το *διάγραμμα 4.19*, για το εύρος τιμών που παρουσιάζονται, φαίνεται ότι όσο το πλάτος των κρυσταλλιτών αυξάνει, τόσο το μέσο μήκος αυξάνει εκθετικά. Το αποτέλεσμα αυτό έρχεται σε αντίθεση με τα πειραματικά δεδομένα. Αυτό βέβαια συμβαίνει διότι όσο το μέγεθος των κρυσταλλιτών αυξάνει για την ίδια συγκέντρωση, ο αριθμός των κρυσταλλιτών μειώνεται. Αυτό σημαίνει ότι όταν η ρωγμή διαδίδεται μέσα σε δοκίμιο με μεγαλύτερους κρυσταλλίτες θα συναντά κρυσταλλίτες πιο σπάνια και άρα το μέσο μήκος θα είναι μεγαλύτερο, καθώς στην πορεία της ρωγμής δε θα εμφανίζονται ενεργειακά άλματα. Αυτό βέβαια συμβαίνει και γιατί οι ενέργειες σύνδεσης των στοιχείων για όλα τα μεγέθη των κρυστάλλων στην παραπάνω δοκιμή είναι η ίδια. Τα παραπάνω γίνονται πιο κατανοητά με τη βοήθεια του παρακάτω παραδείγματος.

Έστω ότι ένα ψηφιακό δοκίμιο με διάσταση $n = 20$ περιέχει κρυσταλλίτες μεγέθους $s = 3$ σε συγκέντρωση $c = 18\%$. Ο αριθμός των κρυσταλλιτών θα είναι 8 στο σύνολο. Έστω τώρα ότι υπάρχει ένα δεύτερο δοκίμιο με ίδια συγκέντρωση και διάσταση, αλλά το πλάτος των κρυσταλλιτών είναι διπλάσιο και άρα ίσο με $s = 6$. Στην περίπτωση αυτή ο αριθμός των κρυσταλλιτών θα είναι δύο. Έστω ότι το πάχος της διεπιφάνειας των κρυσταλλιτών, η αρχική ενέργεια διάδοσης και οι ενέργειες σύνδεσης των στοιχείων είναι ίδιες και στα δύο δοκίμια.

Ως εδώ η κατάσταση μοιάζει αρκετά με την κατάσταση που παρουσιάστηκε στο *διάγραμμα 4.19*. Ας γίνει η υπόθεση ότι οι κρυσταλλίτες στα δύο δοκίμια είναι τοποθετημένοι ο ένας δίπλα στον άλλο και ότι η ρωγμή διαδίδεται σε αδιατάρακτη ευθεία πορεία όπως στο *σχήμα 4.3*.



→ στοιχείο κρυσταλλίτη → στοιχείο διεπιφάνειας → σπασμένο υλικό - «ρωγμή»

Σχήμα 4.3 Διάδοση ρωγμής σε αδιατάρακτη ευθεία πορεία δια μέσου κρυστάλλων μεγέθους $s = 3$ και $s = 6$ τοποθετημένων σε σειρά

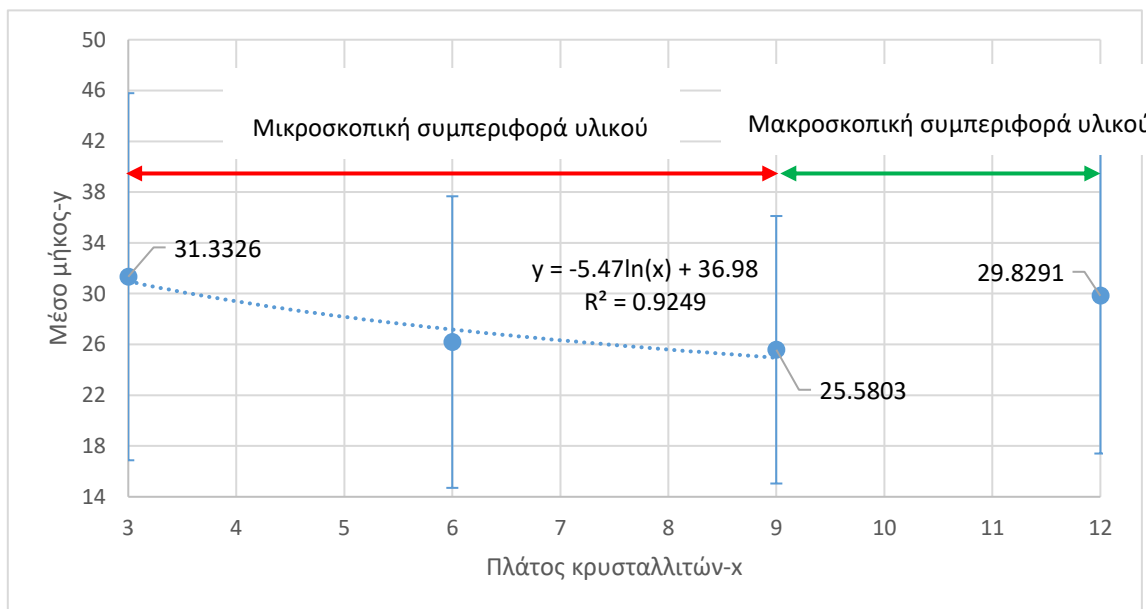
Έστω λοιπόν ότι η ενέργεια σύνδεσης των στοιχείων είναι $E_{gb} = 1$ και $E_{inc} = 2$ και για τις δύο περιπτώσεις. Με ένα γρήγορο υπολογισμό προκύπτει ότι όταν η ρωγμή θα εξέλθει του τελευταίου κρυσταλλίτη στην περίπτωση (α) η ενέργεια διάδοσης που θα έχει απομείνει θα είναι ίση με **Παραμένουσα ενέργεια = $E_{init} - 62$** , ενώ για την περίπτωση (β) η ενέργεια που θα έχει απομείνει θα είναι ίση με **Παραμένουσα ενέργεια = $E_{init} - 26$** . Άρα λοιπόν σύμφωνα με το παράδειγμα στη δεύτερη περίπτωση η ενέργεια που θα έχει μείνει θα είναι πολύ μεγαλύτερη της πρώτης περίπτωσης.

Επίσης έστω ότι ήταν $E_{init} = 70$ και ότι μετά την έξοδο από τους κρυσταλλίτες και στις δύο περιπτώσεις η ρωγή συνεχίζει να διαδίδεται σε ευθεία πορεία και σε κάθε βήμα η ενέργεια που χάνει είναι μονάδα, διότι $E_{mat} = E_{gb} = 1$. Με ένα γρήγορο υπολογισμό προκύπτει ότι το συνολικό μήκος που θα έχει διανυθεί στην πρώτη περίπτωση θα είναι **μήκος (α) = 46** και στην δεύτερη περίπτωση **μήκος (β) = 58** και άρα όπως αποδείχθηκε και από το *διάγραμμα 4.19* το μέσο μήκος αυξάνει όσο αυξάνει το πλάτος των κρυσταλλιτών.

Σχολιασμός μέσου μήκους 2^{ης} δοκιμής

Στη συνέχεια εξετάστηκε η εναλλακτική περίπτωση, ότι δηλαδή η ενέργεια σύνδεσης των στοιχείων των κρυσταλλιτών είναι εξαρτημένη του μεγέθους τους. Για το λόγο αυτό έγινε η 2^η δοκιμή. Κατά τη δοκιμή αυτή όλα τα δεδομένα διατηρήθηκαν ίδια με της 1^{ης} δοκιμής, με τη διαφορά ότι τώρα οι ενέργειες των κρυσταλλιτών υπολογίστηκαν για κάθε μέγεθος σύμφωνα με την *εξίσωση 2.3*, ενώ οι ενέργειες σύνδεσης των στοιχείων της διεπιφάνειας σύμφωνα με την *εξίσωση 2.4*. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο *διάγραμμα 4.20*.

Διάγραμμα 4.20 Μέσο μήκος προς μέγεθος κρυστάλλων για τα δεδομένα της 2^{ης} δοκιμής, $c = 30\%$, μεταβλητές ενέργειες



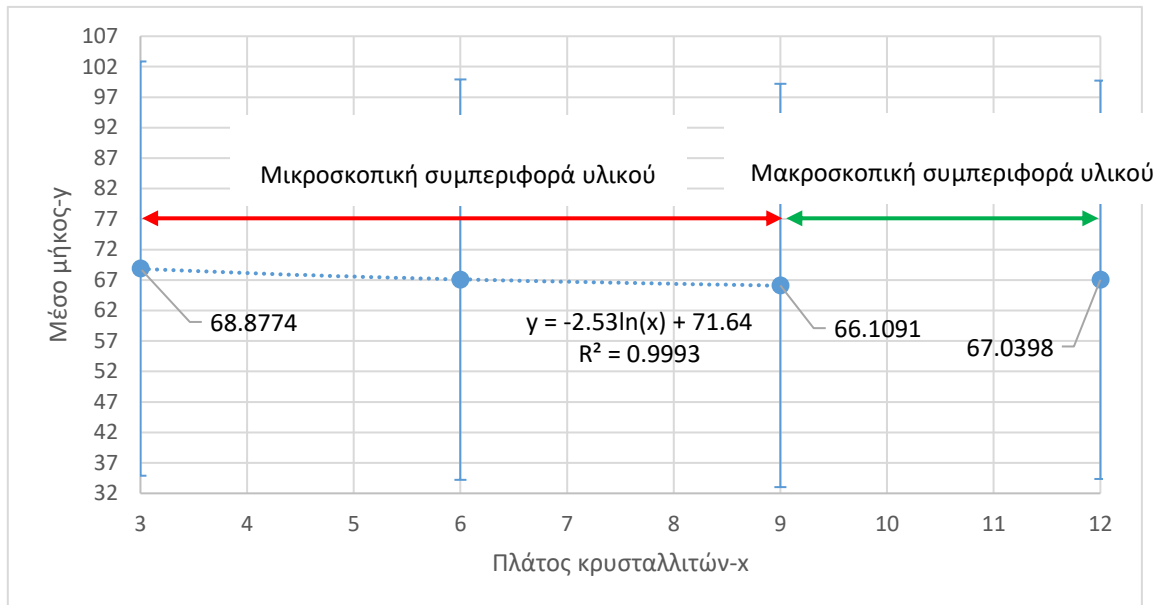
Για τη δεύτερη δοκιμή φαίνεται ότι τα αποτελέσματα ανταποκρίνονται διαφορετικά, και ποιοτικά έρχονται πιο κοντά στα πειραματικά δεδομένα. Όπως φαίνεται στο *διάγραμμα 4.20* το μέσο μήκος μειώνεται λογαριθμικά όσο το μέγεθος των κρυσταλλιτών αυξάνει. Αυτό βέβαια συμβαίνει μέχρι και για πλάτος κρυσταλλιτών ίσο με 9, καθώς για την τιμή 12 φαίνεται ότι το μέσο μήκος αυξάνει. Αυτό συμβαίνει διότι για πλάτος κρυσταλλιτών μεγαλύτερο από 9 οι ενέργειες σύνδεσης που δίνονται από την *εξίσωση 2.3* τείνουν να εξισωθούν με αυτές της άμορφης φάσης του υλικού. Αυτή η υπόθεση ενισχύεται από το γεγονός ότι για πλάτος κρυσταλλίτη $s = 12$ η τιμή του μέσου μήκους διάδοσης του *διαγράμματος 4.20* είναι σχεδόν ίση με αυτή του *διαγράμματος 4.19*, όπου στο *διάγραμμα 4.19* έχει χρησιμοποιηθεί η ενέργεια σύνδεσης του κρυσταλλίτη για την άμορφη φάση ίση με αυτή που χρησιμοποιήθηκε μέσω της *εξίσωσης 2.3* για τον υπολογισμό του *διαγράμματος 4.20*.

Επίσης φαίνεται ότι για τα συγκεκριμένα δεδομένα της δοκιμής, (*συγκέντρωση, P_f , κ.ο.κ.*) μεταξύ των τιμών πλάτους 9 και 12 υπάρχει για μία κρίσιμη τιμή, όπου αν ξεπεραστεί το υλικό χάνει τις μικροσκοπικές ιδιότητες που του προσφέρουν οι μικροκρυσταλλίτες και περνάει στις μακροσκοπικές ιδιότητες της άμορφης φάσης. Επίσης γίνεται κατανοητό ότι πάνω από την κρίσιμη αυτή τιμή το υλικό αλλάζει συμπεριφορά και όσο οι κρυσταλλίτες μεγαλώνουν σε πλάτος, τόσο το μέσο μήκος αυξάνεται. Άρα αλλάζουν και οι μηχανικές ιδιότητες του υλικού. Περαιτέρω ανάλυση δεν έγινε για την εκτίμηση της κρίσιμης αυτής τιμής, γιατί τα δεδομένα της δοκιμής όπως π.χ. οι ενέργειες σύνδεσης, αποτελούν αυθαίρετες επιλογές και δε μπορούν να αντιστοιχηθούν σε κάποια συγκεκριμένη ρεαλιστική κατάσταση υλικού και δοκιμίου. Μεγαλύτερη σημασία δόθηκε στο να μελετηθεί η συμπεριφορά των δοκιμών σε μικρότερη συγκέντρωση, και να δειχθεί αν το εύρος τιμών πλάτους κρυσταλλιτών για το οποίο ισχύουν οι μικροσκοπικές ιδιότητες παραμένει ίδιο ή αλλάζει σε διαφορετικές περιπτώσεις. Έτσι στη συνέχεια παρουσιάζεται η 3^η δοκιμή όπου επαναλαμβάνεται το ίδιο δοκιμαστικό πείραμα με πριν, αλλά για μικρότερη συγκέντρωση.

Σχολιασμός μέσου μήκους 3^{ης} δοκιμής

Στην 3^η δοκιμή η συγκέντρωση του δοκιμίου ήταν $c = 10\%$. Επίσης η αρχική ενέργεια διάδοσης της ρωγμής ήταν εξαπλάσια των άλλων δοκιμών. Αυτό έγινε για να υπάρχει καλύτερη δειγματοληψία μέσα στο δοκίμιο, καθώς τώρα θα υπάρχουν λιγότεροι κρυσταλλίτες.

Διάγραμμα 4.21 Μέσο μήκος προς μέγεθος κρυστάλλων για τα δεδομένα της 3^{ης} δοκιμής, $c = 10\%$, μεταβλητές ενέργειες

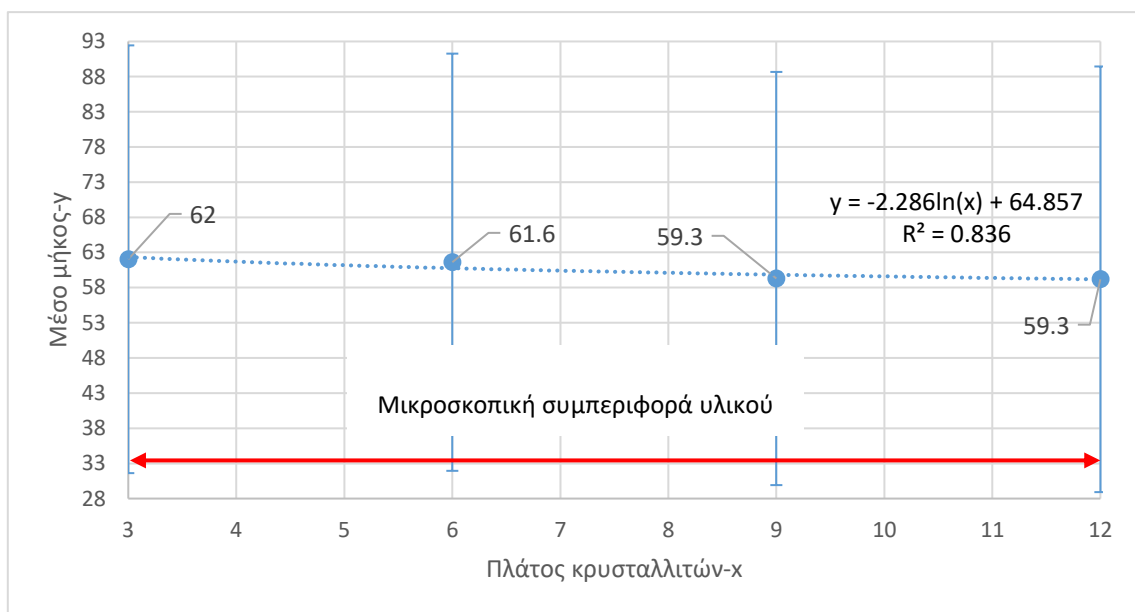


Σύμφωνα με το *διάγραμμα 4.21*, για τα δεδομένα της 3^{ης} δοκιμής φαίνεται ότι το μέσο μήκος μειώνεται λογαριθμικά. Επίσης φαίνεται ότι για πλάτη κρυσταλλιτών μέχρι την τιμή $s = 9$ και εδώ το μέσο μήκος μειώνεται, ενώ για την επόμενη τιμή $s = 12$ το μήκος φαίνεται να αρχίζει να αυξάνει. Στην ουσία παρατηρείται η ίδια συμπεριφορά με του *διαγράμματος 4.20* και άρα η συγκεκριμένη συμπεριφορά είναι ανεξάρτητη της συγκέντρωσης. Ωστόσο για την περίπτωση της μικρής συγκέντρωσης που παρουσιάζεται στην παρούσα δοκιμή, η μείωση του μέσου μήκους είναι πιο ομαλή. Αυτό σημαίνει ότι η επίδραση που έχουν οι μικροκρυσταλλίτες στο μέσο μήκος διάδοσης της ρωγμής, είναι πιο έντονη σε υψηλές συγκεντρώσεις.

Σχολιασμός μέσου μήκους 4^{ης} δοκιμής

Στην 4^η δοκιμή έγινε μία εκτίμηση του πως επηρεάζεται το φαινόμενο αν η ενέργεια σύνδεσης των στοιχείων της μήτρας μειωθεί. Στην 4^η δοκιμή οι ενέργειες των κρυσταλλιτών έμειναν ίδιες με αυτές της 2^{ης} και 3^{ης} δοκιμής και η συγκέντρωση ήταν $c = 10\%$. Στην πραγματικότητα μειώνοντας την ενέργεια σύνδεσης της μήτρας στη δοκιμή αυτή είναι σα να τοποθετούνται κρύσταλλοι ίδιας ενέργειας με πριν σε πιο μαλακό υλικό. Τα αποτελέσματα φαίνονται στο *διάγραμμα 4.22*.

Διάγραμμα 4.22 Μέσο μήκος προς μέγεθος κρυστάλλων για τα δεδομένα της 4^{ης} δοκιμής, $c = 10\%$, μεταβλητές ενέργειες



Σύμφωνα με το διάγραμμα, το μέσο μήκος μειώνεται λογαριθμικά για όλο το εύρος των τιμών του πλάτους των κρυσταλλιτών. Η μείωση είναι αρκετά ομαλή και αυτό εξηγείται βάσει των σχολίων για την προηγούμενη δοκιμή, αφού η συγκέντρωση είναι μικρή. Το ενδιαφέρον στο διάγραμμα αυτό είναι ότι παρατηρείται συνεχής μείωση του μέσου μήκους σε αντίθεση με τις προηγούμενες δοκιμές. Αυτό σημαίνει ότι το κρίσιμο πλάτος κρυσταλλίτη στην περίπτωση αυτή είναι μεγαλύτερο από ότι στις άλλες δοκιμές. Με λίγα λόγια όταν κρυσταλλίτες δεδομένης ενέργειας εισάγονται σε πιο μαλακό υλικό, το εύρος τιμών πλάτους των κρυσταλλιτών για το οποίο θα ισχύουν οι μικροσκοπικές ιδιότητες είναι μεγαλύτερο από ότι σε ένα πιο σκληρό υλικό.

5.ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ-ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ

Στην παρούσα εργασία κατασκευάστηκε ένα δυσδιάστατο υπολογιστικό μοντέλο προσομοίωσης διάδοσης ρωγμών, σε υλικά ενισχυμένα με μικροκρυσταλλίτες. Σκοπός της εργασίας ήταν ο στατιστικός έλεγχος του μοντέλου και η μελέτη του τρόπου επίδρασης διάφορων μεγεθών στο μήκος και την ταχύτητα της ρωγμής. Όπως παρουσιάστηκε στην **ενότητα 3** και στην **ενότητα 4**, το μοντέλο ανταποκρίνεται αρκετά καλά όσο αφορά το στατιστικό του έλεγχο, αλλά και τα αποτελέσματα που παράγει συμφωνούν με πειραματικά και θεωρητικά αποτελέσματα της βιβλιογραφίας. Επιπρόσθετα, μέσα από τον έλεγχο των αποτελεσμάτων εξήχθησαν και σημαντικά συμπεράσματα, πάνω σε ζητήματα που μέχρι τώρα δεν είναι ξεκάθαρα στη βιβλιογραφία. Τα συμπεράσματα παρατίθενται κατά σειρά σύμφωνα με τις ενότητες της εργασίας, ενώ στο τελευταίο κομμάτι δίνονται ιδέες και λύσεις για μελλοντική έρευνα και πιθανές βελτιώσεις του μοντέλου.

5.1.ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Συμπεράσματα ελέγχου σύγκλισης, μεθόδων δειγματοληψίας και φαινομένων μεγέθους μήτρας

Τα μεγέθη του μέσου και ενεργού μήκους και της μέσης και ενεργής ταχύτητας φαίνεται να συγκλίνουν ικανοποιητικά σύμφωνα με το κριτήριο του *Cauchy*. Επίσης και οι δύο διαφορετικές μέθοδοι δειγματοληψίας που αναλύθηκαν στην **ενότητα 3.4.1**, δείχνουν ότι τα μελετώμενα μεγέθη συγκλίνουν στις ίδιες τιμές και άρα μπορεί να χρησιμοποιηθεί η πρώτη μέθοδος δειγματοληψίας, καθώς χρειάζεται λιγότερο υπολογιστικό χρόνο για να υλοποιηθεί. Επιπρόσθετα σύμφωνα με την **ενότητα 3.3.1** δεν υπάρχουν φαινόμενα μεγέθους μήτρας για μικρές και μεγάλες συγκεντρώσεις. Στις ενδιάμεσες συγκεντρώσεις όπως φάνηκε πιθανόν τα φαινόμενα μεγέθους μήτρας να είναι αισθητά. Το συγκεκριμένο πρόβλημα οφείλεται στις μικρές διαστάσεις της μήτρας και θα μπορούσε να λυθεί για μεγαλύτερες διαστάσεις μήτρας.

Συμπεράσματα στατιστικού ελέγχου

Για το εύρος τιμών των παραμέτρων που ελέγχθηκαν, φαίνεται ότι τα μεγέθη του μέσου και ενεργού μήκους και της μέσης και ενεργής ταχύτητας, ακολουθούν την κανονική κατανομή όπως αποδείχθηκε στην **ενότητα 3.5**. Επίσης οι μεγάλες τυπικές αποκλίσεις που παρουσιάζονται σε συγκεκριμένες περιπτώσεις στα αποτελέσματα, δεν αποτελούν πειραματικά σφάλματα ή ελλιπή δειγματοληψία, αλλά οφείλονται στο μεγάλο εύρος τιμών που προκύπτουν από τις πειραματικές δοκιμές προσομοίωσης, όπως εξηγείται αναλυτικά και στην **ενότητα 4**.

Συμπεράσματα επίδρασης της συγκέντρωσης

Κατά τη μελέτη της επίδρασης της συγκέντρωσης στην **ενότητα 4.1**, αποδείχθηκε ότι είναι ένα μέγεθος που έχει άμεση επιρροή στο μήκος και την ταχύτητα της ρωγμής. Πιο συγκεκριμένα η μείωση της συγκέντρωσης των κρυσταλλιτών σε ένα δοκίμιο επιφέρει γραμμική μείωση του μέσου μήκους και της ενεργής ταχύτητας διάδοσης της ρωγμής. Το υλικό φαίνεται να γίνεται πιο σκληρό.

Συμπεράσματα επίδρασης της παραμέτρου P_f

Κατά τη μελέτη της παραμέτρου P_f στην **ενότητα 4.2** παρατηρήθηκε ότι όσο η τιμή της αυξάνεται, τόσο αυξάνεται και το μέσο μήκος εκθετικά. Επιπλέον η ενεργή ταχύτητα αυξάνεται λογαριθμικά. Βέβαια η ενεργή ταχύτητα φαίνεται να πλησιάζει σε ένα πλατό.

Προς το παρόν το μοντέλο αναγνωρίζει την παράμετρο P_f σα μία μεταβλητή που δίνει κύρια κατευθυντικότητα στη ρωγμή. Αν όμως η παράμετρος αυτή συνδυαζόταν και με τους μηχανισμούς διάδοσης θα μπορούσε να δοθεί και κάποια φυσική εξήγηση για τον τρόπο που επιδρά στο μήκος και την ταχύτητα. Έστω ότι οι υψηλές τιμές της παραμέτρου ταυτίζονται με συγκεκριμένους μηχανισμούς διάδοσης ρωγμών. Με την ιδιότητα αυτή μπορεί να πει κάποιος ότι υπάρχει μία κρίσιμη τιμή που όσο και να αυξηθεί η παράμετρος, η ενεργή ταχύτητα διάδοσης (πραγματική ταχύτητα) παραμένει ίδια.

Επίσης όπως παρατηρήθηκε για μικρές τιμές της παραμέτρου η ρωγμή κάνει κύκλους σε μία συγκεκριμένη περιοχή και δε διαδίδεται σε σχετικά ευθεία πορεία. Αυτό σημαίνει ότι σε αυτή την περιοχή σπάει μεγάλη επιφάνεια υλικού και το τελικό μέσο μήκος είναι πολύ μικρό, ενώ για μεγάλες τιμές η ρωγμή πάει σχετικά ευθεία με μικρό άνοιγμα πλάτους ρωγμής και το μέσο μήκος είναι πολύ μεγαλύτερο. Με άλλα λόγια, αν η παράμετρος συνδυαστεί με συγκεκριμένους τύπους εφαρμογής φορτίου στη διάδοση της ρωγμής, αυτό σημαίνει ότι άμεσα ρόλο στη συμπεριφορά του υλικού πέρα από τα τεχνικά και φυσικά χαρακτηριστικά του δοκιμίου, έχει και ο τρόπος διάδοσης της ρωγμής.

Για τύπους εφαρμογής φορτίου που αντιστοιχούν σε χαμηλές τιμές της παραμέτρου η ρωγμή έχει μεγάλο πλάτος και διαδίδεται σε μικρή απόσταση και άρα το υλικό συμπεριφέρεται ψαθυρά, ενώ για μεγάλες τιμές της παραμέτρου για το ίδιο δοκίμιο, η ρωγμή διαδίδεται πιο μακριά με μικρό πλάτος και άρα το υλικό συμπεριφέρεται πιο όλκιμα. Άρα το υλικό γίνεται πιο σκληρό στην πρώτη περίπτωση, ενώ στη δεύτερη πιο ανθεκτικό (Morrell, 1996; Charitidis κ.ά., 2007). Βέβαια η παραπάνω διατύπωση χρήζει περαιτέρω έρευνας, καθώς προς το παρόν δεν έχει αποδειχθεί πλήρως.

Συμπεράσματα επίδρασης της θερμοκρασίας

Στην **ενότητα 4.3** αποδείχθηκε ότι η θερμοκρασία είναι άλλο ένα φυσικό μέγεθος που επηρεάζει άμεσα το μήκος και την ταχύτητα της ρωγμής. Πιο συγκεκριμένα παρατηρήθηκε ότι το μέσο μήκος και η ενεργή ταχύτητα διάδοσης αυξάνονται λογαριθμικά όσο αυξάνει η θερμοκρασία. Επίσης τα μεγέθη του ενεργού μήκους και της μέσης ταχύτητας συμπεριφέρονται και αυτά λογαριθμικά σε σχέση με τη θερμοκρασία.

Όσο η θερμοκρασία αυξάνει οι δεσμοί των στοιχείων γίνονται πιο χαλαροί και άρα είναι πιο εύκολο να σπάσουν. Ως αποτέλεσμα το υλικό συμπεριφέρεται διαφορετικά. Για χαμηλές θερμοκρασίες γίνεται πιο σκληρό, καθώς το πλάτος της ρωγμής είναι πολύ μεγάλο και το μέσο μήκος της μικρό, ενώ για υψηλές θερμοκρασίες το πλάτος γίνεται πολύ μικρό και το μέσο μήκος μεγαλώνει αρκετά και άρα γίνεται πιο μαλακό. Βέβαια για να υπάρχει μία λογική ανταπόκριση του υλικού η θερμοκρασία πρέπει να μη ξεπερνά μία συγκεκριμένη κρίσιμη τιμή, που συνήθως αυτή είναι η θερμοκρασία τήξης του υλικού.

Στην παρούσα εργασία και με την προσεγγιστική βαθμονόμηση που έχει γίνει, φαίνεται ότι η κρίσιμη αυτή τιμή είναι η μονάδα. Αυτό φαίνεται και από τα διαγράμματα των μεγεθών που παρουσιάζονται στην **ενότητα 4.3**, καθώς παρατηρείται ότι για την τιμή αυτή τα μεγέθη φτάνουν σε κάποιο πλατό. Δηλαδή όσο η θερμοκρασία και να αυξηθεί πέρα από την τιμή αυτή, το υλικό αποκτά τόσο χαλαρούς δεσμούς που ανταποκρίνεται με τον ίδιο τρόπο. Η παρατήρηση αυτή αποτελεί χρήσιμο στοιχείο για τη βαθμονόμηση των παραμέτρων του μοντέλου σε μελλοντική έρευνα.

Τέλος ένα σημαντικό στοιχείο που παρουσιάστηκε στην ενότητα αυτή και ενισχύει το παραπάνω συμπέρασμα για την επίδραση της θερμοκρασίας, ήταν ότι οι χαμηλές θερμοκρασίες οδηγούν σε intergranular διάδοση, ενώ οι υψηλές θερμοκρασίες σε transgranular διάδοση της ρωγμής.

Συμπεράσματα επίδρασης των ενεργειών σύνδεσης

Όπως φάνηκε από την **ενότητα 4.3** και μελετήθηκε περισσότερο στην **ενότητα 4.4**, οι ενέργειες σύνδεσης των στοιχείων επιδρούν άμεσα στο μήκος και την ταχύτητα της ρωγμής. Πιο συγκεκριμένα στην **ενότητα 4.3** για το υλικό με τους πιο σκληρούς κρυσταλλίτες, οι τιμές όλων των μελετώμενων μεγεθών ήταν πιο χαμηλές σε σχέση με το υλικό που περιείχε πιο μαλακούς κρυσταλλίτες. Επίσης η περαιτέρω ανάλυση που έγινε στην **ενότητα 4.4** επαλήθευσε την παρατήρηση αυτή. Όσο οι ενέργειες σύνδεσης των στοιχείων αυξάνονται, τόσο το μέσο μήκος διάδοσης και η ενεργή ταχύτητα μειώνονται.

Βέβαια τα αποτελέσματα που παρουσιάστηκαν στην **ενότητα 4.4** αποτελούν ποιοτική απεικόνιση της συμπεριφοράς τους και δε μπορούν να εξαχθούν συμπεράσματα για τη μαθηματική συμπεριφορά τους. Αυτό συνέβη γιατί οι ενέργειες σύνδεσης είναι διαφορετικές για τα στοιχεία των κρυσταλλιτών και τα στοιχεία της διεπιφάνειας και άρα το πρόβλημα γίνεται διπαραμετρικό. Στοιχεία για το πως αυτά τα μεγέθη συμπεριφέρονται μαθηματικά θα μπορούσαν να δοθούν με την κατασκευή της κατάλληλης επιφάνειας στο χώρο. Ωστόσο στα πλαίσια της παρούσας εργασίας δεν υπήρχε ο χρόνος.

Η κατασκευή ενός τέτοιου γραφήματος θα μπορούσε να δώσει συσχέτιση σημαντικότητας μεταξύ ενέργειας κρυσταλλινών και διεπιφάνειας για το πως επιδρούν στο μέσο μήκος, αλλά θα μπορούσε να γίνει επίσης και νομογράφημα πρόβλεψης των τιμών των φυσικών μεγεθών, για τις κάθε φορά επιθυμητές παραμέτρους εισόδου.

Συμπεράσματα επίδρασης του μεγέθους των κρυσταλλινών

Όπως παρουσιάστηκε και αποδείχθηκε στην ενότητα 4.4 οι ενέργειες σύνδεσης των στοιχείων των κρυσταλλινών είναι εξαρτημένες του μεγέθους τους. Για την ακρίβεια παρατηρήθηκε ότι για κρυσταλλίτες που έχουν την ίδια ενέργεια σύνδεσης για όλο το εύρος των μεγεθών τους, όσο το πλάτος τους αυξάνεται το μέσο μήκος αυξάνεται. Ενώ όσο το πλάτος κρυσταλλινών, που οι ενέργειες τους είναι εξαρτημένες του μεγέθους τους, αυξάνεται τόσο το μέσο μήκος της ρωγμής μειώνεται, κάτι που έρχεται σε συμφωνία με πειραματικά δεδομένα (Charitidis κ.ά., 2007).

Επίσης παρατηρήθηκε, στην περίπτωση που οι ενέργειες ήταν εξαρτημένες του μεγέθους, ότι υπάρχει μία κρίσιμη τιμή μεγέθους, που πέρα από αυτή το μέσο μήκος της ρωγμής αλλάζει συμπεριφορά και αρχίζει να αυξάνεται. Αυτό αποδείχθηκε ότι συμβαίνει, διότι για το μέγεθος αυτό οι κρυσταλλίτες τείνουν να έχουν τιμές ενεργειών πολύ κοντά σε αυτές της άμορφης φάσης τους (*bulk phase*). Δηλαδή για μέγεθος κρυσταλλινών μεγαλύτερο από την κρίσιμη αυτή τιμή, το υλικό χάνει τις μικροσκοπικές του ιδιότητες και αποκτά πλέον τις μακροσκοπικές του ιδιότητες. Αυτό αποτελεί σημαντική παρατήρηση, καθώς με τη χρήση του μοντέλου και δεδομένα στοιχεία εισόδου που έχουν μετρηθεί σε μικροσκοπικό επίπεδο, μπορεί να γίνει εκτίμηση αυτού του εύρους τιμών του μεγέθους των κρυσταλλινών, για το οποίο θα ισχύουν οι μικρο ή οι μακρο ιδιότητες.

Επιπρόσθετα παρατηρήθηκε ότι σημαντικό ρόλο παίζει και η συγκέντρωση στο φαινόμενο αυτό, καθώς δεν αλλάζει το εύρος των τιμών μεγέθους που ισχύουν οι μικροσκοπικές ιδιότητες, αλλά για χαμηλές συγκεντρώσεις κρυσταλλινών, παρατηρήθηκε ότι στο ίδιο εύρος μεγεθών η μείωση του μέσου μήκους ήταν πιο ομαλή.

Τέλος παρατηρήθηκε ότι όταν αλλάζουν και οι ενέργειες σύνδεσης της άμορφης μήτρας, δηλαδή όσο το υλικό στο οποίο θα εισαχθούν οι κρυσταλλίτες είναι πιο μαλακό, τόσο το εύρος αυτό αλλάζει. Συγκεκριμένα έγινε δοκιμή που έδειξε ότι σε πιο μαλακή μήτρα οι ίδιοι κρυσταλλίτες μειώνουν το μέσο μήκος για μεγαλύτερο εύρος μεγεθών. Δηλαδή στα πιο μαλακά υλικά μπορούν να ισχύουν οι μικροσκοπικές ιδιότητες και για μεγαλύτερα μεγέθη κρυσταλλιτών, που αντίστοιχα στα σκληρά υλικά θα είχε ήδη γίνει εισαγωγή στη μακροσκοπική ζώνη.

5.2. ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ ΓΙΑ ΜΕΛΟΝΤΙΚΗ ΕΡΕΥΝΑ

1. Ένα κομμάτι του μοντέλου που θα μπορούσε να βελτιωθεί σε περαιτέρω έρευνα είναι η βαθμονόμηση των παραμέτρων. Με τον τρόπο αυτό το μοντέλο θα μπορούσε να δίνει αποτελέσματα που θα ανταποκρίνονται στην πραγματικότητα και δε θα είναι απλά ποιοτικά. Επίσης οι μονάδες μέτρησης των μεγεθών θα μπορούσαν να αναχθούν στο (*S. I.*).
2. Σχετικά με τις ενέργειες σύνδεσης των κρυσταλλιτών, θα μπορούσε να γίνει μία μετατροπή ώστε το μοντέλο να ορίζει στο εσωτερικό των κρυσταλλιτών την ενέργεια σε διαβαθμισμένες ζώνες, όπως συμβαίνει και στην πραγματικότητα (Bitzek κ.ά., 2015). Δηλαδή η ενέργεια σύνδεσης του υλικού του κρυσταλλίτη να εξαρτάται από τη θέση του, καθώς στις εξωτερικές στιβάδες οι κρυσταλλίτες δεν έχουν την ίδια ενέργεια σύνδεσης με αυτή στον πυρήνα τους.
3. Θα μπορούσε να δοθεί περισσότερη προσοχή όσο αφορά την κατανομή των κρυσταλλιτών μέσα στο δοκίμιο και τις μεταξύ τους αποστάσεις. Προς το παρόν το μοντέλο τοποθετεί τους κρυσταλλίτες τελείως πιθανοτικά. Μία στοχευμένη τοποθέτηση θα μπορούσε να είναι χρήσιμη για διάφορους λόγους, καθώς σύμφωνα και με τη βιβλιογραφία οι μεταξύ τους αποστάσεις επιδρούν στη συμπεριφορά του υλικού (Falzone κ.ά., 2016).
4. Ένα άλλο ζήτημα που θα μπορούσε να εξεταστεί, είναι ο τρόπος επίδρασης της διεπιφάνειας στη διάδοση της ρωγμής, καθώς σύμφωνα με πειραματικά δεδομένα παίζει σημαντικό ρόλο στην εξέλιξη του φαινομένου (Karakasidis & Charitidis, 2011). Επίσης θα μπορούσε να οριστεί με πιο ακριβή τρόπο η ενέργεια και το πλάτος των στοιχείων της διεπιφάνειας, αφού προς το παρόν το μοντέλο υπολογίζει την ενέργεια αυτή με μία απλή προσέγγιση.
5. Τέλος το μοντέλο θα μπορούσε να γίνει πιο ακριβές αν επεκτεινόταν σε ένα τρισδιάστατο μοντέλο, όπου θα μπορούσαν να οριστούν καλύτερα οι γεωμετρικές και το σχήμα των κρυσταλλιτών, που με τη σειρά τους επηρεάζουν το φαινόμενο (Karakasidis & Charitidis, 2011; Falzone κ.ά., 2016).

BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. Abraham, F. F., Gao, H. (2000). How fast can cracks propagate?. *Phys. Rev. Lett.*, **84** 3113
2. Argyrakis, Panos., Kehr, Klaus W. (1992). Mean number of distinct sites visited by correlated walks. II. Disordered lattices. *The Journal of Chemical Physics*, **97** 2718
3. Bitzek, Er., Kermode, J. R., Gumbsch, P. (2015). Atomistic aspects of fracture. *Int. J. Fract.*, **191** 13-30
4. Morrell, R. (1996). Microstructural targets for ceramics. In R. W. Cahn, P. Haasen & E. J. Kramer (Eds.), *Materials Science and Technology Series*, **17a**, VCH Weinheim, pp 11
5. Charitidis, C. A., Karakasidis, T. E., Kavouras, P., Karakostas, Th. (2007). The size effect of crystalline inclusions on the fracture modes in glass-ceramic materials. *J. Phys. : Condens. Matter*. **19** 266209
6. Falzone, G., Falla, G. P., Wei, Z., Zhao, M., Kumar, A., Bauchy, M., Neithalath, N., Pilon, L., Sant, G. (2016). The influences of soft and stiff inclusions on the mechanical properties of cementitious composites. *Cement and Concrete Composites*, **71** (2016) 153-165
7. Karakasidis, T. E., Charitidis, C. A. (2011). Influence of nano-inclusions' grain boundaries on crack propagation modes in materials. *Materials Science and Engineering B*, **176** 490-493
8. Ovid'ko, I. A. (2015). Micromechanics of fracturing in nanoceramics. *Phi. Trans. R. Soc. A*, **373** 2014.0129
9. Yaghmaee, M. S., Baghbaderani, H. A. (2017). Thermodynamics modeling of cohesive energy of metallic nano-structured materials. *Materials and Design*, **114** 521-530
10. Yaghmaee, M. S., Shokri, B. (2007). Effect of size on bulk and surface cohesion energy of metallic nano-particles. *Smart Mater. Struct.*, **16** 349-354
11. Zhang, S., Sun, D., Fu, Y., Du, H. (2005). Toughening of hard nanostructural thin films: a critical view. *Surf. Coat. Technol.*, **198** 2-8