



**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ**

**ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ**

**ΤΜΗΜΑ ΠΟΛΙΤΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ**

**ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ**

**«Αριθμητικό μοντέλο διάδοσης ρωγμών σε υλικά με  
επιμήκεις κρυσταλλίτες»**

**ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ ΑΝΑΓΝΩΣΤΟΠΟΥΛΟΣ**

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

**Βόλος, Σεπτέμβριος 2019**

© 2019 Κωνσταντίνος Αναγνωστόπουλος

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).

## Ευχαριστίες

Αρχικά, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα της διπλωματικής μου εργασίας, Αναπληρωτή Καθηγητή κ. Θεόδωρο Καρακασίδη για την υποστήριξη, την καθοδήγηση και την πολύτιμη βοήθειά του, τόσο κατά τη διάρκεια της διπλωματικής, αλλά και γενικότερα. Επιπροσθέτως, θα ήθελα να εκφράσω την ευγνωμοσύνη μου για τα υπόλοιπα μέλη που απαρτίζουν την εξεταστική επιτροπή της διπλωματικής μου εργασίας, Επίκουρο Καθηγητή κ. Χρήστο Παπακωνσταντίνου και Επίκουρο Καθηγητή κ. Λάμπρο Κούτα, για τις ατίμητες υποδείξεις και συμβουλές τους. Θερμές ευχαριστίες θα ήθελα να δώσω στον φίλο και συνάδελφο Νικόλαο Νασίκα για την σημαντική βοήθεια και υποστήριξή του, αλλά και για τις πολύωρες παραγωγικές συζητήσεις επί του περιεχομένου της διπλωματικής εργασίας.

Τέλος, δεν υπάρχουν λόγια που να εκφράζουν σε ικανοποιητικό βαθμό την ευγνωμοσύνη και την αγάπη μου για τους γονείς μου, Γεώργιο Αναγνωστόπουλο και Αικατερίνη Κουτσώνα και για τον αδερφό μου Ιωάννη Αναγνωστόπουλο, για την ανεκτίμητη υποστήριξη, ηθική συμπαράσταση και την βαθιά κατανόησή τους, τόσο κατά την διάρκεια εκπόνησης της διπλωματικής μου εργασίας, όσο και στη ζωή μου εν γένει. Τους αφιερώνω την εργασία μου αυτή.

Κωνσταντίνος Αναγνωστόπουλος

# Αριθμητικό μοντέλο διάδοσης ρωγμών σε υλικά με επιμήκεις κρυσταλλίτες

Κωνσταντίνος Αναγνωστόπουλος

Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών, 2019

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

## Περίληψη

Σκοπός της παρούσας εργασίας αποτελεί η δημιουργία ενός αριθμητικού μοντέλου, πολλαπλών κλιμάκων, για την προσομοίωση του φαινομένου της διάδοσης ρωγμής σε υλικά για μικρή κλίμακα (μικρο/νανο-κλίμακα). Βάση για το μοντέλο αποτελούν η θεωρία ενός αναλυτικού μοντέλου για τον τρόπο διάδοσης της ρωγμής στις δύο διαστάσεις με την ύπαρξη προσμίξεων και η θεωρία του τυχαίου περιπατητή. Το μοντέλο αποτελεί μία πρώτη προσέγγιση, ενώ χρησιμοποιήθηκαν επιμήκεις κρυσταλλίτες, οι οποίοι δημιουργούνται από τις προσμίξεις στην μήτρα. Η κατασκευή του μοντέλου έγινε με την χρήση της προγραμματιστικής γλώσσας Python. Αρχικά παρουσιάζονται τα πλεονεκτήματα που οδήγησαν στην επιλογή της συγκεκριμένης προγραμματιστικής γλώσσας. Στην συνέχεια αναπτύσσεται η μεθοδολογία που ακολουθήθηκε στο μοντέλο και παρατίθεται η στατιστική ανάλυση που πραγματοποιήθηκε για τον έλεγχο της ορθότητας του μοντέλου. Στα αποτελέσματα παρουσιάζονται οι τρόποι επίδρασης των διαφόρων παραμέτρων του μοντέλου, στο μήκος και την ταχύτητα διάδοσης της ρωγμής. Τελικά, παρατίθενται τα συμπεράσματα της εργασίας και οι προτάσεις για μελλοντική έρευνα.

# **Numerical model of crack propagation in materials embedded with longitudinal inclusions**

**Konstantinos Anagnostopoulos**

University of Thessaly, Department of Civil Engineering, 2019

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

## **Abstract**

The goal of the present thesis is to build a multi-scale numerical model for the simulation of crack propagation in nanocomposite materials. The current model is based on the theory of a 2D analytical model for the prediction of the crack propagation in the case of inclusions being included in the matrix and on the theory of random walker. The model consists a first approximation and longitudinal crystallites were used, which are created from the inclusions in the matrix. For the building of the model, the programming language Python was used. Initially, a discussion for the advantages of using Python is made. Then the methodology that was followed, as well as the theory what was used, are described, followed by the results of a statistical analysis for the statistical accuracy of the model. In the results section, the effect of the various parameters on the length and velocity of the crack are presented. Finally, the conclusions are discussed, accompanied by the suggestions for further research in the future.

## Περιεχόμενα

1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ .....	1
2	ΛΟΓΙΣΜΙΚΟ .....	3
3	ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ.....	3
3.1	ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑΣ ΨΗΦΙΑΚΟΥ ΔΟΚΙΜΙΟΥ .....	5
3.2	ΕΙΔΗ ΚΡΥΣΤΑΛΛΩΝ .....	10
3.3	ΑΛΓΟΡΙΘΜΙΚΗ ΡΟΗ ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑΣ ΤΟΥ ΨΗΦΙΑΚΟΥ ΔΟΚΙΜΙΟΥ .....	11
3.3.1	ΑΝΩ ΟΡΙΟ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ.....	13
3.4	ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΡΩΓΜΗΣ.....	15
3.4.1	ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΡΩΓΜΗΣ.....	15
3.4.2	ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΥΠΟΒΑΘΡΟ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΡΩΓΜΗΣ .....	15
3.4.3	ΠΕΡΑΙΤΕΡΩ ΣΧΟΛΙΑΣΜΟΣ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΥ $Pf$ ΚΑΙ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟΥ ΠΑΓΙΔΕΥΣΗΣ .....	20
3.4.4	ΑΛΓΟΡΙΘΜΙΚΗ ΡΟΗ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΡΩΓΜΗΣ .....	24
3.5	ΑΝΑΓΝΩΡΙΣΗ ΤΡΟΠΟΥ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΡΩΓΜΗΣ ΣΤΟΝ ΝΑΝΟΚΡΥΣΤΑΛΛΟ ...	28
4	ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΟΣ ΕΛΕΓΧΟΣ.....	33
4.1	ΥΠΟΛΟΓΙΖΟΜΕΝΑ ΜΕΓΕΘΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ .....	33
4.2	ΕΛΕΓΧΟΣ ΣΥΓΚΛΙΣΗΣ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ.....	34
4.3	ΕΛΕΓΧΟΣ ΜΕΘΟΔΩΝ ΔΕΙΓΜΑΤΟΛΗΨΙΑΣ.....	41
4.4	ΕΛΕΓΧΟΣ ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΦΑΙΝΟΜΕΝΩΝ ΜΕΓΕΘΟΥΣ ΜΗΤΡΑΣ .....	44
4.5	ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΜΗΚΩΝ ΚΑΙ ΤΑΧΥΤΗΤΩΝ ΡΩΓΜΗΣ .....	50
5	ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ.....	65
5.1	ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ .....	66
5.2	ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ $Pf$ .....	70
5.3	ΣΥΝΔΥΑΣΤΙΚΑ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΑ ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ- ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ $Pf$ .....	76
5.4	ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ.....	79

5.5	ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΕΝΕΡΓΕΙΩΝ ΣΥΝΔΕΣΗΣ .....	83
5.6	ΣΥΝΔΥΑΣΤΙΚΑ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΑ ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΩΝ ΣΥΝΔΕΣΗΣ .....	87
5.6.1	ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΩΝ ΣΥΝΔΕΣΗΣ ΚΑΙ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ .....	87
5.6.2	ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΩΝ ΣΥΝΔΕΣΗΣ ΚΑΙ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ $Pf$ .....	92
5.6.3	ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΩΝ ΣΥΝΔΕΣΗΣ ΚΑΙ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ .....	96
5.7	ΕΝΔΟΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗ-ΠΕΡΙΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗ ΔΙΑΔΟΣΗ (INTERGRANULAR- TRANSGRANULAR).....	101
5.7.1	ΤΡΟΠΟΣ ΔΙΑΔΟΣΗΣ - ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ $Pf$ .....	102
5.7.2	ΤΡΟΠΟΣ ΔΙΑΔΟΣΗΣ - ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑ.....	104
5.7.3	ΤΡΟΠΟΣ ΔΙΑΔΟΣΗΣ - ΠΑΧΟΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΤΗ .....	105
5.7.4	ΤΡΟΠΟΣ ΔΙΑΔΟΣΗΣ - ΕΝΕΡΓΕΙΑ ΣΥΝΔΕΣΗΣ .....	109
6	ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ - ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ .....	110
6.1	ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ .....	111
6.2	ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ .....	116
7	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ .....	117

## **ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΕΙΚΟΝΩΝ**

Εικόνα 3.1 Ψηφιακό δοκίμιο πριν την διάδοση ρωγμής.....	4
Εικόνα 3.2 Ψηφιακό δοκίμιο μετά την διάδοση ρωγμής .....	4
Εικόνα 3.3 Απεικόνιση περιοχής του ψηφιακού δοκιμίου.....	5
Εικόνα 3.4 Δέσμευση του χώρου λόγω του σχήματος κρυστάλλων σε ψηφιακό δοκίμιο.....	7
Εικόνα 3.5 Κοντινή απεικόνιση της δέσμευσης του χώρου στο ψηφιακό δοκίμιο.....	7
Εικόνα 3.6 Ψηφιακό δοκίμιο για τιμή παραμέτρου $e = 1$ .....	9
Εικόνα 3.7 Ψηφιακό δοκίμιο για τιμή παραμέτρου $e = 5$ .....	9
Εικόνα 3.8 Παράδειγμα ψηφιακού δοκιμίου στην τελική μορφή.....	9
Εικόνα 3.9 Κοντινή απεικόνιση ψηφιακού δοκιμίου εικόνας 3.8.....	9
Εικόνα 3.10 Ψηφιακό δοκίμιο με τρία είδη κρυστάλλων.....	10
Εικόνα 3.11 Κοντινή απεικόνιση ψηφιακού δοκιμίου με τρία είδη κρυστάλλων.....	10
Εικόνα 4.1 Παράδειγμα αρνητικής και θετικής ασυμμετρίας (wikipedia,Skewness,2008).....	51
Εικόνα 5.1 Παράδειγμα μήτρας πλευράς $N = 500$ , για συγκέντρωση $c = 20\%$ .....	66

## **ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΣΧΗΜΑΤΩΝ**

Σχήμα 3.1 Σχηματική αναπαράσταση περιοχής κρυστάλλου .....	4
Σχήμα 3.2 Διαφοροποίηση των μηκών των τριών ειδών κρυστάλλων.....	10
Σχήμα 3.3 Αλγοριθμική ροή προγράμματος δημιουργίας ψηφιακού δοκιμίου .....	14
Σχήμα 3.4 Γενική περίπτωση πιθανών κινήσεων.....	19
Σχήμα 3.5 Παράδειγμα υπερπήδησης κελιών και ορισμού κύριας κατεύθυνσης.....	22
Σχήμα 3.6 Παράδειγμα μοναδικής δυνατής κίνησης.....	23
Σχήμα 3.7 Διαχωρισμός του ανοιχτού πεδίου $[0,0,1,0)$ από τις τιμές πιθανοτήτων για τον καθορισμό της κίνησης .....	24
Σχήμα 3.8 Αλγοριθμική ροή προγράμματος προσομοίωσης του φαινομένου διάδοσης ρωγμής .....	27
Σχήμα 3.9 Πιθανές περιπτώσεις εισόδου/εξόδου για κάθε κρύσταλλο .....	31
Σχήμα 3.10 Αλγοριθμική ροή προγράμματος αναγνώρισης διαδρομής ρωγμής στους κρυστάλλους.....	32

## **ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΥΠΟΜΝΗΜΑΤΩΝ**

Υπόμνημα 3.1 Στοιχεία σχήματος 3.5.....	22
Υπόμνημα 3.2 Στοιχεία σχήματος 3.6.....	23
Υπόμνημα 3.3 Στοιχεία σχήματος 3.9.....	31



## ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

Πίνακας 3.1 Αντιστοιχία κωδικών αριθμών και στοιχείων του μοντέλου.....	4
Πίνακας 3.2 Παράμετροι μοντελοποίησης του ψηφιακού δοκιμίου.....	5
Πίνακας 3.3 Χαρακτηριστικά μήκος, πάχους κρυστάλλου και ελάχιστου κενού μεταξύ των κρυστάλλων .....	13
Πίνακας 3.4 Τελικές συγκεντρώσεις ψηφιακών δοκιμών για μέγεθος πίνακα και πάχος διεπιφάνειας <i>d</i> ίσο με 2.....	13
Πίνακας 3.5 Τελικές συγκεντρώσεις ψηφιακών δοκιμών για μέγεθος πίνακα και πάχος διεπιφάνειας <i>d</i> ίσο με 1.....	13
Πίνακας 3.6 Επιπρόσθετοι παράμετροι μοντελοποίησης του φαινομένου διάδοσης ρωγμής.....	16
Πίνακας 3.7 Διαμόρφωση των τιμών πιθανοτήτων ανάλογα την περίπτωση ενεργειακών διαφορών .....	20
Πίνακας 4.1 Βασικά μεγέθη που αποθηκεύονται για κάθε περίπτωση προσομοίωσης.....	33
Πίνακας 4.2 Τιμές παραμέτρων για τον έλεγχο σύγκλισης του μοντέλου για δύο διαφορετικά δοκίμια .....	35
Πίνακας 4.3 Αποτελέσματα ελέγχου σύγκλισης για δοκίμιο μεγέθους $N^2 = 500^2$ και $P_f = 0.8$ .....	37
Πίνακας 4.4 Αποτελέσματα ελέγχου σύγκλισης για δοκίμιο μεγέθους $N^2 = 500^2$ και $P_f = 0.95$ .....	37
Πίνακας 4.5 Αποτελέσματα ελέγχου σύγκλισης για δοκίμιο μεγέθους $N^2 = 700^2$ και $P_f = 0.8$ .....	38
Πίνακας 4.6 Αποτελέσματα ελέγχου σύγκλισης για δοκίμιο μεγέθους $N^2 = 700^2$ και $P_f = 0.95$ .....	38
Πίνακας 4.7 Μέσο-ενεργό μήκος, μέση-ενεργή ταχύτητα και τιμή <i>r</i> για τους δύο τρόπους δειγματοληψίας....	41
Πίνακας 4.8 Χρόνος εκτέλεσης και σύγκρισή τους μεταξύ των δύο τρόπων δειγματοληψίας.....	41
Πίνακας 4.9 Αριθμός φαινομένου παγίδευσης για τους δύο τρόπους δειγματοληψίας .....	41
Πίνακας 4.10 Τιμές παραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν για τους ελέγχους επίδρασης του μεγέθους της μήτρας.....	44
Πίνακας 4.11 Τιμές των χαρακτηριστικών μεγεθών για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, $c = 20\%$ , $P_f = 0.5, 0.9$ , $E_{init} = N/2$ .....	45
Πίνακας 4.12 Σύγκριση των τιμών του μέσου μήκους για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, $c = 20\%$ , $E_{init} =$ $N/2$ , $P_f = 0.5, 0.9$ .....	45
Πίνακας 4.13 Σύγκριση των τιμών του ενεργού μήκους για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, $c = 20\%$ , $E_{init} =$ $N/2$ , $P_f = 0.5, 0.9$ .....	45
Πίνακας 4.14 Σύγκριση των τιμών της μέσης ταχύτητας για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, $c = 20\%$ , $E_{init} =$ $N/2$ , $P_f = 0.5, 0.9$ .....	45
Πίνακας 4.15 Σύγκριση των τιμών της ενεργής ταχύτητας για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, $c = 20\%$ , $E_{init} = N/2$ , $P_f = 0.5, 0.9$ .....	45
Πίνακας 4.16 Σύγκριση των τιμών αρχικής ενέργειας $E_{init}$ για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας.....	45
Πίνακας 4.17 Σύγκριση των τιμών των χαρακτηριστικών μεγεθών για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, $c =$ $5\%$ , $P_f = 0.5$ και σταθερή τιμή αρχικής ενέργειας $E_{init}$ .....	48
Πίνακας 4.18 Σύγκριση των τιμών των χαρακτηριστικών μεγεθών για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, $c =$ $5\%$ , $P_f = 0.9$ και σταθερή τιμή αρχικής ενέργειας $E_{init}$ .....	48
Πίνακας 4.19 Σύγκριση των τιμών των χαρακτηριστικών μεγεθών για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, $c =$ $20\%$ , $P_f = 0.5$ και σταθερή τιμή αρχικής ενέργειας $E_{init}$ .....	48
Πίνακας 4.20 Σύγκριση των τιμών των χαρακτηριστικών μεγεθών για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, $c =$ $20\%$ , $P_f = 0.9$ και σταθερή τιμή αρχικής ενέργειας $E_{init}$ .....	48
Πίνακας 4.21 P-values για z-test για τα χαρακτηριστικά μεγέθη.....	60

Πίνακας 4.22 Τιμές του συντελεστή $c(a)$ βάση της τιμής $a$ .....	61
Πίνακας 4.23 Τιμές $pvalue, Dcritical, Dstatistic$ για $a = 0.05$ για μέσο και ενεργό μήκος, μέση και ενεργή ταχύτητα.....	61
Πίνακας 5.1 Τιμές μέσου μήκους και τυπικής απόκλισης για το διάγραμμα 5.1 .....	67
Πίνακας 5.2 Τιμές συνολικού χρόνου για το διάγραμμα 5.3 .....	68
Πίνακας 5.3 Τιμές συνολικού χρόνου για το διάγραμμα 5.7 .....	73
Πίνακας 5.4 Περιπτώσεις διαφοράς ενεργειών σύνδεσης και των τιμών που προκύπτουν για τα στοιχεία .....	83

## **ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΩΝ**

Διάγραμμα 4.1 Τιμή κριτηρίου Cauchy του μέσου μήκους για τον αριθμό των επαναλήψεων .....	40
Διάγραμμα 4.2 Μέσος όρος μέσου μήκους για τον αριθμό των επαναλήψεων.....	40
Διάγραμμα 4.3 Τυπική απόκλιση μέσου μήκους για τον αριθμό των επαναλήψεων .....	40
Διάγραμμα 4.4 Σύγκλιση μέσης τιμής μέσου μήκους για την πρώτη μέθοδο δειγματοληψίας .....	43
Διάγραμμα 4.5 Σύγκλιση μέσου μήκους για την δεύτερη μέθοδο δειγματοληψίας .....	43
Διάγραμμα 4.6 Σύγκλιση τυπικής απόκλισης μέσου μήκους για την πρώτη μέθοδο δειγματοληψίας.....	43
Διάγραμμα 4.7 Σύγκλιση τυπικής απόκλισης μέσου μήκους για την δεύτερη μέθοδο δειγματοληψίας.....	43
Διάγραμμα 4.8 Τιμή κριτηρίου Cauchy του μέσου μήκους για την πρώτη μέθοδο δειγματοληψίας.....	43
Διάγραμμα 4.9 Τιμή κριτηρίου Cauchy του μέσου μήκους για την δεύτερη μέθοδο δειγματοληψίας.....	43
Διάγραμμα 4.10 Μέσο μήκος για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, $c = 20\%$ . $Pf = 0.5, 0.9, E_{init} = N/2$ .....	46
Διάγραμμα 4.11 Ενεργό μήκος για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, $c = 20\%$ . $Pf = 0.5, 0.9, E_{init} = N/2$ .....	46
Διάγραμμα 4.12 Μέση ταχύτητα για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, $c = 20\%$ . $Pf = 0.5, 0.9, E_{init} = N/2$ .....	46
Διάγραμμα 4.13 Ενεργή ταχύτητα για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, $c = 20\%$ . $Pf = 0.5, 0.9, E_{init} = N/2$ .....	46
Διάγραμμα 4.14 Ιστόγραμμα και καμπύλες συχνοτήτων μέσου μήκους ρωγμής.....	53
Διάγραμμα 4.15 Ιστόγραμμα και καμπύλες συχνοτήτων ενεργού μήκους ρωγμής.....	53
Διάγραμμα 4.16 Ιστόγραμμα και καμπύλες συχνοτήτων μέσης ταχύτητας ρωγμής .....	54
Διάγραμμα 4.17 Ιστόγραμμα και καμπύλες συχνοτήτων ενεργής ταχύτητας ρωγμής.....	54
Διάγραμμα 4.18 Κανονικό διάγραμμα για το μέσο μήκος.....	57
Διάγραμμα 4.19 Κανονικό διάγραμμα για το ενεργό μήκος.....	57
Διάγραμμα 4.20 Κανονικό διάγραμμα για τη μέση ταχύτητα .....	58
Διάγραμμα 4.21 Κανονικό διάγραμμα για την ενεργή ταχύτητα .....	58
Διάγραμμα 4.22 Διάγραμμα σύγκρισης των ΑΣΚ για το μέσο μήκος των δεδομένων και των αντίστοιχων της κανονικής κατανομής.....	62
Διάγραμμα 4.23 Διάγραμμα σύγκρισης των ΑΣΚ για το ενεργό μήκος των δεδομένων και των αντίστοιχων της κανονικής κατανομής.....	62
Διάγραμμα 4.24 Διάγραμμα σύγκρισης των ΑΣΚ για ην μέση ταχύτητα των δεδομένων και των αντίστοιχων της κανονικής κατανομής.....	63
Διάγραμμα 4.25 Διάγραμμα σύγκρισης των ΑΣΚ για ην ενεργή ταχύτητα των δεδομένων και των αντίστοιχων της κανονικής κατανομής.....	63
Διάγραμμα 5.1 Μέσο μήκος προς συγκέντρωση για $Pf=0.9, KT=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1, E=1.0, 1.05, 1.1$ . 66	
Διάγραμμα 5.2 Ενεργό μήκος προς συγκέντρωση για $Pf=0.9, KT=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1, E=1.0, 1.05, 1.1$ .....	67

Διάγραμμα 5.3 Μέση ταχύτητα προς συγκέντρωση για $Pf=0.9,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	68
Διάγραμμα 5.4 Ενεργή ταχύτητα προς συγκέντρωση για $Pf=0.9,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	69
Διάγραμμα 5.5 Μέσο μήκος προς συντελεστή $Pf$ , για $c=20\%,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	70
Διάγραμμα 5.6 Μέσο μήκος προς συντελεστή $Pf$ , για $c=20\%,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	72
Διάγραμμα 5.7 Μέση ταχύτητα προς συντελεστή $Pf$ , για $c=20\%,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	73
Διάγραμμα 5.8 Ενεργή ταχύτητα προς συντελεστή $Pf$ , για $c=20\%,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	74
Διάγραμμα 5.9 Μέσο μήκος προς επιπρόσθετων τιμών συντελεστή $Pf$ , για $c=20\%,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	75
Διάγραμμα 5.10 Μέση ταχύτητα προς επιπρόσθετων τιμών συντελεστή $Pf$ , για $c=20\%,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	75
Διάγραμμα 5.11 Μέσο μήκος προς $Pf$ και συγκέντρωση για $KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	76
Διάγραμμα 5.12 Μέση ταχύτητα προς $Pf$ και συγκέντρωση για $KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	77
Διάγραμμα 5.13 Ενεργό μήκος προς $Pf$ και συγκέντρωση για $KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	77
Διάγραμμα 5.14 Ενεργή ταχύτητα προς $Pf$ και συγκέντρωση για $KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	77
Διάγραμμα 5.15 Συνολικός χρόνος προς συγκέντρωση και $Pf$ για $KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	78
Διάγραμμα 5.16 Μέσο μήκος προς θερμοκρασία για $Pf=0.9, c=20\%, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	79
Διάγραμμα 5.17 Ενεργό μήκος προς θερμοκρασία για $Pf=0.9, c=20\%, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	80
Διάγραμμα 5.18 Μέση ταχύτητα προς θερμοκρασία για $Pf=0.9, c=20\%, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	81
Διάγραμμα 5.19 Ενεργή ταχύτητα προς θερμοκρασία για $Pf=0.9, c=20\%, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1,E=1.0,1.05,1.1$	82
Διάγραμμα 5.20 Μέσο μήκος προς διαφορά ενέργειας $\Delta E$ , για $c=20\%,Pf=0.9,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2),dl=5,d=1$	84
Διάγραμμα 5.21 Ενεργό μήκος προς διαφορά ενέργειας $\Delta E$ , για $c=20\%,Pf=0.9,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$	84
Διάγραμμα 5.22 Μέση ταχύτητα προς διαφορά ενέργειας $\Delta E$ , για $c=20\%,Pf=0.9,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$	85
Διάγραμμα 5.23 Ενεργή ταχύτητα προς διαφορά ενέργειας $\Delta E$ , για $c=20\%,Pf=0.9,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$	86
Διάγραμμα 5.24 Μέσο μήκος προς διαφορά ενέργειας $\Delta E$ και συγκέντρωση για $Pf=0.9,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$	87
Διάγραμμα 5.25 Περιοχή του διαγράμματος 4.24 για $\Delta E = 0.025 \rightarrow 0.1$	88
Διάγραμμα 5.26 Περιοχή του διαγράμματος 4.24 για $\Delta E = 0.025 \rightarrow 0.1$ με την προσθήκη των error bars	89
Διάγραμμα 5.27 Ενεργό μήκος προς διαφορά ενέργειας $\Delta E$ και συγκέντρωση για $Pf=0.9,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$	90

Διάγραμμα 5.28 Μέση ταχύτητα προς διαφορά ενέργειας ΔΕ και συγκέντρωση για $Pf=0.9,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$ .....	91
Διάγραμμα 5.29 Μέση ταχύτητα προς διαφορά ενέργειας ΔΕ και συγκέντρωση για $Pf=0.9,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$ .....	92
Διάγραμμα 5.30 Μέσο μήκος προς ενεργειακή διαφορά ΔΕ και $Pf$ , για $c=20\%,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$ .....	92
Διάγραμμα 5.31 Ενεργό μήκος προς ενεργειακή διαφορά ΔΕ και $Pf$ , για $c=20\%,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$ .....	93
Διάγραμμα 5.32 Ενεργό μήκος προς ενεργειακή διαφορά ΔΕ και $Pf$ , για $c=20\%,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$ με την προσθήκη των error bars.....	94
Διάγραμμα 5.33 Μέση ταχύτητα προς ενεργειακή διαφορά ΔΕ και $Pf$ , για $c=20\%,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$ .....	95
Διάγραμμα 5.34 Ενεργή ταχύτητα προς ενεργειακή διαφορά ΔΕ και $Pf$ , για $c=20\%,KT=0.1,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$ .....	95
Διάγραμμα 5.35 Μέσο μήκος προς διαφορά ενέργειας ΔΕ και θερμοκρασία για $Pf=0.9, c=10\%,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$ .....	97
Διάγραμμα 5.36 Μέσο μήκος προς διαφορά ενέργειας ΔΕ και θερμοκρασία για $Pf=0.9, c=10\%, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$ με error bars.....	98
Διάγραμμα 5.37 Ενεργό μήκος προς διαφορά ενέργειας ΔΕ και θερμοκρασία για $Pf=0.9,c=10\%,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$ .....	98
Διάγραμμα 5.38 Μέση ταχύτητα προς διαφορά ενέργειας ΔΕ και θερμοκρασία για $Pf=0.9,c=10\%,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$ .....	99
Διάγραμμα 5.39 Ενεργή ταχύτητα προς διαφορά ενέργειας ΔΕ και θερμοκρασία για $Pf=0.9,c=10\%,(l \times w)=(30 \times 2), dl=5,d=1$ .....	100
Διάγραμμα 5.40 Τιμές μετρητών προς συντελεστή $Pf$ για $c=20\%, KT=0.1,(l \times w)= (30 \times 2), dl=5,d=1, E=1.0,1.05,1.1$ .....	102
Διάγραμμα 5.41 Φορές διαπέρασης ρωγμής αποκλειστικά από γκριζα ζώνη προς συντελεστή $Pf$ για $c=20\%, KT=0.1,(l \times w)= (30 \times 2), dl=5,d=1, E=1.0,1.05,1.1$ .....	103
Διάγραμμα 5.42 Τιμές μετρητών προς θερμοκρασία $KT$ για $Pf = 0.9, c=20\%, (l \times w)= (30 \times 2), dl=5, d=1, E=1.0,1.05,1.1$ .....	104
Διάγραμμα 5.43 Φορές διαπέρασης ρωγμής αποκλειστικά από γκριζα ζώνη προς θερμοκρασία $KT$ για $Pf = 0.9, c=20\%, (l \times w)= (30 \times 2), dl=5,d=1, E=1.0,1.05,1.1$ .....	104
Διάγραμμα 5.44 Τιμές μετρητών προς πάχος κρυσταλλίτη $w$ , για $Pf = 0.9, c=20\%, KT=0.1, l=30, dl=5, d=1, E=1.0,1.05,1.1$ .....	105
Διάγραμμα 5.45 Φορές διαπέρασης ρωγμής αποκλειστικά από γκριζα ζώνη προς πάχος κρυσταλλίτη $w$ , για $Pf = 0.9, c=20\%, KT=0.1, l=30, dl=5, d=1, E=1.0,1.05,1.1$ .....	106
Διάγραμμα 5.46 Μετρητές για την είσοδο/έξοδο από την πλευρά του μήκους για τον κρυσταλλίτη προς πάχος κρυσταλλίτη $w$ , για $Pf = 0.9, c=20\%, KT=0.1, l=30, dl=5, d=1, E=1.0,1.05,1.1$ .....	107
Διάγραμμα 5.47 Μετρητές για την είσοδο/έξοδο από την πλευρά του πάχους για τον κρυσταλλίτη προς πάχος κρυσταλλίτη $w$ , για $Pf = 0.9, c=20\%, KT=0.1, l=30, dl=5, d=1, E=1.0,1.05,1.1$ .....	108
Διάγραμμα 5.48 Τιμές μετρητών προς διαφορά ενέργειας ΔΕ, για $Pf = 0.9, c=20\%, KT=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1$ .....	109
Διάγραμμα 5.49 Φορές διαπέρασης ρωγμής αποκλειστικά από γκριζα ζώνη προς για $Pf = 0.9, c=20\%, KT=0.1, (l \times w)= (30 \times 2), dl=5,d=1$ .....	109

## 1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η αντοχή έναντι της διάδοσης της ρωγμής αποτελεί μία από τις σημαντικότερες ιδιότητες των δομικών υλικών. Σε πολλά υλικά, μικρές ρωγμές δημιουργούνται σαν αποτέλεσμα είτε φόρτισης, είτε τρόπου παραγωγής, θερμικής επεξεργασίας κ.ά. Οι ρωγμές αυτές σε συνθήκες επιπρόσθετης φόρτισης δύνανται να αυξηθούν σημαντικά, μέχρι και σε σημείο που οδηγεί σε αστοχία του υλικού (Möller, 2017).

Η διάδοση της ρωγμής, ειδικά για ψαθυρή θραύση, αποτελεί περίπτωση, όπου οι μακροσκοπικές ιδιότητες των υλικών καθορίζονται σχεδόν εξολοκλήρου από τα γεγονότα που λαμβάνουν χώρα στην ατομική κλίμακα (Bitzek, Kermode & Gumbsch, 2015). Η ψαθυρή θραύση αποτελεί κρίσιμο τρόπο αστοχίας. Οι ρωγμές εξαπλώνονται εξαιρετικά γρήγορα, με πολύ μικρή συνοδευτική πλαστική παραμόρφωσης, εμφανίζονται ξαφνικά και χωρίς προειδοποίηση, κυρίως για τα κεραμικά και πολυμερή υλικά. Για τον λόγο αυτό, παρατηρείται αύξηση του ενδιαφέροντος για την επίδραση των προσμίξεων στην αντοχή και την σκληρότητα των υλικών τα τελευταία χρόνια.

Οι προσμίξεις προσδίδουν διαφορετικά χαρακτηριστικά για την μορφολογία και την μικροδομή των υλικών, φαινόμενο που φαίνεται να διαμορφώνει τον τρόπο θραύσης (Zhang, Sun, Fu & Du, 2005). Κοινό σημείο αναφοράς για τις μηχανικές ιδιότητες και του τρόπου θραύσης των υλικών, είναι το μήκος διάδοσης της ρωγμής. Βάση των χαρακτηριστικών των προσμίξεων υπάρχει διαφοροποίηση στο μήκος διάδοσης, γεγονός που οφείλεται στον τρόπο διέλευσης της ρωγμής από τους κρυσταλλίτες που δημιουργούνται λόγω των προσμίξεων. Οι τρόποι αυτοί είναι δύο: 1) ενδοκρυσταλλική (transgranular) 2) περικρυσταλλική (intergranular). Στα περισσότερα ψαθυρά κρυσταλλικά υλικά, η διάδοση ρωγμών αντιστοιχεί στον διαδοχικό σπάσιμο ατομικών δεσμών κατά μήκος κρυσταλλογραφικών επιπέδων. Το είδος αυτό θραύσης ονομάζεται ενδοκρυσταλλική και οι ρωγμές διαπερνάνε τους κρυσταλλίτες. Ο δεύτερος τρόπος διέλευσης της ρωγμής από τους κρυσταλλίτες, πραγματοποιείται κατά μήκος των ορίων των κρυσταλλιτών. Τα όρια των κρυσταλλιτών αποτελούν την διεπιφάνεια (gray boundary) μεταξύ της άμορφης μήτρας και των προσμίξεων. Εξετάζεται ως διαφορετική περιοχή και

διαφέρει σε σύγκριση με την άμορφη μήτρα και τις προσμίξεις ως προς την ενέργεια σύνδεσης (Karakasidis & Charitidis, 2011).

Η μηχανική θραύσης (fracture mechanics) αποτελεί ένα πολυδιάστατο επιστημονικό πεδίο, στο οποίο οι ρωγμές μελετώνται υπό τουλάχιστον τρεις βασικές οπτικές γωνίες: αναλυτικά, αριθμητικά και πειραματικά (Razvan, 2009). Τα υπολογιστικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται κατά κόρον είναι αυτά που χρησιμοποιούν την θεωρία των πεπερασμένων στοιχείων και τα μοντέλα προσομοίωσης μοριακής δυναμικής σε ατομικό επίπεδο (Bitzek κ.ά., 2015). Και τα δύο είδη μοντέλων παρουσιάζουν μειονεκτήματα. Τα μοντέλα πεπερασμένων στοιχείων, βασίζονται στην θεωρία του συνεχούς μέσου και επομένως δεν είναι κατάλληλα για την μοντελοποίηση φαινομένων σε ατομικό επίπεδο. Η δεύτερη κατηγορία μοντέλων, αν και προσφέρουν μεγάλη ακρίβεια, το υπολογιστικό κόστος για την υλοποίησή τους είναι εξαιρετικά μεγάλο (Bitzek κ.ά., 2015).

Δημιουργείται επομένως η ανάγκη για ένα αριθμητικό μοντέλο προσομοίωσης, το οποίο να καλύπτει τις ανάγκες ακρίβειας και ρεαλιστικής απεικόνισης του φαινομένου σε μικρή κλίμακα, αλλά ταυτόχρονα να είναι αποδοτικό σε σχέση με τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο. Έτσι, σε αρκετές περιπτώσεις υιοθετείται η ιεραρχική προσέγγιση πολλαπλών κλιμάκων (Karakasidis & Charitidis, 2011).

Το υπολογιστικό μοντέλο που κατασκευάστηκε για την παρούσα εργασία, βασίστηκε στο αναλυτικό μοντέλο διάδοσης ρωγμών με την παρουσία προσμίξεων (Argyris & Kehr, 1992). Φαίνεται πως υπάρχει συμφωνία μεταξύ των προτάσεων του μοντέλου και των πειραματικών δεδομένων (Charitidis κ.ά., 2007), ενώ στο μοντέλο ενσωματώθηκε η θεωρία του τυχαίου περιπατητή, λαμβάνοντας υπόψιν την διαφορετική συμπεριφορά των προσμίξεων, της άμορφης μήτρας και της διεπιφάνειας, βάση των ενεργειακών παραμέτρων.

Στόχος της εργασίας τέθηκε η χρήση παραμέτρων, οι τιμές των οποίων προκύπτουν από αναλυτικούς υπολογισμούς σε μικρή κλίμακα (νάνο-κλίμακα) και η εξαγωγή αποτελεσμάτων ακριβείας με αποδεκτό χρονικό και υπολογιστικό κόστος. Στην ενότητα 2 γίνεται λόγος για το λογισμικό υλοποίησης της εργασίας, στην ενότητα 3 γίνεται ανάλυση της μεθοδολογίας που ακολουθήθηκε, καθώς και περιγραφή των προγραμμάτων που κατασκευάστηκαν για τις ανάγκες του

μοντέλου. Η ενότητα 4 αποτελεί την στατιστική διερεύνηση των αποτελεσμάτων του μοντέλου, ενώ στις ενότητες 5 και 6, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα και τα συμπεράσματα αντίστοιχα.

## 2 ΛΟΓΙΣΜΙΚΟ

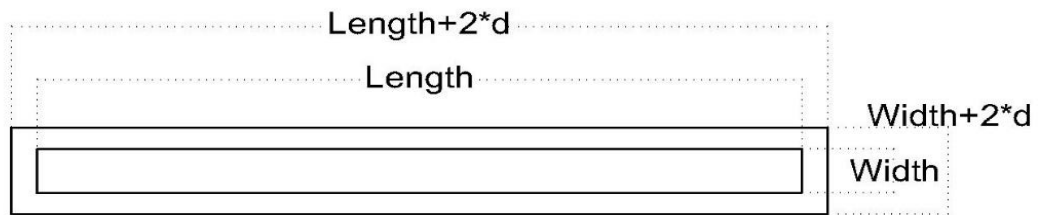
Για την εκπόνηση της εργασίας επιλέχθηκε η προγραμματιστική γλώσσα Python. Είναι απλή σε σύνταξη, υψηλού επιπέδου, αντικειμενοστραφής και δίνεται η δυνατότητα χρήσης βιβλιοθηκών, οι οποίες διευκολύνουν την ανάλυση μεγάλου αριθμού δεδομένων. Στην παρούσα εργασία γίνεται χρήση των NumPy, SciPy, Matplotlib. Ένα ακόμη πλεονέκτημα χρήσης της Python, είναι η δυνατότητα επαναχρησιμοποίησης των προγραμμάτων της παρούσας εργασίας καθώς έχουν οργανωθεί σε κατάλληλες δομές, ώστε να επιτρέπουν επιπλέον, την εύκολη τροποποίησή τους. Συνεπώς, σε μετέπειτα εργασία, μπορεί κανείς να εξετάσει εύκολα τα διαφορετικά μέρη που συμβάλουν στην συνολική προσομοίωση του φαινομένου. Επιπρόσθετα, για την κάθε απαραίτητη διεργασία, ειδικά των επαναλαμβανόμενων, κατασκευάστηκαν υποπρογράμματα, για την καλύτερη εποπτεία και την μείωση του όγκου του γραπτού κώδικα.

## 3 ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ

Για την προσομοίωση της διάδοσης της ρωγμής, ήταν απαραίτητη η μοντελοποίηση αρχικά του δοκιμίου και στη συνέχεια του φαινομένου της διάδοσης της ρωγμής. Λόγω της πολυπλοκότητας περιγραφής και μοντελοποίησης των παραπάνω, καθώς και του απαιτούμενου υπολογιστικού χρόνου, κατασκευάστηκε ένα απλοποιημένο δυσδιάστατο μοντέλο (Charitidis κ.ά., 2007). Το ψηφιακό δοκίμιο αναπαρίσταται από τετραγωνικούς πίνακες και σε κάθε δοκίμιο εμπεριέχονται στοιχεία τριών κατηγοριών, ενώ η ρωγμή αναπαρίσταται χρησιμοποιώντας ένα τέταρτο στοιχείο.

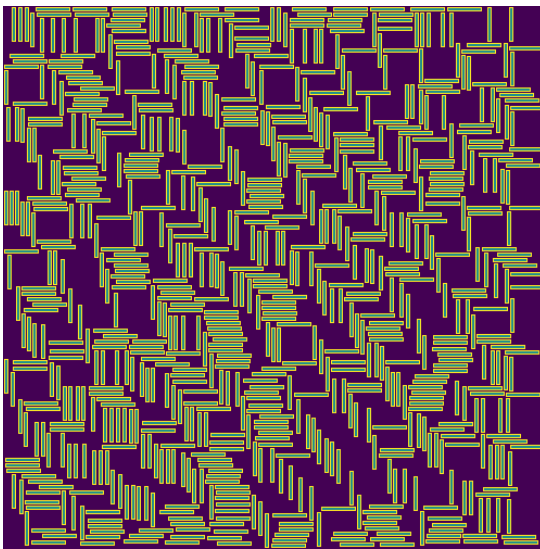
Μετά την προσθήκη των προσμίξεων κατά την δημιουργία των υαλικών-κεραμικών προϊόντων, οι κρύσταλλοι που σχηματίστηκαν είχαν μια βελονοειδής μορφή και μέγεθος μερικών νανομέτρων. Μεταξύ των βελονοειδών κρυστάλλων και της άμορφης μήτρας, σχηματίστηκαν ζώνες διεπιφάνειας. Οι κρύσταλλοι αυτοί, μαζί με τις ζώνες διεπιφάνειας, προσομοιώθηκαν ως ορθογώνια. Μια σχηματική

αναπαράσταση της περιοχής του κρυστάλλου, η οποία αποτελείται από την ζώνη διεπιφάνειας πάχους  $d$  και της προσμίξεως δίνεται στο σχήμα 3.1.

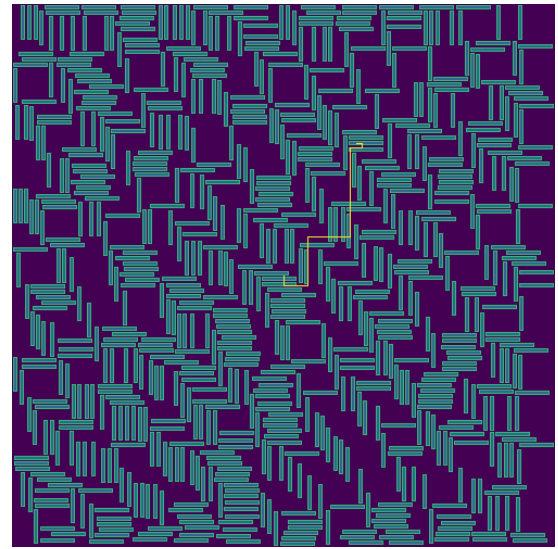


Σχήμα 3.1 Σχηματική αναπαράσταση περιοχής κρυστάλλου

Χρησιμοποιήθηκαν δύο είδη προσανατολισμού : οριζόντιοι και κάθετοι κρύσταλλοι. Το δοκίμιο δύναται να αποδομηθεί σε τρεις κωδικούς αριθμούς, κάθε ένας εκ των οποίων αναφέρεται σε διαφορετικές ιδιότητες, ανάλογα το στοιχείο στο οποίο ανήκει. Το δοκίμιο μετά την προσομοίωση της ρωγμής, απαρτίζεται από τέσσερις κωδικούς αριθμούς. Στην εικόνα 3.1 απεικονίζεται ένα ψηφιακό δοκίμιο πριν την ρωγμή, ενώ στην 3.2 μετά την προσομοίωση της ρωγμής. Οι κωδικοί αριθμοί και τα αντίστοιχα στοιχεία αναγράφονται στον πίνακα 3.1, τα οποία απεικονίζονται στο ψηφιακό δοκίμιο της εικόνας 3.3.



Εικόνα 3.1 Ψηφιακό δοκίμιο πριν την διάδοση ρωγμής

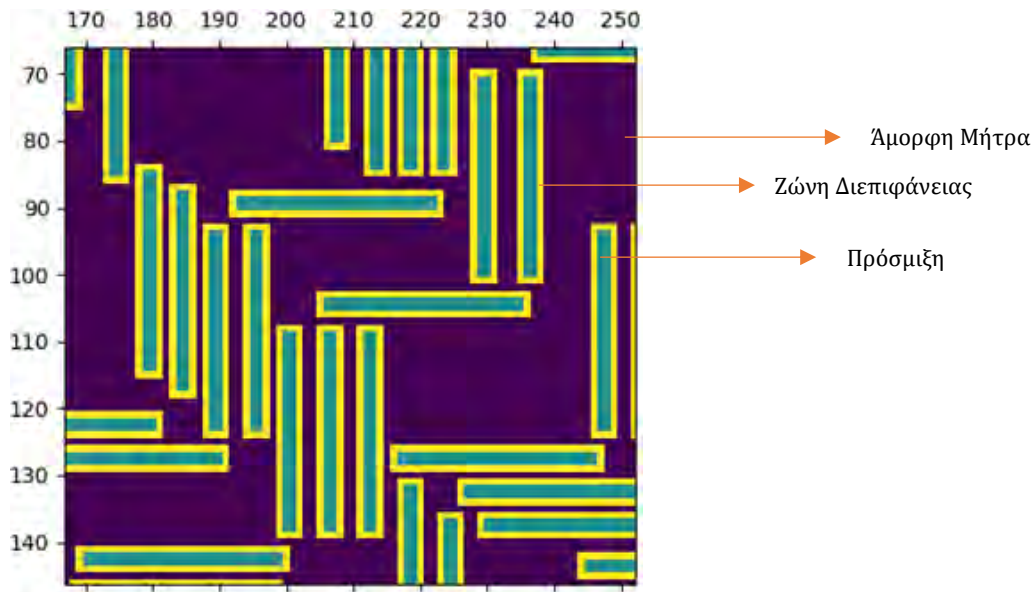


Εικόνα 3.2 Ψηφιακό δοκίμιο μετά την διάδοση ρωγμής

Κωδικός αριθμός	Στοιχείο
1	Άμορφη Μήτρα
2	Πρόσμιξη
3	Γκρίζα ζώνη
4	Ρωγμή

Πίνακας 3.1 Αντιστοιχία κωδικών αριθμών και στοιχείων του μοντέλου





Εικόνα 3.3 Απεικόνιση περιοχής του ψηφιακού δοκιμίου

Για την δημιουργία του ψηφιακού δοκιμίου χρησιμοποιήθηκαν οι παράμετροι που συναντώνται και στην πραγματικότητα, όπως για παράδειγμα το πάχος και το μήκος των κρυστάλλων. Στον πίνακα 3.2 αναγράφονται συγκεντρωτικά οι παράμετροι αυτοί.

Σύμβολο	Παράμετρος
$N$	Διάσταση πλευράς δοκιμίου
$N^2$	Μέγεθος δοκιμίου
$c$	Συγκέντρωση πρόσμιξης
$l$	Μήκος κρυστάλλου
$w$	Πλάτος κρυστάλλου
$d$	Πλάτος διεπιφάνειας
$dl$	Απόκλιση μήκους κρυστάλλου
$dw$	Απόκλιση πλάτους κρυστάλλου
$e$	Ελάχιστο κενό μεταξύ κρυστάλλων

Πίνακας 3.2 Παράμετροι μοντελοποίησης του ψηφιακού δοκιμίου

### 3.1 ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑΣ ΨΗΦΙΑΚΟΥ ΔΟΚΙΜΙΟΥ

Ο αλγόριθμος παραμετροποιήθηκε καθιστώντας εφικτό στον χρήστη να επιλέγει διαφορετικές τιμές για την κάθε παράμετρο του δοκιμίου. Συγκεκριμένα, ο χρήστης μπορεί να επιλέξει μέγεθος δοκιμίου, δίνοντας την κατάλληλη τιμή στην παράμετρο  $N$ , μήκος και πλάτος κρυστάλλου,  $l$  και  $w$  αντίστοιχα κοκ. Έχοντας ορίσει τα μεγέθη του δοκιμίου, των κρυστάλλων και της διεπιφάνειας, ακολουθεί η διαδικασία τοποθέτησης των κρυστάλλων στην άμορφη μήτρα, έως ότου επιτευχθεί η επιθυμητή συγκέντρωση προσμίξεων.

Κατά την διαδικασία τοποθέτησης των κρυστάλλων, εισήχθησαν δύο κριτήρια : α) για την τοποθέτηση ή μη κρυστάλλου β) για τον προσανατολισμό του κρυστάλλου. Στην περίπτωση που το κριτήριο για την τοποθέτηση κρυστάλλου τηρείται, γίνονται οι έλεγχοι, αρχικά για το εάν υπάρχει χώρος για τον κρύσταλλο, ώστε να το τοποθετηθεί εντός του δοκιμίου και έπειτα για το εάν υπάρχει αρκετός χώρος ώστε να μην συν πέσει πάνω σε ήδη υπάρχον κρύσταλλο. Αρχικά και για τα δύο κριτήρια χρησιμοποιήθηκε η `random.random` της βιβλιοθήκης NumPy, η οποία επιστρέφει τυχαίους αριθμούς στο διάστημα  $[0.0,1.0)$  και τα αποτελέσματα αυτής ακολουθούν την κανονική κατανομή. Η συνάρτηση αυτή χρησιμοποιείται δύο φορές : για την παραγωγή πρώτον, τυχαίου αριθμού `ran1` για το κριτήριο (α) και δεύτερον για την παραγωγή τυχαίου αριθμού `ran2` για το κριτήριο (β).

Για την τοποθέτηση του κρυστάλλου το κριτήριο (α) έχει την εξής μορφή, κάνοντας χρήση της εξίσωσης 3.1:

$$ran1 \leq c \quad (3.1)$$

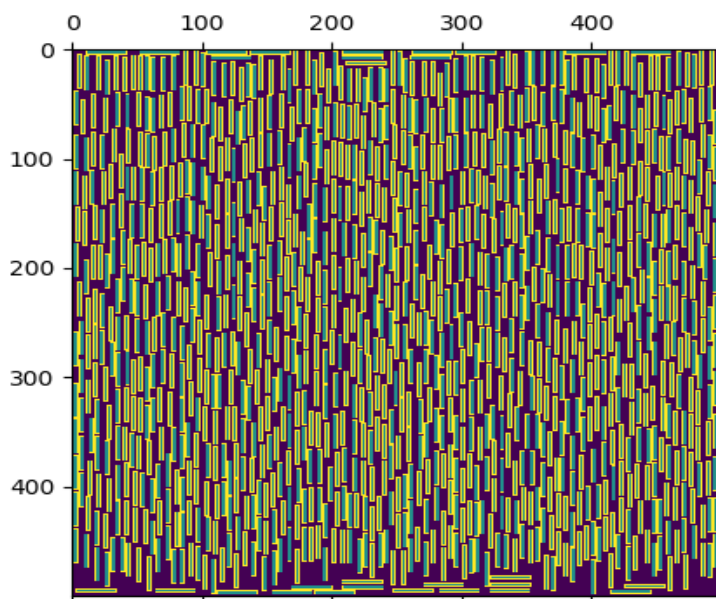
*εάν  $ran1 \leq c \rightarrow$  τοποθέτησε κρύσταλλο*

Αντίστοιχα, για τον προσανατολισμό του κρυστάλλου το κριτήριο (β) χρησιμοποιώντας την εξίσωση 3.2 έχει την εξής μορφή:

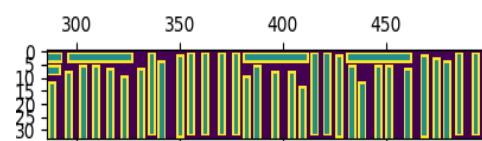
$$ran2 \leq 0.5 \quad (3.2)$$

*εάν  $ran2 \leq 0.5$   $\begin{cases} \text{οριζόντιος προσανατολισμός} \\ \text{κάθετος προσανατολισμός} \end{cases}$*

Είναι σημαντικό να τονιστεί η δημιουργία του δοκιμίου όπως περιεγράφηκε παραπάνω, δεν ήταν εφικτή. Αυτό οφείλεται στην μεγάλη δέσμευση χώρου που προκύπτει λόγω του σχήματος των κρυστάλλων. Όπως φαίνεται και στις εικόνες 3.4,3.5 η τοποθέτηση των πρώτων κρυστάλλων, δεσμεύει τον χώρο κάνοντας μη επιτρεπτή την τοποθέτηση κρυστάλλων. Για το συγκεκριμένο παράδειγμα η αναλογία κάθετων προς οριζόντιων κρυστάλλων είναι  $1067/29$ .



Εικόνα 3.4 Δέσμευση του χώρου λόγω του σχήματος κρυστάλλων σε ψηφιακό δοκίμιο



Εικόνα 3.5 Κοντινή απεικόνιση της δέσμευσης του χώρου στο ψηφιακό δοκίμιο

Το παραπάνω πρόβλημα, ξεπεράστηκε, προσθέτοντας επιπλέον ελέγχους στην τοποθέτηση κρυστάλλων, έτσι ώστε να υπάρχει αρκετός χώρος και για κρυστάλλους.

Παρατηρήθηκε πως χρησιμοποιώντας το κριτήριο ( $\alpha$ ) για την τοποθέτηση ή μη κρυστάλλου οδηγεί αρκετές φορές σε συγκέντρωση διαφορετική από την επιθυμητή με σημαντικές αποκλίσεις. Προέκυψε πως η τοποθέτηση των κρυστάλλων μέχρι να επιτευχθεί η επιθυμητή συγκέντρωση είναι αρκετά περίπλοκο πρόβλημα και οφείλεται στην αλληλεξάρτηση των φαινομένων που λαμβάνουν χώρο. Η τοποθέτηση ενός κρυστάλλου επηρεάζει την τοποθέτηση του επόμενου κοκ με αποτέλεσμα η τελική συγκέντρωση να εξαρτιέται από την τοποθέτηση των κρυστάλλων στον πίνακα, το σχήμα και τον προσανατολισμό τους.

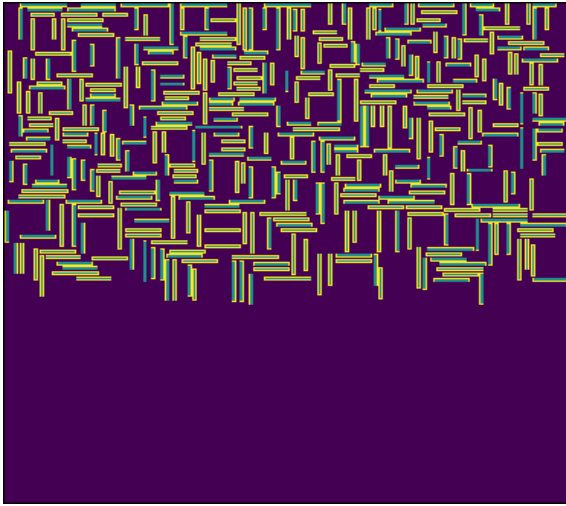
Για την αντιμετώπιση του παραπάνω προβλήματος, αρχικά τροποποιήθηκε το κριτήριο ( $\alpha$ ) στην εξής μορφή:

$$ran1 \leq \frac{c}{100} * \left(1 - \left(\frac{num_{inc} + num_{gb}}{N^2}\right)\right) \quad (3.3)$$

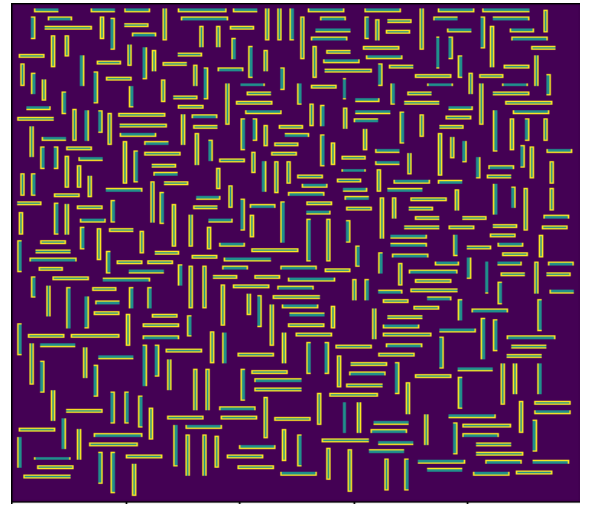
όπου  $num_{inc}$ ,  $num_{gb}$  είναι ο αριθμός των στοιχείων του κρυσταλλίτη και της διεπιφάνειας αντίστοιχα,  $c$  η επιθυμητή συγκέντρωση και  $N^2$  το μέγεθος του πίνακα. Σε κάθε βήμα της διαδικασίας δημιουργίας του δοκιμίου, λαμβάνεται υπόψιν η συγκέντρωση στο δοκίμιο κατά το βήμα αυτό. Η τροποποίηση είχε θετική επίδραση σχετικά με το πρόβλημα επίτευξης της επιθυμητής συγκέντρωσης, παρόλα αυτά σημαντικές αποκλίσεις συνέχισαν να εμφανίζονται μεταξύ της τελικής και της επιθυμητής συγκέντρωσης.

Συνεπώς, το πρόβλημα προσεγγίστηκε διαφορετικά. Χρησιμοποιώντας από την βιβλιοθήκη SciPy της προγραμματιστικής γλώσσας Python, τα εργαλεία βελτιστοποίησης `optimize`, η επίτευξη της επιθυμητής συγκέντρωσης αντιμετωπίστηκε ως πρόβλημα βελτιστοποίησης. Θέτοντας τους απαραίτητους περιορισμούς και την επιθυμητή συνάρτηση προκύπτει ο ελάχιστος αριθμός κρυστάλλων που απαιτούνται ώστε η τελική συγκέντρωση να είναι όση η επιθυμητή, με κάποιο όρια απόκλισης. Στη συνέχεια, χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος που περιεγράφηκε προηγουμένως για την τοποθέτηση των κρυστάλλων και με το κριτήριο (α) χρησιμοποιώντας την απλή εξίσωση 3.1. Εάν δεν έχει τοποθετηθεί ο απαιτούμενος αριθμός κρυστάλλων, «σκανάρεται» ο πίνακας και όπου είναι δυνατό, τοποθετείται κρύσταλλος είτε με οριζόντιο είτε με κάθετο προσανατολισμό. Εάν η επιθυμητή συγκέντρωση δεν έχει επιτευχθεί, η διαδικασία επαναλαμβάνεται για τον αριθμό των επαναλήψεων που έχει οριστεί.

Η παράμετρος  $e$  που ορίστηκε στον πίνακα 3.2 ως το ελάχιστο πάχος κενού μεταξύ των κρυστάλλων έχει διττό ρόλο: αρχικά την εξασφάλιση πως δεν θα είναι κολλημένοι οι κρύσταλλοι μεταξύ τους και έπειτα την δυνατότητα τοποθέτησης των κρυστάλλων ομοιόμορφα πάνω στην άμορφη μήτρα. Για παράδειγμα, δίνονται δύο δοκίμια με τα ίδια χαρακτηριστικά, αλλά διαφορετική τιμή στην παράμετρο  $e$  στις εικόνες 3.6 και 3.7. Όπως είναι εμφανές στην εικόνα 3.7, η μοντελοποίηση του δοκιμίου είναι πιο ρεαλιστική.

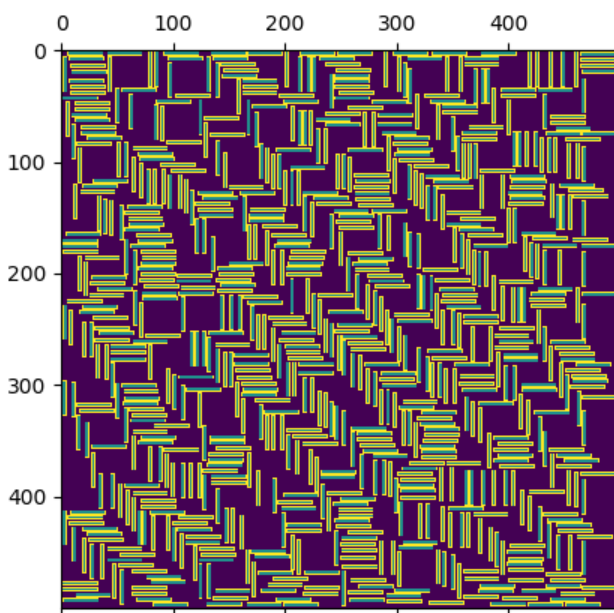


Εικόνα 3.6 Ψηφιακό δοκίμιο για τιμή παραμέτρου  $e = 1$

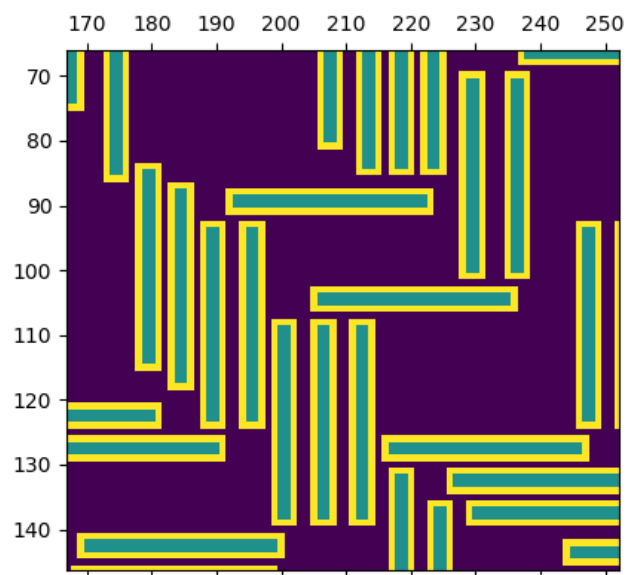


Εικόνα 3.7 Ψηφιακό δοκίμιο για τιμή παραμέτρου  $e = 5$

Η επίλυση του προβλήματος που παρουσιάστηκε δεν είναι η βέλτιστη, καθώς απαιτείται κάποιες φορές ένας αριθμός επαναλήψεων και δεν είναι γνωστό εξ αρχής εάν για τα δεδομένα που διέπουν το πρόβλημα (μέγεθος κρυστάλλου, πάχος διεπιφάνειας, μέγεθος πίνακα) είναι εφικτή η επίτευξη της επιθυμητής της επιθυμητής συγκέντρωσης. Μια αναλυτική λύση θα απαιτούσε σημαντικό χρόνο επίλυσης, εφόσον αποτελεί ένα αρκετά περίπλοκο πρόβλημα και στην παρούσα εργασία υπήρχαν θέματα μεγαλύτερης σημασίας. Δίνεται για παράδειγμα ένα ψηφιακό δοκίμιο στην τελική μορφή στις εικόνες 3.8 και 3.9.



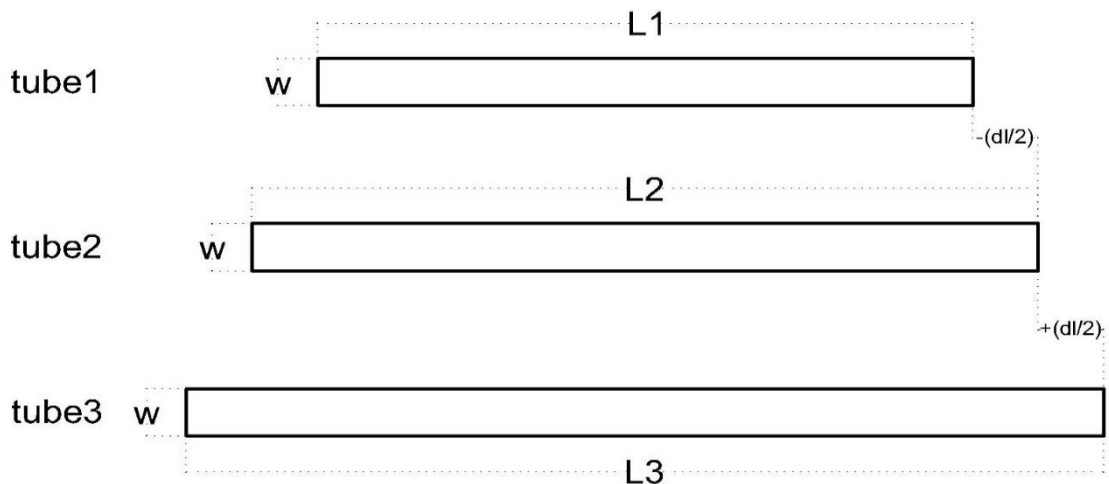
Εικόνα 3.8 Παράδειγμα ψηφιακού δοκιμίου στην τελική μορφή



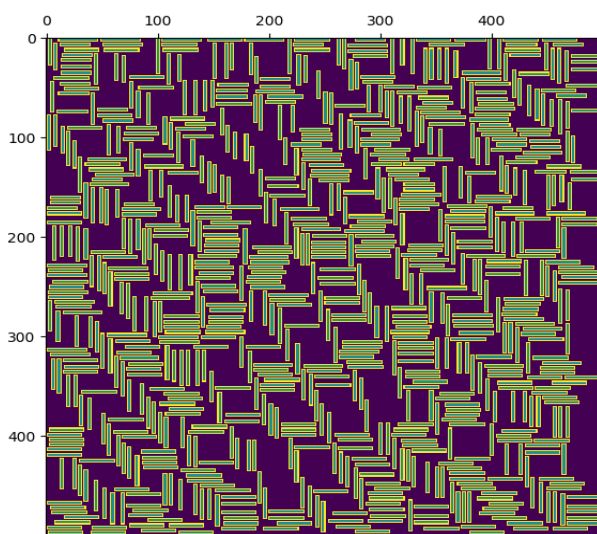
Εικόνα 3.9 Κοντινή απεικόνιση ψηφιακού δοκιμίου εικόνας 3.8

### 3.2 ΕΙΔΗ ΚΡΥΣΤΑΛΛΩΝ

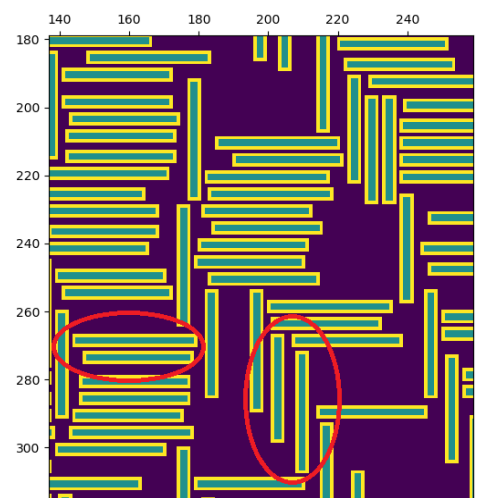
Η διαδικασία δημιουργίας του ψηφιακού δοκιμίου αρχικά έγινε για την τοποθέτηση ενός μεγέθους κρυστάλλου. Στη συνέχεια, καθώς και στην πραγματικότητα δεν συναντώνται κρύσταλλοι αποκλειστικά ενός μεγέθους, η παραπάνω διαδικασία τροποποιήθηκε. Με τον τρόπο αυτό, επιτεύχθηκε η δημιουργία ψηφιακού δοκιμίου με τρία είδη κρυστάλλου, στα οποία εμφανίζεται μια διακύμανση στο μήκος τους  $dl$ . Τα μήκη που εμφανίζονται είναι  $l - dl, l, l + dl$  και ο αριθμός που εμφανίζονται ακολουθεί την κανονική κατανομή, δηλαδή υπάρχουν κυρίως κρύσταλλοι με μήκος  $l$  (68% περίπου αριθμός παρατηρήσεων) και τα άλλα δύο είδη κρυστάλλων πιο σπάνια (16% περίπου ο αριθμός παρατηρήσεων) για κάθε είδος αντίστοιχα. Ένα παράδειγμα με τρία είδη κρυστάλλων και κοντινή απεικόνιση δίνεται στις εικόνες 3.10 και 3.11 αντίστοιχα.



Σχήμα 3.2 Διαφοροποίηση των μηκών των τριών ειδών κρυστάλλων



Εικόνα 3.10 Ψηφιακό δοκίμιο με τρία είδη κρυστάλλων



Εικόνα 3.11 Κοντινή απεικόνιση ψηφιακού δοκιμίου με τρία είδη κρυστάλλων

### 3.3 ΑΛΓΟΡΙΘΜΙΚΗ ΡΟΗ ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑΣ ΤΟΥ ΨΗΦΙΑΚΟΥ ΔΟΚΙΜΙΟΥ

Η διαδικασία δημιουργίας του ψηφιακού δοκιμίου ξεκινά με τον ορισμό των απαραίτητων παραμέτρων, οι οποίες αναγράφονται στον πίνακα 3.2. Εκτελώντας το πρόγραμμα βελτιστοποίησης, υπολογίζεται ο ελάχιστος αριθμός για κάθε είδους κρυστάλλου, προκειμένου να επιτευχθεί η επιθυμητή συγκέντρωση. Για το πρόγραμμα δημιουργίας του δοκιμίου, ο χρήστης έχει την δυνατότητα ορισμού των ορίων που θεωρούνται αποδεκτά για την επίτευξη της συγκέντρωσης. Σαν προεπιλογή έχει οριστεί η τιμή διαφοράς μεταξύ συγκέντρωσης και επιθυμητής συγκέντρωσης ίση με 0.005 ως αποδεκτό όριο. Ακόμη, ο χρήστης μπορεί να ορίσει τον αριθμό επαναλήψεων για τις οποίες θα γίνεται η δεύτερη σάρωση του πίνακα εντός του προγράμματος. Σε αντίθετη περίπτωση έχει οριστεί η προεπιλογή των 50 επαναλήψεων. Επίσης, στο πρόγραμμα έχουν ενσωματωθεί οι αρχικές τιμές για τα είδη των κρυστάλλων ως μετρητές, επιτρέποντας την παρακολούθηση του αριθμού των κρυστάλλων που τοποθετούνται. Έτσι, είναι εφικτός ο έλεγχος για τη σωστή λειτουργία του προγράμματος. Περνώντας τις παραμέτρους που αναγράφονται στον πίνακα 3.2, τον αριθμό κάθε είδους κρυστάλλου σαν ορίσματα και εάν επιθυμεί ο χρήστης μια διαφορετική τιμή για τα ανεκτά όρια της διαφοράς τελικής συγκέντρωσης με την επιθυμητή, εκτελείται το πρόγραμμα για την δημιουργία του ψηφιακού δοκιμίου.

Ξεκινάει η σάρωση του πίνακα, όπως γίνεται η ανάγνωση, από τα αριστερά προς τα δεξιά και από πάνω προς τα κάτω. Αρχικά, εξετάζεται εάν το τωρινό κελί αποτελεί μέρος ήδη τοποθετημένου κρυστάλλου. Εάν όχι, παράγεται ένας τυχαίος αριθμός  $ran3$ , βάση του οποίου καθορίζεται τι είδους κρυστάλλου θα εξεταστεί για τοποθέτηση. Χωρίζοντας το πεδίο  $[0.0,1.0)$  σε τρία ίσα μέρη, κάθε μέρος αντιστοιχεί σε ένα είδος κρυστάλλου. Ανάλογα την τιμή που λαμβάνει ο τυχαίος  $ran3$ , καθορίζεται το είδος του κρυστάλλου που εξετάζεται για τοποθέτηση. Το κελί του κάθε βήματος της σάρωσης, αποτελεί το κελί-οδηγό. Βάση του κελιού αυτού, κατασκευάζεται ο κρύσταλλος.

Σε κάθε κελί του πίνακα, παράγεται ένας τυχαίος αριθμός  $ran1$ , βάση του οποίου καθορίζεται η τοποθέτηση κρυστάλλου ή μη (κριτήριο ( $\alpha$ )). Εάν το κριτήριο ( $\alpha$ ) τηρείται, παράγεται ένας δεύτερος τυχαίος αριθμός  $ran2$ , η τιμή του οποίου καθορίζει τον προσανατολισμό του κρυστάλλου (κριτήριο ( $\beta$ )). Στη συνέχεια

γίνονται οι έλεγχοι για το εάν είναι εφικτή η τοποθέτηση του κρυστάλλου, πρώτον εντός του πίνακα και δεύτερον, εάν στον χώρο που πρόκειται να δεσμεύσει βρίσκεται τμήμα κάποιου άλλου κρυστάλλου που έχει ήδη τοποθετηθεί. Στην περίπτωση που πληρούνται όλα τα κριτήρια και έλεγχοι, τοποθετείται ο κρύσταλλος. Ο αριθμός των κρυστάλλων του είδους αυτού μειώνεται κατά ένα από τον αρχικό αριθμό που έχει εισαχθεί στο πρόγραμμα. Στο τέλος κάθε επανάληψης υπολογίζεται η συγκέντρωση του εκάστοτε βήματος. Εάν η διαφορά συγκέντρωσης του βήματος με την επιθυμητή είναι εντός των αποδεκτών ορίων, η διαδικασία τερματίζεται.

Αφού έχει εκτελεστεί η δημιουργία του δοκιμίου, εάν η επιθυμητή συγκέντρωση δεν έχει επιτευχθεί, ο πίνακας σκανάρεται για έναν αριθμό επαναλήψεων, όπου το κριτήριο (α) έχει τεθεί ως αληθές. Με τον τρόπο αυτό, σε κάθε κελί εξετάζεται ανάλογα τον προσανατολισμό που έχει προκύψει από το κριτήριο (β) εάν χωράει να τοποθετηθεί κρύσταλλος. Έτσι, σε κενούς χώρους τοποθετούνται κρύσταλλοι, κρατώντας τυχαίο το γεγονός εάν θα είναι οριζόντιοι ή κάθετοι. Εάν η επιθυμητή συγκέντρωση δεν επιτυγχάνεται μετά από έναν αριθμό επαναλήψεων, γίνεται αντιληπτό πως η αρχική τοποθέτηση των κρυστάλλων δεν επιτρέπει την περεταίρω προσθήκη κρυστάλλων και συνεπώς η επιθυμητή συγκέντρωση δεν δύναται να επιτευχθεί. Στην περίπτωση αυτή απαιτείται η εκ νέου εκτέλεση του προγράμματος.

Μετά το πέρας του προγράμματος, τυπώνονται πληροφορίες σχετικά με το δοκίμιο σε κατάλληλο αρχείο. Οι πληροφορίες αυτές εμπεριέχουν :

- τελική συγκέντρωση
- αριθμό οριζόντιων κρυστάλλων
- αριθμό κάθετων κρυστάλλων
- χρόνο εκτέλεσης του προγράμματος
- αριθμός κελιών με κωδικό αριθμό που αντιστοιχεί σε κρύσταλλο
- τις παραμέτρους του πίνακα 3.2



### 3.3.1 ΑΝΩ ΟΡΙΟ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ

Είναι άξιο αναφοράς, πως για συγκεκριμένα χαρακτηριστικά μεγεθών κρυστάλλων και πάχος της διεπιφάνειας, είτε πρόκειται για ένα είτε για τρία μεγέθη, ανεξαρτήτως του μεγέθους του πίνακα, προκύπτει μια μέγιστη συγκέντρωση.

Για παράδειγμα, για δοκίμιο με χαρακτηριστικά που αναγράφονται στον πίνακα 3.3, για διαφορετικές τιμές πάχους της διεπιφάνειας και μεγέθους της πλευράς του πίνακα, προκύπτουν οι παρακάτω τιμές τελικής συγκέντρωσης.

Σύμβολο	Παράμετρος
$l$	30
$w$	2
$e$	1

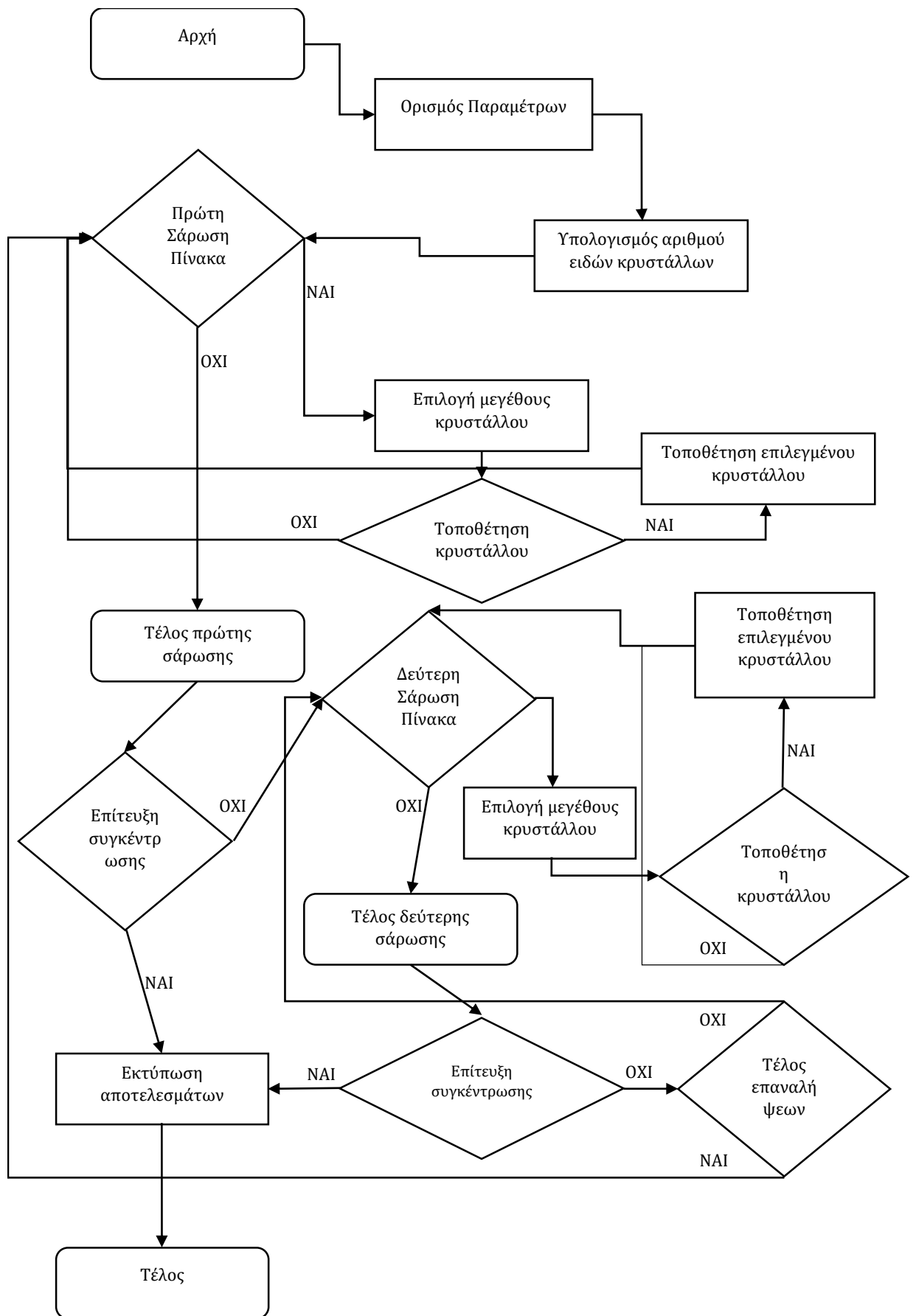
Πίνακας 3.3 Χαρακτηριστικά μήκος, πάχους κρυστάλλου και ελάχιστου κενού μεταξύ των κρυστάλλων

Πάχος διεπιφάνειας $d = 2$	
Διάσταση πλευράς πίνακα N	Τελική συγκέντρωση con
500	0.134
600	0.134
800	0.134
900	0.136
1200	0.136
2000	0.136
5000	0.136

Πίνακας 3.4 Τελικές συγκεντρώσεις ψηφιακών δοκιμίων για μέγεθος πίνακα και πάχος διεπιφάνειας  $d$  ίσο με 2

Πάχος διεπιφάνειας $d = 1$	
Διάσταση πλευράς πίνακα N	Τελική συγκέντρωση con
1000	0.143
1200	0.144
2000	0.14
5000	0.143

Πίνακας 3.5 Τελικές συγκεντρώσεις ψηφιακών δοκιμίων για μέγεθος πίνακα και πάχος διεπιφάνειας  $d$  ίσο με 1



Σχήμα 3.3 Αλγοριθμική ροή προγράμματος δημιουργίας ψηφιακού δοκιμίου

### 3.4 ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΡΩΓΜΗΣ

#### 3.4.1 ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΡΩΓΜΗΣ

Για την προσομοίωση του φαινομένου διάδοσης της ρωγμής αναπτύχθηκε ένα πρόγραμμα, το οποίο χρησιμοποιεί αρχικά το δοκίμιο που παράγεται από το πρόγραμμα δημιουργίας του ψηφιακού δοκιμίου. Η αρχική προσέγγιση του προβλήματος και εξαγωγής αποτελεσμάτων είναι η προσομοίωση της διαδικασίας που πραγματοποιείται στο εργαστήριο, δηλαδή η δημιουργία πολλών δοκιμίων και η πραγματοποίηση ρωγμής σε κάθε δοκίμιο.

Η διαδικασία αυτή αποδείχτηκε αρκετά απαιτητική σε υπολογιστικό χρόνο. Για τον λόγο αυτό, εξετάστηκε μια δεύτερη προσέγγιση. Για την εξαγωγή των αποτελεσμάτων, αντί της δημιουργίας πολλών δοκιμίων και της πραγματοποίησης ρωγμής σε κάθε ένα από αυτά, πραγματοποιούνται πολλές ρωγμές σε ένα δοκίμιο. Οι δύο προσεγγίσεις συγκρίθηκαν τόσο ως προς τον υπολογιστικό χρόνο, όσο και ως προς την στατιστική τους ορθότητα αλλά και ως προς την σύγκλιση βάση του αριθμού των επαναλήψεων.

Όπως αναδεικνύουν τα στοιχεία που παρατίθενται αναλυτικά στην ενότητα 4.3, για τα αποτελέσματα της δεύτερης προσέγγισης υπάρχει σύγκλιση, στατιστική ορθότητα, συνάδουν με αυτά της πρώτης προσέγγισης και ο υπολογιστικός απαιτούμενος χρόνος είναι αρκετά μικρότερος σε σχέση με την πρώτη.

#### 3.4.2 ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΥΠΟΒΑΘΡΟ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΡΩΓΜΗΣ

Η βάση για το πρόγραμμα προσομοίωσης της διάδοσης της ρωγμής στο δοκίμιο υπήρξε ένα αναλυτικό μοντέλο, στο οποίο γίνεται χρήση ενεργειακών και πιθανοτικών σχέσεων συνδυαστικά με την θεωρία του τυχαίου περιπατητή (Charitidis κ.ά.,2007). Το μέγεθος των κρυστάλλων, η συγκέντρωση και το πάχος της διεπιφάνειας, το μήκος και η ταχύτητα διάδοσης της ρωγμής είναι οι βασικοί παράμετροι που χαρακτηρίζουν το φαινόμενο. (Charitidis κ.ά., 2007; Karakasidis & Charitidis, 2011; Falzone κ.ά., 2016). Εξίσου σημαντική επίδραση όμως έχουν παράμετροι όπως οι ενέργειες των στοιχείων του δοκιμίου, η θερμοκρασία και ο τρόπος διάδοσης της ρωγμής (Abraham & Gao, 2000; Bitzek κ.ά., 2015; Ovid'ko, 2015; Yaghmaee & Baghbaderani, 2017). Οι παράμετροι αυτοί παρουσιάζονται στον πίνακα 3.6.

ΣΥΜΒΟΛΟ	ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΣ
$E_{mat}$	ενέργεια σύνδεσης στοιχείων άμορφης μήτρας
$E_{gb}$	ενέργεια σύνδεσης στοιχείων διεπιφάνειας
$E_{inc}$	ενέργεια σύνδεσης στοιχείων κρυστάλλου
$E_{init}$	αρχική ενέργεια ρωγμής
$KT$	θερμοκρασία
$Pf$	Συντελεστής κύριας διεύθυνσης ρωγμής

Πίνακας 3.6 Επιπρόσθετοι παράμετροι μοντελοποίησης του φαινομένου διάδοσης ρωγμής

Ο υπολογισμός των ενεργειών των στοιχείων είναι εφικτός μέσω πειραμάτων μοριακής φυσικής, λαμβάνοντας υπόψιν την χημική σύνθεση του εξεταζόμενου υλικού. Για την παρούσα εργασία δοκιμάστηκαν διάφορες ενεργειακές διαφορές για τα διαφορετικά στοιχεία του δοκιμίου. Οι ενέργειες στο μοντέλο εισέρχονται ως αναλογίες μεταξύ των διαφορετικών στοιχείων. Η υιοθέτηση αυτής της μεθόδου βασίστηκε στις προτάσεις που παρουσιάζονται (Charitidis, Karakasidis, Kavouras, Karakostas) για τις μορφές διάδοσης ρωγμής (transgranular-intergranular) βάση ενεργειακής θεώρησης. Παρουσιάζεται για παράδειγμα στην εξίσωση 3.4 η αναλογία μεταξύ intergranular και transgranular ενεργειών ανάλογα με τις ενέργειες του κρυσταλλίτη ( $E_{cryst}$ ) και της ενδιάμεσης γκρίζας ζώνης ( $E_{inter}$ ) για επιμήκεις κρυσταλλίτες.

$$E_{intergranular}/E_{transgranular} \cong 1.6 E_{inter}/E_{cryst} \quad (3.4)$$

Η τιμή της ενέργειας σύνδεσης των ατομικών δεσμών της διεπιφάνειας είναι ενδιάμεση των ενεργειών της άμορφης μήτρας και των κρυστάλλων (Yaghmaee & Baghbaderani,2017). Για τον λόγο αυτό, η ενέργεια  $E_{gb}$  υπολογίστηκε βάση της εξίσωσης 3.5.

$$E_{gb} = \frac{E_{mat} + E_{inc}}{2} \quad (3.5)$$

Κατά τη διάδοση μιας ρωγμής, έχει παρατηρηθεί πως ορισμένες φορές, εμφανίζεται το φαινόμενο της παγίδευσης (bond trapping). Το φαινόμενο αυτό είναι εξαιρετικά περίπλοκο, απαρτίζει τμήμα εκτενής μελέτης (Bitzek κ.ά., 2015) και για τον λόγο αυτό, στην παρούσα εργασία γίνεται απλή αναφορά. Το φαινόμενο αυτό, παρουσιάστηκε αρκετές φορές στο μοντέλο της παρούσης εργασίας. Έτσι, εισήχθη η παράμετρος  $P_f$ , της οποίας ο σκοπός χρήσης είναι διττός: αποτελεί πρώτον έναν τρόπο αντιμετώπισης του φαινομένου της παγίδευσης και δεύτερον, σημαντικό παράγοντα στον μηχανισμό προσομοίωσης της διάδοσης της ρωγμής (Ovid'ko, 2015). Για την καλύτερη αξιοποίηση της παραμέτρου αυτής, καθώς και για την ελαχιστοποίηση εμφάνισης του φαινομένου παγίδευσης, το πρόγραμμα τροποποιήθηκε. Είναι αρκετά πιθανό η ρωγμή να βρεθεί σε κελί (ή κελιά) του πίνακα όπου έχει «περάσει» προηγουμένως. Δόθηκε η δυνατότητα υπερπήδησης του κελιού αυτού (ή των κελιών). Ο αλγόριθμος διατυπώθηκε έτσι ώστε να ελέγχονται όλα τα πιθανά κελιά κίνησης στο επόμενο βήμα, έως και την τρίτη στιβάδα από το κελί του τωρινού βήματος. Συνεπώς, η παράμετρος  $P_f$  αποτελεί έναν παράγοντα διατήρησης συγκεκριμένης κατεύθυνσης, κάτι που σχετίζεται με τους τρόπους διάδοσης της ρωγμής. Με έμμεσο τρόπο η παράμετρος αυτή είναι δυνατό να συσχετιστεί με τους τύπους ανάπτυξης των ρωγμών καθώς και με τους μηχανισμούς διάδοσης (Abraham & Gao, 2000).

Η θεωρία του τυχαίου περιπατητή ενσωματώνεται χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις βάση των (Argyris & Kehr, 1992). Στις εξισώσεις αυτές εξετάζονται οι διαφορετικές ενέργειες του ψηφιακού δοκιμίου, λαμβάνεται υπόψιν ο συντελεστής  $P_f$  και οι πιθανότητες κίνησης ορίζονται βάση των παραμέτρων αυτών. Σε κάθε βήμα του προγράμματος διάδοσης ρωγμής, εξετάζονται τα στοιχεία και κατ'επέκταση οι ενέργειες αυτών, των κελιών που είναι πιθανά για την επόμενη κίνηση του περιπατητή. Χρησιμοποιώντας τις ενεργειακές εξισώσεις πραγματοποιείται η κατανομή των πιθανοτήτων για τις πιθανές κινήσεις. Οι δύο βασικές εξισώσεις που διέπουν τα παραπάνω είναι οι 3.6 και 3.7.

$$P_{move,main} = P_f e^{-\frac{\Delta E}{KT}} \quad (3.6)$$

$$P_{move,sec} = \frac{(1 - P_f)}{(z - 1)} e^{-\frac{\Delta E}{KT}} \quad (3.7)$$

Για την περίπτωση κελιών που περιέχουν τα ίδια στοιχεία,  $\Delta E = 0$  και οι γενικές εξισώσεις 3.6 και 3.7 μετασχηματίζονται στις 3.8 και 3.9 αντίστοιχα.

$$P_{move,main} = P_f \quad (3.8)$$

$$P_{move,sec} = \frac{(1 - P_f)}{(z - 1)} \quad (3.9)$$

Όπου  $P_{move,main}$  είναι η πιθανότητα κίνησης στην κύρια κατεύθυνση,  $P_{move,sec}$  είναι η πιθανότητα για μια δευτερεύουσα κίνηση, ενώ  $z$  είναι ο αριθμός των πιθανών κινήσεων σε κάθε βήμα.

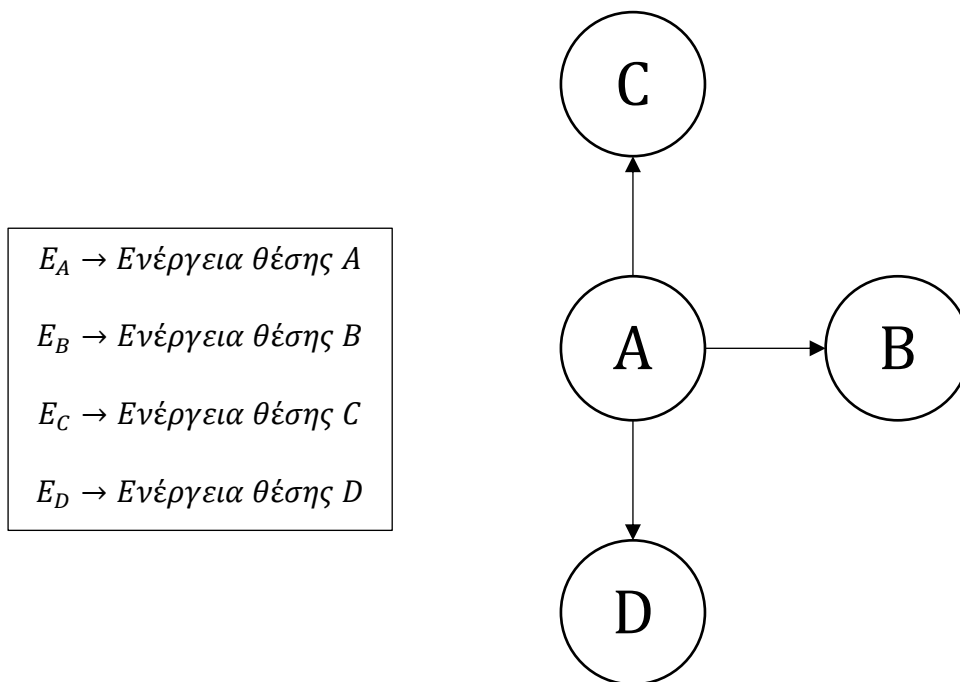
Βάση των εξισώσεων 3.8 και 3.9, γίνεται ξεκάθαρος ο ρόλος της παραμέτρου  $P_f$ . Ενσωματώνει μία «προτίμηση» κατεύθυνσης στο φαινόμενο της διάδοσης της ρωγμής, η οποία καθορίζεται σε κάθε βήμα λαμβάνοντας υπόψιν την κίνηση στο προηγούμενο βήμα. Η διαδικασία περιγράφεται αναλυτικά στην ενότητα 3.4.4. Οι ενεργειακές εξισώσεις περιγράφουν την κατανομή των πιθανοτήτων για τις διάφορες κατευθύνσεις, λαμβάνοντας υπόψιν τις ενεργειακές διαφορές. Για την περίπτωση που το επόμενο πιθανό κελί είναι στοιχείο μικρότερης ενέργειας σε σχέση με το τωρινό χρησιμοποιούνται οι 3.8 και 3.9, ενώ οι 3.6 και 3.7 χρησιμοποιούνται στην αντίθετη περίπτωση.  $\Delta E$  είναι η ενεργειακή διαφορά μεταξύ του κελιού του βήματος και του κελιού πιθανής κίνησης του επόμενου βήματος.

Για μεγάλες τιμές  $KT$ , δηλαδή για υψηλές θερμοκρασίες είναι ευκολότερο να ξεπεραστούν οι ενεργειακές διαφορές.

Σε μια πρώτη εκτίμηση, το αναμενόμενο είναι ότι με αύξηση της θερμοκρασίας, θα υπάρχει αντίστοιχα αύξηση του μέσου μήκους της ρωγμής, όπως και αύξηση της μέσης ταχύτητας διάδοσης (Argyrakis & Kehr, 1992; Yaghmaee & Baghbaderani, 2017).

Οι πιθανές περιπτώσεις για κάθε βήμα διάδοσης ρωγμής, καθώς και οι εξισώσεις που διέπουν την κάθε περίπτωση, παρατίθενται παρακάτω.

## ΣΧΗΜΑΤΙΚΗ ΑΝΑΠΑΡΑΣΤΑΣΗ



Σχήμα 3.4 Γενική περίπτωση πιθανών κινήσεων

Στο σχήμα 3.4 απεικονίζεται το κελί του βήματος που βρισκόμαστε (A) και τα κελιά πιθανής κίνησης (B,C,D). Σε κάθε κελί, ανάλογα το στοιχείο, αντιστοιχεί μια ενέργεια. Καθώς στο δοκίμιο υπάρχουν τρία είδη στοιχείων, σε κάθε ένα από τα A,B,C,D αντιστοιχεί μία από τις τρεις αυτές ενέργειες. Έτσι προκύπτει ένας συνδυασμός περιπτώσεων για τις οποίες οι πιθανότητες κίνησης σε κάθε κελί διαφοροποιούνται.

Οι πιθανές κινήσεις για κάθε βήμα είναι τέσσερις: κίνηση σε κάποιο από τα κελιά B,C,D ή παραμονή στο τωρινό κελί A. Οι πιθανότητες για τις κινήσεις ορίζονται βάση των περιπτώσεων και συμβολίζονται  $P_i, i = A, B, C, D$  όπου ο δείκτης  $i$  υποδεικνύει το κελί. Στη συνέχεια περιγράφονται οι περιπτώσεις και στον πίνακα 3.7 αναγράφονται για κάθε περίπτωση οι τιμές των πιθανοτήτων κίνησης.

### ΠΡΩΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ

Η ενέργεια του κελιού του τωρινού βήματος (A) είναι μεγαλύτερη των κελιών πιθανής κίνησης (B,C,D).

## ΔΕΥΤΕΡΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ

Η ενέργεια του κελιού του τωρινού βήματος (A) είναι μικρότερη των κελιών πιθανής κίνησης (B,C,D).

## ΤΡΙΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ

Η ενέργεια του κελιού του τωρινού βήματος (A) είναι μεγαλύτερη κάποιων κελιών πιθανής κίνησης (π.χ. C, D) αλλά μικρότερη της ενέργειας κάποιων άλλων (π.χ. του κελιού B).

ΠΡΩΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ	ΔΕΥΤΕΡΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ	ΤΡΙΤΗ ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ
$P_B = P_f$	$P_B = P_f * e^{-\frac{\Delta E_{AB}}{KT}}$	$P_B = P_f * e^{-\frac{\Delta E_{AB}}{KT}}$
$P_C = \frac{1 - P_f}{z - 1}$	$P_C = \frac{1 - P_f}{z - 1} * e^{-\frac{\Delta E_{AC}}{KT}}$	$P_C = \frac{1 - P_f}{z - 1}$
$P_D = \frac{1 - P_f}{z - 1}$	$P_D = \frac{1 - P_f}{z - 1} * e^{-\frac{\Delta E_{AD}}{KT}}$	$P_D = \frac{1 - P_f}{z - 1}$
$P_A = 1 - (P_B + P_C + P_D)$	$P_A = 1 - (P_B + P_C + P_D)$	$P_A = 1 - (P_B + P_C + P_D)$

Πίνακας 3.7 Διαμόρφωση των τιμών πιθανοτήτων ανάλογα την περίπτωση ενεργειακών διαφορών

Στην πρώτη περίπτωση η πιθανότητα παραμονής στην ίδια θέση (A) είναι μηδενική.

### 3.4.3 ΠΕΡΑΙΤΕΡΩ ΣΧΟΛΙΑΣΜΟΣ ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΥ $P_f$ ΚΑΙ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟΥ

#### ΠΑΓΙΔΕΥΣΗΣ

Το μοντέλο αρχικά ορίστηκε έτσι ώστε η ρωγή να διαδίδεται μόνο από κελιά στα οποία δεν έχει βρεθεί προηγουμένως.

Σε κάθε βήμα όπου έχουμε κίνηση από ένα κελί σε επόμενο, βάση των περιπτώσεων που αναλύθηκαν προηγουμένως. Εάν υπάρχει κίνηση σε οποιοδήποτε από τα κελιά B,C,D, αφαιρείται από την τιμή της αρχικής ενέργειας  $E_{init}$  η ενέργεια που αντιστοιχεί στο στοιχείο του κελιού. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται έως ότου δεν υπάρχει διαθέσιμη πλέον ενέργεια, δηλαδή η τιμή της  $E_{init}$  γίνεται μικρότερη ή ίση του μηδενός.

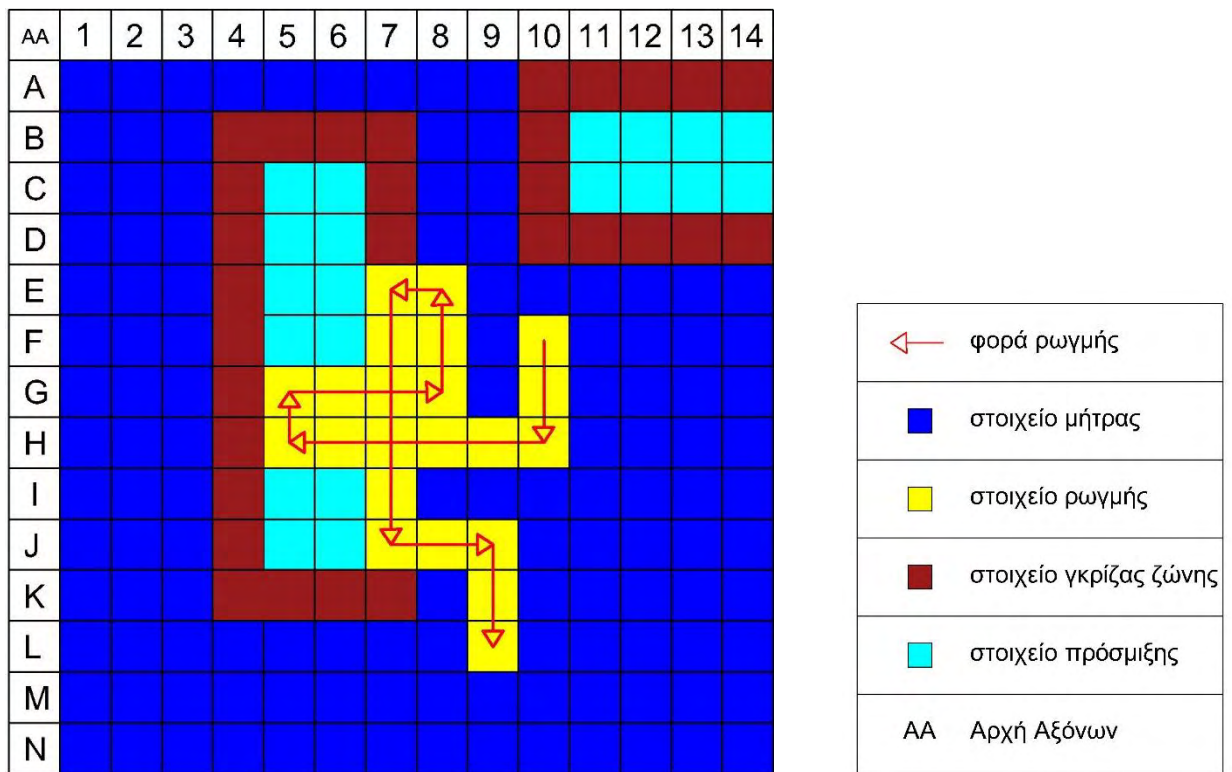
Στις πρώτες υλοποιήσεις του προγράμματος παρατηρήθηκε πως αρκετές φορές η διαδικασία τερματιζόταν παρόλο που υπήρχε διαθέσιμη ενέργεια. Αυτό οφειλόταν στην πραγματοποίηση του φαινομένου της παγίδευσης (bond trapping). Όπως έχει αναφερθεί στην ενότητα 3.4.2, η εισαγωγή της παραμέτρου  $P_f$ , συμβάλει στην



αντιμετώπιση του φαινομένου, ενισχύοντας την επιλογή μιας συγκεκριμένης κατεύθυνσης και οδηγεί σε μια πιο ρεαλιστική προσομοίωση του φαινομένου της διάδοσης της ρωγμής. Για να αποδοθεί η κύρια κατεύθυνση, το πρόγραμμα τροποποιήθηκε καταλλήλως. Σε κάθε βήμα, λαμβάνεται υπόψιν η θέση του προηγούμενου βήματος. Έτσι, η κύρια κατεύθυνση ορίζεται ως το κελί που αποτελεί συνέχεια της προηγούμενης θέσης. Για το πρώτο βήμα της διάδοσης, θεωρήθηκε πως η πρώτη κατεύθυνση κίνησης της ρωγμής είναι τελείως τυχαία και δεν εξετάζονται τα πιθανά κελιά κίνησης ως προς τις ενεργειακές διαφορές. Για τον λόγο αυτόν, οι πιθανότητες κίνησης ισομοιράζονται σε τέσσερα πεδία για κάθε πιθανή κίνηση, καθώς μπορεί να κινηθεί σε μία κατεύθυνση εκ των πάνω, κάτω, δεξιά, αριστερά. Συνεπώς, στην βασική εξίσωση κίνησης 3.6 αντικαθίσταται η παράμετρος  $P_f$  με την τιμή  $\frac{1}{4}$  και το μέρος που αφορά την ενεργειακές διαφορές απαλείφεται. Έτσι η εξίσωση 3.6 παίρνει την εξής μορφή:

$$P_{move} = \frac{1}{4} \quad (3.10)$$

Μετά το πρώτο αυτό βήμα, η διαδικασία διάδοσης συνεχίζεται χρησιμοποιώντας τις γενικές εξισώσεις 3.6, 3.7 και 3.8, 3.9. Όπως αναφέρθηκε στη ενότητα 3.4.3, εκτός του συντελεστή  $P_f$ , το πρόγραμμα ορίστηκε με τρόπο τέτοιο ώστε να εξετάζονται και τα κελιά μπροστά από τα οποία η ρωγμή έχει ήδη περάσει, σύμφωνα με (Bitzek κ.ά., 2015). Η εξέταση των γειτονικών κελιών γίνεται έως και την τρίτη στοιβάδα από το τωρινό κελί. Το άθροισμα των πιθανοτήτων κίνησης και παραμονής είναι ίσο με την μονάδα. Εάν μέχρι και την τρίτη στοιβάδα από τα κελιά μιας ή περισσότερων κατευθύνσεων έχει περάσει ήδη η ρωγμή, οι τιμές των πιθανοτήτων διαφοροποιούνται βάση της παραμέτρου  $z$ . Σε περίπτωση όπου και στις τρεις κινήσεις (μπροστά, δεξιά, αριστερά) από τα κελιά, αυτά έχει περάσει ήδη η ρωγμή, εκτός από ένα κελί, υποχρεωτικά η κίνηση γίνεται σε αυτό το κελί ανεξαρτήτως της προηγούμενης θέσης. Αν δεν υπάρχει ούτε ένα κελί το οποίο να αποτελεί κελί μη περασμένο από ρωγμή, έχουμε το φαινόμενο της παγίδευσης. Με τον τρόπο αυτό, περιορίζεται αρκετά το φαινόμενο παγίδευσης. Για την καλύτερη εμπέδωση των παραπάνω, δίνονται δύο παραδείγματα: στο σχήμα 3.5 για την πορεία της ρωγμής, του ορισμού της κύριας κατεύθυνσης και της υπερπήδησης και στο σχήμα 3.6 για τον ορισμό κίνησης όταν προσφέρεται μόνο ένα κελί.




Σχήμα 3.5 Παράδειγμα υπερπήδησης κελιών και ορισμού κύριας κατεύθυνσης

Υπόμνημα 3.1 Στοιχεία σχήματος 3.5

Η διάδοση της ρωγμής ξεκινάει από το κελί F10. Στο πρώτο βήμα, οι πιθανές θέσεις κίνησης είναι τέσσερις και στο παράδειγμα οι E10, F11, G10, F9. Βάση του τυχαίου αριθμού προκύπτει η κίνηση προς τα κάτω, και προς το κελί G10. Έτσι, ορίζεται ως κύρια κατεύθυνση η κατακόρυφη, με φορά προς τα κάτω. Στη συνέχεια, γίνεται εξέταση των γειτονικών κελιών. Για το συγκεκριμένο βήμα η γενική περίπτωση που απεικονίζεται στο σχήμα 3.4 είναι στραμμένη δεξιόστροφα κατά 90°. Έτσι, η αντιστοιχία των κελιών της γενικής περίπτωσης με αυτή του τωρινού βήματος είναι η εξής:  $A \rightarrow G10, B \rightarrow H10, C \rightarrow G11, D \rightarrow G9$ . Έπειτα ορίζονται οι πιθανότητες κίνησης για κάθε πιθανή κατεύθυνση βάση του πίνακα 3.3 και παράγεται ένας τυχαίος βάση του οποίου προκύπτει ως το επόμενο κελί το H10. Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται σε κάθε βήμα. Έχοντας φτάσει στο κελί F7 παρατηρείται πως τα κελιά G7, H7 αποτελούν τμήμα της διαδρομής της ρωγμής. Η εξέταση των γειτονικών κελιών στο βήμα αυτό, τροποποιείται και αντί του G7 ως το μπροστά κελί, εξετάζεται το I7. Βάση του ορισμού των πιθανοτήτων και του τυχαίου, προέκυψε η κίνηση προς τα εμπρός, συνεπώς η ρωγμή κινήθηκε προς το κελί I7.

AA	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
A											
B											
C											
D											
E											
F											
G											
H											
I											
J											
K											

	φορά ρωγμής
	τωρινό κελί
	κελί ρωγμής
	κελί κίνησης
	κελιά υπόλοιπων στοιχείων
AA	Αρχή Αξόνων

Σχήμα 3.6 Παράδειγμα μοναδικής δυνατής κίνησης

Υπόμνημα 3.2 Στοιχεία σχήματος 3.6

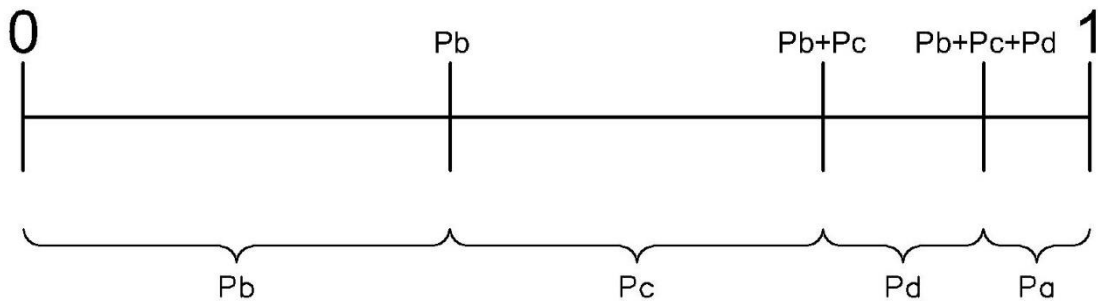
Στο σχήμα 3.6, δίνεται μια τυχαία περίπτωση, για την οποία δίνεται μόνο ένα κελί ως κελί πιθανής κίνησης. Βάση της ανάλυσης που έγινε, παρόλο που η κύρια κατεύθυνση είναι αυτή της στήλης 7 από κάτω προς τα πάνω, το κελί  $F10$  είναι το μοναδικό εκ των τριών κατευθύνσεων (πάνω, δεξιά, αριστερά). Η τιμή της παραμέτρου  $z$  είτε στην εξίσωση 3.9 είτε στην 3.7, ανάλογα την ύπαρξη ή μη ενεργειακής διαφοράς, παίρνει την τιμή της μονάδας, το κλάσμα δεν ορίζεται. Έτσι, δίνεται «υποχρεωτικά» κίνηση ως προς την μοναδική πιθανή κίνηση, στο κελί  $F10$ . Στην περίπτωση όπου και το κελί κίνησης που απεικονίζεται στο σχήμα 3.6, αποτελεί κελί ρωγμής, πρόκειται για περίπτωση παγίδευσης.

### 3.4.4 ΑΛΓΟΡΙΘΜΙΚΗ ΡΟΗ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΡΩΓΜΗΣ

Καθώς το πρόγραμμα διάδοσης αποτελείται από επαναλαμβανόμενα βήματα, δημιουργήθηκαν κατάλληλα υποπρογράμματα.

#### Υπό-πρόγραμμα ορισμού πιθανοτήτων

Σε κάθε βήμα εξετάζονται τα γειτονικά κελιά όπως αναλύθηκε στην προηγούμενη ενότητα. Αφού οριστούν οι πιθανότητες κίνησης ( $P_A, P_B, P_C, P_D$ ) ανάλογα τις ενεργειακές διαφορές, το διάστημα  $[0.0, 1.0)$  διαχωρίζεται σε πεδία βάση των πιθανοτήτων που προκύπτουν από τις εξισώσεις του πίνακα 3.3. Η γενική περίπτωση απεικονίζεται στο σχήμα 3.7.



Σχήμα 3.7 Διαχωρισμός του ανοιχτού πεδίου  $[0.0, 1.0)$  από τις τιμές πιθανοτήτων για τον καθορισμό της κίνησης

#### Υπό-πρόγραμμα κίνησης

Χρησιμοποιείται η συνάρτηση `random.random` της βιβλιοθήκης `NumPy`, τα αποτελέσματα της οποίας ακολουθούν την συνεχή κανονική κατανομή για το δεδομένο διάστημα. Καλώντας την `random.random` η τιμή που προκύπτει ανήκει σε ένα από τα τέσσερα διαστήματα που ορίστηκαν βάση του υποπρογράμματος ορισμού πιθανοτήτων και γίνεται η κίνηση ως προς το κελί στο οποίο αντιστοιχεί το πεδίο αυτό.

#### Υπό-πρόγραμμα ενέργειας

Εφόσον έχουμε κίνηση σε μία από τις τρεις διευθύνσεις, εξετάζεται τι στοιχείο βρίσκεται στο κελί κίνησης και η ενέργεια που αντιστοιχεί στο στοιχείο αφαιρείται από την ενέργεια του βήματος. Η ενέργεια του βήματος είναι η ενέργεια που έχει μείνει από την  $E_{init}$  από την διαδρομή της ρωγμής έως το τωρινό βήμα.

### Υπό-πρόγραμμα ορισμού διαδρομής ρωγμής

Στην περίπτωση όπου έχουμε κίνηση σε μία εκ των τριών διευθύνσεων, στο κελί στο οποίο βρισκόταν πριν την κίνηση του βήματος η ρωγμή, ορίζεται ο τέταρτος κωδικός αριθμός, που αντιστοιχεί σε κελί που έχει περάσει η ρωγμή και έχει χάσει την ενέργειά του.

Αρχικά ο χρήστης δηλώνει στις απαραίτητες παραμέτρους του προγράμματος τις αντίστοιχες τιμές. Οι παράμετροι αυτοί είναι οι αναγραφόμενοι στον πίνακα 3.6. Στη συνέχεια δηλώνει την διεύθυνση (directory) στην οποία έχει αποθηκευτεί το δοκίμιο που παράχθηκε από το πρόγραμμα δημιουργίας ψηφιακού δοκιμίου. Έπειτα δηλώνεται η αρχή διάδοσης της ρωγμής το κέντρο του δοκιμίου.

Το πρόγραμμα χωρίζεται σε δύο μέρη :

- a) Αρχικό βήμα
- b) Κύριο μέρος

Κατά το αρχικό βήμα, όπως περιεγράφηκε, γίνεται η επιλογή κίνησης στις τέσσερις διευθύνσεις. Χρησιμοποιείται η εξίσωση 3.10 για κάθε μία από τις τέσσερις πιθανές κινήσεις. Έτσι, το διάστημα  $[0.0,1.0)$  κατακερματίζεται σε τέσσερα ίσα πεδία, κάθε ένα εκ των οποίων έχει διάστημα ίσο με 0.25 . Το κάθε πεδίο αντιστοιχίζεται σε μία από τις πιθανές κινήσεις (πάνω, κάτω, δεξιά, αριστερά). Καλώντας την `random.random` η τιμή που προκύπτει ανήκει σε ένα από τα τέσσερα διαστήματα και γίνεται η κίνηση ως προς το κελί στο οποίο αντιστοιχεί το πεδίο αυτό.

Στη συνέχεια ακολουθεί το κύριο μέρος. Σε κάθε βήμα της επαναληπτικής διαδικασίας ελέγχεται η τωρινή εναπομείνουσα ενέργεια. Όσο η ενέργεια αυτή είναι μεγαλύτερη του μηδενός, έχουμε την συνέχεια της εκτέλεσης του προγράμματος. Στην αρχή του κάθε βήματος ορίζεται η κύρια κατεύθυνση βάση της κίνησης του προηγούμενου βήματος. Στο καθολικό σύστημα αναφοράς, η κύρια διεύθυνση είναι είτε ως προς τον οριζόντιο είτε ως προς τον κατακόρυφο άξονα. Στην περίπτωση που η κύρια διεύθυνση είναι στον οριζόντιο άξονα, η περίπτωση απεικονίζεται στο σχήμα 3.4. Διαφορετικά η περίπτωση της κατακόρυφης κύριας διεύθυνσης είναι η απεικόνιση στο σχήμα 3.4 στραμμένο κατά  $90^\circ$  με φορά αντίθετης αυτής της κίνησης των δεικτών του ρολογιού. Για την μείωση του όγκου του κώδικα, η κύρια διεύθυνση αποθηκεύεται βάση της προηγούμενης κίνησης. Έτσι εξετάζεται μία

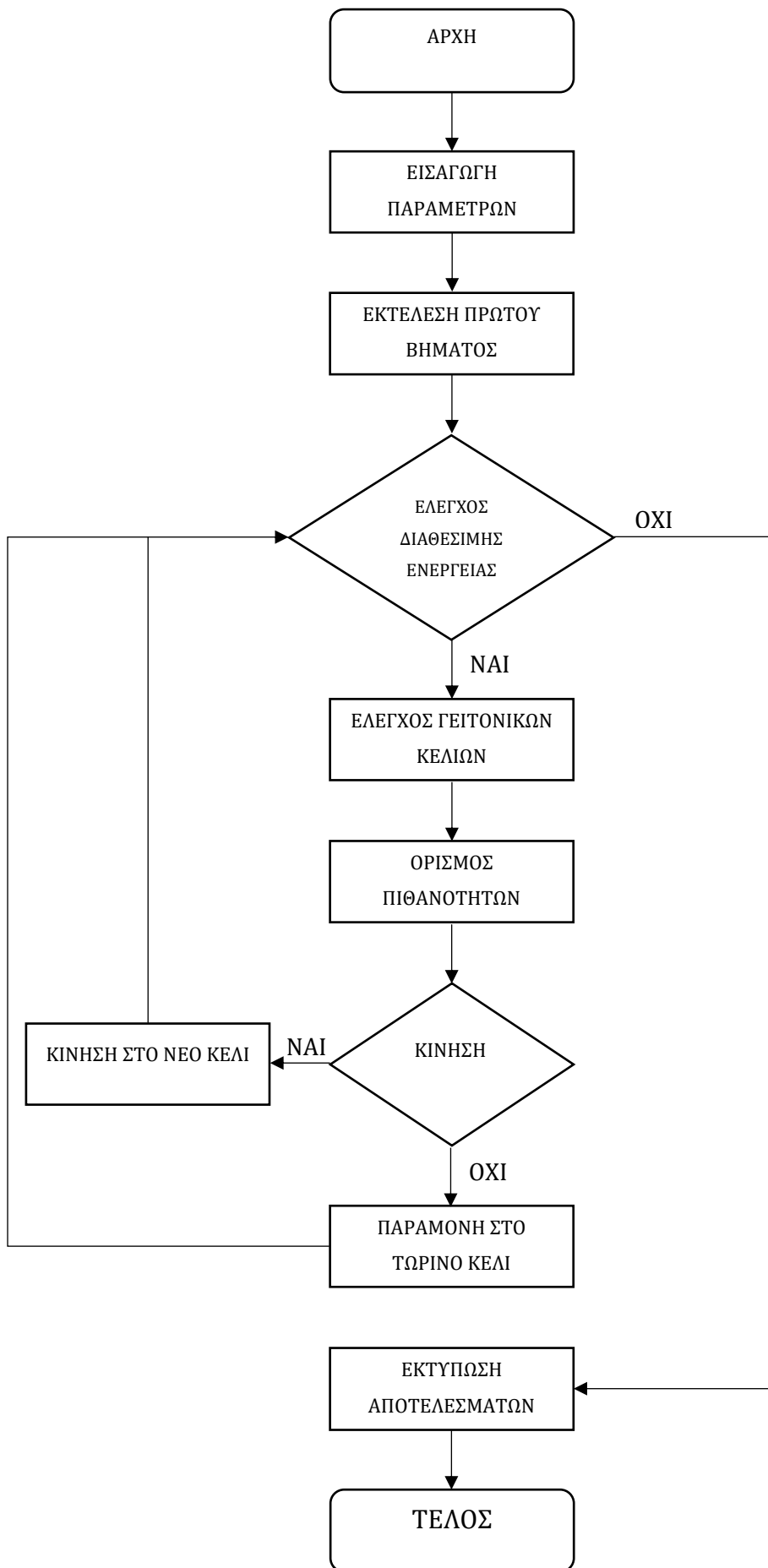
περίπτωση λιγότερη. Το κελί  $B$ , το οποίο δηλώνει το κελί πάνω στην κύρια διεύθυνση, με άλλα λόγια την μπροστά κίνηση, μπορεί να βρίσκεται είτε δεξιά είτε αριστερά του  $A$ , εάν η κύρια διεύθυνση είναι η οριζόντια, διαφορετικά είτε πάνω είτε κάτω του  $A$ . Ακολουθεί η εξέταση των γειτονικών κελιών πιθανής κίνησης. Για κάθε κελί εκ των  $B, C, D$  ελέγχεται εάν το κελί αυτό αποτελεί κομμάτι της διαδρομής της ρωγμής. Εάν η υπόθεση αυτή ισχύει, εξετάζεται το επόμενο κελί στην ίδια κατεύθυνση. Ο έλεγχος αυτός γίνεται έως και την τρίτη στοιβάδα από το κελί  $A$ . Μια τυχαία πιθανή περίπτωση, όπου το κελί  $B$  της πρώτης και της δεύτερης στοιβάδας και το κελί  $C$  της πρώτης στοιβάδας είναι τμήματα της διαδρομής της ρωγμής, παρουσιάστηκε στο σχήμα 3.5.

Στην περίπτωση που όλα τα κελιά πιθανής κίνησης της μίας ή των δύο στοιβάδων είναι τμήματα της διαδρομής της ρωγμής, τροποποιείται ανάλογα η τιμή του συντελεστή  $z$  των εξισώσεων 3.7,3.9. Εάν η κίνηση είναι εφικτή μόνο ως προς ένα κελί, ανεξαρτήτως εάν είναι στην κύρια διεύθυνση ή όχι, γίνεται κίνηση προς το κελί αυτό, καθώς ο παρονομαστής των εξισώσεων 3.7,3.9 θα λάβουν την τιμή του μηδενός, κάτι το μη επιτρεπτό. Έτσι δίνεται κατευθυντικότητα ως προς την κατεύθυνση που βρίσκεται το κελί εφικτής κίνησης. Εάν όλα τα κελιά πιθανής κίνησης και για τις τρεις στοιβάδες είναι τμήματα της διαδρομής της ρωγμής, πρόκειται για περίπτωση παγίδευσης.

Αφού γίνει ο έλεγχος των γειτονικών κελιών πιθανής κίνησης και οριστούν τα κελιά και οι στοιβάδες, εκτελούνται με την σειρά τα υποπρογράμματα :

1. Ορισμού πιθανοτήτων
2. Κίνησης
3. Ενέργειας
4. Ορισμού διαδρομής ρωγμής

Η αναπαράσταση της ροής του προγράμματος διάδοσης της ρωγμής απεικονίζεται στο σχήμα 3.8.



Σχήμα 3.8 Αλγοριθμική ροή προγράμματος προσομοίωσης του φαινομένου διάδοσης ρωγμής [27]

### 3.5 ΑΝΑΓΝΩΡΙΣΗ ΤΡΟΠΟΥ ΔΙΑΔΟΣΗΣ ΡΩΓΜΗΣ ΣΤΟΝ ΝΑΝΟΚΡΥΣΤΑΛΛΟ

Η διάδοση της ρωγμής όταν συναντά προσμίξεις διαχωρίζεται σε δύο κύριες κατηγορίες: i) transgranular ii) intergranular (Karakasidis & Charitidis, 2011). Στην πρώτη περίπτωση η ρωγμή όταν συναντήσει τον κρύσταλλο, τον διαπερνά, ενώ στην δεύτερη περίπτωση «ταξιδεύει» στην περιφέρεια του κρυστάλλου, δηλαδή στην γκριζα ζώνη που σχηματίζεται μεταξύ της άμορφης μήτρας και της προσμίξεως. Είναι εξαιρετικής σημασίας να αναγνωρίζεται ποια από τις δύο κατηγορίες υπερτερεί ανάλογα τις παραμέτρους που ορίζονται, καθώς από τις κατηγορίες αυτές καθίσταται δυνατόν να εξαχθεί κανείς συμπεράσματα για την σκληρότητα και την αντοχή του υλικού.

Για τον λόγο αυτό, δημιουργήθηκε ένα πρόγραμμα, βάση του οποίου γίνεται αναγνώριση του τρόπου που διαπέρασε η ρωγμή κάθε κρύσταλλο. Στο πρόγραμμα δημιουργίας ψηφιακού δοκιμίου, εμπεριέχεται ένα υπό-πρόγραμμα το οποίο αποθηκεύει σε αρχείο κατάλληλης μορφής, τις απαραίτητες πληροφορίες για τους δημιουργημένους κρυστάλλους. Πρόκειται για τις συντεταγμένες του κελιού-οδηγού (όπως παρουσιάστηκε στην ενότητα δημιουργίας του ψηφιακού δοκιμίου), του προσανατολισμού του κρυστάλλου και τα χαρακτηριστικά μεγεθών του κρυστάλλου (μήκος, πλάτος). Στο παρόν πρόγραμμα, τα βασικά στοιχεία τα οποία αποτελούν τα ορίσματά του είναι τα εξής:

- 1) Το αρχικό ψηφιακό δοκίμιο
- 2) Το ψηφιακό δοκίμιο μετά την διάδοση της ρωγμής
- 3) Το αρχείο με τις πληροφορίες των κρυστάλλων
- 4) Η λίστα με τις συντεταγμένες κάθε βήματος της ρωγμής

Εκτελώντας το πρόγραμμα, γίνεται πρωταρχικά, η ανάγνωση του αρχείου που εμπεριέχει τις πληροφορίες των κρυστάλλων και ακολουθεί μια επαναληπτική διαδικασία. Διαβάζοντας τις πληροφορίες για τον εξεταζόμενο κρύσταλλο, επιλέγεται η περιοχή του κρυστάλλου πάνω στο δοκίμιο όπου έχει γίνει η διάδοση της ρωγμής. Εξετάζεται εάν στην περιοχή του κρυστάλλου βρίσκεται κωδικός αριθμός που αντιστοιχεί στη διαδρομή της ρωγμής. Αν δεν είναι αυτή η περίπτωση, σημαίνει πως ο κρύσταλλος έχει μείνει ανέπαφος από τη ρωγμή, συνεπώς η διαδικασία συνεχίζει με τον επόμενο κρύσταλλο. Εάν πρόκειται για κρύσταλλο με ίχνος ρωγμής, κατασκευάζεται ένας προσωρινός πίνακας με μοναδιαία στοιχεία και



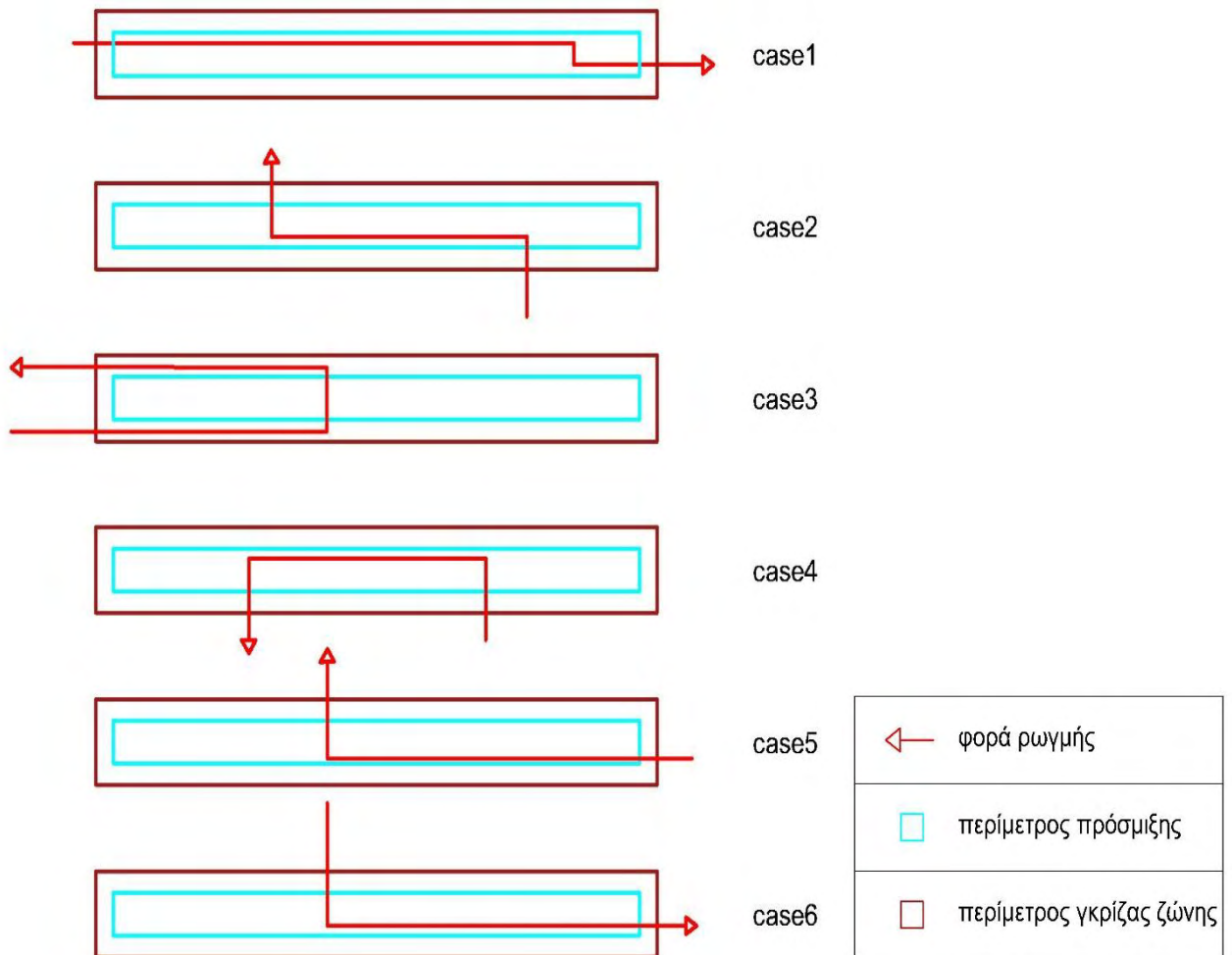
τοποθετείται στην αντίστοιχη με το ψηφιακό δοκίμιο περιοχή, ο κρύσταλλος. Από την διαφορά του ψηφιακού δοκιμίου με τη ρωγμή και του προσωρινού πίνακα προκύπτει ένας τρίτος πίνακας. Στον πίνακα αυτό, τα μη μηδενικά στοιχεία είναι όσα αποτελούν την διαδρομή της ρωγμής στον κρύσταλλο. Με τον τρόπο αυτό αποκτείται το ίχνος της ρωγμής πάνω στον κρύσταλλο. Η διαδικασία αυτή, μπορεί να παρομοιαστεί με αποτύπωση των πινάκων και του εξεταζόμενου σε κάθε βήμα κρυστάλλου, πάνω σε ρυζόχαρτα. Ανάλογα τον προσανατολισμό του κρυστάλλου, γίνεται προσωρινά αποθήκευση σε κατάλληλες δομές, των ακμών του κρυστάλλου που ορίζουν την περίμετρό του. Εξετάζοντας τον αριθμό των μη μηδενικών στοιχείων, σε κατάλληλους μετρητές γίνεται ο διαχωρισμός των στοιχείων αυτών. Είναι στοιχεία του ίχνους της ρωγμής στον κρύσταλλο και είτε ήταν στοιχεία της προσμίξεως είτε της γκρίζας ζώνης. Σε κατάλληλους μετρητές αποθηκεύεται η πληροφορία αυτή. Έπειτα αποκτούνται οι συντεταγμένες του ίχνους της ρωγμής του κρυστάλλου, ταξινομούνται βάση της χρονικής σειράς, πληροφορία που βρίσκεται στην λίστα με τις συντεταγμένες της ρωγμής σε κάθε βήμα και αποθηκεύονται προσωρινά σε κατάλληλη δομή.

Παρατηρήθηκε πως είναι εφικτό, η ρωγμή να διαπεράσει πάνω από μία φορές τον ίδιο κρύσταλλο, σε διαφορετικά σημεία του. Για τον λόγο αυτό, δημιουργήθηκε ένα υπό-πρόγραμμα, το οποίο κατασκευάζει «αλυσίδες» του ίχνους της ρωγμής. Οι αλυσίδες αποτελούν τα χρονικά συνεχόμενα κομμάτια του ίχνους της ρωγμής. Η λίστα των συντεταγμένων της ρωγμής σε κάθε βήμα αποτελεί και την χρονική εξέλιξη της ρωγμής. Κάνοντας χρήση της πληροφορίας αυτής, καθώς και των δομών στις οποίες έχουν αποθηκευτεί οι συντεταγμένες του ίχνους της ρωγμής στον κρύσταλλο, κατασκευάζονται οι αλυσίδες της ρωγμής για τον εξεταζόμενο κρύσταλλο. Αποθηκεύεται επίσης σαν πληροφορία, ο αριθμός των κρυστάλλων στους οποίους εμπεριέχεται τμήμα της ρωγμής. Έτσι, υπάρχει καλύτερη εποπτεία σχετικά με τον αριθμό των κρυστάλλων, αλλά και όλων των περιπτώσεων διαπέρασης της ρωγμής από τον ίδιο κρύσταλλο.

Η περιοχή του κρυστάλλου αποτελείται από την γκρίζα ζώνη και των στοιχείων της πρόσμιξης. Η ρωγμή εισέρχεται στην περιοχή του κρυστάλλου από μία εκ των τεσσάρων ακμών. Ο αρχικός τρόπος εξέτασης για την εισχώρηση της ρωγμής στην περιοχή του κρυστάλλου, έγινε βάση του πρώτου στοιχείου του ίχνους της ρωγμής.

Στην ουσία, επιλέγεται το πρώτο στοιχείο στην δομή που είναι αποθηκευμένες οι συντεταγμένες του ίχνους της ρωγμής στον κρύσταλλο και στη συνέχεια εξετάζεται σε ποια από τις τέσσερις ακμές ανήκει. Παρατηρήθηκαν δύο προβλήματα με την υλοποίηση αυτή. Πρώτον, στην περίπτωση που το πρώτο στοιχείο ανήκει σε δύο ακμές, αποτελεί δηλαδή μία εκ των τεσσάρων γωνιών, δεν γίνεται έλεγχος σε ποια από τις δύο ακμές έγινε η εισχώρηση. Δεύτερον, λόγω της υπερπήδησης που ενσωματώθηκε στον κώδικα διάδοσης ρωγμής, είναι πιθανό το κελί εισχώρησης της ρωγμής να είναι εντός της περιοχής του κρυστάλλου και όχι πάνω σε μία εκ των ακμών. Τα προβλήματα αυτά ισχύουν αντίστοιχα για την έξοδο της ρωγμής από την περιοχή του κρυστάλλου. Δεν ελέγχεται δηλαδή ποια ακμή αποτελεί έξοδο στην περίπτωση που το τελευταίο κελί είναι μία εκ των τεσσάρων γωνιών και σε περίπτωση υπερπήδησης μπορεί να γίνει ανέφικτος ο καθορισμός της ακμής εξόδου. Για να ξεπεραστούν τα προβλήματα αυτά, κατασκευάστηκε ένα υπό-πρόγραμμα, το οποίο εξετάζει το προηγούμενο του πρώτου και το επόμενο του τελευταίου κελιού. Λαμβάνεται έτσι υπόψιν ο προσανατολισμός της κίνησης εισχώρησης και εξόδου. Θα μπορούσε κανείς να πει ότι πρόκειται για ένα είδος διανύσματος. Στη συνέχεια συγκρίνεται η φορά αυτή σε σχέση με τον προσανατολισμό του κρυστάλλου. Με τον τρόπο αυτό, γίνεται γνωστό εάν η κίνηση εισχώρησης/εξόδου έγινε κάθετα ή παράλληλα στον κρύσταλλο. Γνωστοποιείται έτσι εάν πρόκειται για τις πλευρές του πάχους ( $w$ ) ή τις πλευρές του μήκους ( $l$ ). Εξετάζεται στην συνέχεια η τοποθεσία του προηγούμενου του πρώτου και του επόμενου του τελευταίου κελιού αντίστοιχα. Βάση του ελέγχου αυτού, προκύπτει από ποια ακμή εκ των δύο (μήκους  $l$  ή πλάτους  $w$ ) πραγματοποιήθηκε η είσοδος/έξοδος της ρωγμής. Ο έλεγχος πραγματοποιείται για όλες τις αλυσίδες της ρωγμής που παρατηρήθηκαν στην περιοχή του κρυστάλλου. Τα αποτελέσματα του ελέγχου αποθηκεύονται σε κατάλληλη δομή και η διαδικασία συνεχίζει με την εξέταση του επόμενου κρυστάλλου.

Οι περιπτώσεις εισόδου/εξόδου απεικονίζονται στο σχήμα 3.9.

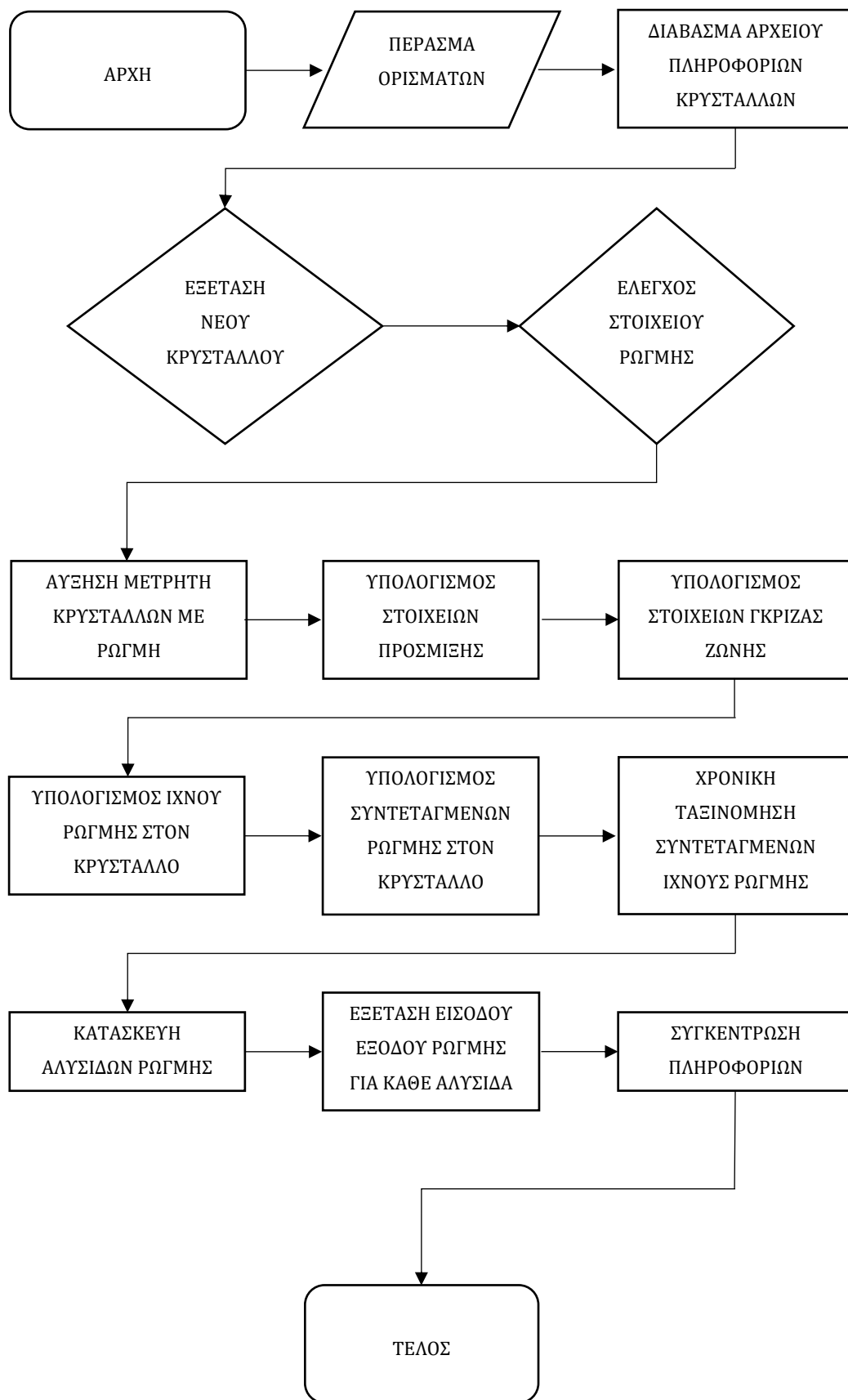


Σχήμα 3.9 Πιθανές περιπτώσεις εισόδου/εξόδου για κάθε κρύσταλλο

Υπόμνημα 3.3 Στοιχεία σχήματος 3.9

Εφόσον ολοκληρωθεί ο έλεγχος όλων των κρυστάλλων, η πληροφορία που εξάγεται είναι αρκετά αναλυτική. Πρόκειται για τον αριθμό των συνδυασμών για τις πλευρές που έγιναν οι είσοδος/έξοδος, τον αριθμό των περιοχών κρυστάλλου-γκρίζας ζώνης που, τον αριθμό των στοιχείων των προσμίξεων και τον αριθμό των στοιχείων της γκρίζας ζώνης που διαπέρασε η ρωγμή συνολικά, αλλά και για κάθε συνδυασμό εισόδου/εξόδου. Όλη αυτή η πληροφορία εκτυπώνονται σε αρχείο καταγραφής και πρόκειται για 23 διαφορετικούς μετρητές.

Η αλγοριθμική ροή του προγράμματος απεικονίζεται στο σχήμα 3.10.



Σχήμα 3.10 Αλγοριθμική ροή προγράμματος αναγνώρισης διαδρομής ρωγμής στους κρυστάλλους

## 4 ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΟΣ ΕΛΕΓΧΟΣ

### 4.1 ΥΠΟΛΟΓΙΖΟΜΕΝΑ ΜΕΓΕΘΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

Για την εξαγωγή συμπερασμάτων και αποτελεσμάτων για τις διάφορες παραμέτρους που διέπουν το πρόβλημα, υπολογίζονται τα χαρακτηριστικά μεγέθη που αναγράφονται στον πίνακα 4.1.

Σύμβολο	Παράμετρος
$Length_{AVG}$	Μέσο μήκος ρωγμής
$Length_{EFF}$	Ενεργό μήκος ρωγμής
$Velocity_{AVG}$	Μέση ταχύτητα ρωγμής
$Velocity_{EFF}$	Ενεργή ταχύτητα ρωγμής
$Move_{TIMES}$	Βήματα κίνησης
$Still_{TIMES}$	Βήματα ακινησίας
$Trapped\_cases$	Περιπτώσεις παγίδευσης

Πίνακας 4.1 Βασικά μεγέθη που αποθηκεύονται για κάθε περίπτωση προσομοίωσης

Η παράμετρος  $Length$  αφορά το μήκος της ρωγμής. Υπολογίζονται δύο χαρακτηριστικά μήκη της ρωγμής: το ενεργό και το μέσο μήκος, τα οποία συμβολίζονται  $Length_{EFF}$  και  $Length_{AVG}$  αντίστοιχα. Στην παρούσα εργασία το ενεργό μήκος πρόκειται για την συνολική διαδρομή που διένυσε η ρωγμή, ενώ το μέσο μήκος πρόκειται για την ευθεία που ενώνει νοητά το τέλος με την αρχή της διαδρομής της ρωγμής. Λόγω μη πλήρους βαθμονόμησης του μοντέλου, δεν είναι εφικτή η έκφραση των μονάδων του μήκος στο διεθνές σύστημα μονάδων (S.I.). Συνεπώς το μέσο μήκος υπολογίζεται κάνοντας χρήση του πυθαγόρειου θεωρήματος για τις συντεταγμένες του τελευταίου και του πρώτου κελιού της διαδρομής της ρωγμής.

Οι παράμετροι  $Move_{TIMES}$ ,  $Still_{TIMES}$  χρησιμοποιούνται ως μονάδες μέτρησης του χρόνου. Η παράμετρος  $Move_{TIMES}$  είναι ο μετρητής των κινήσεων, ενώ η παράμετρος  $Still_{TIMES}$  αφορά τον αριθμό των βημάτων, όπου δεν υπήρξε κίνηση και η ρωγμή παρέμεινε στο ίδιο κελί. Ο συνολικός χρόνος της διάδοσης της ρωγμής ορίζεται ως το άθροισμα των δύο χαρακτηριστικών αυτών χρόνων.

Εκτός των δύο ειδών μήκους της ρωγμής, χαρακτηριστικό μέγεθος του μοντέλου της διάδοσης είναι και η ταχύτητα. Ορίζονται δύο είδη ταχυτήτων: η ενεργή  $Velocity_{EFF}$  και η μέση ταχύτητα  $Velocity_{AVG}$ . Τα μεγέθη αυτά είναι εξίσου

εμπειρικά με τους παραπάνω αναγραφόμενους χρόνους. Η ενεργή ταχύτητα ορίζεται ως το κλάσμα με αριθμητή το ενεργό μήκος και παρονομαστή τον συνολικό χρόνο διάδοσης της ρωγμής, ενώ το μέσο μήκος υπολογίζεται από τον λόγο του μέσου μήκους ρωγμής προς τον συνολικό χρόνο διάδοσης. Ουσιαστικά η βαθμονόμηση του μοντέλου γίνεται βάση των κελιών που αποτελούν την διαδρομή της ρωγμής και των βημάτων πραγματοποίησης του φαινομένου. Οι ταχύτητες υπολογίζεται βάση των εξισώσεων 4.1 και 4.2.

$$Velocity_{EFF} = \frac{Length_{EFF}}{Move_{TIMES} + Still_{TIMES}} \quad (4.1)$$

$$Velocity_{AVG} = \frac{Length_{AVG}}{Move_{TIMES} + Still_{TIMES}} \quad (4.2)$$

Η παράμετρος *Trapped\_cases* χρησιμοποιείται για την μέτρηση των περιπτώσεων παγιδεύσεων και αποτελεί δείκτη για τον περιορισμό της διάδοσης. Εάν για μεγαλύτερα μεγέθη κρυστάλλου η παράμετρος αυτή αποκτά σημαντικά μεγαλύτερη τιμή, μπορεί κανείς να αποφανθεί ότι το μέγεθος και το σχήμα του κρυστάλλου συμβάλλει στο μήκος διάδοσης της ρωγμής. Σε παρόμοια συμπεράσματα μπορεί να οδηγηθεί κανείς εξετάζοντας την διαμόρφωση της τιμής της παραμέτρου αυτής ανάλογα τις τιμές που λαμβάνει ο συντελεστής κατευθυντικότητας  $P_f$ .

## 4.2 ΕΛΕΓΧΟΣ ΣΥΓΚΛΙΣΗΣ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ

Για την εξαγωγή συμπερασμάτων από τα αποτελέσματα του μοντέλου, ήταν απαραίτητο να γίνει πρωταρχικά, μια διερεύνηση σχετικά με την ορθότητα του μοντέλου, το οποίο δημιουργήθηκε όπως περιεγράφηκε στην ενότητα 3, αλλά και οι απαραίτητοι στατιστικοί έλεγχοι των αποτελεσμάτων. Μέσω της στατιστικής ανάλυσης είναι εφικτός ο προσδιορισμός επιρροής των διαφόρων παραμέτρων του μοντέλου στα αποτελέσματα, όπως για παράδειγμα, το μέγεθος των κρυστάλλων, οι ενέργειες σύνδεσης των στοιχείων. Επίσης καθίσταται δυνατόν ο έλεγχος

σύγκλισης των αποτελεσμάτων, ο έλεγχος των διαφορετικών μεθόδων δειγματοληψίας κ.ά.

Καθώς το μοντέλο αποτελείται από μηχανισμούς στους οποίους υπεισέρχονται αρκετοί διαφορετικοί παράμετροι και συνεπώς απαιτείται ένας σημαντικά μεγάλος αριθμός εκτέλεσης των προγραμμάτων, ήταν μείζονος σημασίας ο προσδιορισμός του αναγκαίου αριθμού εκτέλεσης του προγράμματος της διάδοσης της ρωγμής, προκειμένου να επιτευχθεί σύγκλιση των αποτελεσμάτων, αλλά και ο προσδιορισμός του απαιτούμενου χρόνου για την συνολική εκτέλεση των προγραμμάτων.

Για την σύγκλιση των αποτελεσμάτων, ενσωματώθηκε η μεθοδολογία όπου χρησιμοποιείται ένα δοκίμιο και σε αυτό πολλές υλοποιήσεις διάδοσης ρωγμής. Αρχικά, χρησιμοποιήθηκε ένα δοκίμιο, με ένα μέγεθος κρυστάλλων και χρησιμοποιήθηκαν 10 τιμές για τον συντελεστή κατευθυντικότητας  $P_f$ . Οι τιμές αυτές είναι το κλειστό διάστημα [0.5,0.95] με βήμα 0.05. Καθώς υπήρξε σύγκλιση για όλες τις τιμές, εξετάστηκε και ένα δεύτερο δοκίμιο. Η διαφορά έγκειται στο μέγεθος των δοκιμίων. Το πρώτο δοκίμιο έχει μέγεθος  $N^2 = 500^2$ , ενώ το δεύτερο  $N^2 = 700^2$ . Τα κοινά χαρακτηριστικά για τις δύο περιπτώσεις δοκιμίων αναγράφονται στον πίνακα 4.2.

ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΣ	ΤΙΜΗ
l	30
w	2
d	1
e	1
c (%)	20
KT	0.7
$E_{init}$	$N/2$
$E_{mat}$	1.0
$E_{gb}$	1.2
$E_{inc}$	1.5

Πίνακας 4.2 Τιμές παραμέτρων για τον έλεγχο σύγκλισης του μοντέλου για δύο διαφορετικά δοκίμια

Στον έλεγχο της σύγκλισης των αποτελεσμάτων, συμπεριελήφθησαν τα βασικά χαρακτηριστικά της ρωγμής, δηλαδή το μέσο και ενεργό μήκος, καθώς και η μέση και η ενεργή ταχύτητα. Παρατηρώντας τις τιμές των μηκών και των ταχυτήτων, τα σημαντικά ψηφία για τα μήκη είναι ένα, ενώ για τις ταχύτητες δύο. Ανάλογα των σημαντικών ψηφίων έγινε η στρογγυλοποίηση των τιμών των μεγεθών.

Για την σύγκλιση των μεγεθών αυτών, γίνεται χρήση του κριτηρίου της νιοστής ρίζας ή διαφορετικά του κριτηρίου του Cauchy. Καθώς η τιμή  $r$  του κριτηρίου είναι κρίσιμη για την εξαγωγή συμπερασμάτων και παρατηρήθηκαν διαβαθμίσεις ως προς το τέταρτο ψηφίο μετά την υποδιαστολή, ορίστηκαν τα τέσσερα ψηφία μετά την υποδιαστολή ως τα σημαντικά. Η εξίσωση του κριτηρίου σύγκλισης Cauchy δίνεται στην 4.3.

$$r = \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{|a_n|} \quad (4.3)$$

Σύμφωνα με το κριτήριο του Cauchy, θα ισχύουν οι παρακάτω περιπτώσεις ανάλογα την τιμή του ορίου  $r$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Για } r < 1 \rightarrow \text{σύγκλιση αποτελεσμάτων} \\ \text{Για } r > 1 \rightarrow \text{απόκλιση αποτελεσμάτων} \\ \text{Για } r = 1 \rightarrow \text{δεν είναι εφικτή η απόφαση για σύγκλιση αποτελεσμάτων} \end{array} \right.$$

Χρησιμοποιώντας ως αρχική τιμή επαναλήψεων τις 10000, για τα χαρακτηριστικά μεγέθη του μοντέλου υπολογίζεται ο μέσος όρος, η τυπική απόκλιση και η τιμή  $r$  του κριτηρίου της νιοστής ρίζας. Εκτός της τιμής  $r$  του κριτηρίου του Cauchy, υπολογίζονται και καταγράφονται ο μέσος όρος και η τυπική απόκλιση των εξεταζόμενων χαρακτηριστικών μεγεθών. Στους πίνακες 4.3, 4.4, 4.5 και 4.6 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα ανά 1000 επαναλήψεις, για τα δύο δοκίμια και για το κάθε δοκίμιο δύο τιμές του συντελεστή  $P_f$ :  $P_{f1} = 0.8, P_{f2} = 0.95$ .



MATRIX SIZE $N^2 = 500^2$						
$P_f = 0.8$	AVERAGE LENGTH			EFFECTIVE LENGTH		
Iterations	R value	Mean Value	Standard Dev	R value	Mean Value	Standard Dev
1000	1.0107	41.7	20.6	1.0124	215.7	7.5
2000	1.0057	41.9	20.4	1.0065	215.9	7.7
3000	1.0039	41.9	20.6	1.0045	215.6	7.7
4000	1.003	41.7	20.6	1.0034	215.6	7.7
5000	1.0025	41.7	20.5	1.0028	215.6	7.7
6000	1.0021	41.9	20.6	1.0023	215.6	7.7
7000	1.0018	41.8	20.5	1.002	215.6	7.7
8000	1.0016	41.9	20.5	1.0018	215.6	7.8
9000	1.0014	41.8	20.5	1.0016	215.6	7.7
10000	1.0013	42	20.5	1.0015	215.6	7.7
Iterations	AVERAGE VELOCITY			EFFECTIVE VELOCITY		
1000	1.0052	0.18	0.09	1.0069	0.94	0.02
2000	1.003	0.18	0.09	1.0038	0.94	0.02
3000	1.0021	0.18	0.09	1.0027	0.94	0.02
4000	1.0016	0.18	0.09	1.0021	0.94	0.02
5000	1.0014	0.18	0.09	1.0017	0.94	0.02
6000	1.0012	0.18	0.09	1.0014	0.94	0.02
7000	1.001	0.18	0.09	1.0013	0.94	0.02
8000	1.0009	0.18	0.09	1.0011	0.94	0.02
9000	1.0008	0.18	0.09	1.001	0.94	0.02
10000	1.0008	0.18	0.09	1.0009	0.94	0.02

Πίνακας 4.3 Αποτελέσματα ελέγχου σύγκλισης για δοκίμιο μεγέθους  $N^2 = 500^2$  και  $P_f = 0.8$

MATRIX SIZE $N^2 = 500^2$						
$P_f = 0.95$	R value	Mean Value	Standard Dev	R value	Mean Value	Standard Dev
Iterations	AVERAGE LENGTH			EFFECTIVE LENGTH		
1000	1.0114	80.2	38.1	1.0124	218	8.2
2000	1.006	79.9	37.6	1.0065	217.7	8.4
3000	1.0041	79.6	37.6	1.0045	217.7	8.2
4000	1.0032	79.5	37.4	1.0034	217.6	8.3
5000	1.0026	79.6	37.5	1.0028	217.6	8.3
6000	1.0022	79.9	37.6	1.0024	217.5	8.3
7000	1.0019	79.4	37.5	1.002	217.6	8.3
8000	1.0017	79.2	37.5	1.0018	217.7	8.3
9000	1.0015	79.2	37.7	1.0016	217.7	8.3
10000	1.0014	79.1	37.7	1.0015	217.7	8.3
Iterations	AVERAGE VELOCITY			EFFECTIVE VELOCITY		
1000	1.0059	0.35	0.17	1.0069	0.95	0.02
2000	1.0033	0.35	0.16	1.0038	0.95	0.02
3000	1.0023	0.35	0.16	1.0027	0.95	0.02
4000	1.0018	0.35	0.16	1.0021	0.95	0.02
5000	1.0015	0.35	0.16	1.0017	0.95	0.02
6000	1.0013	0.35	0.16	1.0014	0.95	0.02
7000	1.0011	0.35	0.16	1.0013	0.95	0.02
8000	1.001	0.35	0.16	1.0011	0.95	0.02
9000	1.0009	0.35	0.16	1.001	0.95	0.02
10000	1.008	0.35	0.16	1.0009	0.95	0.02

Πίνακας 4.4 Αποτελέσματα ελέγχου σύγκλισης για δοκίμιο μεγέθους  $N^2 = 500^2$  και  $P_f = 0.95$

MATRIX SIZE $N^2 = 700^2$						
$P_f = 0.8$	AVERAGE LENGTH			EFFECTIVE LENGTH		
Iterations	R value	Mean Value	Standard Dev	R value	Mean Value	Standard Dev
1000	1.0109	53.1	24.5	1.0127	314.8	9.2
2000	1.0058	52.7	25	1.0067	315.3	9.1
3000	1.004	52.4	25.2	1.0046	315.5	9
4000	1.0031	52.8	25.4	1.0035	315.6	9
5000	1.0025	53.2	25.6	1.0029	315.6	8.9
6000	1.0021	53.2	25.5	1.0024	315.6	8.9
7000	1.0018	53.1	25.5	1.0021	315.6	8.9
8000	1.0016	53	25.4	1.0018	315.5	8.9
9000	1.0015	52.9	25.3	1.0017	315.6	8.9
10000	1.0013	52.9	25.2	1.0015	315.6	8.9
Iterations	AVERAGE VELOCITY			EFFECTIVE VELOCITY		
1000	1.0051	0.16	0.08	1.0069	0.96	0.02
2000	1.0029	0.16	0.08	1.0038	0.96	0.02
3000	1.0021	0.16	0.08	1.0027	0.96	0.02
4000	1.0016	0.16	0.08	1.0021	0.96	0.02
5000	1.0013	0.16	0.08	1.0017	0.96	0.02
6000	1.0011	0.16	0.08	1.0014	0.96	0.02
7000	1.001	0.16	0.08	1.0013	0.96	0.02
8000	1.0009	0.16	0.08	1.0011	0.96	0.02
9000	1.0008	0.16	0.08	1.001	0.96	0.02
10000	1.0007	0.16	0.08	1.0009	0.96	0.02

Πίνακας 4.5 Αποτελέσματα ελέγχου σύγκλισης για δοκίμιο μεγέθους  $N^2 = 700^2$  και  $P_f = 0.8$

MATRIX SIZE $N^2 = 700^2$						
$P_f = 0.95$	AVERAGE LENGTH			EFFECTIVE LENGTH		
Iterations	R value	Mean Value	Standard Dev	R value	Mean Value	Standard Dev
1000	1.0115	95.5	46.2	1.0127	311.1	9.5
2000	1.0061	96.1	46.2	1.0067	311.3	9.7
3000	1.0042	95.8	46.7	1.0046	311.4	9.6
4000	1.0032	96.2	46.9	1.0035	311.5	9.6
5000	1.0026	96.4	47.1	1.0029	311.5	9.6
6000	1.0022	95.9	46.9	1.0024	311.5	9.6
7000	1.0019	96	46.8	1.0021	311.4	9.6
8000	1.0017	96.2	46.9	1.0018	311.5	9.6
9000	1.0015	96	46.8	1.0017	311.4	9.7
10000	1.0014	95.9	46.7	1.0015	311.5	9.7
Iterations	AVERAGE VELOCITY			EFFECTIVE VELOCITY		
1000	1.0057	0.29	0.14	1.0069	0.96	0.02
2000	1.0032	0.3	0.14	1.0038	0.96	0.02
3000	1.0023	0.3	0.14	1.0027	0.96	0.02
4000	1.0018	0.3	0.15	1.0021	0.96	0.02
5000	1.0015	0.3	0.15	1.0017	0.96	0.02
6000	1.0012	0.3	0.15	1.0014	0.96	0.02
7000	1.0011	0.3	0.15	1.0013	0.96	0.02
8000	1.001	0.3	0.15	1.0011	0.96	0.02
9000	1.0009	0.3	0.15	1.001	0.96	0.02
10000	1.0008	0.3	0.14	1.0009	0.96	0.02

Πίνακας 4.6 Αποτελέσματα ελέγχου σύγκλισης για δοκίμιο μεγέθους  $N^2 = 700^2$  και  $P_f = 0.95$

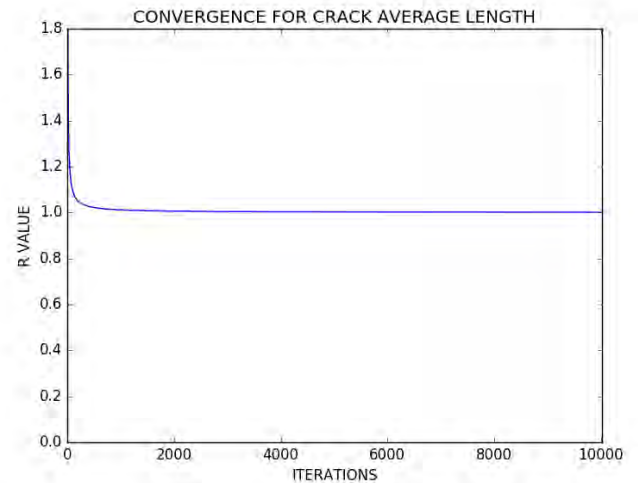
### Σχολιασμός Αποτελεσμάτων Σύγκλισης

Για τις διάφορες τιμές των παραμέτρων στα τεστ σύγκλισης, η τιμή του κριτηρίου Cauchy έχει αρκετά μικρές διακυμάνσεις. Το ίδιο γεγονός παρατηρείται και για τον μέσο όρο των εξεταζόμενων μεγεθών αλλά και για την τιμή της τυπικής απόκλισης. Συνεπώς, η σύγκλιση του μοντέλου μετά από έναν αριθμό επαναλήψεων, δεν επηρεάζεται από τις τιμές των παραμέτρων, είτε πρόκειται για το μέγεθος μήτρας είτε για τον συντελεστή κατεύθυνσης  $P_f$ . Σε επόμενες περιπτώσεις πρόκυψε ότι η σύγκλιση του μοντέλου δεν επηρεάζεται ούτε από τα υπόλοιπα χαρακτηριστικά, όπως τα μεγέθη των κρυστάλλων και οι ενέργειες σύνδεσης.

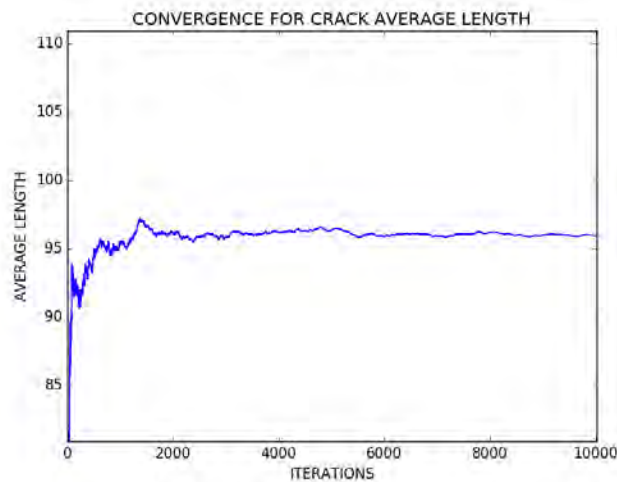
Άξιο αναφοράς είναι το γεγονός πως από τις 2000 περίπου επαναλήψεις και μετά, η τιμή του κριτηρίου  $r$  παραμένει περίπου σταθερή και ίση με την μονάδα. Βάση του ορισμού του κριτηρίου δεν είναι εφικτή η απόφαση για το εάν τα αποτελέσματα συγκλίνουν. Παρατηρώντας όμως τις τιμές του  $r$ , φαίνεται πως τείνουν να μικραίνουν όσο αυξάνεται ο αριθμός των επαναλήψεων. Σε μεγαλύτερο αριθμό επαναλήψεων είναι πιθανό η τιμή αυτή να γίνει μικρότερη της μονάδας. Όπως προαναφέρθηκε όμως, η τιμή του ορίου  $r$ , μετά τις 2000 επαναλήψεις έως και τις 10000 έχει αρκετά μικρές διακυμάνσεις, γεγονός που παρατηρείται και στις τιμές του μέσου όρου και της τυπικής απόκλισης του εκάστοτε εξεταζόμενου ως προς την σύγκλιση μεγέθους. Παρατηρείται επιπλέον πως οι τιμές των ταχυτήτων συγκλίνουν πιο γρήγορα σε σχέση με τις τιμές των μηκών.

Συνεπώς, καθίσταται δυνατό, αρχικά να αποφανθεί κανείς για την σύγκλιση των αποτελεσμάτων και δεύτερον, να χρησιμοποιηθεί η τιμή των 2000 επαναλήψεων ως ο ελάχιστος απαιτούμενος αριθμός επαναλήψεων για την σύγκλιση των εξεταζόμενων μεγεθών. Τα παραπάνω παρατηρήθηκαν και για κρυστάλλους τετραγωνικής μορφής (Nasikas, 2018). Επομένως, η σύγκλιση των αποτελεσμάτων και ο ελάχιστος αριθμός επαναλήψεων είναι ανεξάρτητα και του σχήματος των κρυστάλλων. Σημαντική παρατήρηση είναι ότι εκτός του μέσου όρου, παρατηρείται σύγκλιση και της τυπικής απόκλισης, κάτι που μπορεί να αποδειχθεί πως έχει φυσική σημασία.

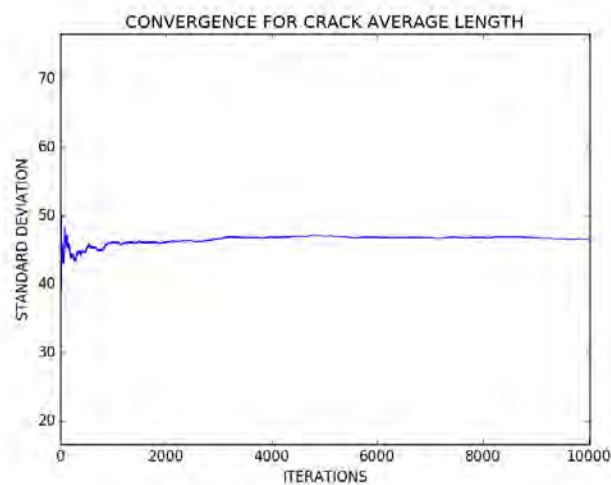
Για κάθε εξεταζόμενο μέγεθος ως προς την σύγκλιση, εκτός της καταγραφής της τιμής τόσο του μεγέθους, όσο και της τιμής  $r$  του κριτηρίου, δημιουργούνται τα κατάλληλα διαγράμματα, όπου στον οριζόντιο άξονα αναγράφεται ο αριθμός των επαναλήψεων και στον κατακόρυφο η τιμή του εξεταζόμενου μεγέθους ή η τιμή  $r$ . Ενδεικτικά παρατίθενται τα διαγράμματα 4.1, 4.2 και 4.3 για την σύγκλιση της περίπτωσης δοκιμίου μεγέθους  $N^2 = 700^2$  και  $P_f = 0.95$ .



Διάγραμμα 4.1 Τιμή κριτηρίου Cauchy του μέσου μήκους για τον αριθμό των επαναλήψεων



Διάγραμμα 4.2 Μέσος όρος μέσου μήκους για τον αριθμό των επαναλήψεων



Διάγραμμα 4.3 Τυπική απόκλιση μέσου μήκους για τον αριθμό των επαναλήψεων

### 4.3 ΕΛΕΓΧΟΣ ΜΕΘΟΔΩΝ ΔΕΙΓΜΑΤΟΛΗΨΙΑΣ

Στην ενότητα 3.4 παρουσιάστηκαν οι δύο τρόποι δειγματοληψίας. Ο πρώτος τρόπος πρόκειται για την προσομοίωση των πειραμάτων στο εργαστήριο, δηλαδή την δημιουργία δοκιμίων και την διάδοση της ρωγμής σε κάθε ένα από αυτά. Σε αντίθεση, ο δεύτερος τρόπος πρόκειται για την δημιουργία ενός δοκιμίου και τις πολλές εκ νέου διαδόσεις ρωγμής στο δοκίμιο αυτό. Στην παρούσα ενότητα συγκρίνονται τα αποτελέσματα των δύο αυτών δειγματοληψιών.

Για ψηφιακό δοκίμιο με τα ακόλουθα χαρακτηριστικά  $N^2 = 500^2, c = 20\%, l = 30, w = 2, dl = 5, E_{mat} = 1.0, E_{gb} = 1.5, E_{inc} = 2.0, E_{init} = 500/2$  και για τις εξής παραμέτρους για την διάδοση της ρωγμής  $P_f = 0.9, KT = 1.0$ , παρουσιάζονται ο χρόνος εκτέλεσης, ο αριθμός του φαινόμενου παγίδευσης, τα υπολογιζόμενα χαρακτηριστικά μεγέθη, ο αριθμός του κριτηρίου Cauchy και η σύγκρισή τους για τους δύο τρόπους δειγματοληψίας για αριθμό επαναλήψεων 2000.

Iterations	AVERAGE LENGTH		EFFECTIVE LENGTH	
2000	Mean Value	R value	Mean Value	R value
One_Crack	54.10	1.0058	193.30	1.0065
One_Matrix	53.20	1.0058	191.70	1.0064
Difference	0.90	0.00	1.60	0.00
Difference(%)	1.66	0.00	0.83	0.01
Iterations	AVERAGE VELOCITY		EFFECTIVE VELOCITY	
2000	Mean Value	R value	Mean Value	R value
One_Crack	0.26	1.0031	0.94	1.0038
One_Matrix	0.26	1.0031	0.93	1.0038
Difference	0.00	0.00	0.01	0.00
Difference(%)	0.00	0.00	1.06	0.00

Πίνακας 4.7 Μέσο-ενεργό μήκος, μέση-ενεργή ταχύτητα και τιμή r για τους δύο τρόπους δειγματοληψίας

time	sec	hours	minutes	Diff	Diff(%)
One_Crack	21540.19	5.98	358.8	21457.43	99.62
One_Matrix	82.76	0.02	1.2		

Πίνακας 4.8 Χρόνος εκτέλεσης και σύγκρισή τους μεταξύ των δύο τρόπων δειγματοληψίας

trapped_cases	
One_Crack	70
One_Matrix	78

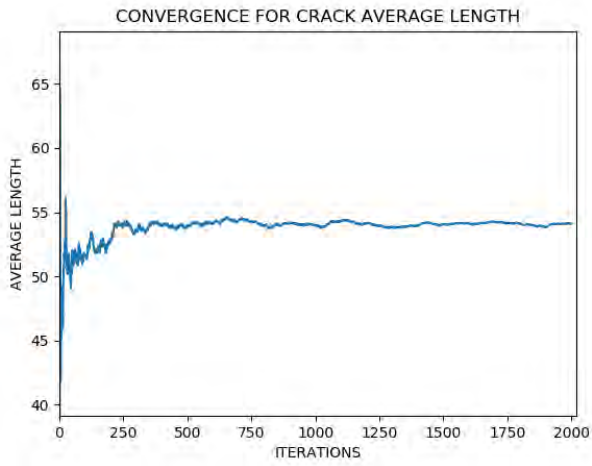
Πίνακας 4.9 Αριθμός φαινομένου παγίδευσης για τους δύο τρόπους δειγματοληψίας

### Σχολιασμός των Μεθόδων

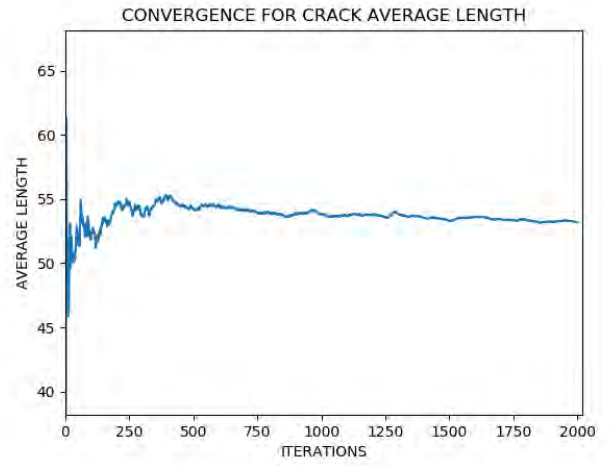
Από τα στοιχεία του πίνακα 4.7, παρατηρείται πως και για τις δύο μεθόδους δειγματοληψίας υπάρχει σύγκλιση των αποτελεσμάτων για τις 2000 επαναλήψεις. Επίσης, για κάθε εξεταζόμενο μέγεθος, η απόκλιση μεταξύ των δύο μεθόδων είναι αρκετά μικρή, με μέγιστη διαφορά αυτή του μέσου μήκους να υπολογίζεται στο 1.66%, στο ενεργό μήκος η διαφορά βρίσκεται στο 0.83%, ενώ για τις ταχύτητες η διαφορά να είναι σχεδόν μηδαμινή. Επομένως, μπορεί να θεωρηθεί πως τα αποτελέσματα των δύο μεθόδων δειγματοληψίας δεν διαφέρουν σημαντικά. Επιπρόσθετα και για τις δύο μεθόδους φαίνεται πως στις 2000 επαναλήψεις, οι τιμές των υπολογιζόμενων μεγεθών έχουν μικρές διακυμάνσεις. Συνεπώς ο αριθμός των επαναλήψεων μπορεί να οριστεί και για τις δύο μεθόδους στις 2000 επαναλήψεις. Για παράδειγμα, παρουσιάζονται στα διαγράμματα 4.4 → 4.9 η σύγκλιση του μέσου μήκους, της τυπικής απόκλισης του μέσου μήκους, αλλά και της τιμής  $r$  του κριτηρίου σύγκλισης Cauchy για τις δύο μεθόδους.

Βάση των στοιχείων του πίνακα 4.8, γίνεται αντιληπτό πως η δεύτερη μέθοδος, δηλαδή η μέθοδος στην οποία χρησιμοποιείται ένα δοκίμιο και σε αυτό διαδόσεις ρωγμών, είναι αρκετά πιο γρήγορη ως προς τον χρόνο εκτέλεσης. Πρόκειται για εξαιρετικά μεγάλη διαφορά, καθώς ο χρόνος εκτέλεσης του δεύτερου τρόπου δειγματοληψίας μειώνεται κατά 99.62%. Εάν λάβει υπόψιν κανείς τον αριθμό των παραμέτρων που διέπουν το μοντέλο, καθώς και ότι σε επόμενο βήμα η αύξηση των μεγεθών της μήτρας και των κρυστάλλων θα απαιτεί μεγαλύτερο υπολογιστικό χρόνο, γίνεται ξεκάθαρο πως η δεύτερη μέθοδος υπερισχύει αντί της πρώτης στο υπολογιστικό κόστος, ενώ και οι δύο τρόποι δειγματοληψίας δίνουν αποτελέσματα χωρίς σημαντικές διακυμάνσεις στις τιμές.

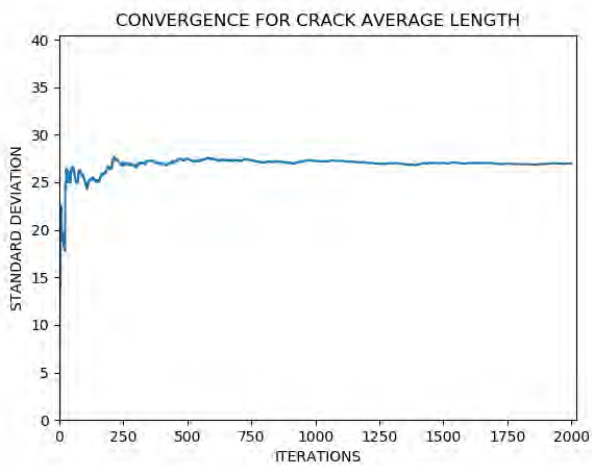
Παρατηρώντας τις τιμές του πίνακα 4.9, ακόμα και ο αριθμός εμφάνισης του φαινομένου της ρωγμής δεν διαφέρει σε μεγάλο βαθμό. Έτσι, η μέθοδος, όπου χρησιμοποιείται ένα δοκίμιο και σε αυτό πολλές διαδόσεις ρωγμής υιοθετήθηκε για την υλοποίηση της παρούσας εργασίας.



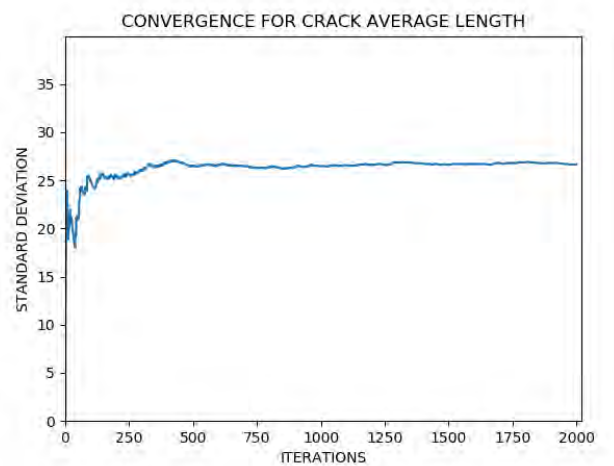
Διάγραμμα 4.4 Σύγκλιση μέσης τιμής μέσου μήκους για την πρώτη μέθοδο δειγματοληψίας



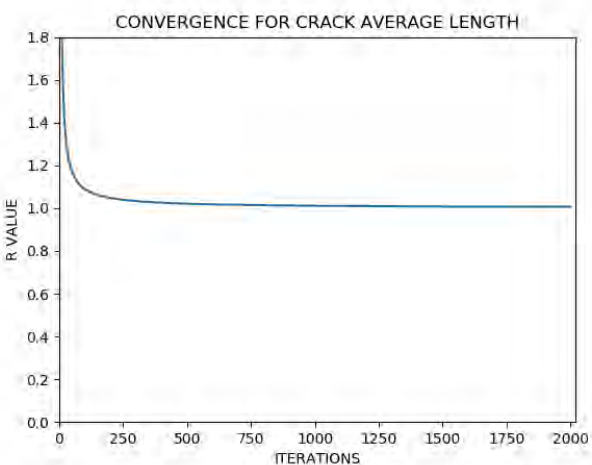
Διάγραμμα 4.5 Σύγκλιση μέσου μήκους για την δεύτερη μέθοδο δειγματοληψίας



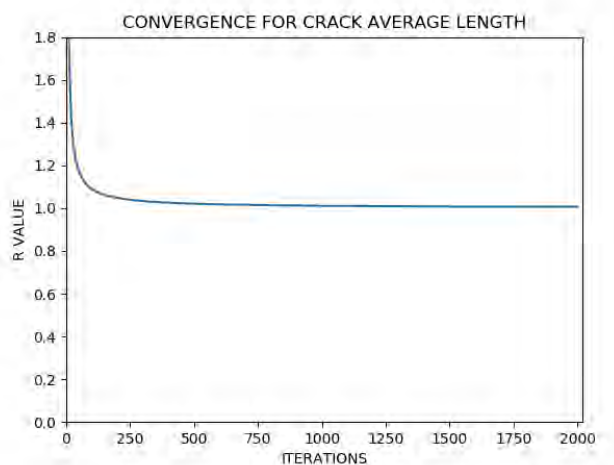
Διάγραμμα 4.6 Σύγκλιση τυπικής απόκλισης μέσου μήκους για την πρώτη μέθοδο δειγματοληψίας



Διάγραμμα 4.7 Σύγκλιση τυπικής απόκλισης μέσου μήκους για την δεύτερη μέθοδο δειγματοληψίας



Διάγραμμα 4.8 Τιμή κριτηρίου Cauchy του μέσου μήκους για την πρώτη μέθοδο δειγματοληψίας



Διάγραμμα 4.9 Τιμή κριτηρίου Cauchy του μέσου μήκους για την δεύτερη μέθοδο δειγματοληψίας

#### 4.4 ΕΛΕΓΧΟΣ ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΦΑΙΝΟΜΕΝΩΝ ΜΕΓΕΘΟΥΣ ΜΗΤΡΑΣ

Ένας επιπρόσθετος έλεγχος που πραγματοποιήθηκε αφορά την εξέταση της επίδρασης του μεγέθους της μήτρας στα αποτελέσματα. Δύο ήταν τα είδη στα οποία χωρίστηκε ο έλεγχος. Αρχικά, έγινε μια πρωταρχική εξέταση των αποτελεσμάτων για διαφορετικό μέγεθος δοκιμίου και αρχική ενέργεια  $E_{init} = N/2$ , όπου  $N$  το μέγεθος της μία διάστασης του εκάστοτε δοκιμίου, για την ίδια συγκέντρωση  $c$ . Ο δεύτερος έλεγχος, πρόκειται για την σύγκριση των αποτελεσμάτων διαφορετικού μεγέθους δοκιμίου, αλλά για την ίδια αρχική ενέργεια  $E_{init} = N/2$ . Καθώς ο δεύτερος έλεγχος είναι και ο πιο σημαντικός, συμπεριελήφθησαν διαφορετικές τιμές συγκέντρωσης και διαφορετικές τιμές για τον συντελεστή  $P_f$ , για να εξεταστεί εάν η επίδραση του μεγέθους της μήτρας επιδρά σημαντικά διαφορετικά για τις διάφορες τιμές συγκέντρωσης και του συντελεστή  $P_f$ .

Για τους ελέγχους χρησιμοποιήθηκαν δοκίμια με τα ακόλουθα χαρακτηριστικά:

Σύμβολο	Παράμετρος
$N$	300,500,700
$c(\%)$	5,20
$l$	30
$w$	2
$d$	1
$dl$	5
$E_{mat}$	1.0
$E_{gb}$	1.2,1.5
$E_{inc}$	1.5,2.0
$E_{init}$	$N/2, N = 300/2$
$KT$	0.7
$P_f$	0.5,0.9

Πίνακας 4.10 Τιμές παραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν για τους ελέγχους επίδρασης του μεγέθους της μήτρας

#### **Πρωταρχική εξέταση**

Παρουσιάζονται τα αποτελέσματα σύγκρισης της πρωταρχικής εξέτασης για συγκέντρωση  $c(\%) = 20$  και για συντελεστή κατευθυντικότητας  $P_f = 0.5, 0.9$ , αρχική ενέργεια  $E_{init} = N/2$ , και ενέργειες σύνδεσης  $E_{mat} = 1.0, E_{gb} = 1.2, E_{inc} = 1.5$  στους πίνακες 4.11 → 4.16 και στα διαγράμματα 4.10 → 4.13.



c(%) =20		Average Length	Effective Length	Average Velocity	Effective Velocity
P <sub>f</sub> = 0.5	N=300	23.92	136.26	0.17	0.97
	N=500	33.65	222.57	0.15	0.96
	N=700	42.03	310.66	0.13	0.96
P <sub>f</sub> = 0.9	N=300	32.2	134.65	0.23	0.96
	N=500	43.07	221.14	0.19	0.96
	N=700	52.65	309.44	0.16	0.95

Πίνακας 4.11 Τιμές των χαρακτηριστικών μεγεθών για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, c = 20%. P<sub>f</sub> = 0.5, 0.9, E<sub>init</sub> = N/2

Average Length								
c=20%	Difference in values (absolute)			Difference in values(%)			Mean Value	
Pf	300-500	300-700	500-700	300-500	300-700	500-700	300-700	500
0.5	9.73	18.11	8.38	40.68	75.71	24.9	32.98	33.65
0.9	10.87	20.45	9.58	33.76	63.51	22.24	42.43	43.07

Πίνακας 4.12 Σύγκριση των τιμών του μέσου μήκους για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, c = 20%, E<sub>init</sub> = N/2, P<sub>f</sub> = 0.5, 0.9

Effective Length								
c=20%	Difference in values (absolute)			Difference in values(%)			Mean Value	
Pf	300-500	300-700	500-700	300-500	300-700	500-700	300-700	500
0.5	86.31	174.4	88.09	63.34	127.99	39.58	223.46	222.57
0.9	86.49	174.79	88.3	64.23	129.81	39.93	222.05	221.14

Πίνακας 4.13 Σύγκριση των τιμών του ενεργού μήκους για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, c = 20%, E<sub>init</sub> = N/2, P<sub>f</sub> = 0.5, 0.9

Average Velocity								
c=20%	Difference in values (absolute)			Difference in values(%)			Mean Value	
Pf	300-500	300-700	500-700	300-500	300-700	500-700	300-700	500
0.5	0.02	0.04	0.02	11.76	23.53	13.33	0.15	0.15
0.9	0.04	0.07	0.03	-17.39	-30.43	-15.79	0.2	0.19

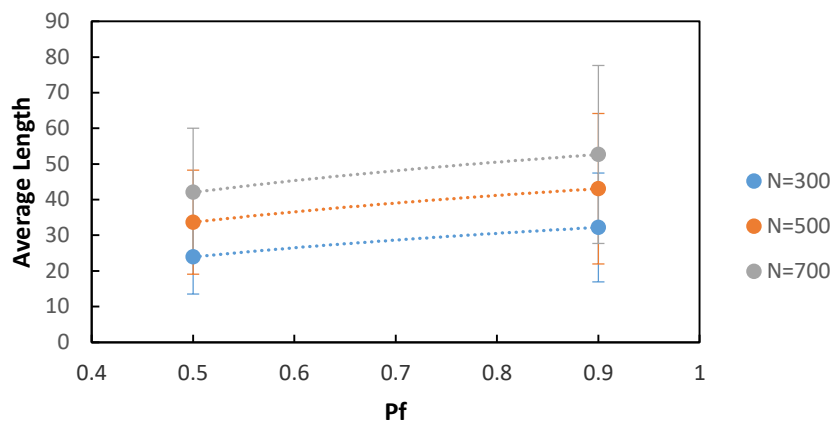
Πίνακας 4.14 Σύγκριση των τιμών της μέσης ταχύτητας για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, c = 20%, E<sub>init</sub> = N/2, P<sub>f</sub> = 0.5, 0.9

Effective Velocity								
c=20%	Difference in values (absolute)			Difference in values(%)			Mean Value	
Pf	300-500	300-700	500-700	300-500	300-700	500-700	300-700	500
0.5	0.01	0.01	0	1.03	1.03	0	0.97	0.96
0.9	0	0.01	0.01	0	1.04	1.04	0.96	0.96

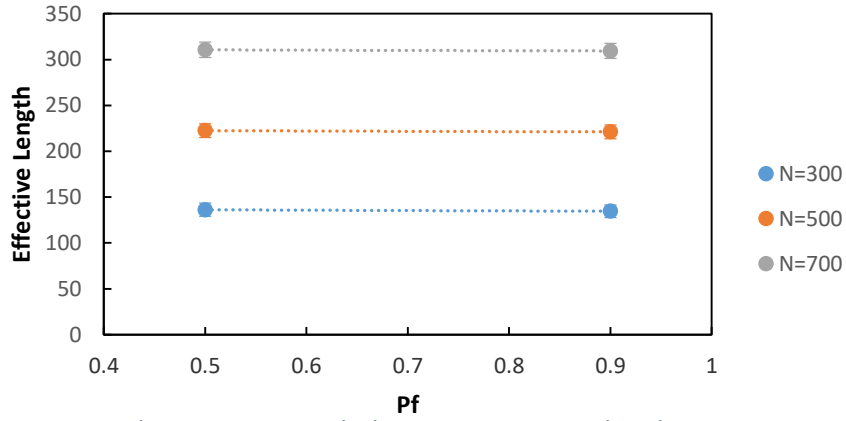
Πίνακας 4.15 Σύγκριση των τιμών της ενεργής ταχύτητας για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, c = 20%, E<sub>init</sub> = N/2, P<sub>f</sub> = 0.5, 0.9

Difference in E <sub>init</sub>		
Difference in N	Difference in Einit (absolute)	Difference in Einit(%)
300-500	100	66.67
300-700	200	133.33
500-700	100	40

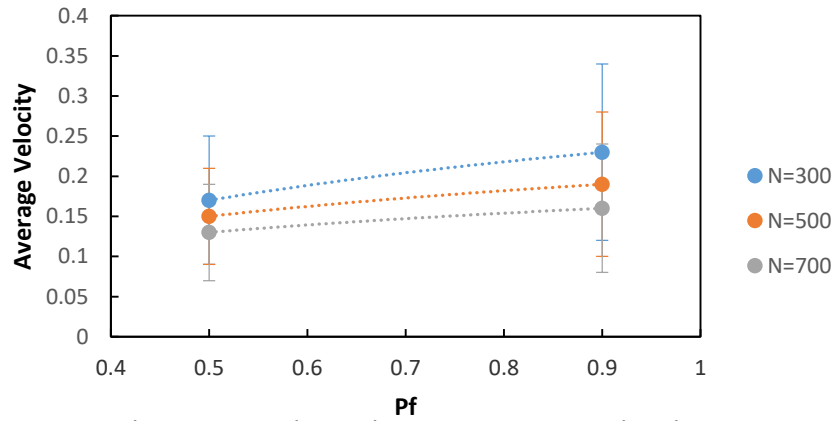
Πίνακας 4.16 Σύγκριση των τιμών αρχικής ενέργειας E<sub>init</sub> για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας



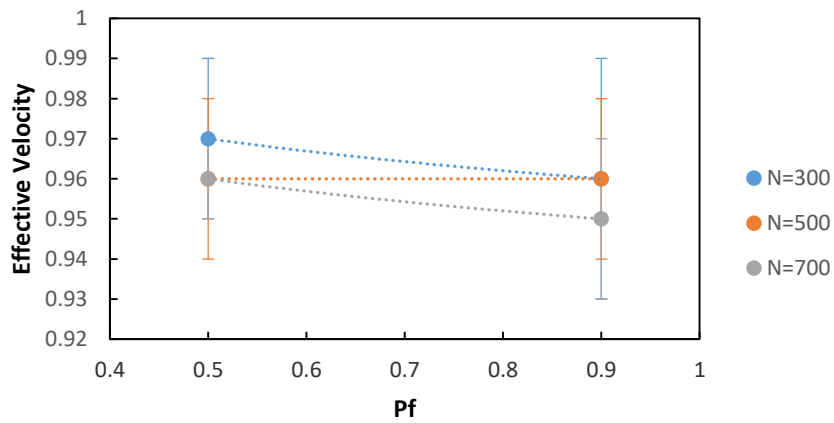
Διάγραμμα 4.10 Μέσο μήκος για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας,  $c = 20\%$ .  $P_f = 0.5, 0.9$ ,  $E_{init} = N/2$



Διάγραμμα 4.11 Ενεργό μήκος για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας,  $c = 20\%$ .  $P_f = 0.5, 0.9$ ,  $E_{init} = N/2$



Διάγραμμα 4.12 Μέση ταχύτητα για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας,  $c = 20\%$ .  $P_f = 0.5, 0.9$ ,  $E_{init} = N/2$



Διάγραμμα 4.13 Ενεργή ταχύτητα για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας,  $c = 20\%$ .  $P_f = 0.5, 0.9$ ,  $E_{init} = N/2$

### Σχολιασμός πρωταρχικής εξέτασης

Σε κάθε πίνακα, αναγράφεται για κάθε μέγεθος, η απόλυτη και ποσοστιαία διαφορά στις τιμές του εκάστοτε μεγέθους για τις διαφορετικές τιμές της παραμέτρου  $N$ , για τις τιμές του συντελεστή  $P_f$ . Στη στήλη Mean Value, αναγράφεται η μέση τιμή του εκάστοτε μεγέθους μεταξύ των δύο ακραίων τιμών του μεγέθους της μήτρας (300-700) και η τιμή για το εξεταζόμενο μέγεθος για την τιμή μεγέθους μήτρας (500). Στον πίνακα 4.16, αναγράφεται η διαφορά της απόλυτης και ποσοστιαίας αρχικής ενέργειας. Κάποιες τιμές ταυτίζονται για τις διαφορετικές τιμές της παραμέτρου  $N$ . Στο γεγονός αυτό οφείλεται η μορφή του διαγράμματος 4.13 ενεργής ταχύτητας.

Ένα πρώτο συμπέρασμα που εξάγεται από τις τιμές της στήλης Mean Value, είναι πως για κάθε μέγεθος και για κάθε τιμή του συντελεστή  $P_f$ , οι τιμές του αριθμητικού μέσου για τις δύο ακραίες τιμές της παραμέτρου  $N$ , είναι σχεδόν οι ίδιες με αυτές που προέκυψαν για την τιμή της παραμέτρου  $N = 500$ . Συνεπώς, τα οι τιμές των μεγεθών, αυξάνονται γραμμικά με την αύξηση του μεγέθους της μήτρας.

Μία ακόμα σημαντική παρατήρηση είναι πως για τις ποσοστιαίες διαφορές της αρχικής ενέργειας, όπως παρουσιάζονται στον πίνακα 4.16, οι ποσοστιαίες διαφορές του ενεργού μήκους οριακά ταυτίζονται. Γίνεται αντιληπτό επομένως, πως η ποσοστιαία αύξηση στην αρχική ενέργεια  $E_{init}$ , αντικατοπτρίζεται στην αντίστοιχη ποσοστιαία αύξηση του ενεργού μήκους.

### Κύριος έλεγχος

Μετά την εκτέλεση της πρωταρχικής εξέτασης, πραγματοποιήθηκε ο έλεγχος για την επιρροή του μεγέθους της μήτρας, για τα στοιχεία του πίνακα 4.10, για ενέργειες σύνδεσης  $E_{mat} = 1.0, E_{gb} = 1.5, E_{inc} = 2.0$  και για σταθερή τιμή αρχικής ενέργειας  $E_{init} = (N = 300)/2$ . Παρατίθενται οι πίνακες για κάθε περίπτωση, οι τιμές και οι ποσοστιαίες διαφορές για τα χαρακτηριστικά μεγέθη του μέσου-ενεργού μήκους και μέσης-ενεργής ταχύτητας.

c(%) = 5	Average Length		Effective Length		Average Velocity		Effective Velocity	
	mean	std	mean	std	mean	std	mean	std
P <sub>f</sub> = 0.5								
N=300	24.78	10.73	145.28	5.14	0.17	0.07	0.99	0.01
N=500	23.54	10.2	136.86	7.16	0.17	0.07	0.97	0.02
N=700	24.17	10.66	137.56	7.65	0.17	0.07	0.97	0.02
D(300-500)(%)	5	4.94	5.8	39.3	0	0	2.02	100
D(300-700)(%)	2.46	0.65	5.31	48.83	0	0	2.02	100
D(500-700)(%)	2.68	4.51	0.51	6.84	0	0	0	0

Πίνακας 4.17 Σύγκριση των τιμών των χαρακτηριστικών μεγεθών για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, c = 5%, P<sub>f</sub> = 0.5 και σταθερή τιμή αρχικής ενέργειας E<sub>init</sub>

c(%) = 5	Average Length		Effective Length		Average Velocity		Effective Velocity	
	mean	std	mean	std	mean	std	mean	std
P <sub>f</sub> = 0.9								
N=300	45.45	20.94	141.04	6.59	0.32	0.15	0.97	0.02
N=500	44.08	21.41	136.37	7.82	0.31	0.15	0.96	0.03
N=700	44.73	21.76	137.19	7.76	0.31	0.15	0.96	0.03
D(300-500)(%)	3.01	2.24	3.31	18.66	3.13	0	1.03	50
D(300-700)(%)	1.58	3.92	2.73	17.75	3.13	0	1.03	50
D(500-700)(%)	1.47	1.63	0.6	0.77	0	0	0	0

Πίνακας 4.18 Σύγκριση των τιμών των χαρακτηριστικών μεγεθών για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, c = 5%, P<sub>f</sub> = 0.9 και σταθερή τιμή αρχικής ενέργειας E<sub>init</sub>

c(%) = 20	Average Length		Effective Length		Average Velocity		Effective Velocity	
	mean	std	mean	std	mean	std	mean	std
P <sub>f</sub> = 0.5								
N=300	23.13	10.11	128.41	12.41	0.17	0.08	0.94	0.04
N=500	22.93	10.27	121.91	9.12	0.17	0.08	0.93	0.04
N=700	21.97	9.69	120.03	7.93	0.17	0.07	0.91	0.03
D(300-500)(%)	0.86	1.58	5.06	26.51	0	0	1.06	0
D(300-700)(%)	5.02	4.15	6.53	36.1	0	12.5	3.19	25
D(500-700)(%)	4.19	5.65	1.54	13.05	0	12.5	2.15	25

Πίνακας 4.19 Σύγκριση των τιμών των χαρακτηριστικών μεγεθών για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, c = 20%, P<sub>f</sub> = 0.5 και σταθερή τιμή αρχικής ενέργειας E<sub>init</sub>

c(%) = 20	Average Length		Effective Length		Average Velocity		Effective Velocity	
	mean	std	mean	std	mean	std	mean	std
P <sub>f</sub> = 0.9								
N=300	41.05	19.09	120.37	11.46	0.32	0.15	0.92	0.04
N=500	40.89	19.73	117.22	10.29	0.32	0.16	0.92	0.04
N=700	40.02	20.02	118.53	9.37	0.31	0.15	0.91	0.04
D(300-500)(%)	0.39	3.35	2.62	10.21	0	6.67	0	0
D(300-700)(%)	2.51	4.87	1.53	18.24	3.13	0	1.09	0
D(500-700)(%)	2.13	1.47	1.12	8.94	3.13	6.25	1.09	0

Πίνακας 4.20 Σύγκριση των τιμών των χαρακτηριστικών μεγεθών για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας, c = 20%, P<sub>f</sub> = 0.9 και σταθερή τιμή αρχικής ενέργειας E<sub>init</sub>

### Σχολιασμός κύριου ελέγχου

Στις στήλες με τον τίτλο *mean*, πρόκειται για τις τιμές του εκάστοτε μεγέθους, ενώ παρατίθενται και οι τιμές της τυπικής απόκλισης στις στήλες με τίτλο *std* (*standard deviation*). Γίνεται αντιληπτό με μια πρώτη ματιά, από τις μέσες τιμές για κάθε περίπτωση και για κάθε χαρακτηριστικό μέγεθος, πως δεν υπάρχει μεγάλη απόκλιση στις τιμές των μεγεθών για τα διαφορετικά μεγέθη μήτρας. Παρατηρώντας τις ποσοστιαίες διαφορές (τα πεδία των γραμμών που συμβολίζονται με  $D$  και τις τιμές της πλευράς της μήτρας), φαίνεται πως ουσιαστικά οι αποκλίσεις είναι μικρές. Η μέγιστη διαφορά στις τιμές ποσοστιαίας διαφοράς των μεγεθών εμφανίζεται για την περίπτωση του πίνακα 4.19 για συγκέντρωση 20% και συντελεστή κατευθυντικότητας  $P_f = 0.5$  στο ενεργό μήκος με τιμή 6.53%. Μία επιπρόσθετη παρατήρηση πρόκειται για τις ποσοστιαίες διαφορές στην τυπική απόκλιση. Οι μεγάλες τιμές τυπικής απόκλισης που εμφανίζονται στις ταχύτητες οφείλονται στο γεγονός ότι πρόκειται για αρκετά μικρές τιμές μέσης τιμής. Οι επόμενες μεγάλες τιμές τυπικής απόκλισης εμφανίζονται για το ενεργό μήκος, με τις μεγαλύτερες τιμές για κάθε περίπτωση, εκτός της περίπτωσης  $c = 5\%$ ,  $P_f = 0.9$  του πίνακα 4.18, όπου οι τιμές είναι περίπου ίδιες, να παρατηρούνται μεταξύ μητρών μεγέθους πλευράς  $N_1 = 300$ ,  $N_2 = 700$ . Σε μελλοντική μελέτη η παρατήρηση αυτή, μπορεί να αποτελέσει αφορμή για περαιτέρω εξέταση της φυσικής σημασίας της διαφοράς στην τυπική απόκλιση για τα στοιχεία αυτά.

### Συμπεράσματα ελέγχων

Βάση των αποτελεσμάτων των ελέγχων, φαίνεται πως η τιμή της αρχικής ενέργειας  $E_{init}$  παίζει σημαντικό ρόλο στα αποτελέσματα. Ανάλογα της αύξησης του μεγέθους της μήτρας είναι η αύξηση των χαρακτηριστικών φαινομένων. Φαίνεται πως για διαφορετικές συγκεντρώσεις, διαφορετικές τιμές του συντελεστή  $P_f$  αλλά για ίδια τιμή αρχικής ενέργειας  $E_{init}$ , το μέγεθος  $N^2$  της μήτρας δεν επηρεάζει σημαντικά τα αποτελέσματα. Βάση του συμπεράσματος αυτού, δύναται η χρήση μικρών σχετικά μητρών, κάτι που επιδρά στην μείωση του απαιτούμενου υπολογιστικού χρόνου. Για τις αναλύσεις επιλέχθηκε μέγεθος μήτρας  $N^2 = 500^2$ , καθώς αποτελεί μια σχετικά μεγάλη τιμή, αλλά ταυτόχρονα δεν απαιτείται μεγάλος υπολογιστικός χρόνος.

## 4.5 ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΜΗΚΩΝ ΚΑΙ ΤΑΧΥΤΗΤΩΝ ΡΩΓΜΗΣ

Για την εξαγωγή συμπερασμάτων ανάλογα τις διάφορες παραμέτρους του μοντέλου, υπολογίζονται τέσσερα χαρακτηριστικά μεγέθη, όπως ορίστηκαν στην ενότητα 4.1: το μέσο και ενεργό μήκος, η μέση και ενεργή ταχύτητα. Συνεπώς, θεωρήθηκε χρήσιμο να διεκπεραιωθεί μια πρώιμη στατιστική ανάλυση των μεγεθών αυτών. Μια εις βάθος στατιστική ανάλυση των μεγεθών αυτών, ίσως οδηγήσει σε συμπεράσματα σχετικά με την φύση του προβλήματος. Δεν αποτελεί όμως κύριος στόχος της παρούσας εργασίας. Μια εκτενέστερη μελέτη μπορεί να αποτελέσει μέρος μελλοντικής εργασίας.

### **Έλεγχος κατανομής**

Πρωταρχικό ερώτημα που εγείρεται είναι εάν οι τιμές των εξεταζόμενων μεγεθών, ακολουθούνε κάποια κατανομή. Τα ιστογράμματα δίνουν μια αίσθηση της πυκνότητας της υποκείμενης κατανομής των δεδομένων και βάση αυτών δημιουργείται η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας. Για τον λόγο αυτό, αρχική ενέργεια ήταν η δημιουργία ιστογραμμάτων και των καμπύλων συχνοτήτων για κάθε μέγεθος.

### **Ασυμμετρία και κύρτωση κατανομής**

Δύο σημαντικοί παράμετροι στην Στατιστική είναι η ασυμμετρία και η κύρτωση μιας κατανομής (Skewness and Kurtosis).

Η καμπύλη της κανονικής κατανομής είναι συμμετρική γύρω από την αριθμητική μέση τιμή. Η τιμή της Ασυμμετρίας υποδεικνύει τον βαθμό παραμόρφωσης από την κανονική κατανομή. Υπάρχουν δύο είδη ασυμμετρίας: η θετική και η αρνητική. Στην περίπτωση θετικής συμμετρίας, η καμπύλη της κατανομής παρουσιάζει μια ουρά στο δεξί μέρος και ο μέσος όρος είναι μεγαλύτερος από τη διάμεσο και την επικρατούσα τιμή. Για την περίπτωση αρνητικής ασυμμετρίας ισχύουν τα αντίστροφα. Δύο παραδείγματα θετικής και αρνητικής ασυμμετρίας δίνονται στην εικόνα 4.1. Για τον υπολογισμό της ασυμμετρίας δίνεται η εξίσωση 4.4 γνωστή ως συντελεστής ασυμμετρίας Fisher-Pearson. Βάση της τιμής του συντελεστή ασυμμετρίας, μια κατανομή χαρακτηρίζεται ως εξής:

- Εάν η τιμή του συντελεστή είναι μικρότερη του  $-1$  ή μεγαλύτερη του  $1$ , η κατανομή είναι αρκετά ασύμμετρη
- Εάν είναι μεταξύ  $-1$  και  $-0.5$  ή μεταξύ  $0.5$  και  $1$ , η κατανομή είναι μέτρια ασύμμετρη
- Εάν είναι μεταξύ  $-0.5$  και  $0.5$ , η κατανομή είναι προσεγγιστικά συμμετρική

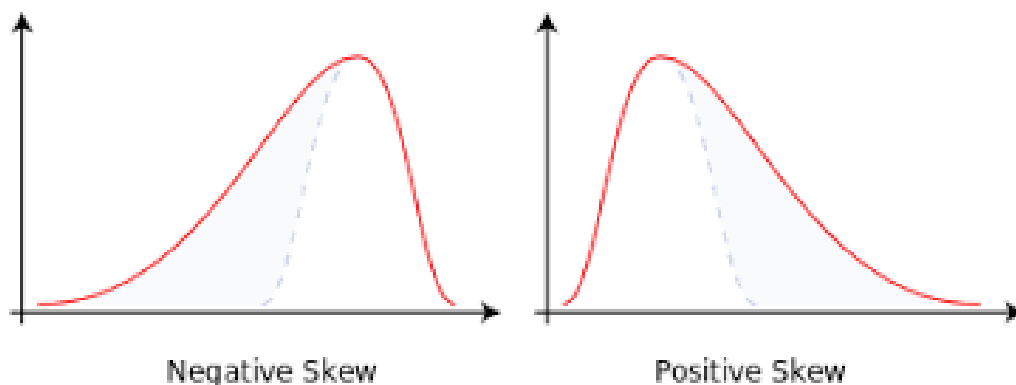
Πολλά λογισμικά χρησιμοποιούν την εξίσωση 4.5 που αποτελεί την προσαρμοσμένο συντελεστή ασυμμετρίας Fisher-Pearson. Η προσαρμογή γίνεται ως προς το μέγεθος του δείγματος  $N$ . Όσο αυξάνεται η τιμή του δείγματος  $N$ , ο συντελεστής προσαρμογής προσεγγίζει τη μονάδα.

$$g_1 = \frac{\sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^3 / N}{s^3} \quad (4.4)$$

$$G_1 = \frac{\sqrt{N * (N - 1)}}{N - 2} * g_1 \quad (4.5)$$

όπου:

- $N \rightarrow$  το μέγεθος των δεδομένων
- $\bar{Y} \rightarrow$  ο μέσος όρος
- $Y_{i,i=1 \rightarrow N} \rightarrow$  οι τιμές των δεδομένων
- $s \rightarrow$  η τυπική απόκλιση



Εικόνα 4.1 Παράδειγμα αρνητικής και θετικής ασυμμετρίας (wikipedia,Skewness,2008)

Η κύρτωση, όπως και η ασυμμετρία, περιγράφει το σχήμα της καμπύλης συχνοτήτων πυκνότητας πιθανότητας και αποτελεί ένα μέτρο κορύφωσης ή επιπεδοποίησης της κατανομής συχνοτήτων. Η μορφή μιας κατανομής μπορεί να προσεγγιστεί ως μία εκ των τριών περιπτώσεων κύρτωσης:

- 1) Λεπτόκυρτη, όταν παρουσιάζεται μια σχετικά υψηλή κορυφή.
- 2) Πλατύκυρτη, όταν η κορυφή είναι σχετικά χαμηλή και η κατανομή επίπεδη.
- 3) Μεσόκυρτη, όταν πρόκειται για μια ενδιάμεση περίπτωση της λεπτόκυρτης και πλατύκυρτης. Η κανονική κατανομή αποτελεί ένα τέτοιο παράδειγμα.

Μέσω της κύρτωσης δίνεται η πληροφορία για το εάν η κατανομή των δεδομένων έχει βαριά ή λεπτή ουρά (heavy or light tailed) σε σύγκριση με την κανονική κατανομή. Με άλλα λόγια αποτελεί δείκτη για την εμφάνιση κάποιες ακραίων τιμών στις «ουρές» της κατανομής. Οι αρνητικές τιμές για την κύρτωση υποδεικνύουν πως πρόκειται για πλατύκυρτη κατανομή, ενώ οι θετικές για λεπτόκυρτη. Για την κανονική κατανομή η κύρτωση υπολογίζεται κοντά στον αριθμό 3. Για τον υπολογισμό της χρησιμοποιείται η εξίσωση 4.6. Ένας εναλλακτικός ορισμός δίνεται στην εξίσωση 4.7, από την οποία αφαιρείται ο αριθμός 3 της κανονικής κατανομής και υποδεικνύει την διαφορά στην κυρτότητα μεταξύ της κατανομής των δεδομένων που μελετώνται σε σχέση με την αντίστοιχη κανονική.

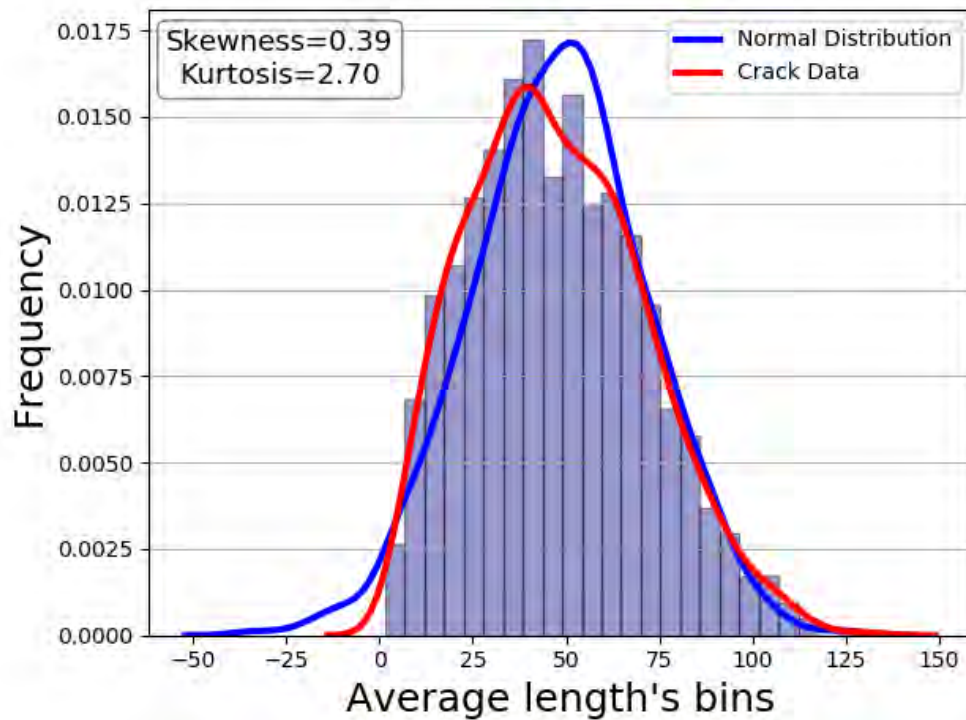
$$kurtosis = \frac{\sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^4 / N}{s^4} \quad (4.6)$$

$$kurtosis = \frac{\sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^4 / N}{s^4} - 3 \quad (4.7)$$

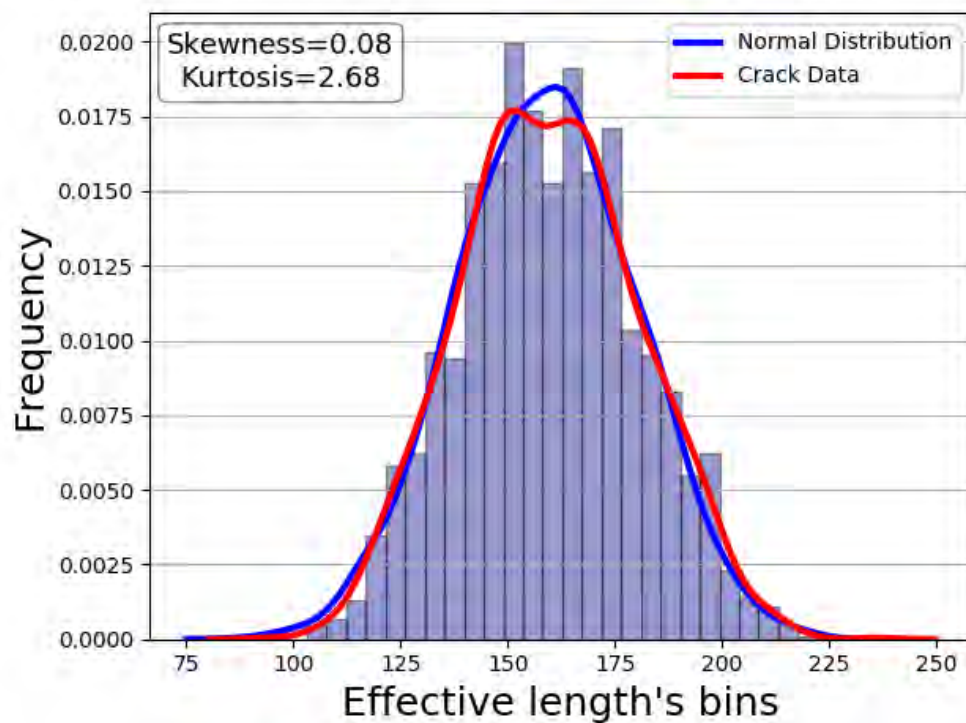
Ενδεικτικά παρουσιάζονται τα ιστογράμματα, με τις καμπύλες των κατανομών με κόκκινο χρώμα, ενώ με μπλε οι καμπύλες των δεδομένων εάν ακολουθούσαν την κανονική κατανομή και οι τιμές της ασυμμετρίας και της κύρτωσης για το μέσο και ενεργό μήκος και μέση και ενεργή ταχύτητα για ψηφιακό δοκίμιο με τα χαρακτηριστικά:  $N^2 = 500^2, c = 20\%, l = 30, w = 2, dl = 5, E_{mat} = 1.0, E_{gb} = 2.0, E_{inc} = 3.0, E_{init} = 500/2$  και για τις εξής παραμέτρους για την διάδοση της



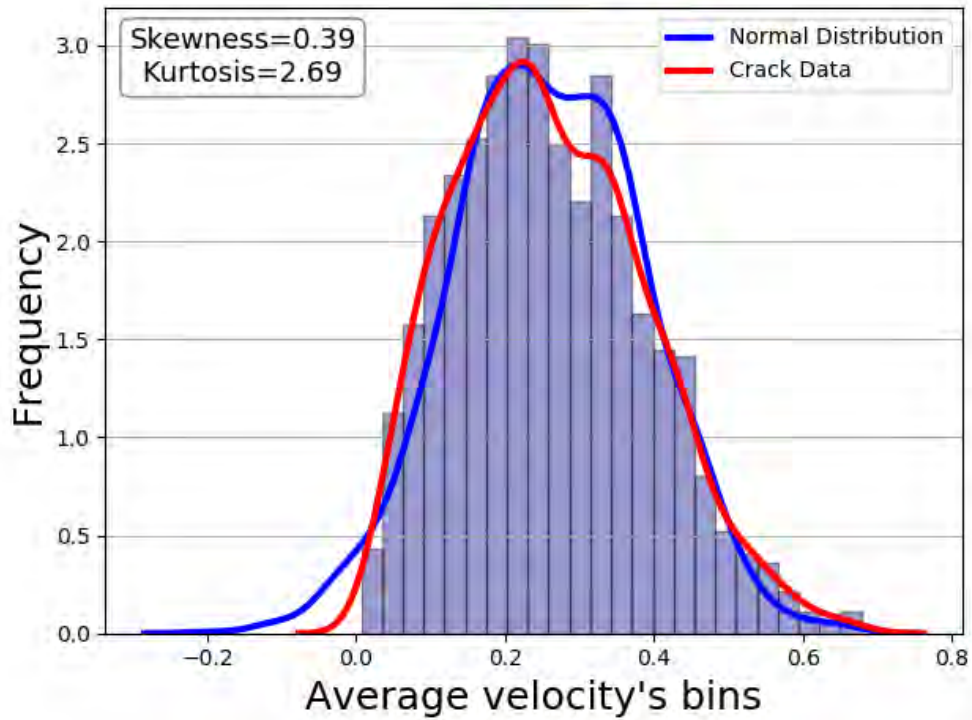
ρωγμής  $P_f = 0.9, KT = 1.0$ . Οι τιμές της ασυμμετρίας παρουσιάζονται βάση της εξίσωσης 4.4, ενώ της κύρτωσης βάση της 4.6.



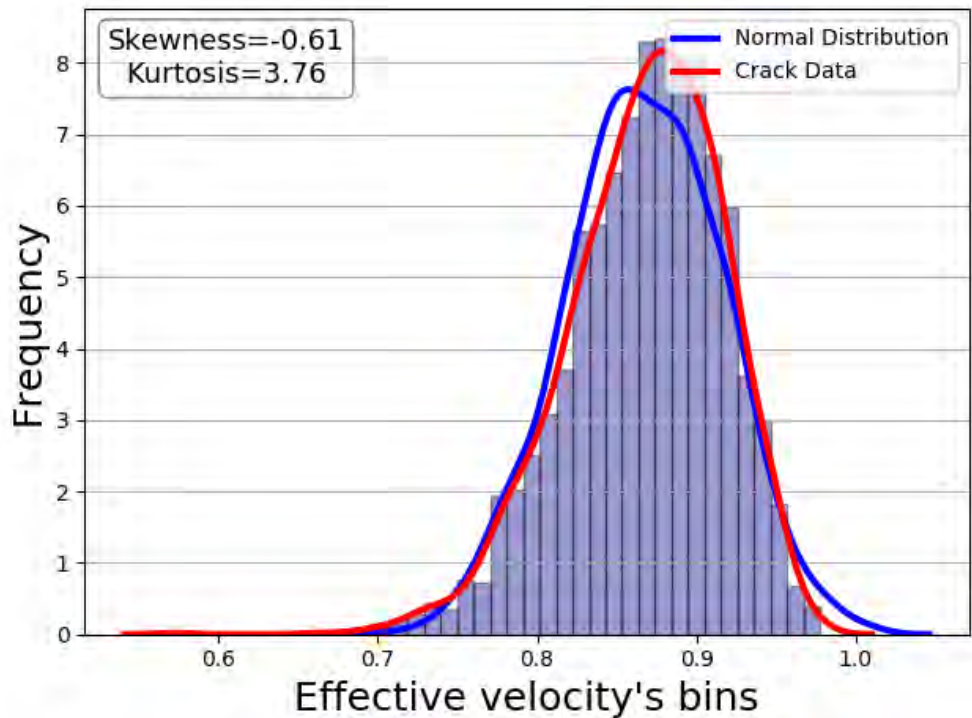
Διάγραμμα 4.14 Ιστόγραμμα και καμπύλες συχνοτήτων μέσου μήκους ρωγμής



Διάγραμμα 4.15 Ιστόγραμμα και καμπύλες συχνοτήτων ενεργού μήκους ρωγμής



Διάγραμμα 4.16 Ιστόγραμμα και καμπύλες συχνότητων μέσης ταχύτητας ρωγμής



Διάγραμμα 4.17 Ιστόγραμμα και καμπύλες συχνότητων ενεργής ταχύτητας ρωγμής

### Σχολιασμός ιστογραμμάτων

Παρατηρώντας τα διαγράμματα 4.14, 4.15, 4.16, 4.17, φαίνεται πως οι καμπύλες συχνοτήτων, των δεδομένων της ρωγμής και των αντίστοιχων δεδομένων εάν ακολουθούσαν την κανονική κατανομή, παρουσιάζουν μικρές διαφορές. Η ένδειξη ότι πρόκειται για προσεγγιστικά κανονική κατανομή ενισχύεται από τις τιμές της ασυμμετρίας και της κύρτωσης και τα τέσσερα μεγέθη της ρωγμής. Για το ενεργό μήκος (effective length) η τιμή της ασυμμετρίας είναι εξαιρετικά κοντά στο μηδέν (0.08), συνεπώς πρόκειται για αρκετά συμμετρική καμπύλη. Η κύρτωση υπολογίζεται στο 2.68, παρατηρώντας μια διαφορά μεταξύ της κορυφής της καμπύλης των δεδομένων (κόκκινη) και της κορυφής της καμπύλης των δεδομένων που ακολουθούν την κανονική κατανομή (μπλε). Από τα παραπάνω, μπορεί κανείς να ισχυριστεί πως η κατανομή είναι προσεγγιστικά κανονική. Παρόμοιες παρατηρήσεις εξάγονται και από το ιστόγραμμα μέσου μήκους. Παρατηρείται μεγαλύτερη τιμή ασυμμετρίας. Δίνοντας έμφαση στις τιμές του μέσου μήκους, παρατηρείται πως είναι πιο κοντά προς το μηδέν. Το μήκος αποτελεί μία παράμετρο που λαμβάνει μη αρνητικές τιμές. Συνεπώς, είναι αναμενόμενο να υπάρχει μια ασυμμετρία, καθώς το διάγραμμα βρίσκεται πιο κοντά στον άξονα  $x = 0$ . Όμοια αποτελέσματα εξάγονται από το διάγραμμα 4.16 για την μέση ταχύτητα.

Με μια πρώτη ματιά, φαίνεται πως στο διάγραμμα 4.17 παρουσιάζονται κάποιες διαφοροποιήσεις ως προς την μορφή των καμπυλών. Παρατηρώντας τις τιμές της ασυμμετρίας και της κύρτωσης, παρατηρείται πως για την ενεργή ταχύτητα παρουσιάζεται αρνητική ασυμμετρία, ενώ και η τιμή της κύρτωσης είναι μεγαλύτερη του 3, κάτι που δεν συμβαίνει για τα υπόλοιπα τρία μεγέθη. Βάση του ορισμού της ασυμμετρίας, εφόσον η τιμή της είναι μεταξύ  $-1$  και  $-0.5$  ( $= -0.61$ ), η κατανομή είναι μέτρια ασύμμετρη. Συνεπώς, ο μέσος όρος των τιμών στην αριστερή ουρά είναι μικρότερος από τον μέσο όρο. Όντως, η αλλαγή στην ασυμμετρία οφείλεται στο γεγονός, ότι για την ενεργή ταχύτητα, εμφανίζεται σε μεγάλο βαθμό μια συγκεκριμένη τιμή (0.87) και κοντινές σε αυτήν τιμές σε σχέση με άλλες τιμές ενεργής ταχύτητας. Για τον λόγο αυτόν, εμφανίζεται μια κορυφή υψηλότερη της αντίστοιχης της κανονικής κατανομής και η καμπύλη ως «συμπιεσμένη» από αριστερά και δεξιά. Πρόκειται για λεπτόκυρτη κατανομή.

Οι διαφοροποιήσεις στο διάγραμμα 4.17 είναι αρκετά μικρές και ίσως με τη χρήση διαφορετικών ορίων στις κλάσεις, να υπήρξε μια εξομάλυνσή τους. Είναι ασφαλές να θεωρήσει κανείς πως πρόκειται για προσεγγιστικά κανονική κατανομή.

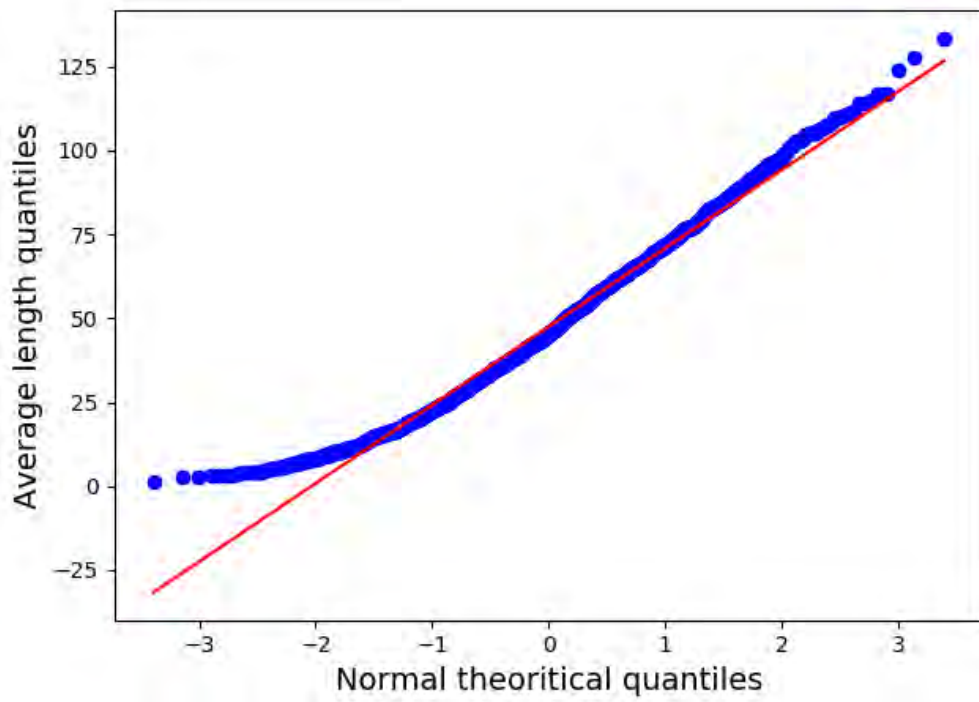
Για την ενίσχυση των παραπάνω παρατηρήσεων, εισήχθησαν επιπρόσθετοι έλεγχοι κανονικότητας. Για τα αποτελέσματα κάθε εξεταζόμενου μεγέθους, δημιουργούνται τα κανονικά διαγράμματα QQ (quantile-quantile), ενώ γίνεται και χρήση των Kolmogorov–Smirnov, z test.

### **Διαγράμματα QQ**

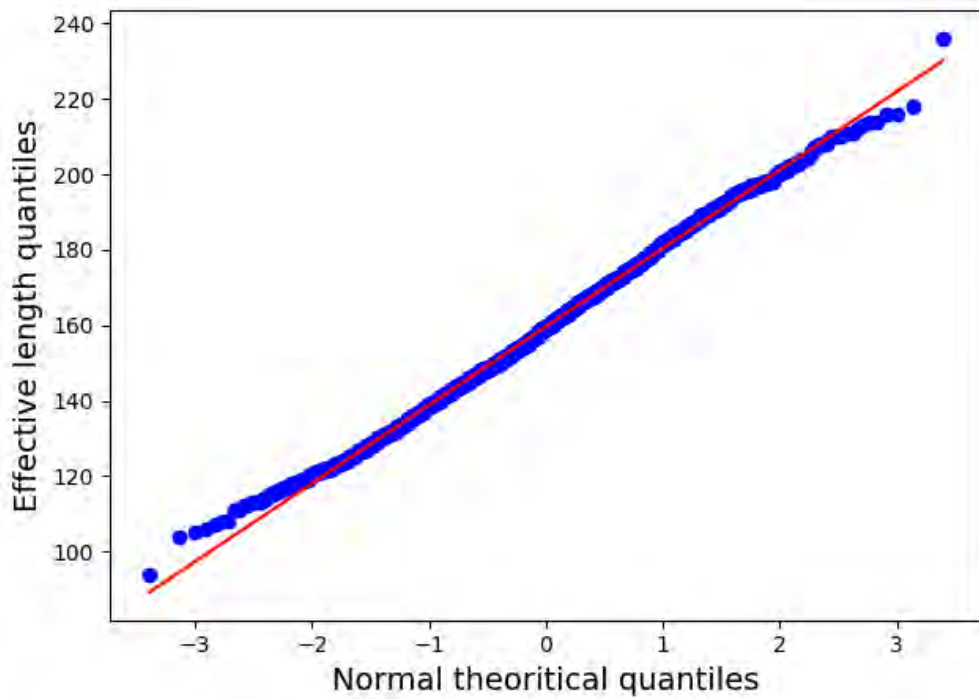
Σε σύγκριση με τα ιστογράμματα, τα οποία παρέχουν μια άμεση οπτική εκτίμηση της κατανομής μιας συνεχούς μεταβλητής, στα κανονικά διαγράμματα Q-Q απεικονίζονται οι τιμές μιας μεταβλητής σε σχέση με τις αναμενόμενες τιμές, οι οποίες θα προκύπταν εάν η μεταβλητή ακολουθούσε μια συγκεκριμένη κατανομή. Πρόκειται για την σύγκριση μεταξύ δύο κατανομών, η οποία βασίζεται στα ποσοστημόρια ή στις εκτιμήσεις των ποσοστημορίων για τις κατανομές αυτές. Η απλή περίπτωση είναι όταν πρόκειται για σύγκριση δύο δειγμάτων ίδιου μεγέθους. Για την παρούσα διερεύνηση, πρόκειται για την περίπτωση αυτή, καθώς εξετάζεται η υπόθεση εάν τα αποτελέσματα για τα μεγέθη του μήκους και ταχύτητας της ρωγμής ακολουθούν την κανονική κατανομή. Κατασκευάζεται δηλαδή βάση του μέσου όρου και της τυπικής απόκλισης των δεδομένων αυτών μια κανονική κατανομή και συγκρίνεται με αυτή που προκύπτει από τα δεδομένα ως έχουν.

Εάν οι τιμές της μεταβλητής ακολουθούν την κανονική κατανομή, τότε τα σημεία που έχουν τοποθετηθεί στο διάγραμμα βρίσκονται αρκετά κοντά στην ευθεία γραμμή. Το γεγονός αυτό δηλώνει την ύπαρξη κανονικότητας, ενώ σε αντίθετη περίπτωση όπου οι τιμές της συνεχούς μεταβλητής αποκλίνουν από την ευθεία αυτή, πρόκειται για ύπαρξη ασυμμετρίας. Με άλλα λόγια, πρόκειται για ένα συγκριτικό γράφημα ποσοστιαίων σημείων, μεταξύ της κατανομής των δεδομένων που εξετάζονται και μιας υποτιθέμενης, εδώ κανονικής, κατανομής.

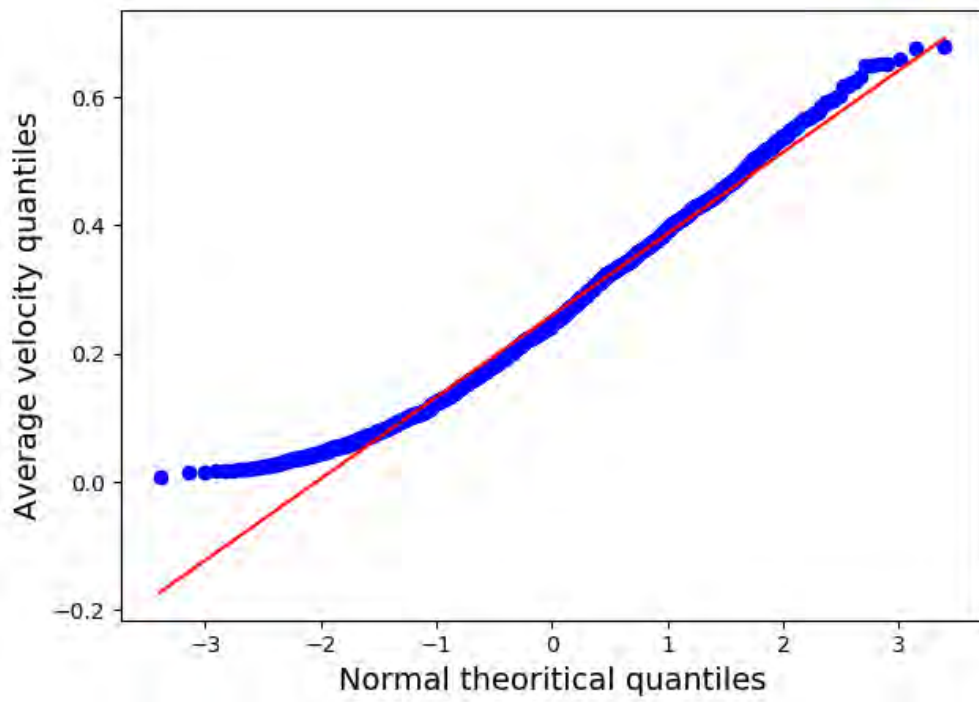
Για τα χαρακτηριστικά που αναγράφηκαν για τα διαγράμματα 4.18-4.21, παρατίθενται τα κανονικά διαγράμματα Q-Q για το μέσο-ενεργό μήκος και την μέση-ενεργή ταχύτητα.



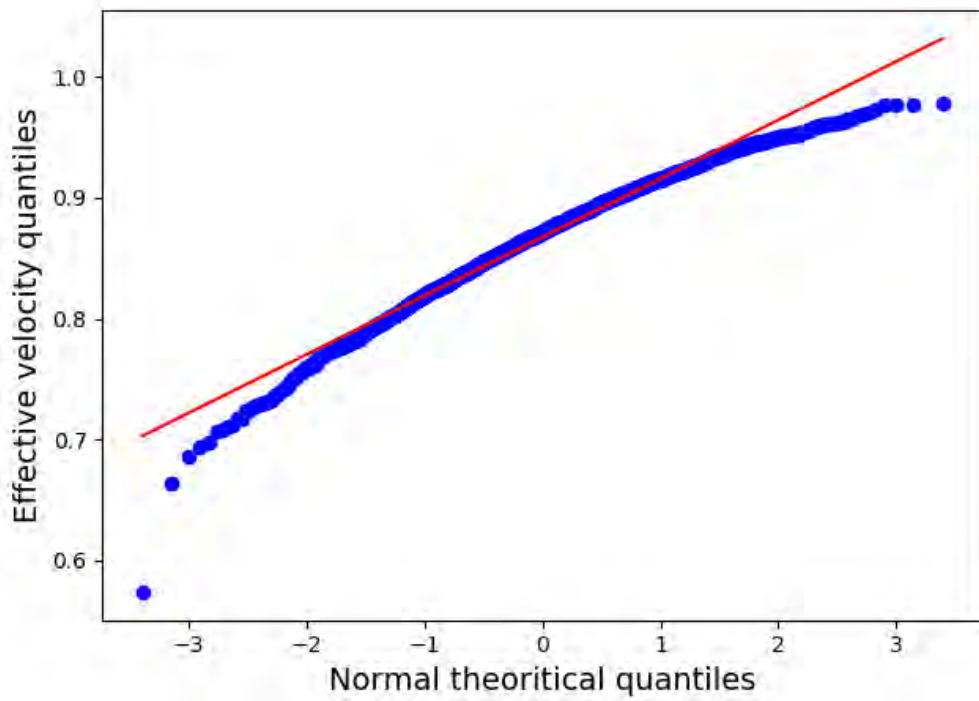
Διάγραμμα 4.18 Κανονικό διάγραμμα για το μέσο μήκος



Διάγραμμα 4.19 Κανονικό διάγραμμα για το ενεργό μήκος



Διάγραμμα 4.20 Κανονικό διάγραμμα για τη μέση ταχύτητα



Διάγραμμα 4.21 Κανονικό διάγραμμα για την ενεργή ταχύτητα

## Σχολιασμός κανονικών διαγραμμάτων QQ

Παρατηρώντας τα κανονικά διαγράμματα, αρχικά φαίνεται πως για το μέσο μήκος (4.18) και την μέση ταχύτητα (4.20) είναι παρόμοια. Αρχικά υπάρχει απόκλιση των σημείων από την ευθεία γραμμή της κανονικής κατανομής, η οποία μειώνεται και μετά το σημείο  $-2$  η απόσταση γίνεται ελάχιστη. Στο διάγραμμα 4.19 για το ενεργό μήκος, όλα τα σημεία βρίσκονται πάνω στην ευθεία της κανονικής κατανομής. Διαφοροποίηση συγκριτικά με τα προαναφερθέντα διαγράμματα παρουσιάζει το κανονικό διάγραμμα για την ενεργή ταχύτητα. Στην αρχή και τέλος των τιμών του ημιάξονα  $0x$  υπάρχει απόκλιση των σημείων από την ευθεία γραμμή. Από τις παραπάνω παρατηρήσεις, προκύπτουν τα συμπεράσματα που παρουσιάστηκαν στον σχολιασμό των ιστογραμμάτων. Τα σημεία για κάθε εξεταζόμενο μέγεθος βρίσκονται αρκετά κοντά στην ευθεία γραμμή, εκτός από κάποιες περιοχές. Ενισχύεται βάση των διαγραμμάτων αυτών, η πεποίθηση ότι τα υπό εξέταση μεγέθη, ακολουθούν προσεγγιστικά την κανονική κατανομή.

## z-test

Τα τεστ στην στατιστική ποικίλλουν (π.χ. f test, t test). Για την παρούσα εργασία κρίνεται ως καταλληλότερο το z-test. Η επιλογή αυτή προκύπτει, καθώς πληρούνται τα ακόλουθα κριτήρια:

- Τα μεγέθη των δειγμάτων είναι μεγαλύτερα της τιμής 30.
- Τα σημεία των δεδομένων που προκύπτουν είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους. Μια τιμή ενός εξεταζόμενου μεγέθους (π.χ. της μέσης ταχύτητας), δεν επηρεάζει κάποιο από τα υπόλοιπα αποτελέσματα
- Τα δεδομένα θα πρέπει να είναι κατανομημένα βάση της κανονικής κατανομής, για το οποίο υπάρχει ήδη η ένδειξη βάση της ανάλυσης των ιστογραμμάτων, των καμπύλων συχνοτήτων, της ασυμμετρίας και κύρτωσης, καθώς και από τα κανονικά διαγράμματα QQ
- Τα δεδομένα θα πρέπει να επιλέγονται τυχαία από έναν πληθυσμό, κάτι που ισχύει για τα αποτελέσματα κάθε μεγέθους.

Επιλέγοντας επίπεδο σημαντικότητας  $\alpha = 0.05$ , ορίστηκε ως μηδενική υπόθεση εάν προκύψει τιμή  $p_{value}$  μεγαλύτερη του  $\alpha$ , τα δύο δείγματα δεν διαφέρουν

σημαντικά. Το πρώτο δείγμα είναι τα δεδομένα του εκάστοτε εξεταζόμενου μεγέθους και το δεύτερο, τα δεδομένα που προκύπτουν από κανονική κατανομή, η οποία έχει τιμές μέσου όρου και τυπικής απόκλισης τις τιμές του πρώτου δείγματος.

$\alpha = 0.05$	$p\_value$	$p\_value > \alpha$
AVERAGE_LENGTH	0.7614	TRUE
EFFECTIVE_LENGTH	0.7879	TRUE
AVERAGE_VELOCITY	0.854	TRUE
EFFECTIVE_VELOCITY	0.0958	TRUE

Πίνακας 4.21 P-values για z-test για τα χαρακτηριστικά μεγέθη

Παρατηρώντας τα αποτελέσματα του πίνακα 4.21, γίνεται κατανοητό πως η τιμή  $p\_value$  είναι μεγαλύτερη του  $\alpha$ , για κάθε μέγεθος. Συνεπώς, δεν δύναται να απορριφθεί η μηδενική υπόθεση και έτσι προκύπτει το συμπέρασμα ότι πρόκειται για κανονική κατανομή και για τα τέσσερα εξεταζόμενα μεγέθη.

### **Kolmogorov-Smirnov test**

Για την περαιτέρω εξέταση των δεδομένων, επιλέχθηκε να χρησιμοποιηθεί το τεστ Kolmogorov-Smirnov. Το τεστ αυτό πρόκειται για έναν έλεγχο, μη παραμετρικό, ο οποίος χρησιμοποιείται για την εξέταση του κατά πόσο καλά προσαρμόζεται ένα τυχαίο δείγμα σε μια δεδομένη κατανομή. Ο έλεγχος αυτός βασίζεται στην διαφορά της εμπειρικής συνάρτησης κατανομής που προέρχεται από το δείγμα και της αναμενόμενης συνάρτησης κατανομής υπό μία υπόθεση. Η υπόθεση αυτή μπορεί να είναι της κανονικότητας ή μιας μηδενικής υπόθεσης  $H_0$ , η οποία μπορεί να είναι μία εκ των: Ομοιόμορφη, Poisson, Exponential ή Κανονική. Αν η διαφορά μεταξύ της εμπειρικής συνάρτησης κατανομής από το δείγμα και αυτής που αναμένεται από ένα δοσμένο μέγεθος δείγματος είναι μεγάλη, τότε η θεωρητική κατανομή απορρίπτεται.

Για διάστημα εμπιστοσύνης 95% (βαθμός εμπιστοσύνης  $1 - \alpha = 0.95$ ), υπολογίζονται οι τιμές  $p\_value$ ,  $D_{critical}$ ,  $D_{statistic}$  για το μέσο-ενεργό μήκος και μέση-ενεργή ταχύτητα. Η τιμή του  $D_{critical}$  για μεγάλο αριθμό δειγμάτων υπολογίζεται βάση της εξίσωσης 4.8.

$$D_a = c(a) \sqrt{\frac{n_1 + n_2}{n_1 n_2}} \quad (4.8)$$



Όπου:

- $n_1, n_2 \rightarrow$  τα μεγέθη των δειγμάτων
- $c(a) \rightarrow$  συντελεστής που δίνεται από πίνακες της βιβλιογραφίας, βάση της τιμής  $a$  που έχει επιλεχθεί

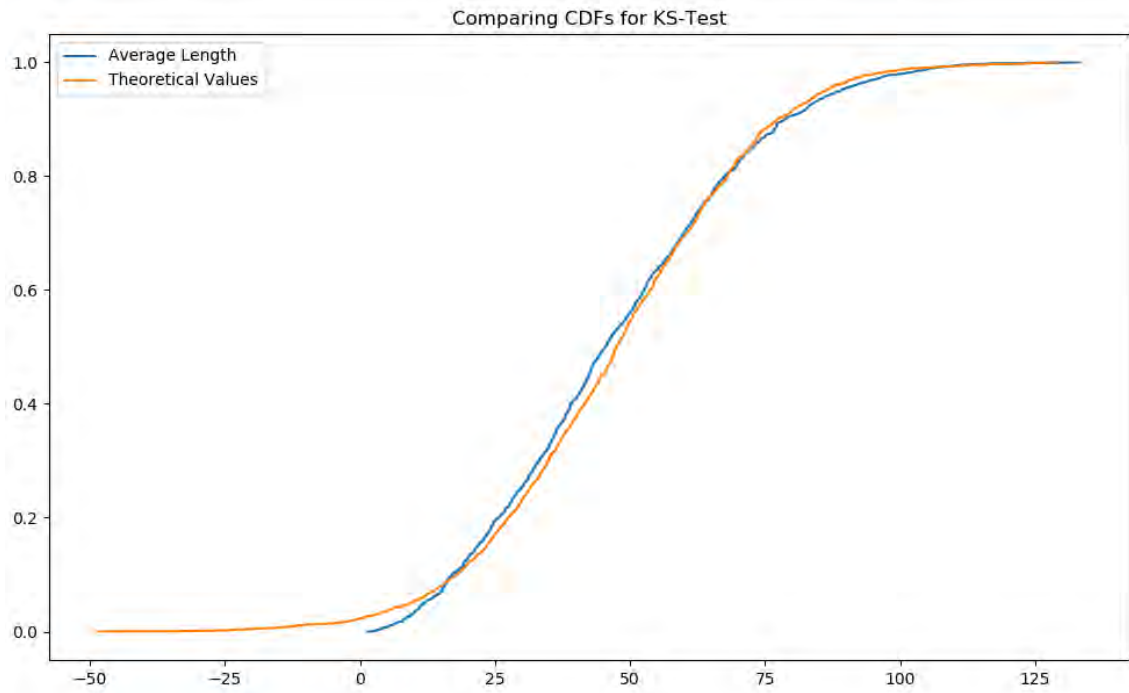
a	0.1	0.05	0.025	0.01	0.005	0.001
c(a)	1.22	1.36	1.48	1.63	1.73	1.95

Πίνακας 4.22 Τιμές του συντελεστή  $c(a)$  βάση της τιμής  $a$

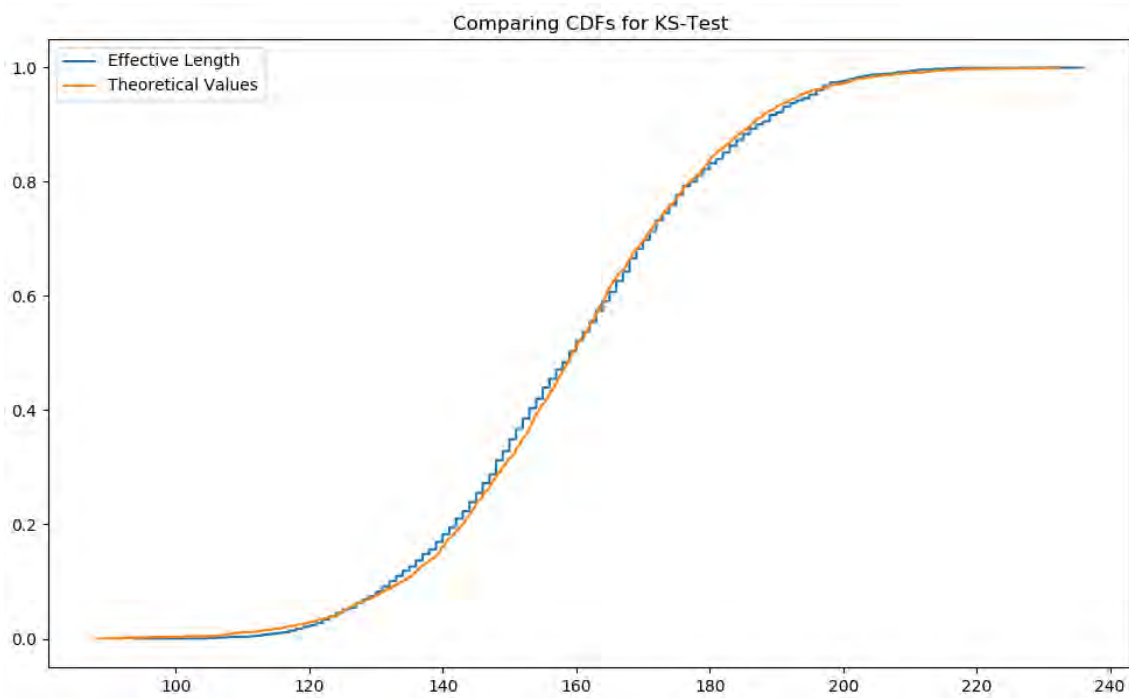
Γίνεται η σύγκριση μεταξύ των τιμών  $p_{value} - a$  και  $D_{statistic} - D_{critical}$ . Στον πίνακα 4.23 παρουσιάζονται οι τιμές για το συγκεκριμένο τεστ ενώ παρατίθενται και τα διαγράμματα σύγκρισης των αθροιστικών συναρτήσεων κατανομής μεταξύ του εκάστοτε εξεταζόμενου μεγέθους και της αντίστοιχης κανονικής κατανομής που έχει τιμές μέσου όρου και τυπικής απόκλισης αυτές του εξεταζόμενου μεγέθους.

a=0.05	AVERAGE_LENGTH		EFFECTIVE_LENGTH		AVERAGE_VELOCITY		EFFECTIVE_VELOCITY	
D_critical	p_value	D	p_value	D	p_value	D	p_value	D
0.043	0.0693	0.041	0.4838	0.0265	0.2742	0.0315	0.0638	0.0415
D>D_crit		FALSE		FALSE		FALSE		FALSE
p>a	FALSE		FALSE		FALSE		FALSE	

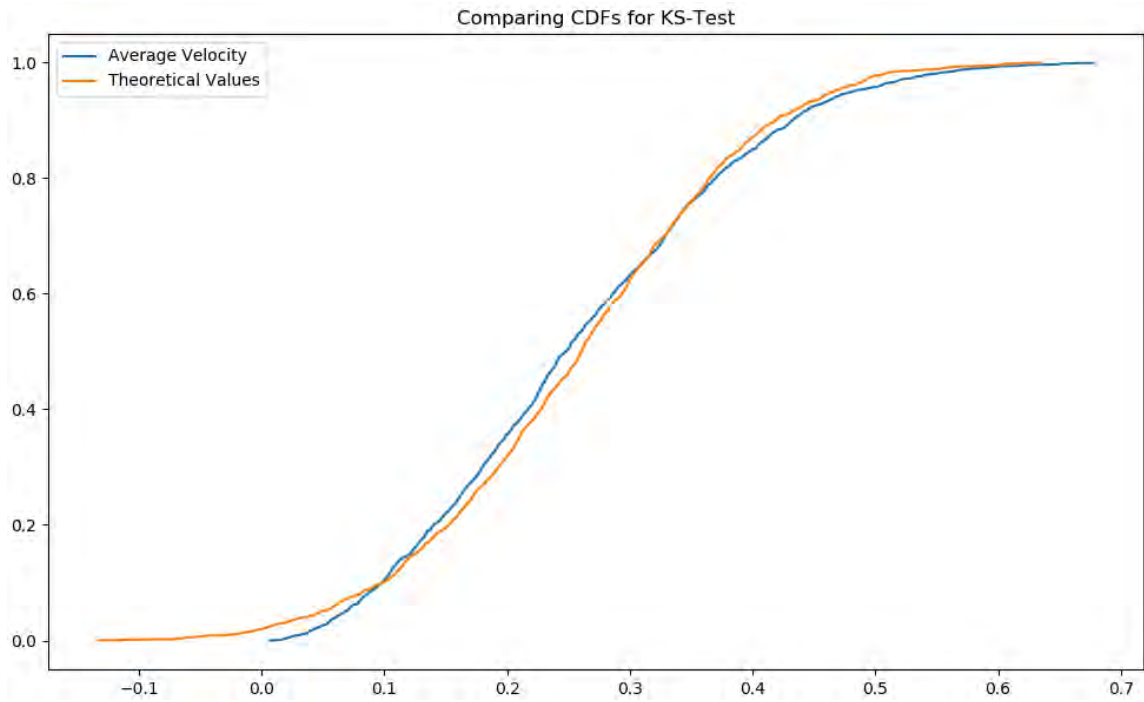
Πίνακας 4.23 Τιμές  $p_{value}$ ,  $D_{critical}$ ,  $D_{statistic}$  για  $a = 0.05$  για μέσο και ενεργό μήκος, μέση και ενεργή ταχύτητα



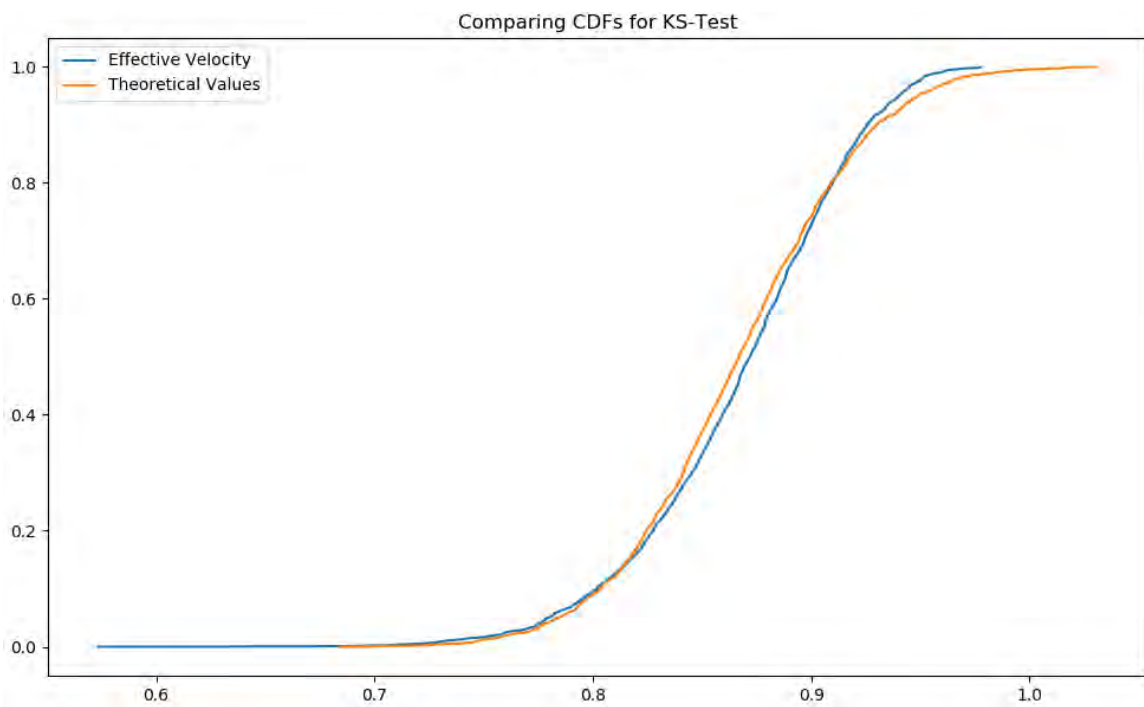
Διάγραμμα 4.22 Διάγραμμα σύγκρισης των ΑΣΚ για το μέσο μήκος των δεδομένων και των αντίστοιχων της κανονικής κατανομής



Διάγραμμα 4.23 Διάγραμμα σύγκρισης των ΑΣΚ για το ενεργό μήκος των δεδομένων και των αντίστοιχων της κανονικής κατανομής



Διάγραμμα 4.24 Διάγραμμα σύγκρισης των ΑΣΚ για ην μέση ταχύτητα των δεδομένων και των αντίστοιχων της κανονικής κατανομής



Διάγραμμα 4.25 Διάγραμμα σύγκρισης των ΑΣΚ για ην ενεργή ταχύτητα των δεδομένων και των αντίστοιχων της κανονικής κατανομής

### Σχολιασμός αποτελεσμάτων Kolmogorov-Smirnov test

Παρατηρώντας τις τιμές του πίνακα 4.23 και την σύγκριση μεταξύ  $p_{value} - \alpha$  και  $D_{statistic} - D_{critical}$ , είναι ξεκάθαρο πως η τιμή  $p_{value}$  είναι μεγαλύτερη της τιμής του επιπέδου σημαντικότητας  $\alpha$ , αλλά και η τιμή  $D_{statistic}$  είναι μεγαλύτερη της  $D_{critical}$ , για όλα τα εξεταζόμενα μεγέθη. Προκύπτει συνεπώς το συμπέρασμα, ότι πρόκειται για δύο παρόμοιες κατανομές και συγκεκριμένα για κανονική κατανομή. Το συμπέρασμα αυτό ενισχύεται εξετάζοντας τα διαγράμματα 4.22→4.25, καθώς οι διαφορές μεταξύ των Αθροιστικών Συναρτήσεων Κατανομής των αποτελεσμάτων δεν είναι σημαντικά μεγάλες από τις αντίστοιχες των δεδομένων για την κανονική κατανομή.

Βάση της στατιστικής ανάλυσης και των ελέγχων, είναι αρκετά ασφαλές να θεωρηθεί πως για το μέσο και ενεργό μήκος, αλλά και για την μέση και ενεργή ταχύτητα, τα αποτελέσματα μπορούν να προσεγγιστούν από την κανονική κατανομή. Η ενεργή ταχύτητα παρουσιάζει μια ιδιαιτερότητα ως προς την εμφάνιση συγκεκριμένων τιμών σε μεγάλη συχνότητα. Μια περαιτέρω μελλοντική μελέτη μπορεί να οδηγήσει σε κάποια συμπεράσματα για το χαρακτηριστικό αυτό μέγεθος και να συνδεθεί με τις παραμέτρους της θερμοκρασίας, του συντελεστή κατευθυντικότητας  $P_f$  και τις ενεργειακές διαφορές.

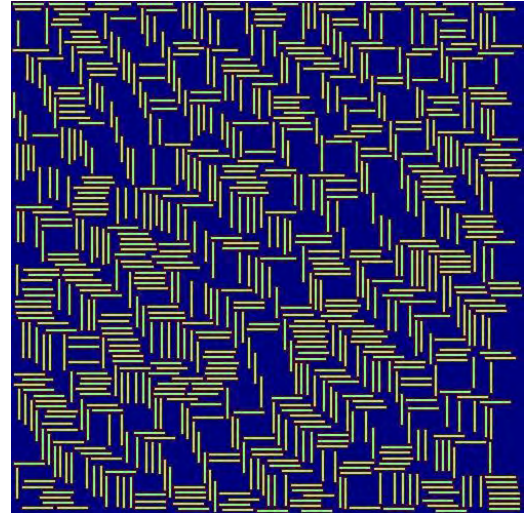
## 5 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Σκοπός της εργασίας, όπως παρουσιάστηκε και στην εισαγωγή, είναι η ρεαλιστική προσομοίωση του σύνθετου προβλήματος της διάδοσης της ρωγμής στην μικροκλίμακα, για προσμίξεις με επίμηκες σχήμα. Βάση του στόχου αυτή κατασκευάστηκε ένα υπολογιστικό μοντέλο, το οποίο αποτελεί προϊόν του συνδυασμού ενός αναλυτικού μοντέλου, όπως παρουσιάστηκε από (Charitidis κ.ά., 2007), και της θεωρίας τυχαίου περιπατητή (Monte Carlo method). Χρησιμοποιήθηκε η προγραμματιστική γλώσσα Python και δομές της, προκειμένου να κατασκευαστούν όλα τα απαραίτητα προγράμματα για την διεκπεραίωση της προσομοίωσης του προβλήματος. Συνεπώς οι επιμέρους διεργασίες του μοντέλου αποτελούν μια αρχική ενέργεια προς την επίτευξη του σκοπού. Τα αποτελέσματα για τις διάφορες παραμέτρους ελέγχθηκαν τόσο ως προς την σύγκλιση όσο και ως προς την στατιστική ορθότητα, καθώς δύναται να εξαχθούν συμπεράσματα για την φυσική υπόσταση των χαρακτηριστικών που υπολογίζονται.

Στο υπολογιστικό μοντέλο υπεισέρχονται αρκετές παράμετροι και ο χρόνος για την εξέταση των χαρακτηριστικών μεγεθών της ρωγμής για τους ποικίλους συνδυασμούς που προκύπτουν, αυξάνεται σημαντικά. Τα προγράμματα που δημιουργήθηκαν για τις απαιτήσεις της εργασίας επιτρέπουν την αυτοματοποίηση των διεργασιών, γεγονός που αποτελεί πλεονέκτημα για τον απαιτούμενο χρόνο διεκπεραίωσης της επεξεργασίας των αποτελεσμάτων. Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στην παρούσα ενότητα, είναι για κάποιους από τους συνδυασμούς για τις διάφορες τιμές των παραμέτρων και αποτελούν χαρακτηριστικά παραδείγματα για την γενική συμπεριφορά του μοντέλου. Παρατηρείται πως οι διαφοροποιήσεις στα αποτελέσματα για τις ποικίλες τιμές των παραμέτρων συμβαδίζουν με τα αποτελέσματα που αναγράφονται στην βιβλιογραφία. Το γεγονός αυτό αποτελεί σημαντική ένδειξη για την αξιοπιστία του μοντέλου ως προς την προσέγγιση των πραγματικών φαινομένων για την διάδοση της ρωγμής, εκτός των κρυσταλλινών με τετράγωνο μέγεθος (Nasikas, 2018) και για κρυσταλλίτες με ορθογωνικό σχήμα, με σχετικά μικρό υπολογιστικό κόστος.

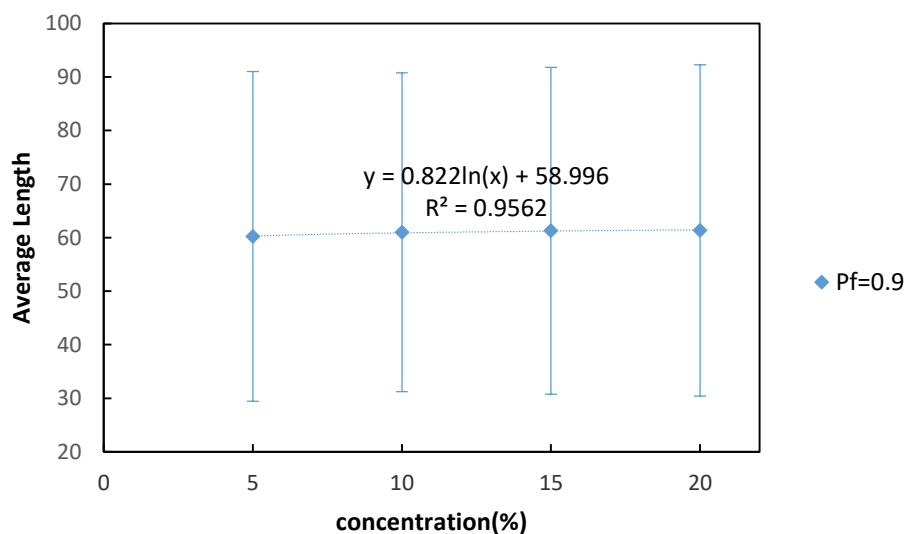
## 5.1 ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ

Μία βασική παράμετρος για την διερεύνηση της επίδρασης στα αποτελέσματα, αποτελεί η συγκέντρωση των προσμίξεων  $c$ . Σαν βασικό μέγεθος κρυστάλλου επιλέχθηκε  $(l \times w) = (30 \times 2)$  διακύμανση στο μήκος  $dl = 5$ , καθώς για κρυσταλλίτες με επίμηκες σχήμα, απαιτούνται μεγάλες τιμές για το aspect ratio, δηλαδή την αναλογία μήκος/πλάτος. Παρατηρήθηκε πως για τιμή συγκέντρωσης  $c = 20\%$ , προκύπτει δοκίμιο με αρκετά πυκνά τοποθετημένους κρυστάλλους. Ένα παράδειγμα μήτρας μεγέθους  $N^2 = 500^2$  και μέγεθος κρυστάλλου δίνεται στην εικόνα 5.1. Συνεπώς, χρησιμοποιήθηκαν δοκίμια με τιμές συγκέντρωσης να διακυμαίνονται από 5% έως 20%. Σημειώνεται πως σε όλα τα διαγράμματα οι τιμές του εξεταζόμενου μεγέθους για την εκάστοτε παράμετρο απεικονίζονται ως διακριτά σημεία, ενώ συμπεριλαμβάνονται και οι γραμμές τάσεις με διακεκομμένες γραμμές. Οι τιμές των ενεργειών των στοιχείων σε κάθε διάγραμμα παρουσιάζονται με την μορφή τριάδας  $E = E_{mat}, E_{gb}, E_{inc}$ .



Εικόνα 5.1 Παράδειγμα μήτρας πλευράς  $N = 500$ , για συγκέντρωση  $c = 20\%$

### Σχολιασμός μέσου μήκους-συγκέντρωσης



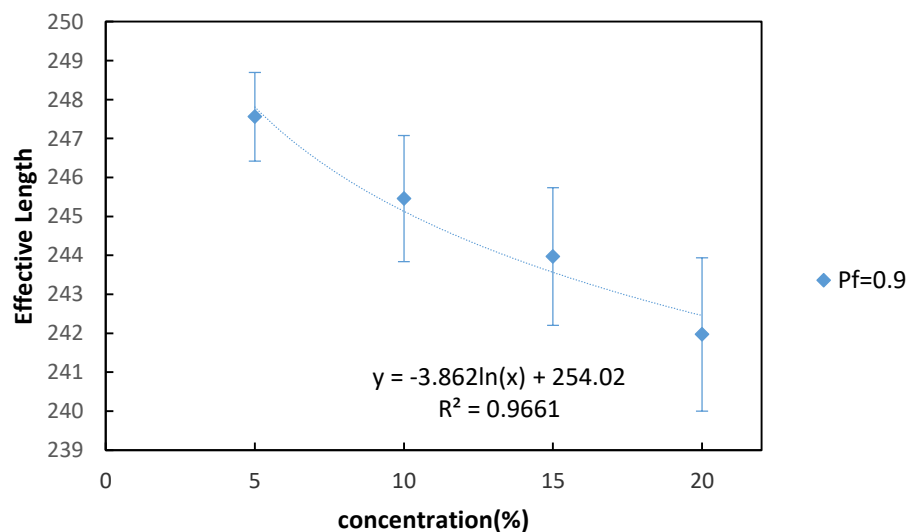
Διάγραμμα 5.1 Μέσο μήκος προς συγκέντρωση για  $Pf=0.9, KT=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1, E=1.0, 1.05, 1.1$

Γίνεται εμφανές παρατηρώντας το διάγραμμα 5.1, πως οι τιμές του μέσου μήκους για τις διαφορετικές συγκεντρώσεις είναι αρκετά κοντά μεταξύ τους. Η τάση φαίνεται να είναι πως με την αύξηση της συγκέντρωσης, παρατηρείται αύξηση στο μέσο μήκος, αλλά σε αρκετά μικρό βαθμό. Δίνοντας έμφαση στις διαφορές στις τιμές (πρόκειται για διαφορά 1.83% μεταξύ της μέγιστης και της ελάχιστης συγκέντρωσης), οι οποίες αναγράφονται και στον πίνακα 5.1, και στα ύψη των error bars, δύναται να αποφανθεί κανείς πως το μέσο μήκος μένει περίπου σταθερό. Φαίνεται δηλαδή πως η συγκέντρωση δεν επιδρά σημαντικά στο μέγεθος του μέσου μήκους της ρωγμής. Το γεγονός αυτό μπορεί να εξηγηθεί λόγω του σχήματος και του προσανατολισμού των κρυστάλλων σε συνδυασμό με τις ενεργειακές διαφορές μεταξύ των επιμέρους στοιχείων. Καθώς η ενέργεια σύνδεσης μεταξύ των κρυσταλλιτών και της διεπιφάνειας είναι μεγαλύτερη από αυτή μεταξύ της διεπιφάνειας και της μήτρας και ταυτόχρονα οι κρυσταλλίτες είναι τοποθετημένοι οριζόντια και κατακόρυφα οδηγούν σε παρόμοιες τιμές μέσου μήκους.

c(%)	AVERAGE LENGTH	
	mean	std
5	60.25	30.79
10	61	29.77
15	61.29	30.52
20	61.35	30.92

Πίνακας 5.1 Τιμές μέσου μήκους και τυπικής απόκλισης για το διάγραμμα 5.1

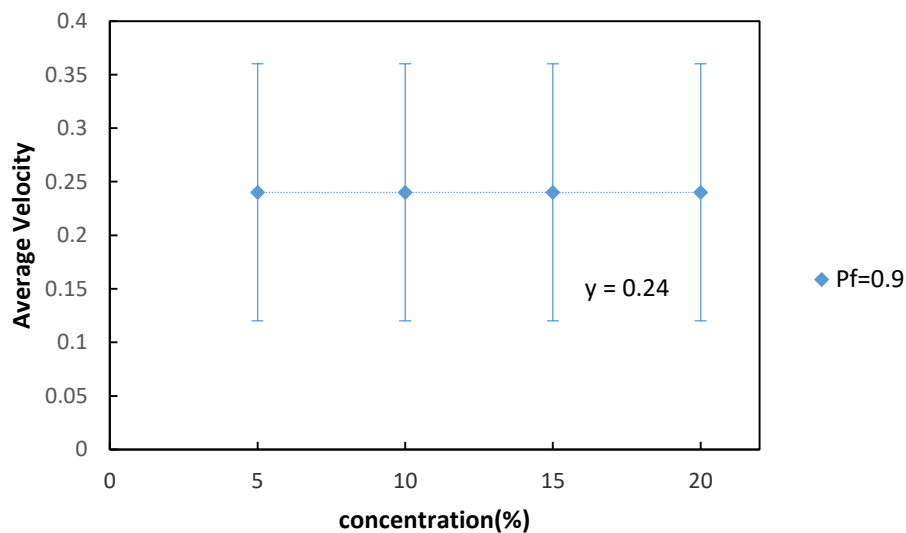
### Σχολιασμός ενεργού μήκους-συγκέντρωσης



Διάγραμμα 5.2 Ενεργό μήκος προς συγκέντρωση για  $Pf=0.9, KT=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1, E=1.0, 1.05, 1.1$

Είναι ξεκάθαρο παρατηρώντας το διάγραμμα 5.2 για το ενεργό μήκος σε σχέση με την συγκέντρωση, πως με την αύξηση στην συγκέντρωση το ενεργό μήκος μειώνεται. Άξιο αναφοράς είναι πως για  $c = 20\%$  φαίνεται να μειώνεται περισσότερο το ενεργό μήκος σε σχέση με τις προηγούμενες συγκεντρώσεις. Το αποτέλεσμα είναι λογικό, καθώς με την αύξηση της συγκέντρωσης αυξάνεται ο αριθμός των κρυσταλλιτών και με την δεδομένη ενεργειακή κατάσταση μεταξύ των στοιχείων, δηλαδή την σκλήρυνση κινούμενοι από τα στοιχεία της μήτρας προς αυτά των κρυσταλλιτών, καταναλώνεται πιο γρήγορα η αρχική ενέργεια με αποτέλεσμα το μικρότερο ενεργό μήκος.

### Σχολιασμός μέσης ταχύτητας-συγκέντρωσης



Διάγραμμα 5.3 Μέση ταχύτητα προς συγκέντρωση για  $Pf=0.9, KT=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1, E=1.0, 1.05, 1.1$

Για την μέση ταχύτητα σε σύγκριση με τις τιμές της συγκέντρωσης φαίνεται πως παραμένει σταθερή. Έχοντας παρατηρηθεί και εξηγηθεί η σχέση μέσου μήκους-συγκέντρωσης, σε συνδυασμό με την εξίσωση 4.2 μπορεί να δοθεί μια εξήγηση για την παρατήρηση της σταθερής μέσης ταχύτητας.

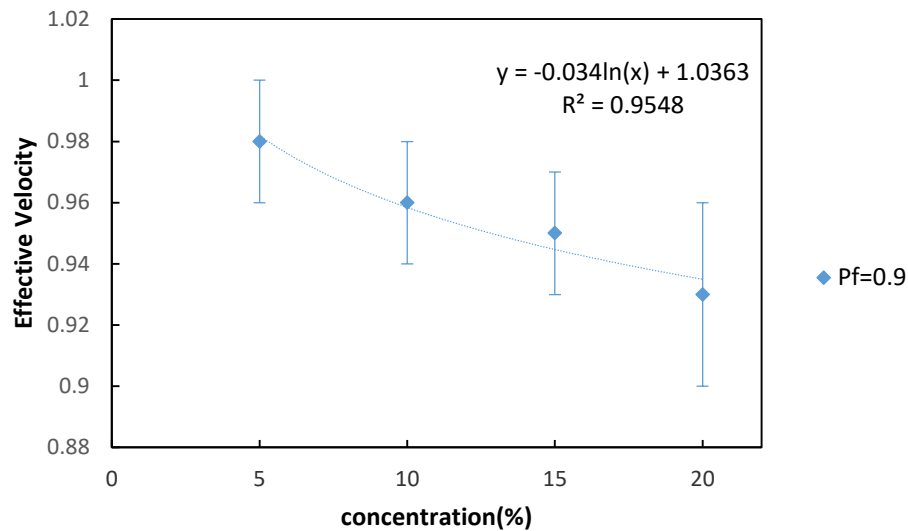
Παρατηρείται πως ο συνολικός χρόνος της διάδοσης  $Move_{TIMES} + Still_{TIMES}$  είναι περίπου ο ίδιος για τις διαφορετικές τιμές της συγκέντρωσης, όπως φαίνεται στον πίνακα 5.2. Συνεπώς, για σταθερό μέσο μήκος και σταθερή τιμή συνολικού χρόνου, προκύπτει από την εξίσωση 4.2 ότι η τιμή της μέσης ταχύτητας παραμένει σταθερή. Το αποτέλεσμα αυτό απεικονίζεται στο διάγραμμα μέσης ταχύτητας 5.3.

c(%)	time
5	252.61
10	255.69
15	256.81
20	260.18

Πίνακας 5.2 Τιμές συνολικού χρόνου για το διάγραμμα 5.3



## Σχολιασμός ενεργής ταχύτητας-συγκέντρωσης



Διάγραμμα 5.4 Ενεργή ταχύτητα προς συγκέντρωση για  $Pf=0.9, KT=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1, E=1.0, 1.05, 1.1$

Η τάση για την ενεργή ταχύτητα είναι παρόμοια με αυτή του ενεργού μήκους. Καθώς το ενεργό μήκος μειώνεται με την αύξηση της συγκέντρωσης, παρατηρώντας τις τιμές του χρόνου στον πίνακα 5.2 και ανατρέχοντας στην εξίσωση ορισμού της ενεργής ταχύτητας 4.1, το αποτέλεσμα που διατυπώνεται στο διάγραμμα 5.4 είναι απολύτως λογικό. Για χρόνο με μικρές διαφορές για τις διάφορες συγκεντρώσεις, ο παρονομαστής μένει περίπου σταθερός, ενώ ο αριθμητής, δηλαδή το ενεργό μήκος, μειώνεται. Ως αποτέλεσμα η τιμή του κλάσματος μικραίνει και προκύπτει η μείωση της ενεργής ταχύτητας.

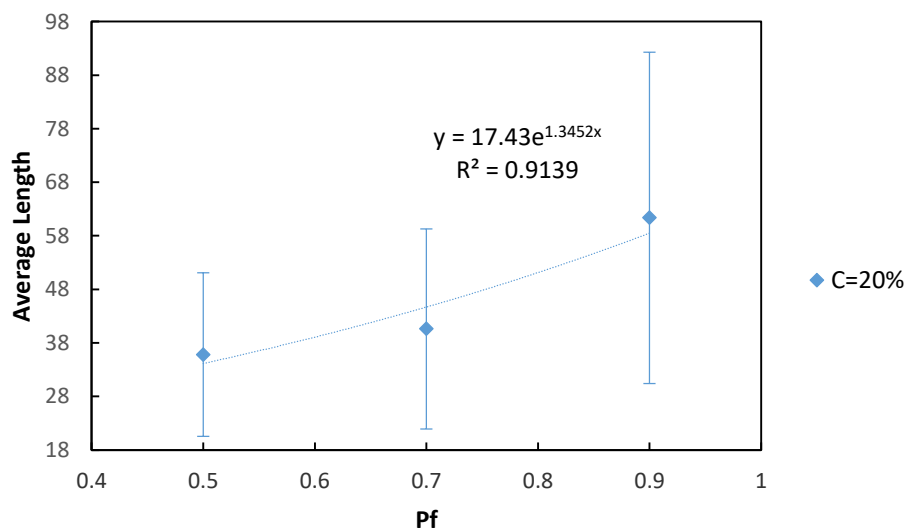
Προκύπτει σαν γενικό συμπέρασμα πως με την αύξηση της συγκέντρωσης παρατηρείται διαφορά στην αύξηση του συνολικού χρόνου και στην μείωση του ενεργού μήκους και της ενεργής ταχύτητας. Η αιτία, πιθανώς οφείλεται στο γεγονός της αύξησης του αριθμού των κρυσταλλιτών σε συνδυασμό με τις συνθήκες ενεργειακής διαφοράς που περιεγράφηκαν προηγουμένως. Όσο μεγαλύτερος ο αριθμός των κρυσταλλιτών, τόσο πιο συχνά συναντά η ρωγμή κρυσταλλίτες και συνεπώς πιο συχνά πρόκειται να μετακινηθεί σε κελί με μεγαλύτερη ενέργεια από την τωρινή. Επομένως, χρησιμοποιούνται πιο συχνά οι σχέσεις που καθορίζουν τις πιθανότητες κίνησης για περιπτώσεις ενεργειακής διαφοράς (3.6,3.7), αντί των σχέσεων για περιπτώσεις μη ύπαρξης ενεργειακής διαφοράς (3.8, 3.9). Για τις τιμές των παραμέτρων της εξεταζόμενης περίπτωσης, η

πιθανότητα  $P_a$  να μην έχουμε κίνηση σε κάθε βήμα από την τιμή 0, λαμβάνει την τιμή 0.39 (για την γενική περίπτωση  $z = 3$ , για  $z = 2 \rightarrow P_a = 0.33$ ). Έτσι εξηγείται η αύξηση του χρόνου  $Still_{TIMES}$ , όπου δεν υπήρξε κίνηση, άρα και του συνολικού χρόνου διάδοσης  $Move_{TIMES} + Still_{TIMES}$ . Σε αντίθεση, το μέσο μήκος και η μέση ταχύτητα παραμένουν σταθερά για την διαφοροποίηση στην συγκέντρωση.

## 5.2 ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ $P_f$

Ορίστηκε στις ενότητες 3.4.2-3.4.3 ο συντελεστής κατευθυντικότητας  $P_f$ , βάση του οποίου δίνεται η έμφαση ή μη, στην επιλογή της κίνησης μπρος τα μπροστά, μέσω των σχέσεων 3.6  $\rightarrow$  3.9. Στην παρούσα ενότητα παρουσιάζονται διαγράμματα σχετικά με την επίδραση του συντελεστή  $P_f$ , προκειμένου να εξεταστεί η επίδραση του στα μήκη και τις ταχύτητες της ρωγμής. Με την μείωση στις τιμές του  $P_f$ , παρατηρήθηκε πως ο αριθμός του φαινομένου παγίδευσης αυξάνεται σημαντικά, με αποτέλεσμα την εξαιρετικά μεγάλη αύξηση του απαιτούμενου υπολογιστικού χρόνου. Έτσι, ως βασικές τιμές για την διεξαγωγή των προσομοιώσεων, χρησιμοποιήθηκαν οι 0.5, 0.7, 0.9 από το διάστημα (0.0, 1.0), καθώς ήδη στην τιμή 0.5 ο αριθμός του φαινομένου παγίδευσης είναι αρκετά μεγάλος.

### Σχολιασμός μέσου μήκους-συντελεστή $P_f$

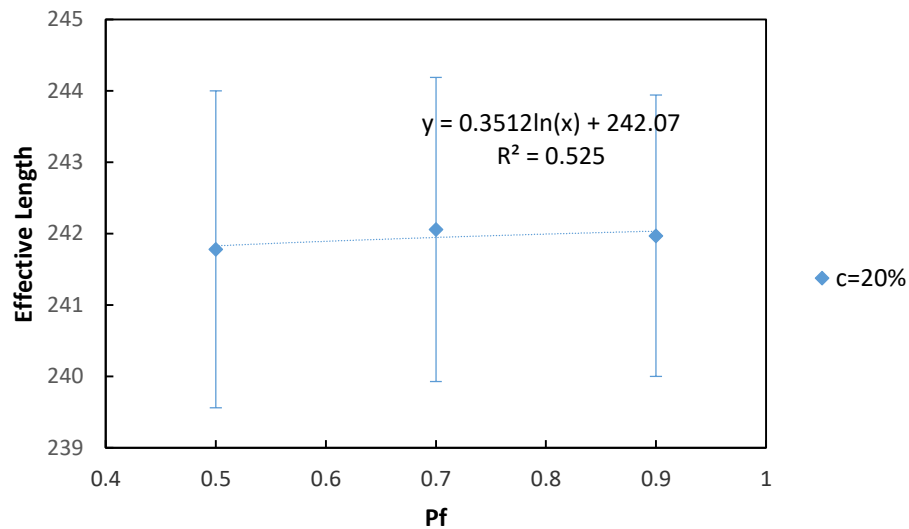


Διάγραμμα 5.5 Μέσο μήκος προς συντελεστή  $P_f$ , για  $c=20\%$ ,  $KT=0.1$ ,  $(l \times w)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$ ,  $E=1.0, 1.05, 1.1$

Από το διάγραμμα 5.5 αντιλαμβάνεται κανείς πως με την αύξηση του συντελεστή  $P_f$  το μέσο μήκος αυξάνεται εκθετικά. Γίνεται επίσης αντιληπτό πως η διαφορά μεταξύ των τιμών 0.5 – 0.7 (περίπου στις 5 μονάδες), είναι μικρότερη σε σχέση με την διαφορά μεταξύ της τιμής 0.9 και των άλλων δύο (20 μονάδες διαφορά για τις τιμές  $P_f = 0.9 - 0.7$ , 25 μονάδες διαφορά για τις τιμές  $P_f = 0.9 - 0.5$ ). Η τάση αυτή είναι λογικό να είναι αυξητική, καθώς με την αύξηση του συντελεστή  $P_f$  αυξάνεται η κατευθυντικότητα της ρωγμής οδηγώντας σε περισσότερες περιπτώσεις υπερπήδησης σε κελί με μεγαλύτερη ενεργειακή διαφορά. Έτσι, μειώνεται και ο αριθμός των παγιδεύσεων. Αυτό πρακτικά συμβαίνει, επειδή για μικρές τιμές  $P_f$  και την ενεργειακή κατάσταση, όπου οι ενέργειες των στοιχείων αυξάνονται κινούμενοι από την μήτρα προς τον κρυσταλλίτη, οι κρυσταλλίτες δρουν σαν εμπόδια εγκλωβίζοντας την ρωγμή σε μια περιοχή μεταξύ των κρυσταλλιτών. Με άλλα λόγια η ρωγμή τείνει να πηγαίνει πιο μακριά με την αύξηση του  $P_f$  και να μην εγκλωβίζεται μεταξύ των γειτονικών κρυσταλλιτών.

Μια δεύτερη παρατήρηση στο διάγραμμα 5.5 για το μέσο μήκος είναι πως με την αύξηση του συντελεστή  $P_f$ , υπάρχει αύξηση και στην τυπική απόκλιση για την εκάστοτε περίπτωση. Η εξήγηση είναι αυτή που αναλύθηκε και για την αύξηση της μέσης τιμής του μήκους. Για μικρές τιμές  $P_f$ , η παγίδευση της ρωγμής σε μια περιοχή οδηγεί σε κοντινές τελικές θέσεις για την κάθε διάδοση. Έτσι, η τυπική απόκλιση είναι σχετικά μικρή. Καθώς όμως αυξάνεται η τιμή  $P_f$  και η ρωγμή ταξιδεύει πιο μακριά και οι τελικές θέσεις για κάθε διάδοση είναι πιο πιθανό να διαφέρουν αρκετά μεταξύ τους. Οι διαφορές μεταξύ των τυπικών αποκλίσεων είναι παρόμοιες με αυτές των μέσων τιμών του μέσου μήκους. Δηλαδή, μεταξύ των τιμών 0.5 – 0.7 είναι πιο μικρή η διαφορά σε σύγκριση με τις διαφορές για την τιμή  $P_f = 0.9$  και των άλλων δύο. Συμπερασματικά, φαίνεται πως για την τιμή  $P_f = 0.9$ , η ρωγμή ταξιδεύει σημαντικά πιο μακριά συγκριτικά με τις υπόλοιπες τιμές.

## Σχολιασμός ενεργού μήκους-συντελεστή $P_f$

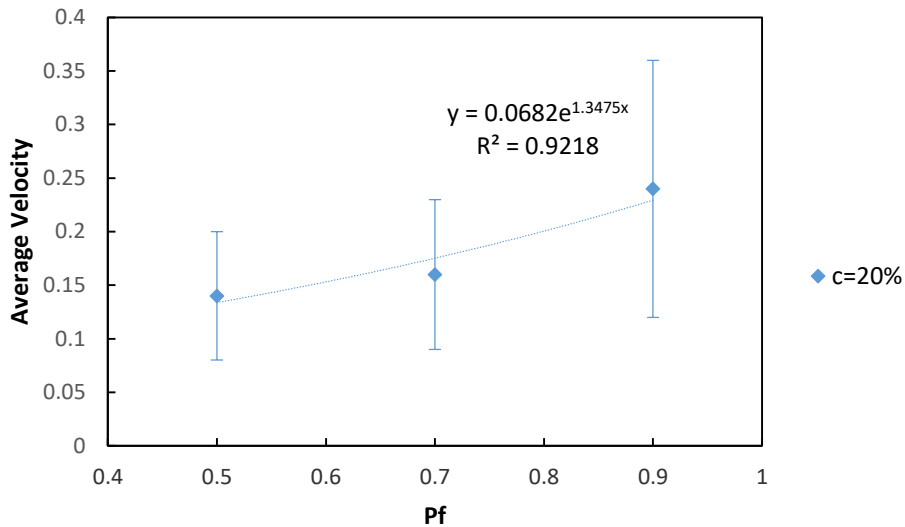


Διάγραμμα 5.6 Μέσο μήκος προς συντελεστή  $P_f$ , για  $c=20\%$ ,  $KT=0.1$ ,  $(l \times w)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$ ,  $E=1.0, 1.05, 1.1$

Παρατηρείται στο διάγραμμα 5.6 πως οι διαφορές μεταξύ των τιμών για το ενεργό μήκος είναι εξαιρετικά μικρές για τις διαφορετικές τιμές του συντελεστή κατευθυντικότητας  $P_f$ . Μπορεί να θεωρηθεί πως πρόκειται για σταθερές τιμές. Καθώς το ενεργό μήκος αποτελεί την συνολική διαδρομή που διένυσε η ρωγμή προκύπτει το συμπέρασμα πως για όλες τις τιμές του  $P_f$  γίνεται ο ίδιος περίπου αριθμός κινήσεων. Συνεπώς, φαίνεται πως για όλες τις τιμές του  $P_f$  η ρωγμή περνάει από περίπου τον ίδιο αριθμό στοιχείων κρυσταλλιτών ή και στοιχείων διεπιφάνειας. Έτσι, η μείωση της αρχικής ενέργειας γίνεται με παρόμοιο ρυθμό, οδηγώντας στις ίδιες τιμές ενεργού μήκους για την ίδια συγκέντρωση και την ενεργειακή κατάσταση που περιεγράφηκε και στον σχολιασμό του μέσου μήκους.

Επιπρόσθετα, φαίνεται πως οι τιμές της τυπικής απόκλισης γίνονται μικρότερες με την αύξηση των τιμών του συντελεστή  $P_f$ . Παρατηρώντας τις τιμές γίνεται εμφανές πως πρόκειται για αρκετά μικρές διαφορές (2.22, 2.13, 1.97 για τις τιμές  $P_f$  0.5, 0.7, 0.9 αντίστοιχα). Συνεπώς, μπορεί να θεωρηθεί πως και οι τυπικές αποκλίσεις για το ενεργό μήκος είναι περίπου οι ίδιες, δίνοντας την εξήγηση που έγινε και για τις τιμές του μέσου όρου του ενεργού μήκους.

## Σχολιασμός μέσης ταχύτητας-συντελεστή $P_f$



Διάγραμμα 5.7 Μέση ταχύτητα προς συντελεστή  $P_f$ , για  $c=20\%$ ,  $KT=0.1$ ,  $(l \times w)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$ ,  $E=1.0, 1.05, 1.1$

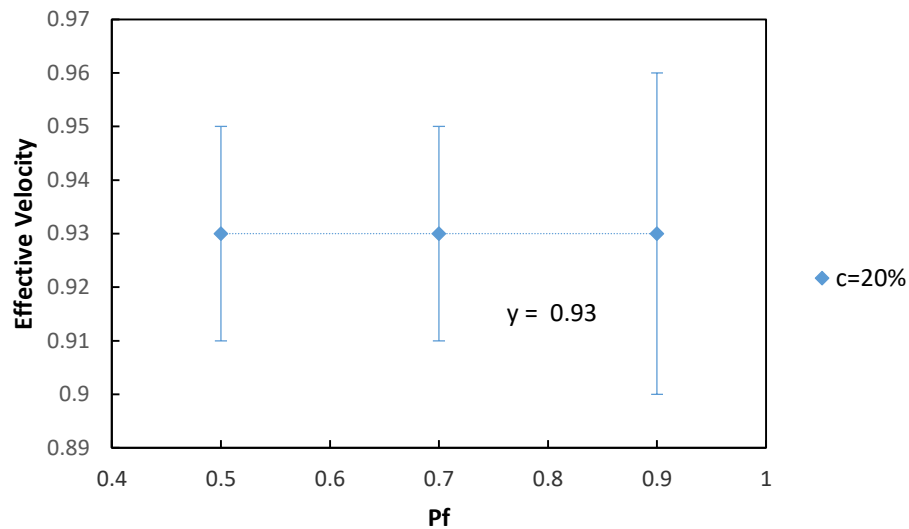
Είναι ξεκάθαρο πως η μέση ταχύτητα αυξάνεται ανάλογα με την αύξηση του συντελεστή κατευθυντικότητας  $P_f$ , όπως αναγράφονται οι τιμές και η γραμμή τάσης στο διάγραμμα 5.7. Ανατρέχοντας ξανά στην εξίσωση για την μέση ταχύτητα 4.2 και παρατηρώντας την αυξητική τάση στο διάγραμμα για το μέσο μήκος έναντι της αύξησης του συντελεστή  $P_f$ , είναι αναμενόμενο η μέση ταχύτητα να έχει αυξητική τάση. Παραθέτοντας και τις τιμές του χρόνου διάδοσης της ρωγμής στον πίνακα 5.3 για τις περιπτώσεις που διατυπώνονται στο διάγραμμα 5.7 γίνεται ξεκάθαρο πως για αύξηση του μέσου μήκους στον αριθμητή της εξίσωσης 4.2, έναντι της σταθερής τιμής χρόνου στον παρονομαστή, η μέση ταχύτητα έχει αυξητική τάση.

$P_f$	time
0.5	259.9785
0.7	260.2796
0.9	260.1828

Πίνακας 5.3 Τιμές συνολικού χρόνου για το διάγραμμα 5.7

Σχετικά με τις τιμές της τυπικής απόκλισης για το διάγραμμα ενεργού μήκους, φαίνεται πως υπάρχει αύξηση ανάλογα με την αύξηση των τιμών του συντελεστή  $P_f$ . Η εξήγηση τόσο για την αύξηση της μέσης τιμής, όσο και της τυπικής απόκλισης για κάθε περίπτωση, προκύπτει από την εξήγηση που δόθηκε στον σχολιασμό για το διάγραμμα μέσου μήκους, έναντι του συντελεστή  $P_f$ .

### Σχολιασμός ενεργής ταχύτητας-συντελεστή $P_f$



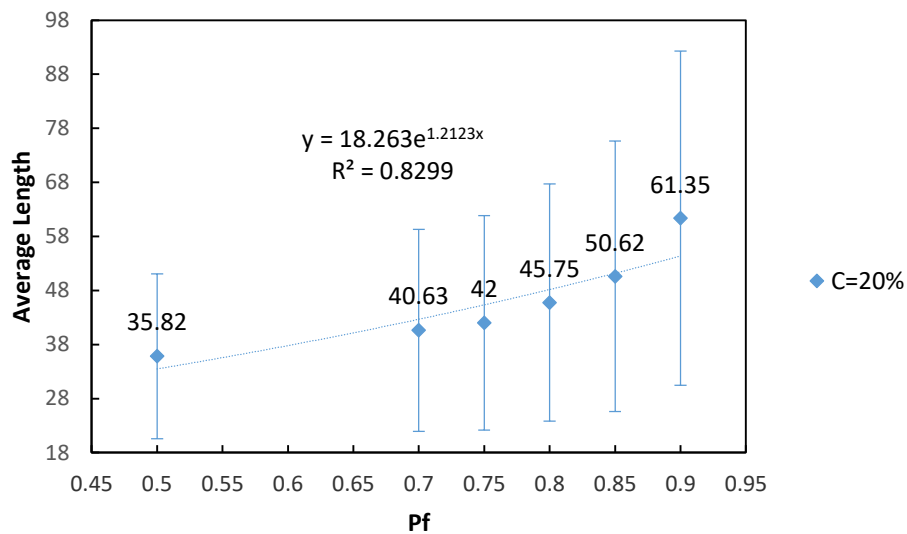
Διάγραμμα 5.8 Ενεργή ταχύτητα προς συντελεστή  $P_f$ , για  $c=20\%$ ,  $KT=0.1$ ,  $(l \times w)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$ ,  $E=1.0, 1.05, 1.1$

Η πρώτη εντύπωση που προκύπτει από το διάγραμμα 5.8 για την ενεργή ταχύτητα έναντι του συντελεστή  $P_f$  είναι πως πρόκειται για σταθερές τιμές. Παρατηρώντας την εξίσωση για την γραμμή τάσης γίνεται ξεκάθαρο πως πρόκειται για ευθεία γραμμής της οικογένειας  $y = C$ , όπου  $C$  σταθερά. Επομένως η ενεργή ταχύτητα εκφράζεται από την εξίσωση της ευθείας  $y = 0.93$  και είναι σταθερή για όλες τις τιμές του  $P_f$ .

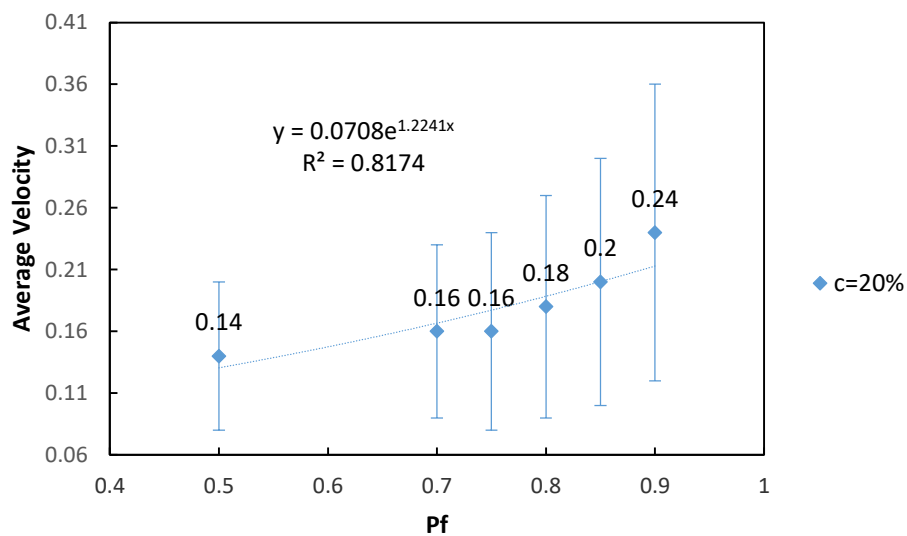
Σχετικά με την τυπική απόκλιση, για  $P_f = 0.9$  υπάρχει μια αύξηση, ενώ για τις άλλες δύο τιμές πρόκειται για την ίδια τιμή (ίση με 0.02). Πρόκειται όμως για αύξηση της τιμής ίση με 0.01, καθώς για  $P_f = 0.9$ ,  $standard\ deviation = 0.03$ . Συνεπώς, μπορεί να θεωρηθεί πως πρόκειται για περίπου σταθερή τιμή και για την τυπική απόκλιση. Βάση της εξίσωσης 4.1, τις τιμές του χρόνου που είναι περίπου ίδιες όπως αναγράφονται στον πίνακα 5.3 και της εξήγησης που δόθηκε για τον σχολιασμό του ενεργού μήκους προκύπτει το συμπέρασμα πως τόσο η μέση τιμή όσο και η τυπική απόκλιση για την ενεργή ταχύτητα παραμένουν σταθερές για τις διάφορες τιμές του  $P_f$ .

### Σχολιασμός μέσου μήκους, μέσης ταχύτητας για υψηλές τιμές $P_f$

Καθώς το μοντέλο αποτελεί μια πρώτη προσέγγιση, είναι σημαντικό να διεξαχθεί έρευνα για την επιρροή των τιμών των παραμέτρων. Για τον λόγο αυτό, έγιναν κάποιες επιπρόσθετες επιλύσεις για τιμές  $P_f = 0.75, 0.8, 0.85$  προκειμένου να διερευνηθεί η συμπεριφορά του μοντέλου για το μέσο μήκος και την μέση ταχύτητα για το διάστημα  $P_f = 0.7 - 0.9$  που εμφανίζονται σημαντικές διαφορές, όπως σχολιάστηκε για τα διαγράμματα 5.5 και 5.7.



Διάγραμμα 5.9 Μέσο μήκος προς επιπρόσθετων τιμών συντελεστή  $P_f$ , για  $c=20\%$ ,  $KT=0.1$ ,  $(l \times w)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5, d=1, E=1.0, 1.05, 1.1$



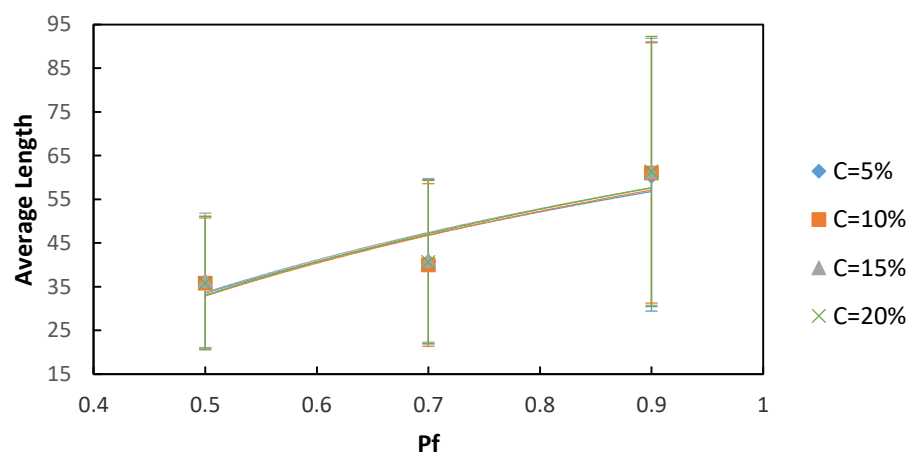
Διάγραμμα 5.10 Μέση ταχύτητα προς επιπρόσθετων τιμών συντελεστή  $P_f$ , για  $c=20\%$ ,  $KT=0.1$ ,  $(l \times w)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5, d=1, E=1.0, 1.05, 1.1$

Στα διαγράμματα 5.9 και 5.10 έγινε προσθήκη των τιμών για τα σημεία του μέσου μήκους και της μέσης ταχύτητας αντίστοιχα, για την καλύτερη διερεύνηση της συμπεριφοράς του μοντέλου για τα δύο αυτά χαρακτηριστικά μεγέθη. Για το μέσο μήκος φαίνεται στο διάγραμμα 5.9 πως η εκθετική αύξηση, με σχετικά ομαλό ρυθμό, των τιμών που παρατηρήθηκε αρχικά για το διάγραμμα 5.5 ισχύει μέχρι και την τιμή  $P_f = 0.85$ . Για την τιμή όμως  $P_f = 0.9$  παρουσιάζεται ένα «άλμα» στην διαφορά των τιμών. Αντίστοιχες είναι οι παρατηρήσεις για τις τιμές της μέσης ταχύτητας, όπως αναγράφονται στο διάγραμμα 5.10.

Προκύπτει το συμπέρασμα, πως το μοντέλο έχει εκθετικά αυξητική τάση με παρόμοιο τρόπο, για το μέσο μήκος και τη μέση ταχύτητα για τις τιμές  $P_f$  0.5 → 0.85. Για την τιμή  $P_f = 0.9$  παρουσιάζεται μια σημαντική διαφοροποίηση στα αποτελέσματα αυτά, παρατήρηση που αποτελεί σημαντικό στοιχείο για την μελλοντική περαιτέρω έρευνα και επέκταση του μοντέλου.

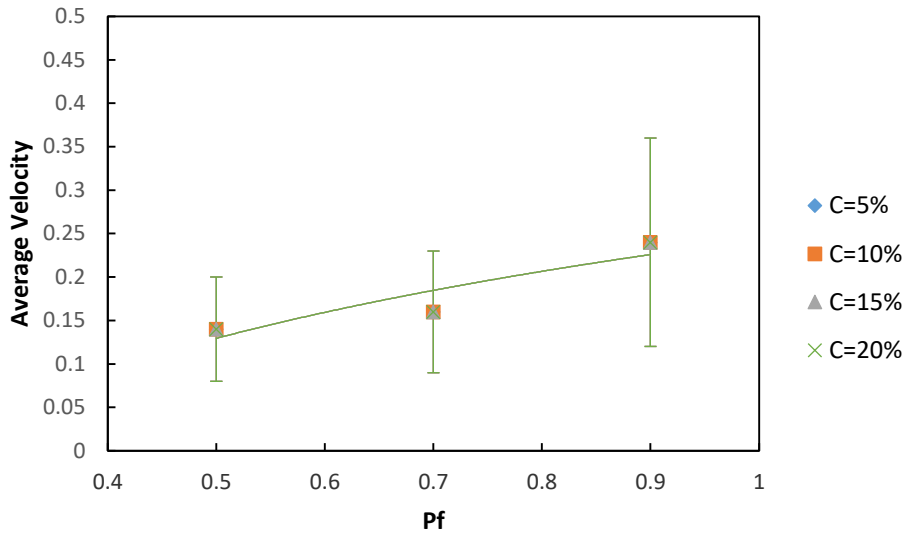
### 5.3 ΣΥΝΔΥΑΣΤΙΚΑ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΑ ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ-ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ $P_f$

Στις ενότητες 5.1 και 5.2 παρουσιάστηκαν τα διαγράμματα για τα μήκη και τις ταχύτητες και την επίδραση της συγκέντρωσης και του συντελεστή  $P_f$  στα αποτελέσματα αυτά. Για να γίνει ξεκάθαρη επίδραση μιας παραμέτρου, στις υπόλοιπες παραμέτρους δόθηκε μια τιμή. Προκειμένου να διεξαχθεί ένας έλεγχος για την συνδυαστική επίδραση των δύο παραμέτρων αυτών στα αποτελέσματα του μοντέλου, παρουσιάζονται στην παρούσα ενότητα κάποια συνδυαστικά διαγράμματα για τις παραμέτρους της συγκέντρωσης και του συντελεστή  $P_f$ .

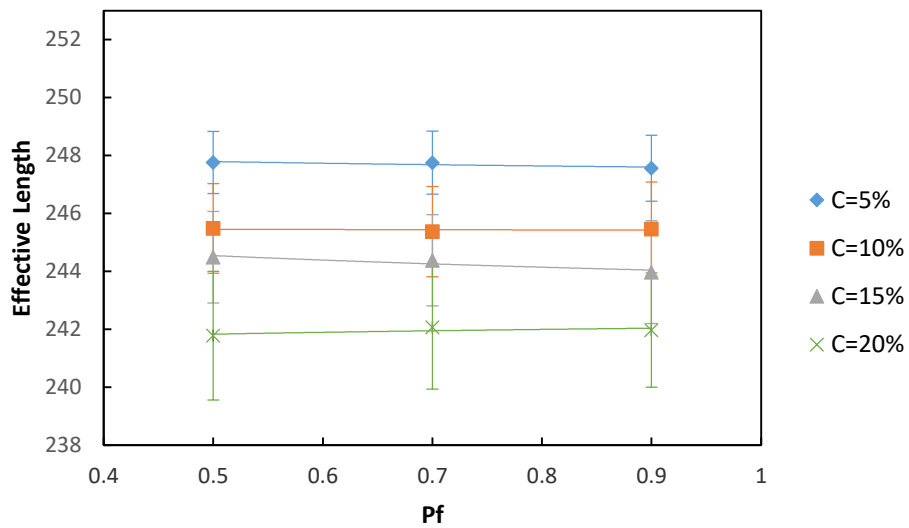


Διάγραμμα 5.11 Μέσο μήκος προς  $P_f$  και συγκέντρωση για  $KT=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1, E=1.0, 1.05, 1.1$

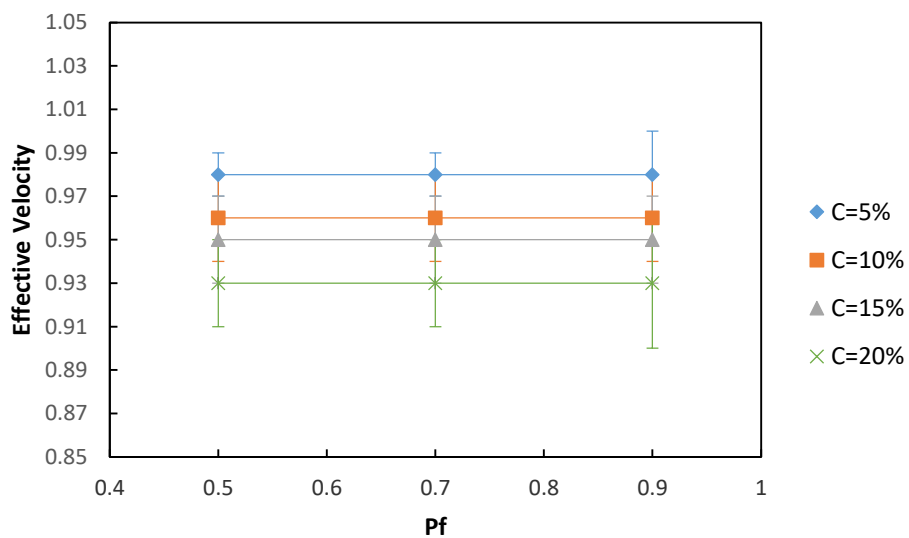




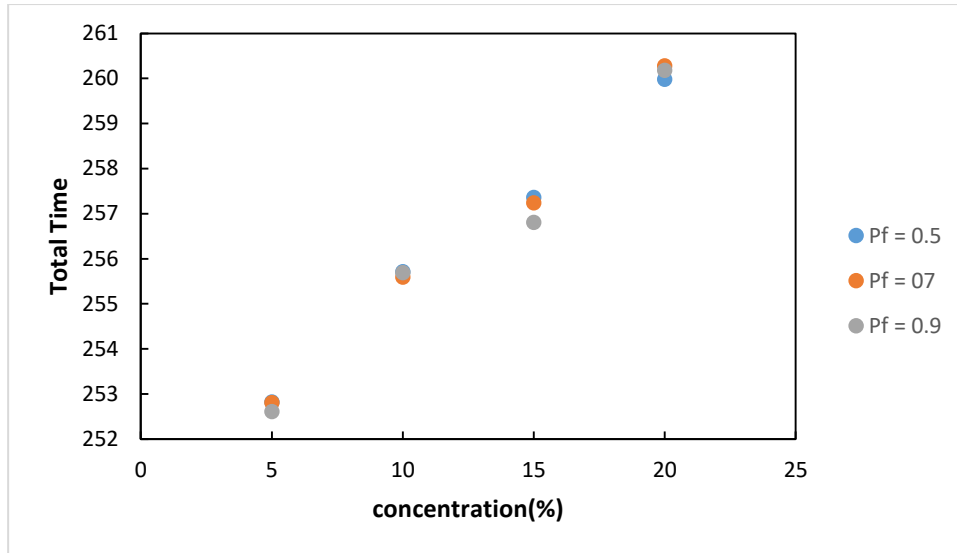
Διάγραμμα 5.12 Μέση ταχύτητα προς Pf και συγκέντρωση για  $KT=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1, E=1.0, 1.05, 1.1$



Διάγραμμα 5.13 Ενεργό μήκος προς Pf και συγκέντρωση για  $KT=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1, E=1.0, 1.05, 1.1$



Διάγραμμα 5.14 Ενεργή ταχύτητα προς Pf και συγκέντρωση για  $KT=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1, E=1.0, 1.05, 1.1$



Διάγραμμα 5.15 Συνολικός χρόνος προς συγκέντρωση και  $P_f$  για  $KT=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1, E=1.0, 1.05, 1.1$

### Σχολιασμός συνδυαστικών διαγραμμάτων συγκέντρωσης-συντελεστή $P_f$

Γίνεται κατανοητό παρατηρώντας τα διαγράμματα 5.11 και 5.12, πως για το μέσο μήκος και την μέση ταχύτητα ο συντελεστής  $P_f$  επιδρά αυξητικά, ενώ για την συγκέντρωση δεν παρουσιάζεται κάποια σημαντική διαφοροποίηση. Η παρατήρηση αυτή ισχύει και για την μέση τιμή, αλλά και για την τυπική απόκλιση των μεγεθών. Η διαφορά στην αύξηση των μεγεθών για την μέση τιμή και την τυπική απόκλιση μεταξύ της τιμής  $P_f = 0.9$  σε σχέση με  $P_f = 0.5, 0.7$  όπως σχολιάστηκε και στην ενότητα 5.2 για το μέσο μήκος, φαίνεται πως ισχύει για όλες τις συγκεντρώσεις και όχι αποκλειστικά για την τιμή  $c = 20\%$ .

Αντίστροφα φαίνεται πως είναι η τάση για το ενεργό μήκος και την ενεργή ταχύτητα (διαγράμματα 5.13 και 5.14). Για διαφορετικές τιμές  $P_f$ , οι τιμές παραμένουν περίπου οι ίδιες. Ξεκάθαρο είναι το γεγονός πως με την αύξηση της συγκέντρωσης για όλες τις τιμές  $P_f$ , τόσο το ενεργό μήκος όσο και η ενεργή ταχύτητα μειώνονται.

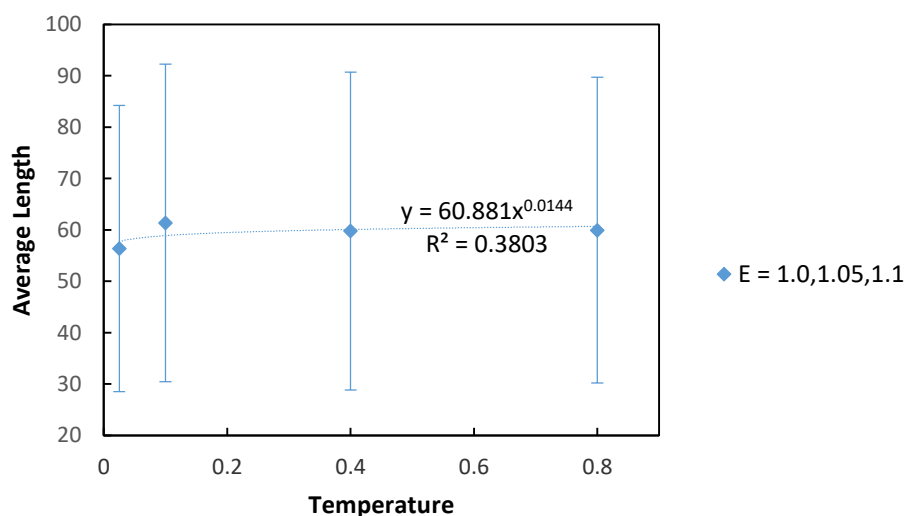
Στο διάγραμμα 5.15 αποτυπώνονται οι συνολικοί χρόνοι για κάθε περίπτωση σαν διακριτά σημεία χωρίς error bars, καθώς ο σκοπός είναι να δοθεί η απεικόνιση των τιμών. Είναι φανερό πως ο συντελεστής  $P_f$  δεν επιδρά στον συνολικό χρόνο, εναντίως για την συγκέντρωση. Η επίδραση της συγκέντρωσης στον συνολικό χρόνο εξηγείται βάση της συγκεκριμένης ενεργειακής διαφοράς και αναλύθηκε εκτενώς στον σχολιασμό ενεργής ταχύτητας-συγκέντρωσης.

Συμπερασματικά από τις ενότητες 5.1, 5.2 και τις παρατηρήσεις της παρούσας ενότητας, φαίνεται πως ο συντελεστής  $P_f$  επιδρά στο μέσο μήκος και στην μέση ταχύτητα, με διαφοροποίηση στην αύξηση για την μέγιστη τιμή  $P_f = 0.9$ , ενώ ο συνολικός χρόνος παραμένει σταθερός. Σε αντίθεση, η συγκέντρωση επιδρά στο ενεργό μήκος, την ενεργή ταχύτητα και τον συνολικό χρόνο διεξαγωγής της διάδοσης της ρωγμής. Τα παραπάνω προκύπτουν για αυξητική ενεργειακή διαφορά από τα στοιχεία μήτρας, στα στοιχεία διεπιφάνειας και στα στοιχεία κρυσταλλίτη, δηλαδή για την ανισότητα  $E_{mat} < E_{gb} < E_{inc}$ .

#### 5.4 ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

Στη ενότητα αυτή εξετάζεται η επίδραση της θερμοκρασίας στα αποτελέσματα του μοντέλου και αν αυτά συνάδουν με τις παρατηρήσεις που δίνονται στην βιβλιογραφία. Συγκεκριμένα βάση των (Abraham & Gao, 2000; Bitzek κ.ά., 2015; Yaghmaee & Baghbaderani, 2017), ο παράγοντας της θερμοκρασίας έχει επιρροή στο μέσο μήκος και στην ενεργή ταχύτητα διάδοσης της ρωγμής. Οι τιμές της θερμοκρασίας που χρησιμοποιήθηκαν για την εξέταση της επίδρασής της, είναι οι 0.025, 0.1, 0.4, 0.8. Με τον τρόπο αυτό, δύναται να εξαχθούν συμπεράσματα, τόσο ως προς τους αριθμούς που επιλέχθηκαν, όσο και για την διαφορετική αναλογία θερμοκρασιών (για τους αριθμούς αυτούς πρόκειται για αναλογίες 1,4,16,32).

#### Σχολιασμός μέσου μήκους-θερμοκρασίας



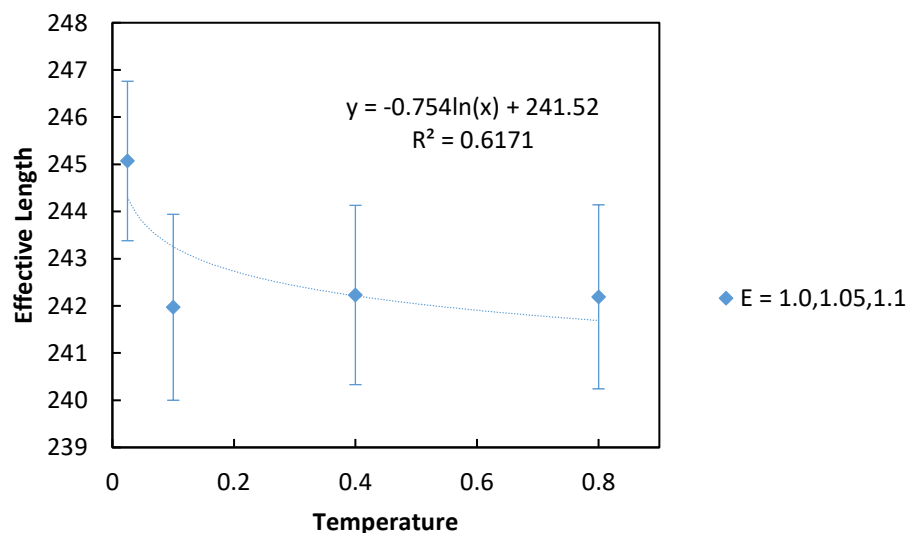
Διάγραμμα 5.16 Μέσο μήκος προς θερμοκρασία για  $P_f=0.9$ ,  $c=20\%$ ,  $(l \times w)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$ ,  $E=1.0, 1.05, 1.1$

Με την αύξηση της θερμοκρασίας, ο όρος  $e^{-\frac{\Delta E}{kT}}$  στις εξισώσεις 3.6, 3.7 που προσδίδουν τις πιθανότητες κίνησης για περιπτώσεις ενεργειακής διαφοράς, τείνει προς την μονάδα. Συνεπώς, αυξάνεται σημαντικά η πιθανότητα κίνησης προς τα εμπρός, παρά τις ενεργειακές διαφορές. Με τον τρόπο αυτό, προκύπτει μεγαλύτερο μέσο μήκος, δηλαδή η τελική θέση της ρωγμής είναι αρκετά πιο μακριά από την αρχική.

Από το διάγραμμα 5.16 για το μέσο μήκος, γίνεται αντιληπτή η αντιστοιχία μεταξύ της αύξησης της θερμοκρασίας με την αύξηση του μέσου μήκους. Παρατηρείται, όμως, πως η σημαντική αύξηση έγκειται μεταξύ των τιμών 0.025 – 0.1, ενώ στη συνέχεια η τιμή του μέσου μήκους φαίνεται να μένει σταθερή, παρά την αύξηση της θερμοκρασίας. Φαίνεται δηλαδή, πως υπάρχει κάποια κρίσιμη τιμή για την θερμοκρασία και τις δεδομένες τιμές ενεργειών των στοιχείων, μετά της οποίας, οι τιμές του μέσου μήκους παραμένουν περίπου οι ίδιες. Παρόμοια είναι τα συμπεράσματα για τις τιμές της τυπικής απόκλισης, οι οποίες φαίνεται να είναι περίπου οι ίδιες για τις τιμές θερμοκρασίας = 0.1, 0.4, 0.8.

Επιπλέον, για την τιμή θερμοκρασίας 0.1, φαίνεται πως η τιμή του μέσου μήκους είναι ελάχιστα πιο μεγάλη από τις αντίστοιχες τιμές θερμοκρασίας 0.4, 0.8.

### Σχολιασμός ενεργού μήκους-θερμοκρασίας

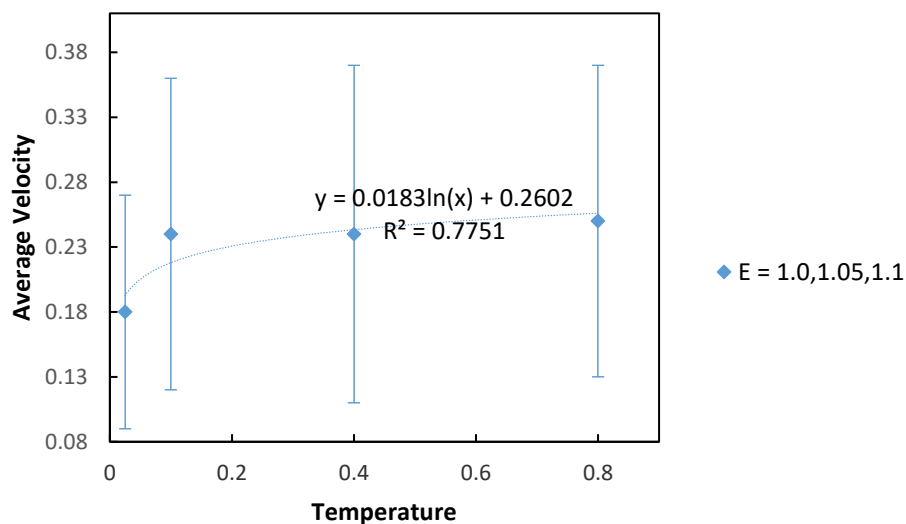


Διάγραμμα 5.17 Ενεργό μήκος προς θερμοκρασία για  $Pf=0.9$ ,  $c=20\%$ ,  $(l \times w)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$ ,  $E=1.0, 1.05, 1.1$

Βάση του διαγράμματος 5.17, μπορεί να συμπεράνει κανείς πως με την αύξηση της θερμοκρασίας, το ενεργό μήκος μειώνεται. Όπως περιεγράφηκε και στον σχολιασμό του μέσου μήκους, σύμφωνα με τις εξισώσεις 3.6, 3.7, οι οποίες καθορίζουν τις πιθανότητες κίνησης, η μεταβολή του όρου  $e^{-\frac{\Delta E}{kT}}$  παίζει ρόλο στην κατευθυντικότητα της ρωγμής. Όσο μεγαλύτερες οι τιμές της θερμοκρασίας, η ρωγμή δεν εγκλωβίζεται σε περιοχή μεταξύ γειτονικών κρυσταλλιτών και τόσο πιο πιθανό να κινηθεί προς στοιχεία με μεγαλύτερη ενέργεια. Συνεπώς, προκύπτει μεγαλύτερος ρυθμός μείωσης της αρχικής ενέργειας. Πρόκειται δηλαδή, για ανάλογα συμπεράσματα με αυτά που παρουσιάστηκαν στην ενότητα 5.2 για την επίδραση της αύξησης του συντελεστή  $P_f$ .

Ομοίως με το διάγραμμα μέσου μήκους 5.16, παρατηρείται αντίστοιχη συμπεριφορά για την τιμή της θερμοκρασίας 0.1. Στην περίπτωση του ενεργού μήκους παρατηρείται πως είναι περίπου οι ίδιες τιμές για τις θερμοκρασίες 0.1,0.4,0.8, με την διαφορά έναντι του μέσου μήκους, πως για την θερμοκρασία 0.1 πρόκειται για ελάχιστα μικρότερη τιμή σε σχέση με τις θερμοκρασίες 0.4,0.8.

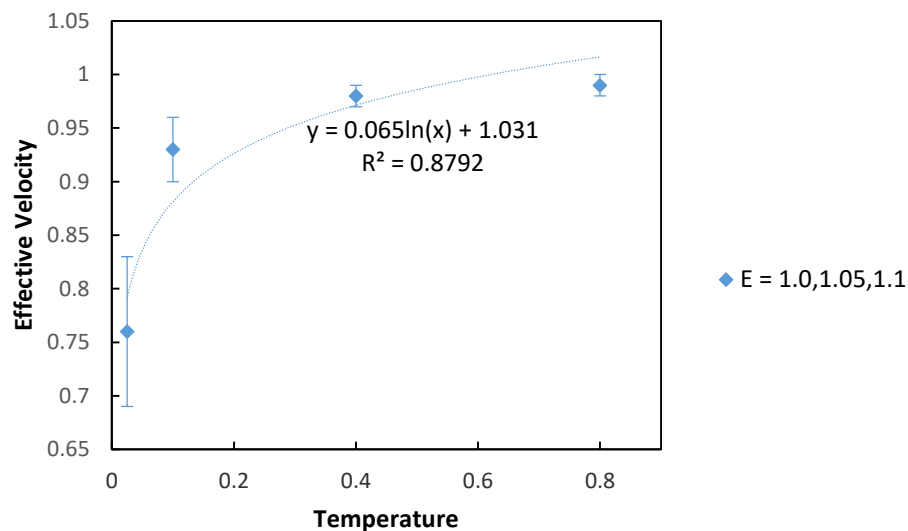
### Σχολιασμός μέσης ταχύτητας-θερμοκρασίας



Διάγραμμα 5.18 Μέση ταχύτητα προς θερμοκρασία για  $P_f=0.9$ ,  $c=20\%$ ,  $(l \times w)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$ ,  $E=1.0,1.05,1.1$

Στο διάγραμμα 5.18 είναι εμφανές πως η συμπεριφορά του μοντέλου για την μέση ταχύτητα είναι παρόμοια με αυτή για το μέσο μήκος. Με την αύξηση της θερμοκρασίας, παρατηρείται αύξηση της μέσης ταχύτητας. Και στην περίπτωση της μέσης ταχύτητας, μετά την τιμή θερμοκρασίας 0.1, προκύπτουν παρόμοιες τιμές, ακριβώς όπως και στο διάγραμμα μέσου μήκους. Μετά την τιμή αυτή δηλαδή, φαίνεται πως δεν υπάρχει κάποια μεταβολή παρόλο που η θερμοκρασία αυξάνεται. Οι τιμές της τυπικής απόκλισης, όπως και για τις τιμές της μέσης τιμής, αυξάνονται, αλλά μετά την χαρακτηριστική τιμή θερμοκρασίας, είναι περίπου οι ίδιες. Τα αποτελέσματα αυτά είναι λογικά, καθώς πρόκειται για την ίδια συμπεριφορά με αυτή του μέσου μήκους.

### Σχολιασμός ενεργής ταχύτητας-θερμοκρασίας



Διάγραμμα 5.19 Ενεργή ταχύτητα προς θερμοκρασία για  $Pf=0.9$ ,  $c=20\%$ ,  $(l \times w)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$ ,  $E=1.0, 1.05, 1.1$

Στο διάγραμμα ενεργής ταχύτητας προς θερμοκρασία 5.19, γίνεται αντιληπτό πως με την αύξηση της θερμοκρασίας, η ενεργή ταχύτητα αυξάνεται λογαριθμικά. Πρόκειται για την αντίστροφη τάση σε σχέση με το ενεργό μήκος, όπως παρουσιάστηκε στο διάγραμμα 5.17, όπου με την αύξηση της θερμοκρασίας, το ενεργό μήκος μειώνεται. Η παρατήρηση για την αύξηση της ενεργής ταχύτητας δύναται να εξηγηθεί βάση των σχολίων που έγιναν για το ενεργό μήκος και την

εξίσωση 4.1 που αποτελεί τον ορισμό της ενεργής ταχύτητας. Εφόσον το ενεργό μήκος μειώνεται και πρόκειται για τον αριθμητή του κλάσματος της εξίσωσης 4.1, για να αυξάνεται συνολικά η ενεργή ταχύτητα, θα πρέπει να μειώνεται σημαντικά ο παρονομαστής, δηλαδή ο συνολικός χρόνος  $Move_{TIMES} + Still_{TIMES}$ . Βάση των σχολίων που έγιναν για τον όρο  $e^{-\frac{\Delta E}{KT}}$  στο ενεργό μήκος, με την αύξηση της θερμοκρασίας προκύπτουν μικρότερες τιμές της πιθανότητας  $P_a$ , της πιθανότητας δηλαδή να μην κινηθεί σε περίπτωση ενεργειακής διαφοράς. Επομένως, υπάρχει συνεχής κίνηση, ο χρόνος ακινησίας  $Still_{TIMES}$  μειώνεται σημαντικά και επαγωγικά προκύπτει μικρότερος συνολικός χρόνος  $Move_{TIMES} + Still_{TIMES}$ .

## 5.5 ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΕΝΕΡΓΕΙΩΝ ΣΥΝΔΕΣΗΣ

Σε συμφωνία με τις προτάσεις από βιβλιογραφία και συγκεκριμένα από (Abraham & Gao, 2000; Bitzek κ.ά., 2015; Ovid'ko, 2015; Falzone κ.ά., 2016), οι ενέργειες σύνδεσης των στοιχείων έχουν αντίκτυπο στα χαρακτηριστικά μεγέθη της ρωγμής, δηλαδή στα μήκη και τις ταχύτητες της ρωγμής. Εξετάζεται στην ενότητα αυτή, η επίδραση των ενεργειών σύνδεσης, προκειμένου να προκύψουν συμπεράσματα από την συσχέτιση των ενεργειών με τα μεγέθη που υπολογίζονται για την ρωγμή.

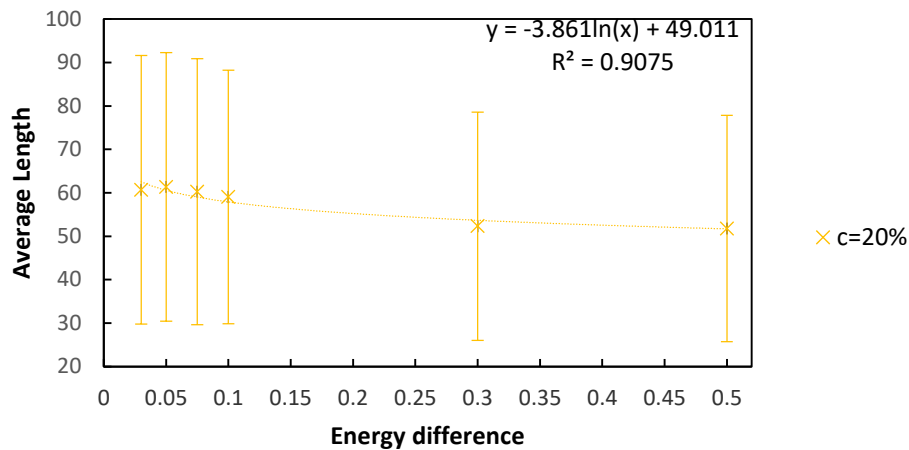
Χρησιμοποιήθηκαν έξι βασικές διαφορές ενεργειών σύνδεσης, βάση των οποίων αναγράφονται στον πίνακα 5.4 οι τιμές των ενεργειών σύνδεσης για τα τρία είδη στοιχείων με την μορφή  $E = E_{mat}, E_{gb}, E_{inc}$ , δηλαδή ενέργεια για τα στοιχεία μήτρας, διεπιφάνειας, κρυσταλλίτη. Η διαφορά ενεργειών αντιστοιχείται στις διαφορές  $E_{gb} - E_{mat}, E_{inc} - E_{gb}$ , ενώ αναγράφονται και οι τιμές της αναλογίας  $\frac{E_{inc}}{E_{gb}}$ .

$\Delta E$	$E_{inc}/E_{gb}$	$E = E_{mat}, E_{gb}, E_{inc}$
0.03	1.03	E = 1.0, 1.03, 1.06
0.05	1.05	E = 1.0, 1.05, 1.1
0.075	1.07	E = 1.0, 1.075, 1.15
0.1	1.09	E = 1.0, 1.1, 1.2
0.3	1.23	E = 1.0, 1.3, 1.6
0.5	1.33	E = 1.1, 1.5, 2

Πίνακας 5.4 Περιπτώσεις διαφοράς ενεργειών σύνδεσης και των τιμών που προκύπτουν για τα στοιχεία

Οι τιμές των υπόλοιπων παραμέτρων που παρουσιάζονται στην ενότητα αυτή καθορίζονται ως εξής:  $P_f = 0.9, c = 20\%, KT = 0.1$ .

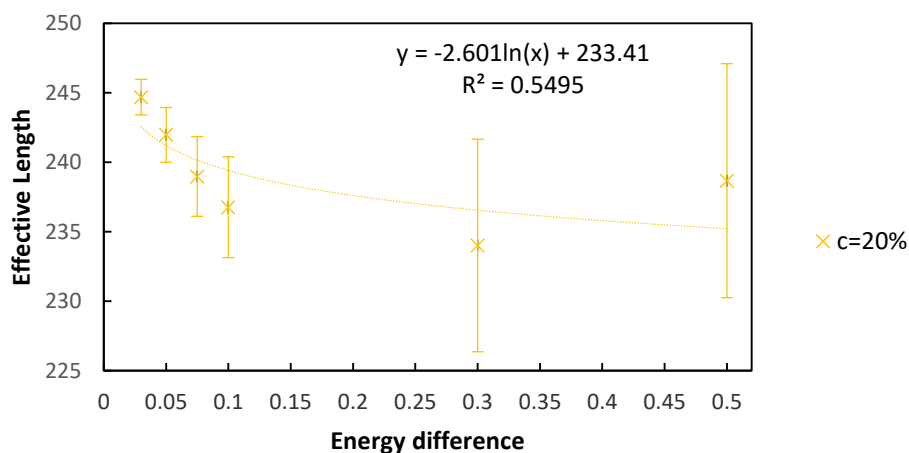
### Σχολιασμός μέσου μήκους-διαφορά ενέργειας σύνδεσης



Διάγραμμα 5.20 Μέσο μήκος προς διαφορά ενέργειας  $\Delta E$ , για  $c=20\%$ ,  $Pf=0.9$ ,  $KT=0.1$ ,  $(l \times w)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$

Παρατηρείται στο διάγραμμα 5.20, πως αρχικά υπάρχει μια μικρή αύξηση για το μέσο μήκος, ενώ για την τιμή ενεργειακής διαφοράς  $\Delta E = 0.05$  και μετά, η τιμή του μέσου μήκους μειώνεται. Η εξήγηση για την τάση αυτή, έγκειται στον όρο  $e^{-\frac{\Delta E}{KT}}$  που εμπεριέχεται στις εξισώσεις καθορισμού των πιθανοτήτων κίνησης 3.6, 3.7. Πρόκειται για την αντίστροφη περίπτωση από αυτή που περιεγράφηκε για την επίδραση της θερμοκρασίας στο μέσο μήκος. Με την αύξηση της ενεργειακής διαφοράς, καθίσταται πιο δύσκολο να υπερβληθούν οι ενεργειακές διαφορές και να υπάρξει κίνηση από στοιχείο χαμηλότερης ενέργειας σε στοιχείο υψηλότερης. Ομοίως με την μέση τιμή, μειώνονται και οι τιμές για την τυπική απόκλιση.

### Σχολιασμός ενεργού μήκους-διαφορά ενέργειας σύνδεσης



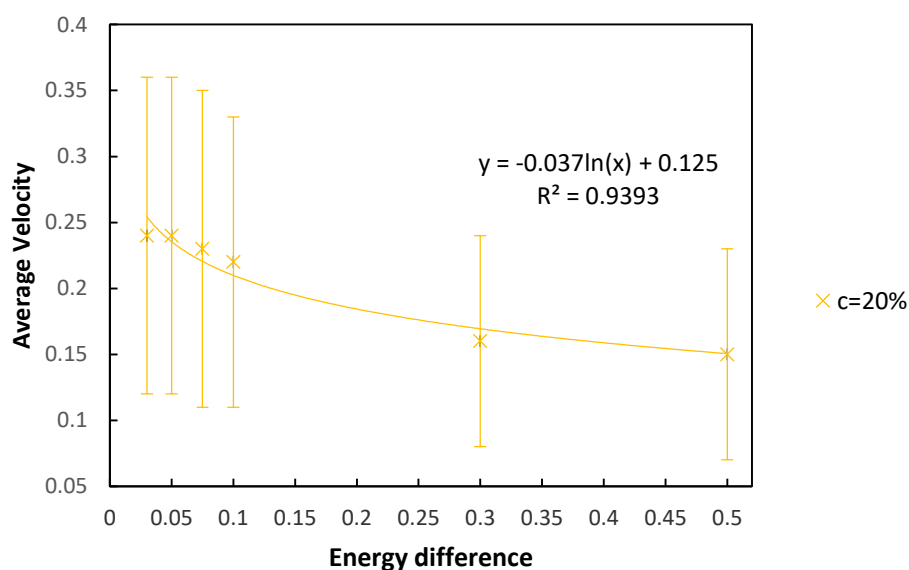
Διάγραμμα 5.21 Ενεργό μήκος προς διαφορά ενέργειας  $\Delta E$ , για  $c=20\%$ ,  $Pf=0.9$ ,  $KT=0.1$ ,  $(l \times w)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$



Η τάση του ενεργού μήκους έναντι της διαφοράς ενέργειας σύνδεσης που απεικονίζεται στο διάγραμμα 5.21 είναι μειωτική. Γίνεται επίσης εμφανές πως με την αύξηση της  $\Delta E$ , αυξάνεται και η τυπική απόκλιση για κάθε τιμή. Είναι λογικό να παρατηρείται μείωση στην μέση τιμή, καθώς με την αύξηση των ενεργειών για κάθε στοιχείο, σε περίπτωση κίνησης από στοιχείο χαμηλότερης σε στοιχείο υψηλότερης ενέργειας, δαπανάται μεγαλύτερη ενέργεια. Συνεπώς, ο ρυθμός μείωσης της αρχικής ενέργειας είναι αρκετά μεγαλύτερος με αποτέλεσμα την μικρότερη συνολική διαδρομή της ρωγμής. Η αυξητική τάση στην τυπική απόκλιση εξηγείται με τις τιμές που λαμβάνει ο όρος  $e^{-\frac{\Delta E}{kT}}$  των εξισώσεων πιθανοτήτων κίνησης 3.6, 3.7. Με την αύξηση της  $\Delta E$ , ο όρος αυτός μειώνεται σημαντικά, οδηγώντας σε μεγάλες τιμές της πιθανότητας μη κίνησης  $P_a$  (για παράδειγμα,  $P_a = 0.95, 0.99$  για  $\Delta E = 0.3$  και  $0.5$ , για  $z = 3$ ). Επομένως, θα υπάρξουν περισσότερες περιπτώσεις μη κίνησης, οδηγώντας σε μεγαλύτερες αποκλίσεις της μέσης τιμής.

Σημαντική παρατήρηση αποτελεί το γεγονός πως για  $\Delta E = 0.075$  και  $\Delta E = 0.5$  οι τιμές του ενεργού μήκους είναι σχεδόν ίδιες (238.97 – 268.67). Πρόκειται για τις αναλογίες  $\frac{E_{inc}}{E_{gb}} = 1.07, 1.33$ , αντίστοιχα και αξίζει να σημειωθεί, καθώς οι αναλογίες των ενεργειών μπορεί να οδηγήσουν σε συμπεράσματα για την καλύτερη βαθμονόμηση του μοντέλου.

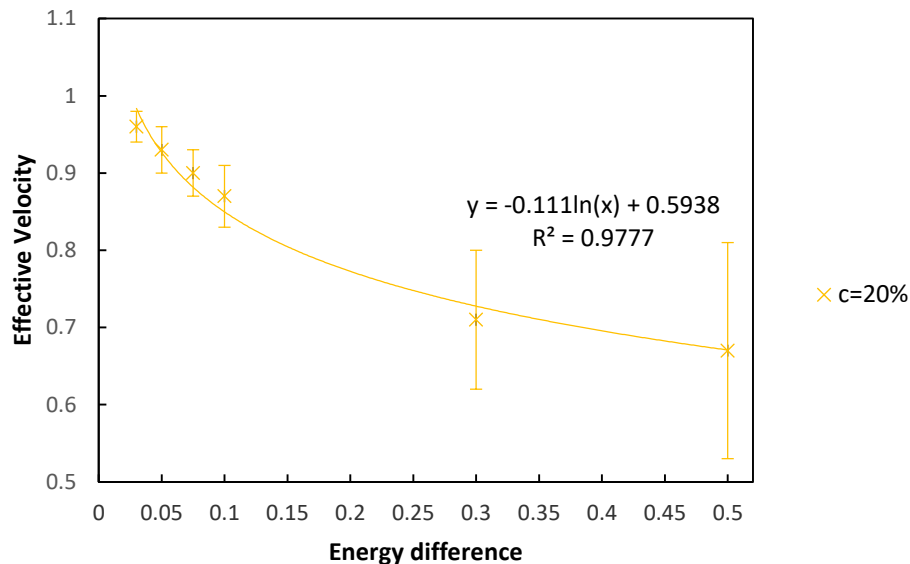
### Σχολιασμός μέσης ταχύτητας-διαφορά ενέργειας σύνδεσης



Διάγραμμα 5.22 Μέση ταχύτητα προς διαφορά ενέργειας  $\Delta E$ , για  $c=20\%$ ,  $P_f=0.9$ ,  $KT=0.1$ ,  $(l \times w)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$

Όπως απεικονίζεται στο διάγραμμα 5.22, η συμπεριφορά που παρουσιάζει το μοντέλο για την μέση ταχύτητα, είναι παρόμοια με αυτή του μέσου μήκους. Για τις τιμές  $\Delta E = 0.03, 0.05$  πρόκειται για τις ίδιες τιμές, ενώ στη συνέχεια η ενεργή ταχύτητα εκπίπτει. Ανάλογη είναι η συμπεριφορά για την τυπική απόκλιση.

### Σχολιασμός ενεργής ταχύτητας-διαφορά ενέργειας σύνδεσης



Διάγραμμα 5.23 Ενεργή ταχύτητα προς διαφορά ενέργειας  $\Delta E$ , για  $c=20\%$ ,  $P_f=0.9$ ,  $KT=0.1$ ,  $(l \times w)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5, d=1$

Στο διάγραμμα 5.23 για την ενεργή ταχύτητα, είναι εμφανής η εκπτωτική τάση των τιμών για την αύξηση της διαφοράς ενέργειας σύνδεσης. Η παρατήρηση αυτή είναι αναμενόμενη, καθώς παρόμοια είναι η συμπεριφορά για το ενεργό μήκος. Ο σχολιασμός που δόθηκε για το διάγραμμα 5.21, έχει εφαρμογή και για την εξεταζόμενη περίπτωση της ενεργής ταχύτητας. Με την αύξηση της διαφοράς ενέργειας σύνδεσης  $\Delta E$ , αυξάνονται οι τιμές για την πιθανότητα μη κίνησης  $P_a$ . Επομένως, αυξάνεται η τιμή του χρόνου ακινησίας  $still_{TIMES}$ , συνεπώς και του συνολικού χρόνου  $move_{TIMES} + still_{TIMES}$ . Βάση της εξίσωσης της ενεργής ταχύτητας 4.1, αυξάνεται ο παρονομαστής. Σε συνδυασμό με την μείωση του ενεργού μήκους, που αποτελεί τον αριθμητή, προκύπτει συνολική μείωση της ενεργής ταχύτητας.

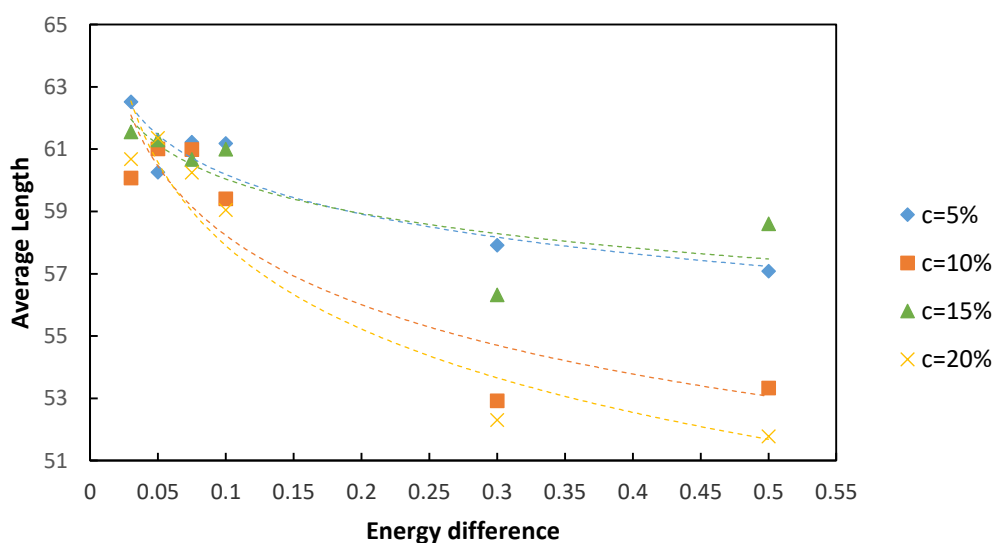
## 5.6 ΣΥΝΔΥΑΣΤΙΚΑ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΑ ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΩΝ ΣΥΝΔΕΣΗΣ

Οι τιμές που προκύπτουν για τις εξισώσεις που καθορίζουν τις πιθανότητες κίνησης για τις περιπτώσεις ενεργειακής διαφοράς και μη, (3.6 → 3.9) παίζουν καθοριστικό ρόλο για την συμπεριφορά του μοντέλου. Επιπλέον, παρουσιάστηκαν κάποιες ενδιαφέρουσες παρατηρήσεις στην ενότητα 5.1. Επομένως είναι σημαντικό να εξεταστούν διάφοροι συνδυασμοί τιμών για τις παραμέτρους του συντελεστή  $P_f$ , της συγκέντρωσης, της θερμοκρασίας και των ενεργειών σύνδεσης. Ειδικά για τις τιμές των ενεργειών σύνδεσης φάνηκε πως επηρεάζουν σημαντικά τα αποτελέσματα. Για τον λόγο αυτό, στην ενότητα αυτή, παρουσιάζονται συνδυαστικά διαγράμματα, για τα χαρακτηριστικά μεγέθη της ρωγμής σε σχέση με τις ενεργειακές διαφορές και τις καμπύλες για τις παραμέτρους της συγκέντρωσης, του συντελεστή  $P_f$  και της θερμοκρασίας.

Επειδή σε κάθε διάγραμμα αναγράφονται τιμές για τουλάχιστον 12 τιμές, προκειμένου να είναι ευδιάκριτα τα σημεία, συμπεριλαμβάνονται μόνο τα σημεία για την μέση τιμή του εκάστοτε μεγέθους και οι γραμμές τάσης. Οι τιμές της τυπικής απόκλισης με την μορφή των error bars, παρατίθενται όπου κρίνεται αναγκαίο.

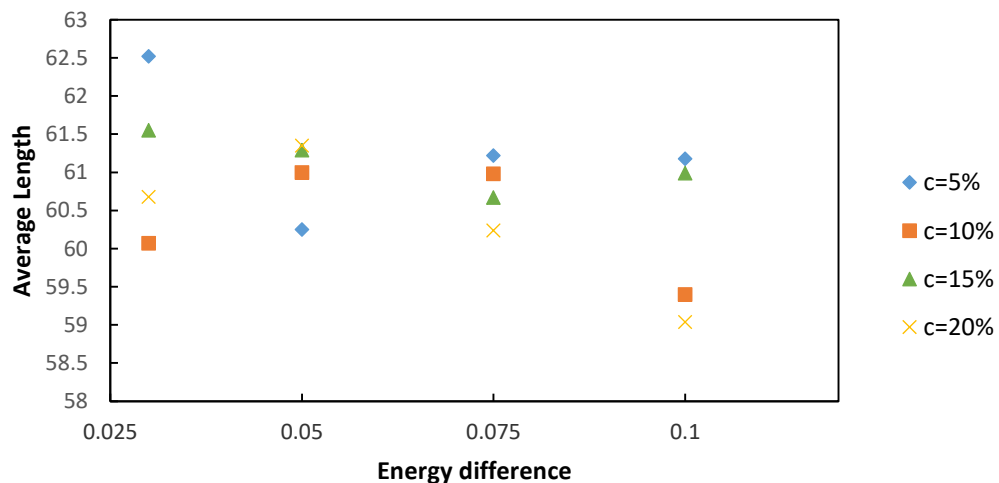
### 5.6.1 ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΩΝ ΣΥΝΔΕΣΗΣ ΚΑΙ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ

#### Σχολιασμός μέσου μήκους-συγκέντρωσης



Διάγραμμα 5.24 Μέσο μήκος προς διαφορά ενέργειας  $\Delta E$  και συγκέντρωση για  $P_f=0.9, K_T=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1$

Η πρώτη πληροφορία που εξάγεται από το διάγραμμα 5.24, είναι πως για όλες τις συγκεντρώσεις, το μέσο μήκος παρουσιάζει εκπτωτική τάση. Σημαντική είναι η παρατήρηση πως οι γραμμές τάσεις για  $c = 5,15\%$  είναι αρκετά κοντά. Μία δεύτερη παρατήρηση πρόκειται για την πυκνότητα των τιμών. Θα μπορούσε να πει κανείς πως πρόκειται για δύο διαφορετικές περιοχές. Για τις πρώτες ενεργειακές διαφορές, οι τιμές μέσου μήκους βρίσκονται αρκετά κοντά για όλες τις συγκεντρώσεις, ενώ για τις τιμές  $\Delta E = 0.3, 0.5$  υπάρχει μεγαλύτερη διακύμανση για τις διαφορετικές τιμές συγκεντρώσεων. Καθώς στις μικρές τιμές ενεργειακών διαφορών δεν είναι ευδιάκριτα τα σημεία, παρατίθεται το διάγραμμα 5.25, το οποίο αποτελεί την υπό εξέταση περιοχή του διαγράμματος 5.24.

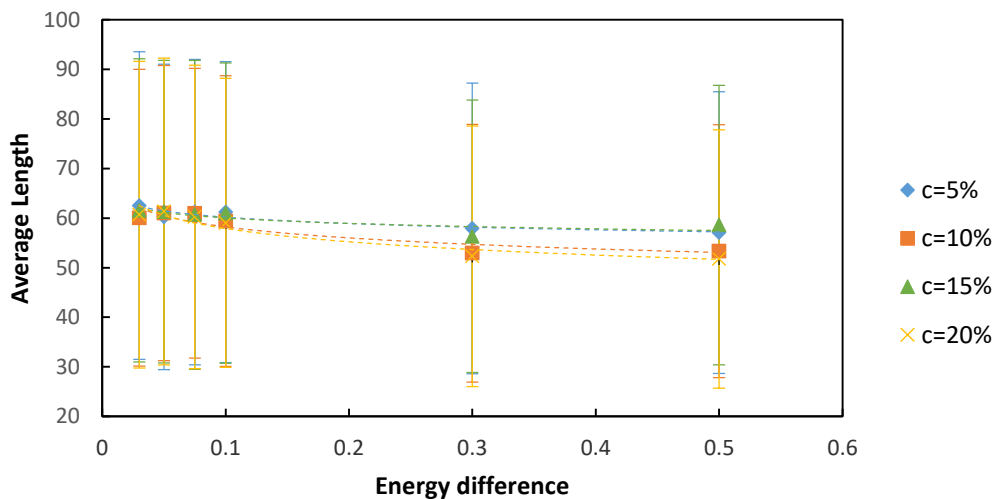


Διάγραμμα 5.25 Περιοχή του διαγράμματος 4.24 για  $\Delta E = 0.025 \rightarrow 0.1$

Αρχικά, είναι εμφανές στο διάγραμμα 5.25 πως για τις τιμές  $\Delta E = 0.05, 0.075$  οι τιμές του μέσου μήκους βρίσκονται αρκετά κοντά μεταξύ τους για όλες τις συγκεντρώσεις, κάτι που δεν ισχύει για τις άλλες δύο τιμές. Συνδυαστικά με το διάγραμμα 5.24, φαίνεται πως καθώς οι τιμές ενεργειακής διαφοράς αυξάνονται, οι διαφορές για το μέσο μήκος γίνονται μικρότερες για τις διαφορετικές συγκεντρώσεις, ενώ από την τιμή  $\Delta E = 0.1$  και μετά, οι διαφορές γίνονται μεγαλύτερες.

Παρατηρείται πως για κάθε τιμή ενεργειακής διαφοράς  $\Delta E$ , η σειρά των τιμών για κάθε συγκεντρώση δεν είναι η ίδια. Για παράδειγμα, για  $\Delta E = 0.03$ , οι συγκεντρώσεις που αντιστοιχούν στις τιμές μέσου μήκους κατά αύξουσα σειρά είναι  $c(\%) = 10, 20, 15, 5$ , ενώ για  $\Delta E = 0.05$ , είναι  $c(\%) = 5, 10, 15, 20$ . Με την

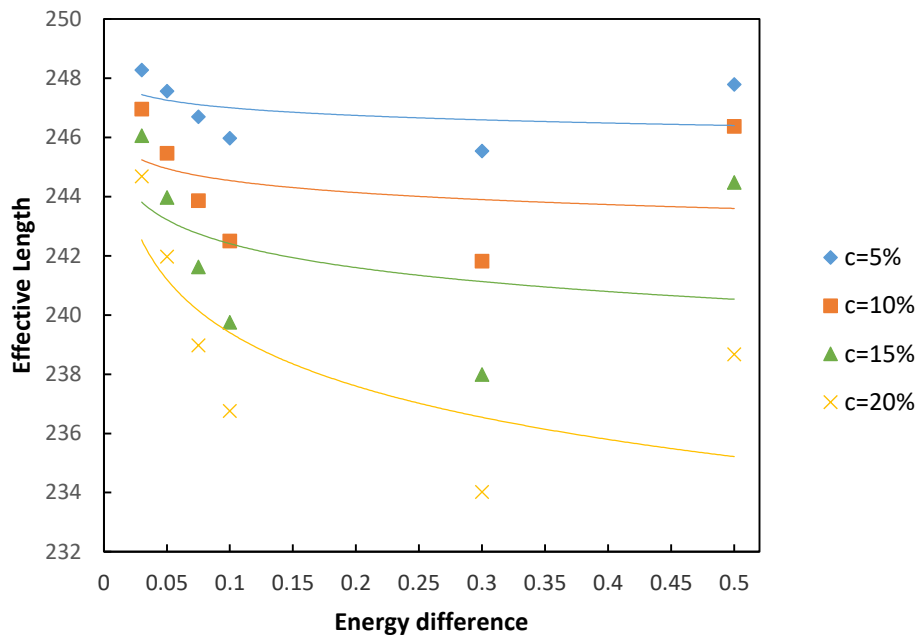
προσθήκη των error bars για το διάγραμμα 5.25 στο διάγραμμα 5.26, γίνεται εμφανές ότι πρόκειται για μεγάλες τιμές τυπικής απόκλισης. Συνεπώς, η σειρά των τιμών για τις διαφορετικές συγκεντρώσεις, στις ίδιες τιμές ενεργειακής διαφοράς  $\Delta E$ , μπορεί να θεωρηθεί πως δεν έχει ιδιαίτερη σημασία. Προκύπτει, πως για τις ενεργειακές διαφορές  $\Delta E$  οι τιμές του μέσου μήκους μειώνονται, αλλά με μέγιστη διαφορά περίπου 9 μονάδων (14%) μεταξύ  $\Delta E_{min} - \Delta E_{max} = 0.03 - 0.5$ , για  $c = 20\%$ , ενώ για τις διαφορετικές τιμές  $c$  σε κάθε  $\Delta E$  είναι περίπου οι ίδιες.



Διάγραμμα 5.26 Περιοχή του διαγράμματος 4.24 για  $\Delta E = 0.025 \rightarrow 0.1$  με την προσθήκη των error bars

Η εξήγηση για την συμπεριφορά που αναλύθηκε, έγκειται στην γεωμετρία και τον προσανατολισμό των κρυσταλλιτών. Καθώς πρόκειται για κρυσταλλίτες με επίμηκες σχήμα και σε προσανατολισμό οριζόντιο και κάθετο, δρύνε σαν αναχώματα περιορίζοντας την ρωγμή σε μια συγκεκριμένη περιοχή. Στο διάγραμμα μέσου μήκους-συγκέντρωσης για κρυσταλλίτες τετραγωνικού σχήματος (Nasikas, 2018) παρατηρήθηκε πως με την αύξηση της συγκέντρωσης, το μέσο μήκος μειώνεται γραμμικά, ενώ στην παρούσα περίπτωση η μείωση γίνεται λογαριθμικά και σε πολύ μικρό ρυθμό, ακόμα και για την αύξηση ενεργειακών διαφορών. Φαίνεται δηλαδή, πως το σχήμα του κρυσταλλίτη και η σκλήρυνση του υλικού κινούμενοι από την μήτρα προς τον κρυσταλλίτη, παίζουν μεγαλύτερο ρόλο από την συγκέντρωση και τις τιμές ενεργειακής διαφοράς (τουλάχιστον για αυτές που εξετάστηκαν).

## Σχολιασμός ενεργού μήκους-συγκέντρωσης

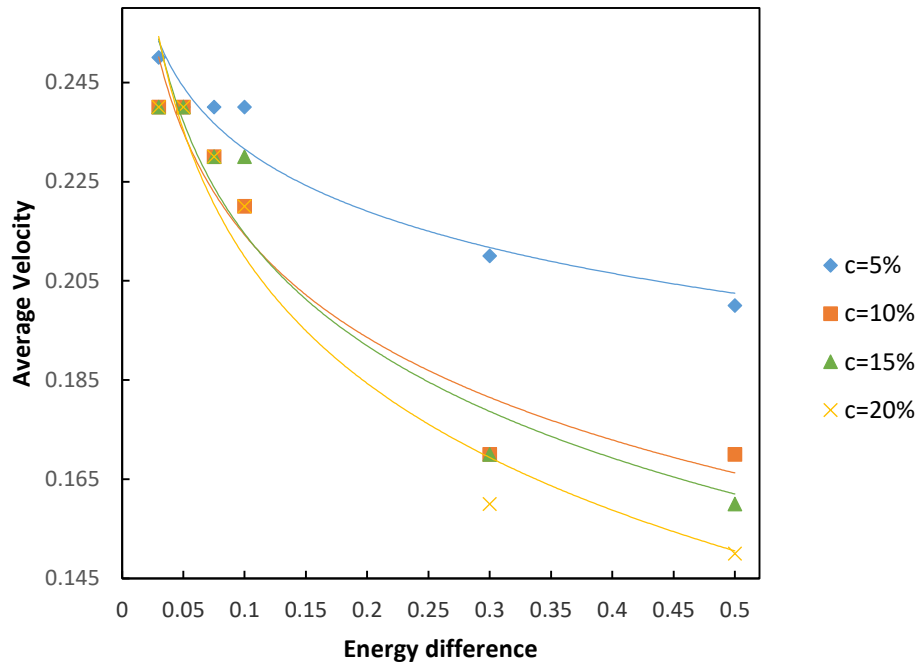


Διάγραμμα 5.27 Ενεργό μήκος προς διαφορά ενέργειας  $\Delta E$  και συγκέντρωση για  $Pf=0.9, KT=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1$

Για το διάγραμμα ενεργού μήκους 5.27, είναι εμφανές πως με την αύξηση της ενεργειακής διαφοράς, η τάση είναι εκπτωτική. Παρατηρείται επίσης, πως για όλες τις συγκεντρώσεις τηρείται μια συγκεκριμένη τάση. Με την αύξηση δηλαδή της συγκέντρωσης, προκύπτουν χαμηλότερες καμπύλες. Επιπλέον, με την αύξηση στις ενεργειακές διαφορές, προκύπτει και αύξηση των διαφορών για τις διαφορετικές τιμές των συγκεντρώσεων. Το αποτέλεσμα είναι λογικό, καθώς όπως αναλύθηκε στις ενότητες 5.1 και 5.5, με την αύξηση της συγκέντρωσης και της ενεργειακής διαφοράς, προκύπτει μεγαλύτερος ρυθμός μείωσης της αρχικής ενέργειας, συνεπώς και μείωση της συνολικής διαδρομής της ρωγμής.

Διαφοροποίηση εμφανίζεται για την τιμή  $\Delta E = 0.5$ , όπου ξαφνικά οι τιμές μέσου μήκους για όλες τις συγκεντρώσεις, με τις τιμές για  $c(\%) = 5, 10, 15$  να είναι κοντά σε αυτές για  $\Delta E = 0.03$ , ενώ για  $c(\%) = 20$ , για  $\Delta E = 0.03$ .

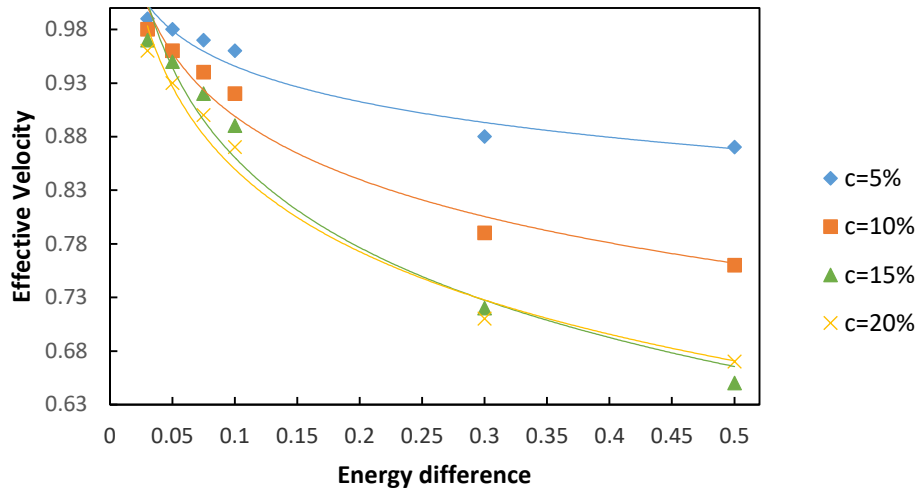
## Σχολιασμός μέσης ταχύτητας-συγκέντρωσης



Διάγραμμα 5.28 Μέση ταχύτητα προς διαφορά ενέργειας  $\Delta E$  και συγκέντρωση για  $Pf=0.9, KT=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1$

Όπως είναι αναμενόμενο, με την αύξηση των ενεργειακών διαφορών και την αύξηση της συγκέντρωσης, η μέση ταχύτητα μειώνεται. Με την αύξηση της συγκέντρωσης η ρωγμή συναντά πιο συχνά κρυσταλλίτες και συνεπώς προκύπτουν οι περιπτώσεις ενεργειακών διαφορών για τις σχέσεις των πιθανοτήτων, με αποτέλεσμα η τιμή πιθανότητας μη κίνησης  $P_a$  να λαμβάνει μη μηδενική τιμή. Επομένως αυξάνεται ο χρόνος μη κίνησης, αλλά και ο συνολικός χρόνος (όπως σχολιάστηκε εκτενώς σε παρόμοιες περιπτώσεις προηγουμένως), ενώ με την παράλληλη αύξηση των ενεργειακών διαφορών, η τιμή πιθανότητας μη κίνησης  $P_a$  αυξάνεται σε μεγαλύτερο βαθμό οδηγώντας σε ακόμα μεγαλύτερες τιμές συνολικού χρόνου διάδοσης  $move_{TIMES} + still_{TIMES}$ . Η αύξηση του συνολικού χρόνου, με την διατήρηση περίπου σταθερού του μέσου μήκους, οδηγεί βάση της εξίσωσης 4.2, στην μείωση της μέσης ταχύτητας, όπως απεικονίζεται και στο διάγραμμα 5.28.

## Σχολιασμός ενεργής ταχύτητας-συγκέντρωσης

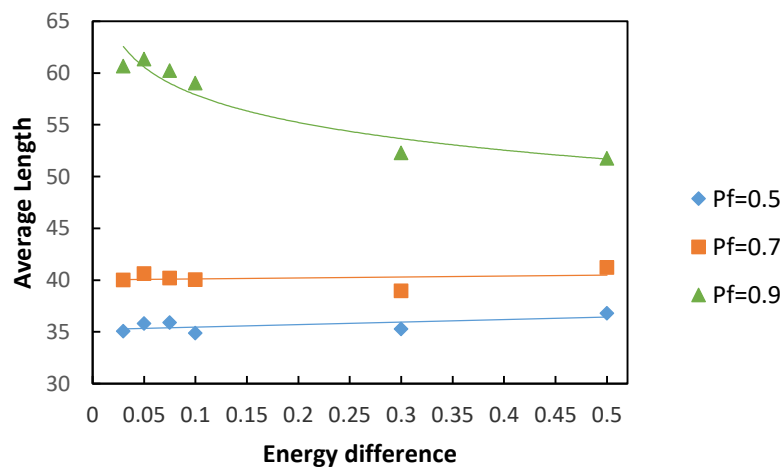


Διάγραμμα 5.29 Μέση ταχύτητα προς διαφορά ενέργειας  $\Delta E$  και συγκέντρωση για  $P_f=0.9, K_T=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1$

Για την περίπτωση της ενεργής ταχύτητας σε σχέση με τις διάφορες τιμές ενεργειακών διαφορών, αλλά και συγκεντρώσεων, φαίνεται στο διάγραμμα 5.29 η εκπτωτική τάση γενικά και με μεγαλύτερο ρυθμό ειδικά, μετά την τιμή  $\Delta E = 0.1$ . Η εξήγηση για την απεικονιζόμενη συμπεριφορά, είναι η αύξηση του συνολικού χρόνου, όπως σχολιάστηκε για την μέση ταχύτητα, αλλά και για τον ρυθμό μείωσης της αρχικής ενέργειας, όπως σχολιάστηκε για το ενεργό μήκος, σε συνδυασμό με την εξίσωση 4.1 για τον ορισμό της ενεργής ταχύτητας.

### 5.6.2 ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΩΝ ΣΥΝΔΕΣΗΣ ΚΑΙ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗ $P_f$

#### Σχολιασμός μέσου μήκους-συντελεστή $P_f$



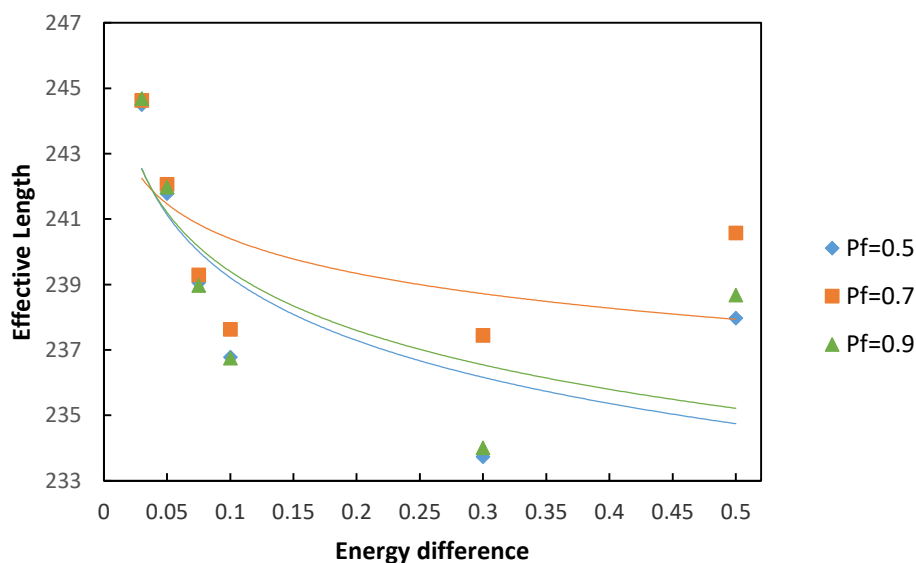
Διάγραμμα 5.30 Μέσο μήκος προς ενεργειακή διαφορά  $\Delta E$  και  $P_f$  για  $c=20\%, K_T=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1$



Η πρώτη παρατήρηση για το διάγραμμα 5.30, είναι πως για όλες τις τιμές ενεργειακής διαφοράς  $\Delta E$  παρατηρείται αύξηση του μέσου μήκους με την αύξηση του  $P_f$  και για την τιμή  $P_f = 0.9$ , υπάρχει άλμα στις τιμές αυτές. Σημαντικό είναι το γεγονός, πως για τις τιμές  $P_f = 0.5, 0.7$  οι γραμμές τάσεις προσεγγίζουν καλύτερα τις τιμές για γραμμική εξίσωση, ενώ για  $P_f = 0.9$  με λογαριθμική. Φαίνεται δηλαδή να υπάρχει μεταβολή στη μορφή των τιμών μέσου μήκους για την μεγάλη τιμή  $P_f = 0.9$ . Δίνεται η εντύπωση, πως οι τιμές ενεργειακής διαφοράς, επιδρούν σε μεγαλύτερο βαθμό για  $P_f = 0.9$ , καθώς η μείωση που παρατηρείται στο μέσο μήκος από την τιμή  $\Delta E = 0.1$  για την τιμή  $\Delta E = 0.3$ , είναι μεγαλύτερη για  $P_f = 0.9$ .

Επίσης, υπάρχει διαφοροποίηση στην τάση του μέσου μήκους με την αύξηση των ενεργειακών διαφορών. Για  $\Delta E = 0.05$ , παρατηρείται μικρή αύξηση, στη συνέχεια μια μικρή μείωση και για την τιμή  $\Delta E = 0.5$ , παρατηρείται πως υπάρχει μικρή αύξηση ξανά. Η ερμηνεία των αποτελεσμάτων είναι αυτή που δόθηκε στην ενότητα 5.2 για το μέσο μήκος. Με την αύξηση του  $P_f$ , η ρωγμή φαίνεται να πηγαίνει πιο μακριά από την περιοχή εγκλωβισμού και με την αύξηση  $\Delta E$  από  $0.1 \rightarrow 0.3, 0.5$  φαίνεται απότομη μείωση για το μέσο μήκος, λόγω της μείωσης της αρχικής ενέργειας, καθώς για μεγάλη τιμή  $P_f$ , αυξάνεται η κατευθυντικότητα και εισέρχεται πιο συχνά σε κελιά στοιχείων υψηλότερης ενέργειας. Αυτή η παρατήρηση, έχει μεγαλύτερη επίδραση για την αύξηση  $\Delta E$  στις τιμές που περιεγράφηκε.

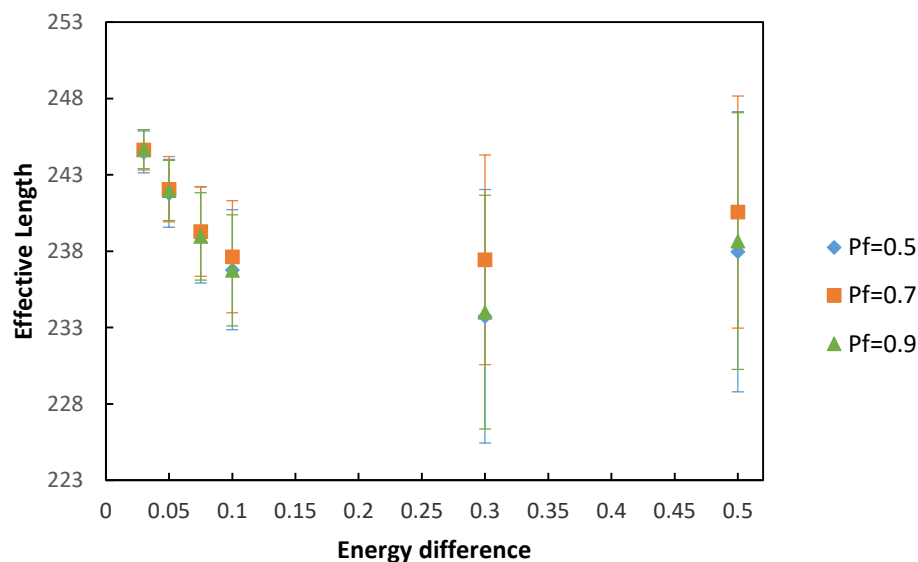
### Σχολιασμός ενεργού μήκους-συντελεστή $P_f$



Διάγραμμα 5.31 Ενεργό μήκος προς ενεργειακή διαφορά  $\Delta E$  και  $P_f$ , για  $c=20\%, KT=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1$

Παρόμοια συμπεριφορά με αυτή για το μέσο μήκος, παρουσιάζεται στο διάγραμμα 5.31 για το ενεργό. Με την αύξηση της ενεργειακής διαφοράς  $\Delta E$ , το ενεργό μήκος μειώνεται λογαριθμικά. Για τις διαφορετικές συγκεντρώσεις, με την αύξηση της  $\Delta E$ , αυξάνεται και η διαφορά μεταξύ τους, για τις ίδιες τιμές  $\Delta E$ . Για τις τιμές  $\Delta E = 0.03, 0.05, 0.075, 0.1$  φαίνεται πως οι τιμές για το ενεργό μήκος, ενώ αρχικά ταυτίζονται, αρχίζουν να διαφέρουν μεταξύ τους με την αύξηση  $\Delta E$ . Για  $\Delta E = 0.1, 0.3$  φαίνεται πως η τιμή του ενεργού μήκους μένει σταθερή για  $P_f = 0.7$ . Αξιοσημείωτο είναι το γεγονός, πως για  $P_f = 0.7$ , το μέσο μήκος έχει μεγαλύτερες τιμές για όλες σχεδόν τις τιμές  $\Delta E$ , σε σύγκριση με τις υπόλοιπες  $P_f$ .

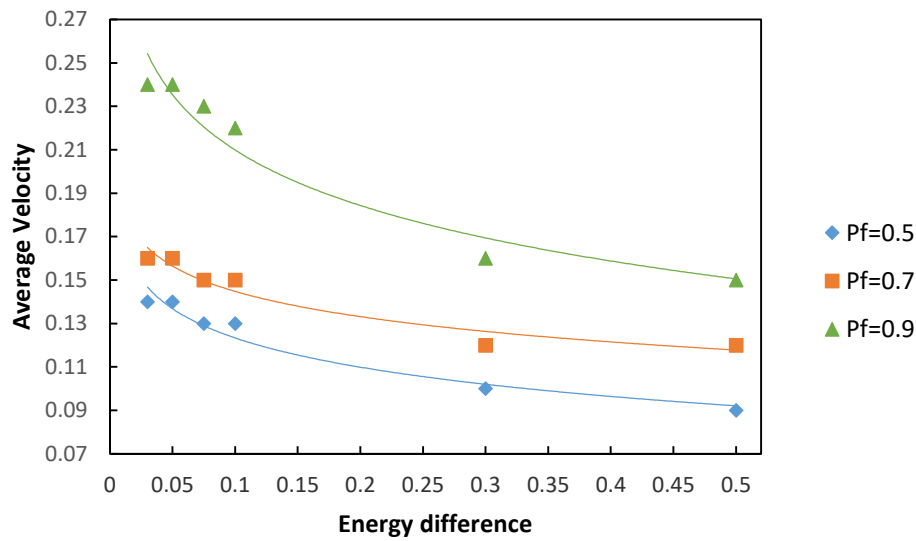
Καθώς παρουσιάζονται ενδιαφέρουσες παρατηρήσεις για το διάγραμμα ενεργού μήκους 5.31, παρατίθεται το διάγραμμα 5.32. Πρόκειται για το διάγραμμα 5.31, στο οποίο προστίθενται τα error bars.



Διάγραμμα 5.32 Ενεργό μήκος προς ενεργειακή διαφορά  $\Delta E$  και  $P_f$ , για  $c=20\%, KT=0.1, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1$  με την προσθήκη των error bars

Παρατηρείται πως η αύξηση της τυπικής απόκλισης συμβαίνει για όλες τις τιμές  $\Delta E$ . Η ερμηνεία είναι αυτή που δόθηκε στην ενότητα 5.3 για τον σχολιασμό του ενεργού μήκους. Αξίζει να σημειωθεί πως για  $P_f = 0.7$ , η τυπική απόκλιση είναι μικρότερη σε σύγκριση με τις άλλες δύο τιμές, για όλες τις ενεργειακές διαφορές.

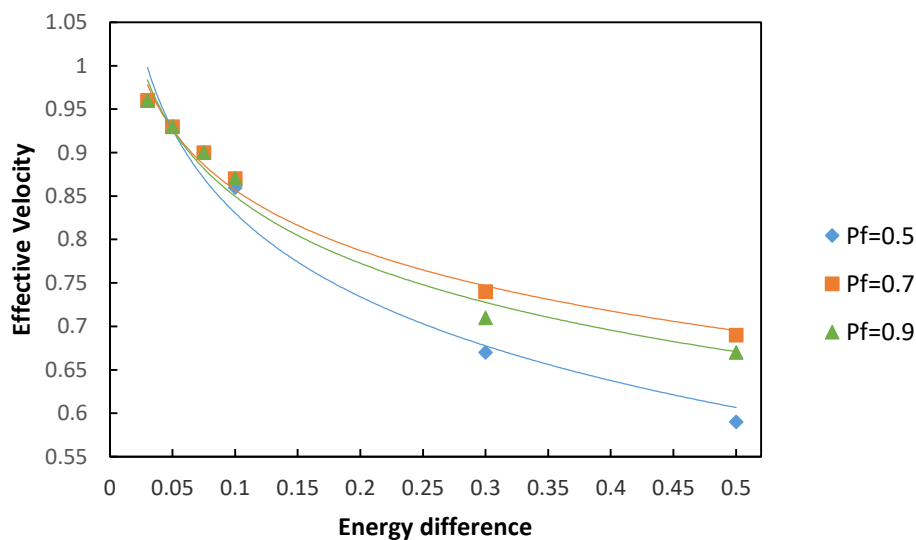
### Σχολιασμός μέσης ταχύτητας-συντελεστή $P_f$



Διάγραμμα 5.33 Μέση ταχύτητα προς ενεργειακή διαφορά  $\Delta E$  και  $P_f$ , για  $c=20\%$ ,  $KT=0.1$ ,  $(l \times w)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$

Η συμπεριφορά που διαφαίνεται στο διάγραμμα 5.33 για την μέση ταχύτητα είναι αναμενόμενη. Παρουσιάζεται εκπτωτική τάση με την αύξηση της ενεργειακής διαφοράς  $\Delta E$  και ισχύουν οι ίδιες παρατηρήσεις με αυτές για το μέσο μήκος. Η διαφορά έγκειται στο γεγονός, πως οι τιμές της μέσης ταχύτητας για  $P_f = 0.5, 0.7$  προσεγγίζονται καλύτερα από γραμμές τάσης λογαριθμικής μορφής, σε σχέση με την γραμμική μορφή για το μέσο μήκος, όπως φαίνεται στο διάγραμμα 5.31.

### Σχολιασμός ενεργής ταχύτητας-συντελεστή $P_f$



Διάγραμμα 5.34 Ενεργή ταχύτητα προς ενεργειακή διαφορά  $\Delta E$  και  $P_f$ , για  $c=20\%$ ,  $KT=0.1$ ,  $(l \times w)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$

Η τάση για την ενεργή ταχύτητα σε σχέση με την αύξηση της ενεργειακής διαφοράς είναι εκπτωτική για όλες τις τιμές  $P_f$ . Τα αποτελέσματα στο διάγραμμα 5.34, είναι τα αναμενόμενα και είναι σε αναλογία με το διάγραμμα του ενεργούς μήκους 5.32. Η διαφορά εντοπίζεται πως η μείωση των τιμών ισχύει για όλες τιμές  $\Delta E$ , ακόμα και για την τιμή  $\Delta E = 0.5$ .

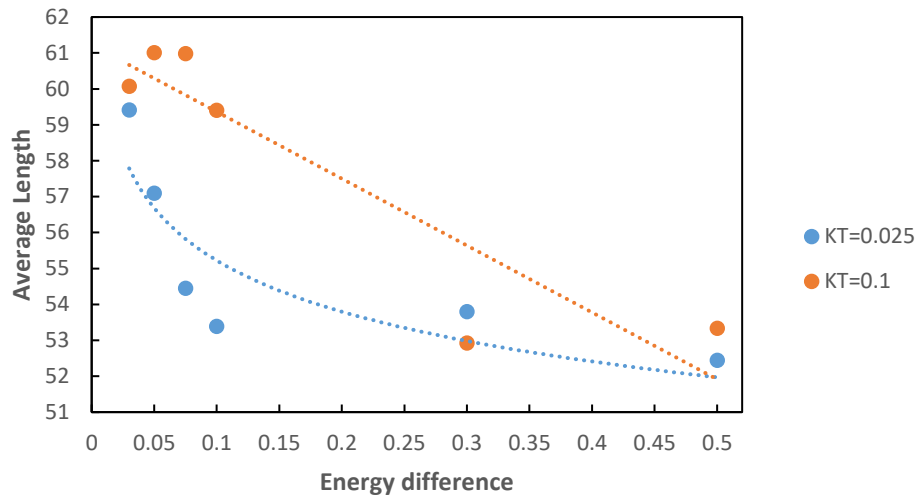
Συμπερασματικά για όλα τα διαγράμματα φαίνεται πως η παράμετρος της ενεργειακής διαφοράς, επιδρά σε μεγαλύτερο βαθμό στο ενεργό μήκος και την ενεργή ταχύτητα, κυρίως για τις τιμές  $\Delta E = 0.03, 0.05, 0.075, 0.1$ . Αντίθετα, η επίδραση του συντελεστή  $P_f$  είναι μεγαλύτερη από αυτή των  $\Delta E$ , για το μέσο μήκος και την μέση ταχύτητα, για όλες τις τιμές  $\Delta E$ . Εξαιρέση αποτελεί η διαφορά που παρατηρείται για  $P_f = 0.9$  και  $\Delta E = 0.3, 0.5$ , όπου φαίνεται οι συγκεκριμένες τιμές  $\Delta E$  να επιδρούν στην συμπεριφορά του μέσου μήκους σημαντικά.

### 5.6.3 ΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΩΝ ΣΥΝΔΕΣΗΣ ΚΑΙ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

Στην ενότητα 5.4, παρατηρήθηκε πως για τις τιμές θερμοκρασίας  $KT = 0.025, 0.1$  υπήρξαν οι σημαντικές διαφοροποιήσεις στην συμπεριφορά των μεγεθών των μηκών και των ταχυτήτων διάδοσης της ρωγμής. Στην παρούσα ενότητα χρησιμοποιήθηκαν αυτές οι δύο τιμές θερμοκρασίας, προκειμένου να γίνει η περαιτέρω εξέταση της επίδρασης της διαφοράς ενεργειών σύνδεσης  $\Delta E$  σε συνδυασμό με την θερμοκρασία. Βάση των δύο αυτών παραμέτρων, ο όρος  $e^{-\frac{\Delta E}{KT}}$  στις εξισώσεις 3.6, 3.7 των εξισώσεων πιθανοτήτων κίνησης, λαμβάνει διαφορετικές τιμές και καθορίζει την συμπεριφορά του μοντέλου. Οι τις τιμές των υπόλοιπων παραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν είναι αυτές που ακολουθούν:  $c(\%) = 5, 10, 15, 20, P_f = 0.9, (l \times w) = (30 \times 2), d = 1, dl = 5$ .

Κατά την διεξαγωγή των προσομοιώσεων για τις τιμές των παραμέτρων που αναγράφηκαν, για τις συγκεντρώσεις  $c(\%) = 15, 20$ , παρόλο που χρησιμοποιήθηκε η μεγάλη τιμή  $P_f = 0.9$ , για την θερμοκρασία  $KT = 0.025$ , ο χρόνος εκτέλεσης του προγράμματος αυξήθηκε δραματικά. Οφείλεται στην σημαντικά μεγάλη αύξηση της πιθανότητας μη κίνησης  $P_a (= 0.9984, \Delta E = 0.05, P_f = 0.9)$  και στην αύξηση της συγκέντρωσης. Αναλυτικότερος σχολιασμός της ερμηνείας δόθηκε στην ενότητα 5.4. Επομένως, τα διαγράμματα που παρουσιάζονται στην ενότητα αυτή είναι για  $c(\%) = 10$ .

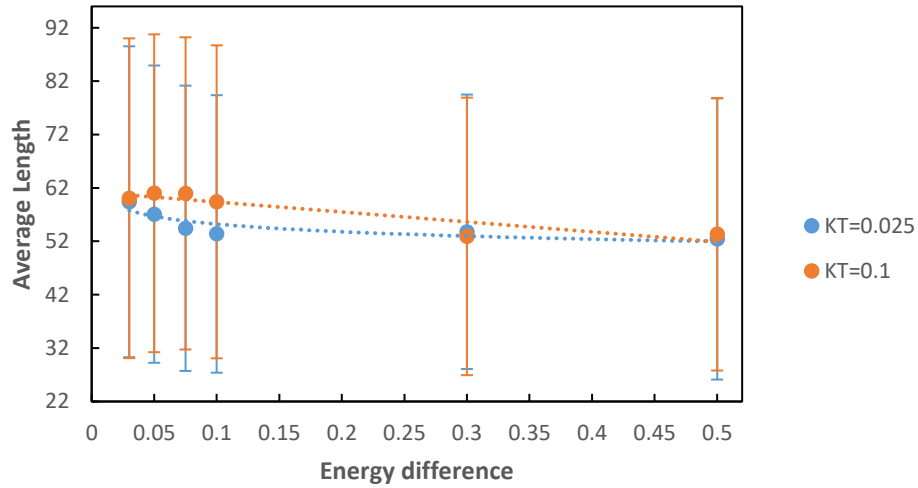
## Σχολιασμός μέσου μήκους-θερμοκρασίας



Διάγραμμα 5.35 Μέσο μήκος προς διαφορά ενέργειας  $\Delta E$  και θερμοκρασία για  $Pf=0.9, c=10\%, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1$

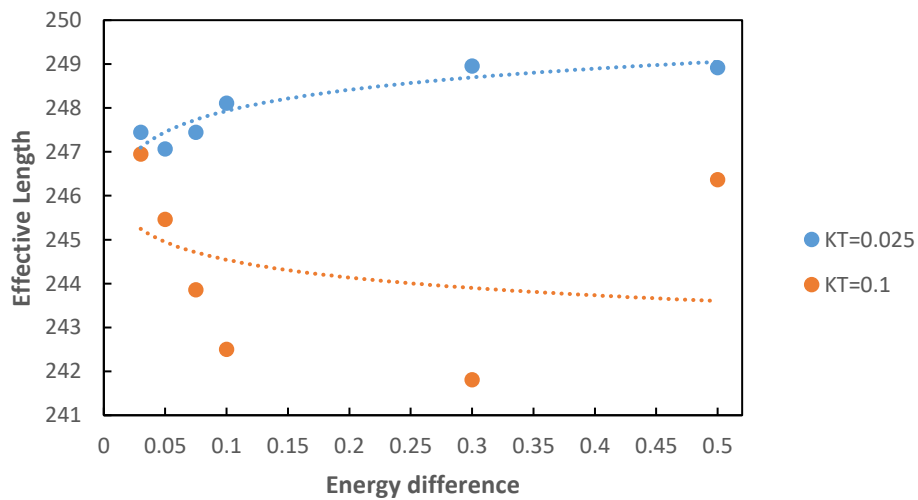
Από το διάγραμμα 5.35 γίνεται αμέσως κατανοητό πως πρόκειται για διαφορετική συμπεριφορά των μέσων τιμών για τις δύο θερμοκρασίες. Για την θερμοκρασία  $KT = 0.025$ , το μέσο μήκος μειώνεται ομαλά με την αύξηση της ενεργειακής διαφοράς, με εξαίρεση την τιμή  $\Delta E = 0.3$ , όπου φαίνεται να υπάρχει μια μικρή αύξηση. Αντίθετα, για την θερμοκρασία  $KT = 0.1$ , αρχικά υπάρχει μια μικρή αύξηση για τις τιμές  $\Delta E = 0.05, 0.075$ , ενώ μετά το μέσο μήκος μειώνεται. Οι τιμές της θερμοκρασίας  $KT = 0.025$ , προσεγγίζονται καλύτερα από γραμμή τάσης γραμμικής εξίσωσης, ενώ της  $KT = 0.1$ , από λογαριθμικής εξίσωσης. Επίσης, για όλες τις τιμές  $\Delta E$ , εκτός της  $\Delta E = 0.3$ , το μέσο μήκος είναι μεγαλύτερο για την θερμοκρασία  $KT = 0.1$ . Παρατηρείται πως οι μέγιστες διαφορές μεταξύ του μέσου μήκους, για τις διαφορετικές θερμοκρασίες, εμφανίζονται στις ενεργειακές διαφορές  $\Delta E = 0.05, 0.075, 0.1$ .

Καθώς στο διάγραμμα για το μέσο μήκος εμφανίζονται σημαντικές διαφορές, στο διάγραμμα 5.36 προστίθενται και τα error bars, για το μέσο μήκος έναντι των ενεργειακών διαφορών. Για την θερμοκρασία  $KT = 0.1$ , φαίνεται και από τα error bars, πως πρόκειται για υψηλότερες τιμές μέσου μήκους για  $\Delta E = 0.05, 0.075, 0.1$ , σε σχέση με την θερμοκρασία  $KT = 0.025$ . Συμπερασματικά, για τις ενεργειακές διαφορές  $\Delta E = 0.03, 0.3, 0.5$  υπάρχει οριακά ταύτιση της μέσης τιμής για το μέσο μήκος, ενώ οι τιμές τυπικής απόκλισης είναι αρκετά κοντά και για τις δύο  $KT$ .



Διάγραμμα 5.36 Μέσο μήκος προς διαφορά ενέργειας  $\Delta E$  και θερμοκρασία για  $P_f=0.9, c=10\%, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1$  με error bars

### Σχολιασμός ενεργού μήκους-θερμοκρασίας



Διάγραμμα 5.37 Ενεργό μήκος προς διαφορά ενέργειας  $\Delta E$  και θερμοκρασία για  $P_f=0.9, c=10\%, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1$

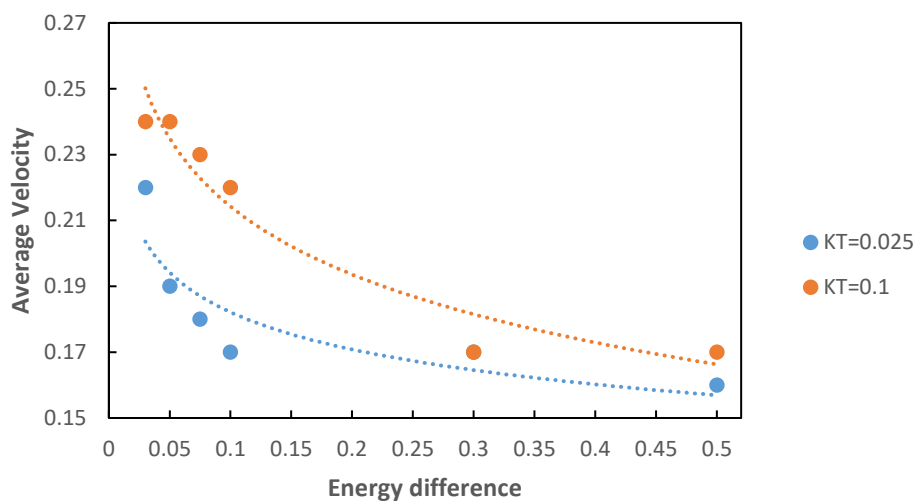
Για το ενεργό μήκος, όπως διαγράφονται τα αποτελέσματα στο διάγραμμα 5.37, φαίνεται πως για τις δύο θερμοκρασίες, ισχύει η αντίστροφη τάση. Για την θερμοκρασία  $KT = 0.025$  είναι αυξητική, ενώ για την  $KT = 0.1$  είναι εκπτωτική για την αύξηση της ενεργειακής διαφοράς  $\Delta E$ . Οι τιμές και για τις δύο θερμοκρασίες προσεγγίζονται από γραμμές λογαριθμικής εξίσωσης. Για την τιμή  $KT = 0.1$  παρουσιάζεται διαφορά στην συνολική εκπτωτική τάση, η τιμή του ενεργού μήκους για ενεργειακή διαφορά  $\Delta E = 0.5$ . Επιπρόσθετα, η τιμή του ενεργού μήκους

στη θέση αυτή (246.37) είναι ενδιάμεση των αντίστοιχων τιμών ενεργού μήκους για  $\Delta E = 0.03, 0.05$  (246.95, 245.46).

Για  $KT = 0.025$ , παρατηρείται μια μικρή μείωση μεταξύ των τιμών  $\Delta E = 0.03 - 0.05$  και στην συνέχεια αύξηση του ενεργού μήκους. Σε αντίθεση με την θερμοκρασία  $KT = 0.1$ , για τις τιμές ενεργειακής διαφοράς  $\Delta E = 0.03, 0.05, 0.075, 0.1$  οι τιμές παρουσιάζουν μικρές διακυμάνσεις. Φαίνεται επίσης πως για  $\Delta E = 0.3, 0.5$  οι τιμές του ενεργού μήκους είναι περίπου οι ίδιες.

Συμπερασματικά, φαίνεται πως για την θερμοκρασία  $KT = 0.025$  και την αύξηση της ενεργειακής διαφοράς  $\Delta E$ , η ρωγμή κινείται κυρίως σε κελιά ίδιας ενέργειας και όχι σε υψηλότερης, με αποτέλεσμα να είναι σχετικά μικρός ο ρυθμός μείωσης της αρχικής ενέργειας και επαγωγικά να αυξάνεται το ενεργό μήκος. Για  $KT = 0.1$ , φαίνεται πως η συμπεριφορά του μοντέλου αλλάζει σχετικά με το ενεργό μήκος, οδηγώντας σε μικρότερες τιμές με την αύξηση της ενεργειακής διαφοράς  $\Delta E$ .

### Σχολιασμός μέσης ταχύτητας-θερμοκρασίας

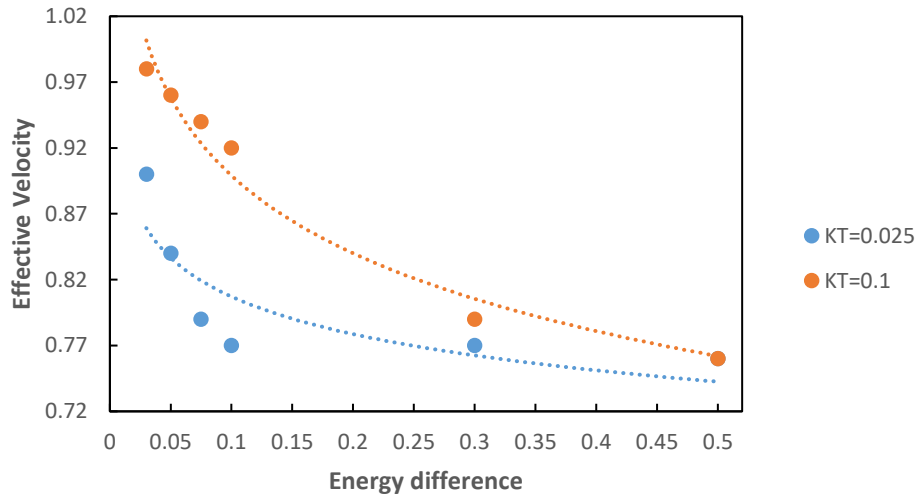


Διάγραμμα 5.38 Μέση ταχύτητα προς διαφορά ενέργειας  $\Delta E$  και θερμοκρασία για  $Pf=0.9, c=10\%, (l \times w)=(30 \times 2), dl=5, d=1$

Στο διάγραμμα 5.38 για την μέση ταχύτητα, αποτυπώνεται η αναμενόμενη συμπεριφορά και για τις δύο τιμές θερμοκρασιών. Πρόκειται για την μείωση της μέσης ταχύτητας με την αύξηση της ενεργειακής διαφοράς  $\Delta E$ . Για τις τιμές  $\Delta E = 0.03, 0.05$  η μέση ταχύτητα είναι η ίδια για  $KT = 0.1$ , ενώ για την τιμή  $\Delta E = 0.3$ , παρατηρείται πως υπάρχει ταύτιση για τις δύο θερμοκρασίες. Η ερμηνεία της εκπτώτικης τάσης δόθηκε στην ενότητα 5.5. Η καμπύλη για την  $KT = 0.1$  είναι πιο

υψηλή από αυτή της  $KT = 0.025$ , ενώ παρατηρείται διαφορά στον τύπο της γραμμής τάσης για την  $KT = 0.025$  από λογαριθμική για το μέσο μήκος, σε υπερβολική για την μέση ταχύτητα.

### Σχολιασμός ενεργής ταχύτητας-θερμοκρασίας



Διάγραμμα 5.39 Ενεργή ταχύτητα προς διαφορά ενέργειας  $\Delta E$  και θερμοκρασία για  $Pf=0.9, c=10\%, (l \times w) = (30 \times 2), dl=5, d=1$

Παρόμοιες παρατηρήσεις με την μέση ταχύτητα, προκύπτουν και για το διάγραμμα 5.39 για την ενεργή ταχύτητα. Η τάση και για τις δύο καμπύλες είναι εκπτωτική, με αυτή της  $KT = 0.1$  να είναι πιο ψηλά από την καμπύλη για  $KT = 0.025$ . Και για την ενεργή ταχύτητα, η γραμμή τάσης που προσεγγίζει με τον καλύτερο τρόπο τις τιμές της καμπύλης  $KT = 0.025$ , από λογαριθμική για το ενεργό μήκος, γίνεται υπερβολική για την ενεργή ταχύτητα. Για την τιμή  $\Delta E = 0.3$ , οι τιμές είναι αρκετά κοντά για τις δύο θερμοκρασίες, ενώ για  $\Delta E = 0.5$  ταυτίζονται. Η ερμηνεία για την εκπτωτική τάση δόθηκε στην ενότητα 5.5.



## 5.7 ΕΝΔΟΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗ-ΠΕΡΙΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗ ΔΙΑΔΟΣΗ (INTERGRANULAR-TRANSGRANULAR)

Όπως αναφέρθηκε και στην εισαγωγή, οι προσμίξεις παίζουν καθοριστικό ρόλο για την συμπεριφορά του υλικού, ανάλογα με την συμπεριφορά της ρωγμής όταν συναντά κρυσταλλίτες. Ο ενδοκρυσταλλικός τρόπος διάδοσης οδηγεί σε υψηλή αντοχή του υλικού, σε αντίθεση με τον περικρυσταλλικό τρόπο που οδηγεί σε αύξηση της σκληρότητας (R.W. Cahn, P. Haasen, E.J. Kramer, 1996). Στη ενότητα αυτή παρουσιάζονται αποτελέσματα σχετικά με τον τρόπο διάδοσης από τους κρυσταλλίτες για τις διαφορετικές παραμέτρους, καθώς και στοιχεία που προκύπτουν βάση του προγράμματος αναγνώρισης της διάδοσης της ρωγμής από τους κρυσταλλίτες, το οποίο περιεγράφηκε στην ενότητα 3.5. Βασικοί παράμετροι που παίζουν ρόλο στον τρόπο διέλευσης της ρωγμής από τους κρυσταλλίτες είναι ο συντελεστής  $P_f$ , η θερμοκρασία, το πάχος των κρυσταλλιτών και η ενεργειακή διαφορά  $\Delta E$ . Καθώς η πληροφορία που εξάγεται για κάθε περίπτωση ανέρχεται στους 23 μετρητές και για κάθε έναν δύο τιμές, η μέση τιμή και η τυπική απόκλιση, στην παρούσα ενότητα παρουσιάζονται τα απαραίτητα στοιχεία για την εξαγωγή συμπερασμάτων για την συμπεριφορά του μοντέλου ως προς τον τρόπο διάδοσης.

Έχει παρατηρηθεί, πως η ρωγμή δεν διαπερνά μόνο μία φορά από την περιοχή του κρυσταλλίτη και της γκρίζας ζώνης. Συνεπώς, οι σχετικοί μετρητές που εξάγονται είναι οι φορές που διαπέρασε η ρωγμή την περιοχή αυτή, πόσες φορές διαπέρασε μόνο την γκρίζα ζώνη του κρυσταλλίτη. Με τους μετρητές αυτούς, καθίσταται δυνατόν να ελεγχθούν τα αποτελέσματα που παρουσιάστηκαν προηγουμένως, σχετικά με το πώς επιδρά η ενεργειακή διαφορά  $\Delta E$  στην είσοδο ή μη της ρωγμής στην περιοχή του κρυσταλλίτη-γκρίζας ζώνης.

Επιπρόσθετα, εξάγονται μετρητές για τον συνολικό αριθμό στοιχείων κρυσταλλίτη και στοιχείων γκρίζας ζώνης που διαπέρασε η ρωγμή. Βάση των μετρητών αυτών, δύναται να καθοριστεί η συμπεριφορά του μοντέλου για τους δύο τρόπους διάδοσης της ρωγμής από τις περιοχές κρυσταλλίτη-γκρίζας ζώνης.

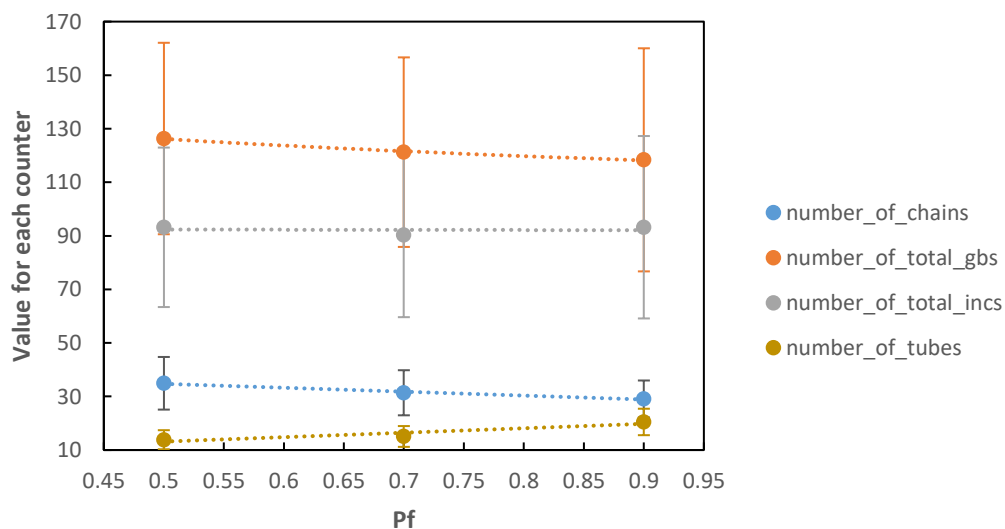
### **Επεξήγηση παραμέτρων**

Για τους μετρητές χρησιμοποιήθηκαν διαφορετικές χαρακτηριστικές ονομασίες. Παρακάτω δίνονται οι επεξηγήσεις για τον κάθε μετρητή.

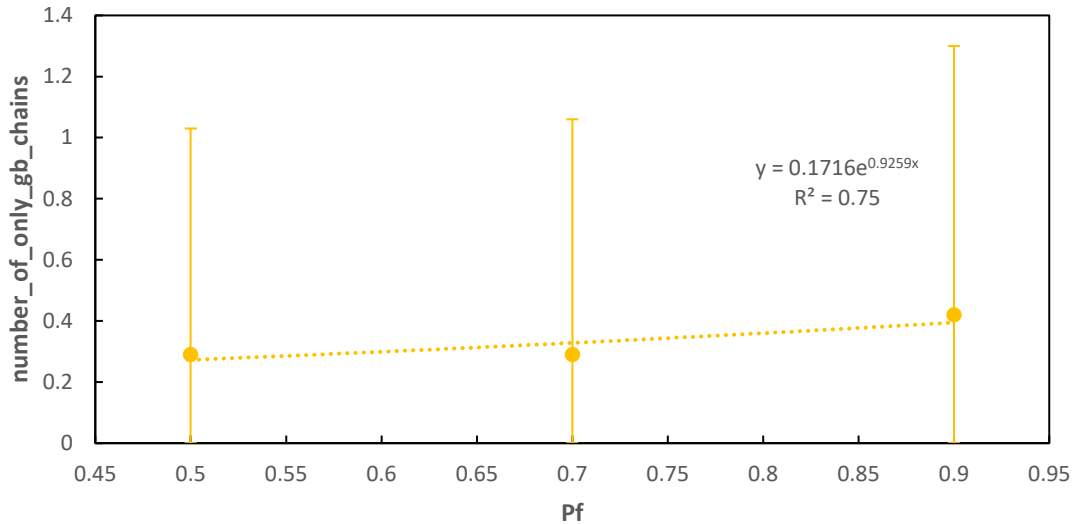
- `number_of_chains` → Συνολικός αριθμός φορών διέλευσης ρωγμής από τις περιοχές κρυσταλλιτών-γκρίζας ζώνης
- `number_of_total_gbs` → Συνολικός αριθμός διέλευσης στοιχείων γκρίζας ζώνης από τα οποία διαπέρασε η ρωγμή
- `number_of_total_incs` → Συνολικός αριθμός διέλευσης στοιχείων κρυσταλλίτη από τα οποία διαπέρασε η ρωγμή
- `number_of_only_gb_chains` → Συνολικός αριθμός φορών διέλευσης ρωγμής αποκλειστικά από τις περιοχές γκρίζας ζώνης
- `number_of_crystallites` → Συνολικός αριθμός κρυσταλλιτών από τους οποίους διαπέρασε η ρωγμή
- `number_of_tubes` → Συνολικός αριθμός περιοχών κρυσταλλιτών στις οποίες εισήλθε η ρωγμή

Για την κάθε εξεταζόμενη περίπτωση παρουσιάζονται δύο διαγράμματα, καθώς για κάποιους μετρητές προκύπτουν τιμές σε διαφορετική κλίμακα. Έτσι, καθίσταται πιο εύκολη η παρατήρηση των διαγραμμάτων. Ο μετρητής `number_of_crystallites`, χρησιμοποιείται μόνο στην εξέταση επίδρασης του πάχους του κρυσταλλίτη, καθώς μόνο για την περίπτωση αυτή προσδίδει πληροφορία που δεν γίνεται να εξαχθεί από τους υπόλοιπους μετρητές.

### 5.7.1 ΤΡΟΠΟΣ ΔΙΑΔΟΣΗΣ - ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ $P_f$



Διάγραμμα 5.40 Τιμές μετρητών προς συντελεστή  $P_f$  για  $c=20\%$ ,  $KT=0.1$ ,  $(l \times w) = (30 \times 2)$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$ ,  $E=1.0, 1.05, 1.1$

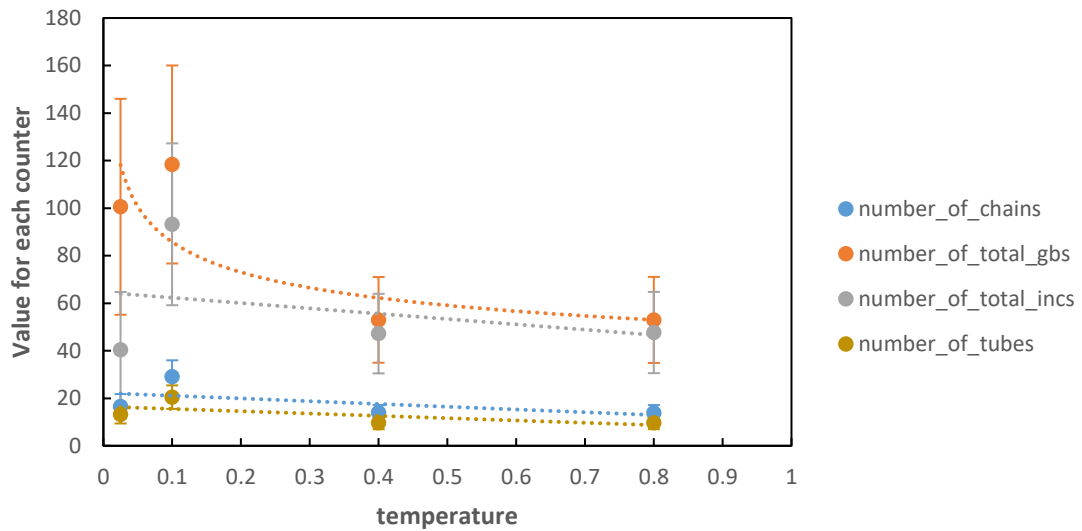


Διάγραμμα 5.41 Φορές διαπέρασης ρωγμής αποκλειστικά από γκρίζα ζώνη προς συντελεστή  $P_f$  για  $c=20\%$ ,  $KT=0.1, (l_{kw})= (30 \times 2)$ ,  $dl=5, d=1$ ,  $E=1.0, 1.05, 1.1$

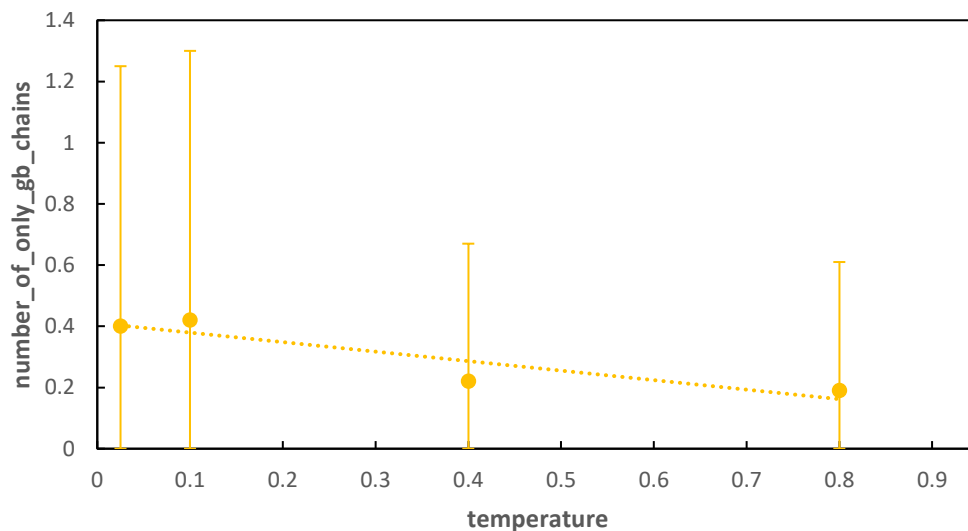
Στο διάγραμμα 5.40, φαίνεται πως με την αύξηση του συντελεστή  $P_f$ , υπάρχει αύξηση του αριθμού των περιοχών κρυσταλλίτη-γκρίζα ζώνη (number\_of\_tubes), αλλά και αύξηση του αριθμού των στοιχείων κρυσταλλίτη (number\_of\_total\_incs) από τα οποία διέρχεται η ρωγμή. Επαληθεύονται επομένως οι παρατηρήσεις που έγιναν στις ενότητες 5.2 και 5.6.2 για την επίδραση του συντελεστή  $P_f$  στην υπερπήδηση ενεργειακών διαφορών και στην εισχώρηση σε περισσότερες περιοχές κρυσταλλιτών-γκρίζας ζώνης αλλά και κρυσταλλιτών. Η παρατήρηση αυτή συμβαδίζει και με την τάση των στοιχείων για τον συνολικό αριθμό που διέρχεται από τον ίδιο κρυσταλλίτη, αλλά και των στοιχείων γκρίζας ζώνης που διαπερνά η ρωγμή. Στο διάγραμμα 5.41, φαίνεται πως υπάρχει μείωση του αριθμού των φορών που η ρωγμή διαπερνά αποκλειστικά μέρη της γκρίζας ζώνης.

Βάση των παραπάνω, παρατηρείται πως η αύξηση του συντελεστή  $P_f$  οδηγεί σε αύξηση της κατευθυντικότητας της ρωγμής, καθώς μειώνεται ο αριθμός διαπέρασης αποκλειστικά από περιοχή γκρίζας ζώνης, μειώνεται ο αριθμός των συνολικών στοιχείων γκρίζας ζώνης, ενώ αυξάνεται ο αριθμός των φορών που διαπερνά την ίδια περιοχή κρυσταλλίτη-γκρίζας ζώνης και ο αριθμός στοιχείων κρυσταλλίτη. Διέρχεται δηλαδή πιο συχνά από περιοχές κρυσταλλιτών-γκρίζας ζώνης και κρυσταλλιτών. Άρα με την αύξηση του  $P_f$ , ξεπερνιούνται πιο συχνά οι ενεργειακές διαφορές και συνεπώς αλλάζει ο τρόπος διάδοσης της ρωγμής από περικρυσταλλικό σε ενδοκρυσταλλικό (intergranular → transgranular).

### 5.7.2 ΤΡΟΠΟΣ ΔΙΑΔΟΣΗΣ - ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑ



Διάγραμμα 5.42 Τιμές μετρητών προς θερμοκρασία  $KT$  για  $P_f = 0.9$ ,  $c=20\%$ ,  $(lxw) = (30 \times 2)$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$ ,  $E=1.0, 1.05, 1.1$



Διάγραμμα 5.43 Φορές διαπέρασης ρωγμής αποκλειστικά από γκρίζα ζώνη προς θερμοκρασία  $KT$  για  $P_f = 0.9$ ,  $c=20\%$ ,  $(lxw) = (30 \times 2)$ ,  $dl=5, d=1$ ,  $E=1.0, 1.05, 1.1$

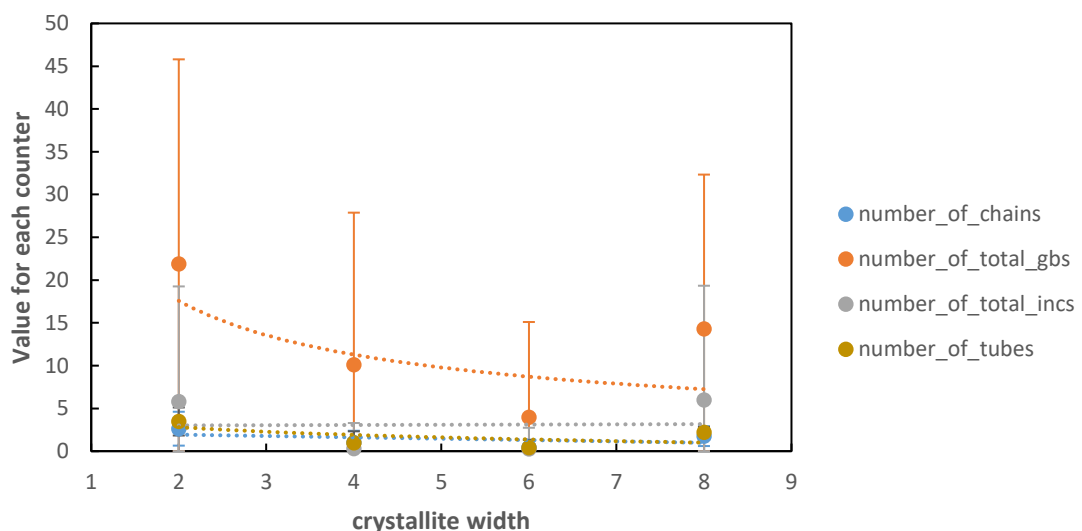
Η πρώτη παρατήρηση που είναι εμφανής για τα διαγράμματα 5.42, 5.43 είναι πως υπάρχει διαφοροποίηση της τάσης για τις τιμές της θερμοκρασίας. Φαίνεται πως για τις τιμές  $KT = 0.025 \rightarrow 0.1$  υπάρχει αύξηση για όλες τις καμπύλες των μετρητών, ενώ στην συνέχεια υπάρχει μια μείωση. Η παρατήρηση αυτή είναι χρήσιμη για την βαθμονόμηση του μοντέλου. Καθώς για τις τιμές θερμοκρασίας  $KT = 0.025, 0.1$  το μοντέλο έχει διαφορετική και πιο κοντά στην πραγματικότητα

συμπεριφορά, όπως φάνηκε και στις ενότητες 5.4, 5.6.3, ο σχολιασμός επικεντρώνεται για τις τιμές αυτές.

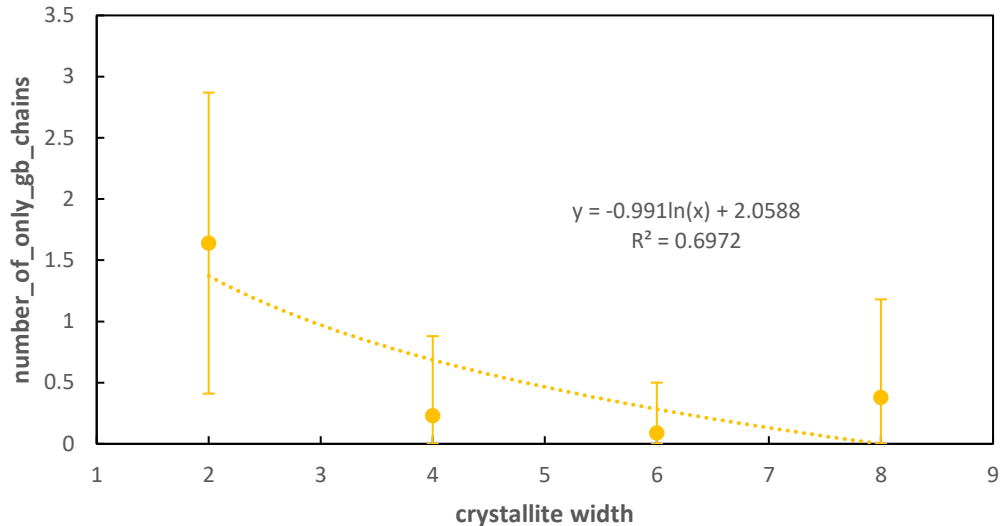
Παρατηρείται στα διαγράμματα 5.42, 5.43 πως με την αύξηση της θερμοκρασίας από 0.025 → 0.1, υπάρχει αύξηση για όλους τους μετρητές. Επομένως, η ρωγμή εισέρχεται περισσότερες και στις περιοχές κρυσταλλίτη-γκρίζας ζώνης και στους κρυσταλλίτες, ενώ περνάει περισσότερες φορές από τους ίδιους κρυσταλλίτες. Στο διάγραμμα 5.43, φαίνεται πως η αύξηση δεν είναι σημαντική για τις φορές που περνάει αποκλειστικά από την γκρίζα-ζώνη. Είναι εμφανές πως η αύξηση για τον συνολικό αριθμό στοιχείων κρυσταλλίτη είναι αρκετά μεγαλύτερη από αυτήν για τον συνολικό αριθμό στοιχείων γκρίζας ζώνης.

Συμπερασματικά με την αύξηση της θερμοκρασίας, ξεπερνιούνται πιο συχνά οι ενεργειακές διαφορές. Έτσι η ρωγμή εισέρχεται πιο συχνά στις περιοχές κρυσταλλίτη-γκρίζας ζώνης (αύξηση του αριθμού στοιχείων γκρίζας ζώνης) και διαπερνά πιο πολλά στοιχεία κρυσταλλίτη. Άρα υπάρχει αλλαγή του τρόπου διάδοσης της ρωγμής από περικρυσταλλικό σε ενδοκρυσταλλικό (intergranular → transgranular).

### 5.7.3 ΤΡΟΠΟΣ ΔΙΑΔΟΣΗΣ – ΠΑΧΟΣ ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΤΗ



Διάγραμμα 5.44 Τιμές μετρητών προς πάχος κρυσταλλίτη  $w$ , για  $P_f = 0.9$ ,  $c=20\%$ ,  $KT=0.1$ ,  $l=30$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$ ,  $E=1.0, 1.05, 1.1$



Διάγραμμα 5.45 Φορές διαπέρασης ρωγμής αποκλειστικά από γκριζα ζώνη προς πάχος κρυσταλλίτη  $w$ , για  $P_f = 0.9$ ,  $c=20\%$ ,  $KT=0.1$ ,  $l=30$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$ ,  $E=1.0, 1.05, 1.1$

Κοινή παρατήρηση στα διαγράμματα 5.44, 5.45 είναι πως για όλους τους μετρητές οι γραμμές τάσης είναι εκπτωτικές. Διαφοροποίηση προκύπτει για την τιμή πάχους κρυσταλλίτη  $w = 8$ , όπου υπάρχει μια μικρή αύξηση στις τιμές των μέσων όρων. Επομένως, με την αύξηση του πάχους, μειώνεται ο αριθμός των φορών που εισέρχεται στις περιοχές κρυσταλλίτη-γκρίζας ζώνης, ο συνολικός αριθμός των φορών που εισέρχεται στους ίδιους κρυσταλλίτες, ο συνολικός αριθμός των στοιχείων τόσο της γκριζας ζώνης, όσο και των κρυσταλλιτών σε μεγαλύτερο βαθμό, αλλά και των φορών που πέρασε αποκλειστικά από την γκριζα ζώνη, μειώνονται. Ειδικά για την περίπτωση του αριθμού των φορών που διέρχεται από τον ίδιο κρυσταλλίτη και του αριθμού των περιοχών κρυσταλλίτη-γκρίζας ζώνης, υπάρχει οριακά ταύτιση τιμών.

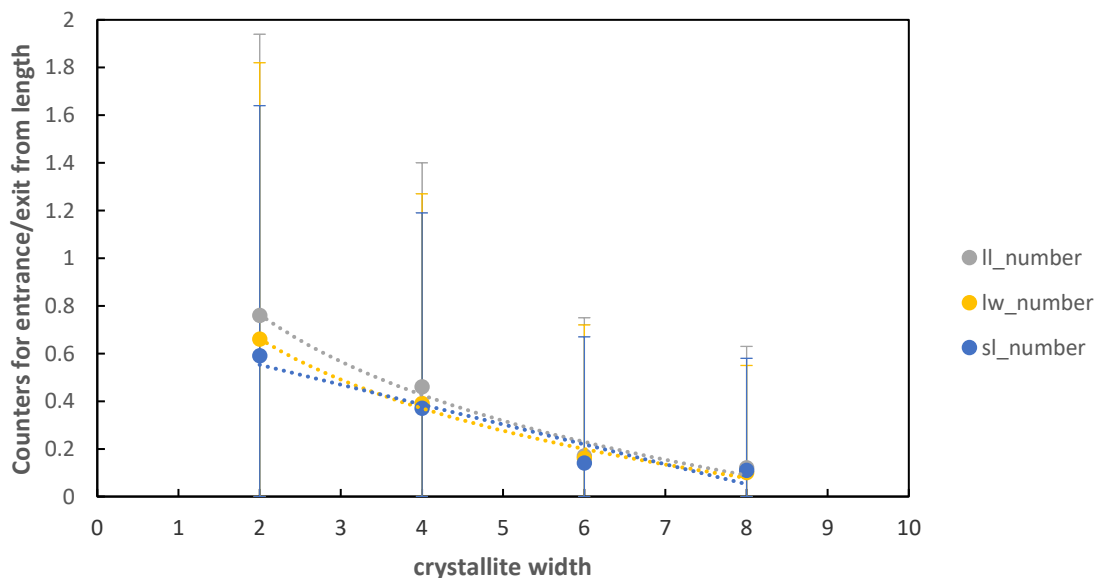
Συμπερασματικά, η ρωγμή διαπερνά σε αρκετά μικρότερο βαθμό κρυσταλλίτες και εισέρχεται σπανιότερα σε περιοχές κρυσταλλίτη-γκρίζας ζώνης. Προκύπτει δηλαδή αλλαγή στον τρόπο διάδοσης της ρωγμής από ενδοκρυσταλλικό σε περικρυσταλλικό (transgranular  $\rightarrow$  intergranular). Το αποτέλεσμα αυτό είναι σε συμφωνία με την βιβλιογραφία (Charitidis κ.ά., 2007).

## Επιπρόσθετοι μετρητές για την επίδραση του πάχους στον τρόπο διάδοσης

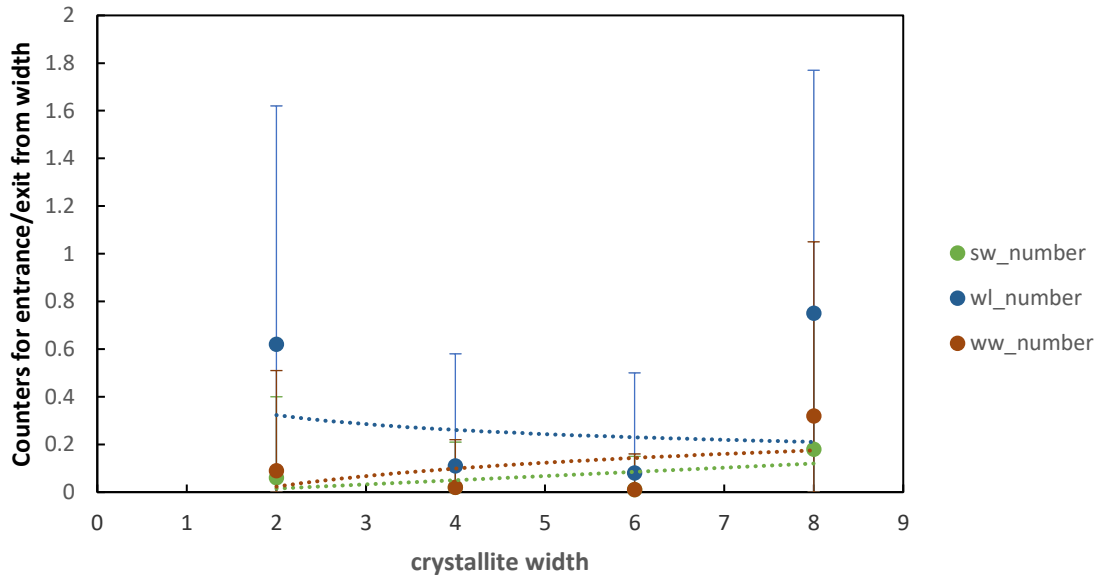
Καθώς η διαφοροποίηση στο πάχος του κρυσταλλίτη αποτελεί σημαντική παράμετρο, καθώς επηρεάζεται άμεσα το σχήμα του, είναι σημαντικό να παρουσιαστούν κάποια επιπρόσθετα διαγράμματα για την τάση μετρητών που χαρακτηρίζουν την συμπεριφορά της ρωγμής. Δίνονται οι ορισμοί για τους επιπρόσθετους μετρητές:

- $ll\_number$  → Συνολικός αριθμός εισαγωγής ρωγμής από την μια πλευρά μήκους του κρυσταλλίτη και εξόδου από την επόμενη πλευρά μήκους
- $lw\_number$  → Συνολικός αριθμός εισαγωγής ρωγμής από την μια πλευρά μήκους του κρυσταλλίτη και εξόδου από πλευρά πάχους
- $sl\_number$  → Συνολικός αριθμός εισαγωγής ρωγμής από την μια πλευρά μήκους του κρυσταλλίτη και εξόδου από την ίδια πλευρά μήκους

Ομοίως ορίζονται και οι μετρητές  $ww\_number$ ,  $wl\_number$ ,  $sw\_number$ , αντί της πλευράς του μήκους, εξετάζεται η πλευρά πάχους.



Διάγραμμα 5.46 Μετρητές για την είσοδο/έξοδο από την πλευρά του μήκους για τον κρυσταλλίτη προς πάχος κρυσταλλίτη  $w$ , για  $P_f = 0.9$ ,  $c=20\%$ ,  $KT=0.1$ ,  $l=30$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$ ,  $E=1.0,1.05,1.1$



Διάγραμμα 5.47 Μετρητές για την είσοδο/έξοδο από την πλευρά του πάχους για τον κρυσταλλίτη προς πάχος κρυσταλλίτη  $w$ , για  $P_f = 0.9$ ,  $c=20\%$ ,  $KT=0.1$ ,  $l=30$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$ ,  $E=1.0,1.05,1.1$

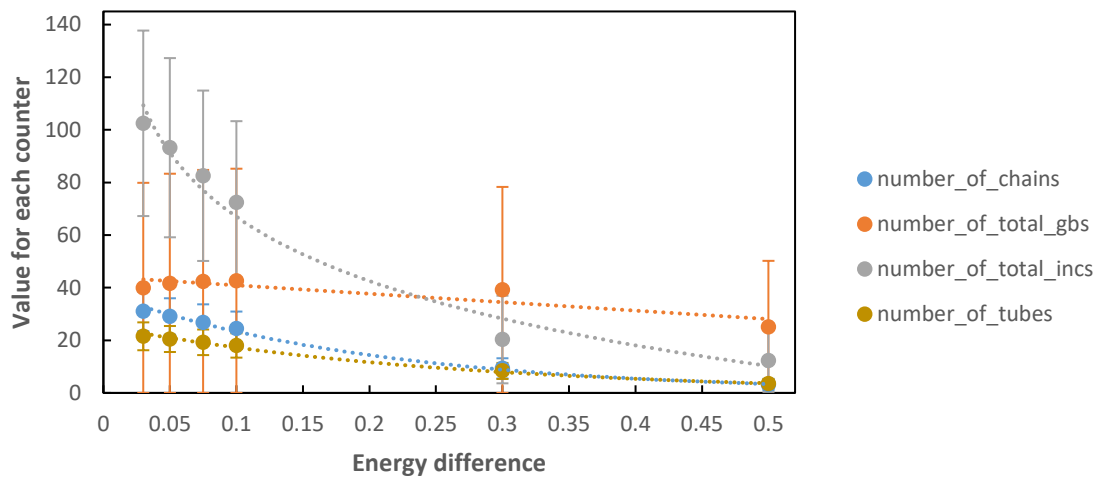
Γίνεται κατανοητό παρατηρώντας το διάγραμμα 5.46, πως με την αύξηση του πάχους του κρυσταλλίτη, τόσο οι τιμές του μέσου όρου, όσο και της τυπικής απόκλισης, μειώνονται και για τους τρεις μετρητές. Με την μείωση του μετρητή  $ll\_number$ , συμπεραίνεται πως διασχίζει λιγότερες φορές η ρωγμή τον κρύσταλλο από τις πλευρές του μήκους. Συνεπώς, η αύξηση στο πάχος δυσχεραίνει την κάθετη στο πάχος ενδοκρυσταλλική διάδοση ρωγμής. Με την αύξηση του πάχους, η τιμή του μέσου όρου αλλά και της τυπικής απόκλισης του μετρητή  $ll\_number$ , τείνει να ταυτιστεί με αυτές των μετρητών  $lw\_number$  και  $sl\_number$ . Προκύπτει το συμπέρασμα πως δεν είναι μόνο εκπτώτικη η τάση, αλλά και πως για την μετατροπή από ενδοκρυσταλλική σε περικρυσταλλική διάδοση ρωγμής, όπως σχολιάστηκε για τα διαγράμματα 5.44 και 5.45, αρκετά σπανιότερα θα διασχίσει η ρωγμή τον κρυσταλλίτη κάθετα στην διεύθυνση του πάχους.

Στο διάγραμμα 5.47 γίνεται αντιληπτό, πως υπάρχει μείωση για τις τιμές του μέσου όρου και τυπικής απόκλισης για όλους τους μετρητές. Διαφοροποίηση προκύπτει για το πάχος  $w = 8$  τόσο για την μέση τιμή όσο και για την τυπική απόκλιση κάθε μετρητή. Φαίνεται πως για μικρή τιμή πάχους  $w = 2$ , είναι αρκετές περισσότερες οι φορές που η ρωγμή εισέρχεται από το πάχος του κρυστάλλου και εξέρχεται από μία εκ των δύο πλευρών μήκους, ενώ πολύ σπάνια εισέρχεται- εξέρχεται από την ίδια πλευρά πάχους και σπάνια διασχίζει από την μία πλευρά πάχους έως την επόμενη

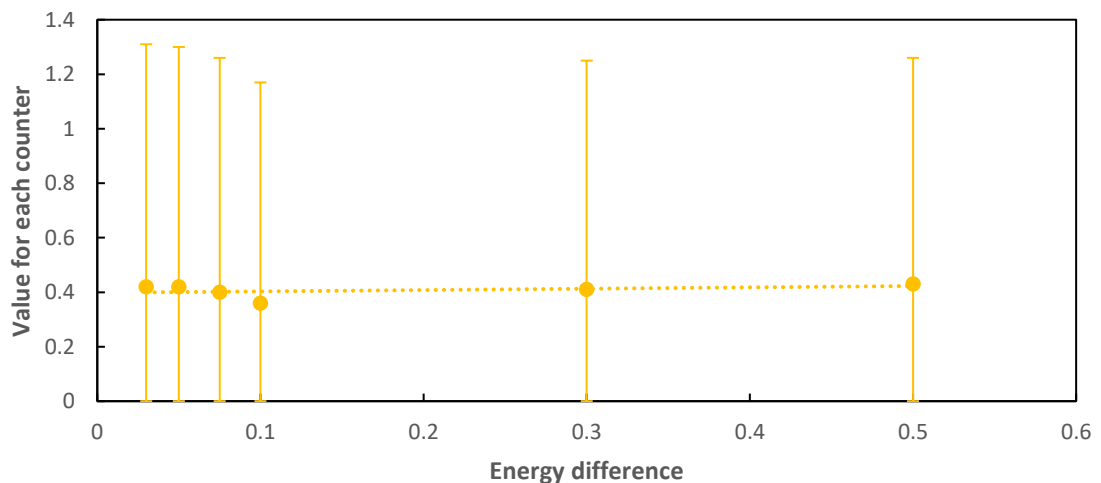


τον κρυσταλλίτη. Συγκρίνοντας τα δύο διαγράμματα 5.46, 5.47 φαίνεται πως πιο συχνά εισέρχεται η ρωγμή στους κρυσταλλίτες από την πλευρά του μήκους και σπάνια από την πλευρά του πάχους. Η συμπεριφορά αυτή φαίνεται να αλλάζει για την τιμή  $w = 8$ , όπου υπάρχει αύξηση των τιμών όπως φαίνεται στο διάγραμμα 5.47. Πρόκειται για την τιμή  $aspect\ ratio = l/w = 3.75$ . Συμπεραίνεται πως τείνοντας από ορθογωνική προς τετραγωνική μορφή ο κρυσταλλίτης, να έχει διαφορά στην εισχώρηση της ρωγμής στις περιοχές κρυσταλλίτη-γκρίζα ζώνη.

#### 5.7.4 ΤΡΟΠΟΣ ΔΙΑΔΟΣΗΣ – ΕΝΕΡΓΕΙΑ ΣΥΝΔΕΣΗΣ



Διάγραμμα 5.48 Τιμές μετρητών προς διαφορά ενέργειας  $\Delta E$ , για  $P_f = 0.9$ ,  $c=20\%$ ,  $KT=0.1$ ,  $(lxw)=(30 \times 2)$ ,  $dl=5$ ,  $d=1$



Διάγραμμα 5.49 Φορές διαπέρασης ρωγμής αποκλειστικά από γκρίζα ζώνη προς για  $P_f = 0.9$ ,  $c=20\%$ ,  $KT=0.1$ ,  $(lxw) = (30 \times 2)$ ,  $dl=5, d=1$

Παρατηρώντας τα διαγράμματα 5.48, 5.49, φαίνεται πως με την αύξηση της τιμής ενεργειακής διαφοράς  $\Delta E$  η τάση είναι εκπτωτική για όλους τους μετρητές του διαγράμματος 5.48 και περίπου σταθερή για το διάγραμμα 5.49. Για τον συνολικό αριθμό των φορών που διαπερνά η ρωγμή από τους ίδιους κρυσταλλίτες και για τον συνολικό αριθμό που διέρχεται μέσα από τις περιοχές κρυσταλλίτη-γκρίζας ζώνης, για τις τιμές  $\Delta E = 0.3, 0.5$  υπάρχει οριακή ταύτιση των τιμών. Συνεπώς, με την αύξηση της τιμής  $\Delta E$ , η ρωγμή εισέρχεται σπανιότερα στην περιοχή του κρυσταλλίτη-γκρίζας ζώνης γενικά. Η παρατήρηση αυτή επιβεβαιώνει τις παρατηρήσεις στην ενότητα 5.5. Η τάση αυτή επιβεβαιώνεται και από τις καμπύλες του συνολικού αριθμού των στοιχείων κρυσταλλίτη και γκρίζας ζώνης που διαπερνά η ρωγμή (`number_of_total_incs`, `number_of_total_gbs`). Ενώ η δεύτερη καμπύλη έχει μια μικρή μείωση στις τιμές, για την καμπύλη του αριθμού των στοιχείων κρυσταλλίτη υπάρχει σημαντικά μεγάλη πτώση.

Συμπερασματικά, η αύξηση της ενεργειακής διαφοράς  $\Delta E$  οδηγεί σε αλλαγή του τρόπου διάδοσης της ρωγμής, από ενδοκρυσταλλικό σε περικρυσταλλικό (`transgranular` → `intergranular`), το οποίο είναι λογικό, εφόσον όσο σκληρότερο είναι το υλικό στην περιοχή του κρυσταλλίτη από την άμορφη μήτρα, τόσο πιο δύσκολο να εισέλθει η ρωγμή στην περιοχή του κρυσταλλίτη.

## 6 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ - ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ

Όπως παρουσιάστηκε και στην εισαγωγή, στόχος για την παρούσα εργασία ήταν η κατασκευή ενός υπολογιστικού μοντέλου για την προσομοίωση της διάδοσης της ρωγμής στις δύο διαστάσεις, σε υλικά, όπου υπάρχουν μικροκρυσταλλίτες. Το μοντέλο και τα αποτελέσματα που προκύπτουν εξετάστηκαν ως προς την σύγκλιση, την στατιστική ορθότητα και ως προς την επίδραση των διαφόρων παραμέτρων και των τιμών που εισάγονται σε κάθε μία παράμετρο. Κατά την διεξαγωγή της εξέτασης αυτής προέκυψαν χρήσιμες παρατηρήσεις και συμπεράσματα. Στην ενότητα αυτή, παρατίθενται τα αποτελέσματα και οι προτάσεις για μελλοντική έρευνα.

## 6.1 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

### **Δέσμευση χώρου βάση μεγέθους & προσανατολισμού κρυσταλλίτη**

Το μέγεθος, το σχήμα και ο προσανατολισμός του κρυσταλλίτη δεσμεύουν σημαντικά τον χώρο, όπως παρουσιάστηκε στην ενότητα 3.1. Επιπρόσθετα, τα χαρακτηριστικά του κρυσταλλίτη και της γκρίζας ζώνης, οδηγούν λόγω της δέσμευσης του χώρου, σε συγκεκριμένες τιμές συγκέντρωσης, ανεξαρτήτως του μεγέθους της μήτρας, βάση των αποτελεσμάτων που παρουσιάστηκαν στην ενότητα 3.3.1.

### **Σύγκλιση, μέθοδοι δειγματοληψίας, φαινόμενα μεγέθους μήτρας**

Για τα χαρακτηριστικά μεγέθη της ρωγμής, μήκος-ταχύτητα, υπάρχει σύγκλιση τόσο για τον μέσο όρο των τιμών, όσο και για την τυπική απόκλιση, όπως φάνηκε στη ενότητα 4.2. Επιπρόσθετα, για τις δύο μεθόδους δειγματοληψίας που αναπτύχθηκαν στην ενότητα 4.3, υπάρχει σύγκλιση στις ίδιες τιμές και για τις δύο μεθόδους. Επομένως δύναται να χρησιμοποιηθεί η δεύτερη μέθοδος, δηλαδή η δημιουργία ενός δοκιμίου και η διεξαγωγή πολλών εκ νέου διαδόσεων ρωγμής στο δοκίμιο αυτό, για την οποία απαιτείται σημαντικά μικρότερος υπολογιστικός χρόνος. Σύμφωνα με την ενότητα 4.4, το μέγεθος της μήτρας δεν επηρεάζει σημαντικά τα αποτελέσματα, για τις διαφορετικές τιμές συγκέντρωσης, συντελεστή  $P_f$  και την ίδια τιμή αρχικής ενέργειας, σε αντίθεση με την αρχική ενέργεια να είναι ανάλογη του μεγέθους της μήτρας. Στην περίπτωση αυτή, παρατηρήθηκε αύξηση των αποτελεσμάτων, κυρίως για το μέσο και ενεργό μήκος, ανάλογη της αύξησης της αρχικής ενέργειας.

### **Στατιστικός έλεγχος**

Στην ενότητα 4.5 έγινε ο στατιστικός έλεγχος για τα χαρακτηριστικά μεγέθη της ρωγμής χρησιμοποιώντας την θεωρία των κανονικών διαγραμμάτων QQ, των ιστογραμμάτων και των καμπυλών συχνοτήτων, των z-test και του τεστ Kolmogorov-Smirnov. Βάση των αποτελεσμάτων φαίνεται ότι τα μεγέθη του μέσου και ενεργού μήκους, της μέσης και ενεργής ταχύτητας ακολουθούν προσεγγιστικά την κανονική κατανομή.

### Επίδραση της συγκέντρωσης

Για τις τιμές της συγκέντρωσης που εξετάστηκαν ( $c(\%) = 5,10,15,20$ ), παρατηρήθηκε πως το μέσο μήκος, η μέση ταχύτητα και ο συνολικός χρόνος είναι περίπου σταθερά, ενώ παρουσιάζεται μείωση του ενεργού μήκους και της ενεργής ταχύτητας λογαριθμικά με την αύξηση της συγκέντρωσης.

### Επίδραση της παραμέτρου $P_f$

Παρατηρήθηκε πως με την αύξηση της παραμέτρου  $P_f$ , για την ίδια συγκέντρωση, υπάρχει εκθετική αύξηση στο μέσο μήκος και στην μέση ταχύτητα, ενώ το ενεργό μήκος, η ενεργή ταχύτητα και ο συνολικός χρόνος παραμένουν περίπου σταθερά. Για το μοντέλο ως έχει, η παράμετρος  $P_f$  αποτελεί έναν δείκτη κατευθυντικότητας της ρωγμής. Φαίνεται όμως για τις διαφορετικές τιμές να επιδρά στους μηχανισμούς διάδοσης, όπως συμπεράθηκε στη ενότητα 5.2. Για υψηλές τιμές παρατηρήθηκε διαφοροποίηση στην αυξητική τάση του μέσου μήκους και της μέσης ταχύτητας, ενώ η ενεργή (πραγματική) ταχύτητα διάδοσης βρίσκεται σε ένα πλατό (παραμένει σταθερή). Τα αποτελέσματα αυτά ενισχύονται από τον σχολιασμό της ενότητας 5.3, όπου για τα συνδυαστικά διαγράμματα μεγεθών ρωγμής-συγκέντρωσης- $P_f$ , παρατηρείται πως για το μέσο μήκος και την μέση ταχύτητα επιδρά η παράμετρος  $P_f$ , ενώ για το ενεργό μήκος και ενεργή ταχύτητα η συγκέντρωση.

Συμπεράθηκε πως με τις υψηλές τιμές, η ρωγμή απεγκλωβίζεται από την περιοχή που περιοριζόταν για τις μικρές τιμές και έτσι προκύπτει η αύξηση στο μέσο μήκος. Εάν, λοιπόν, η παράμετρος αυτή συνδυαστεί με την εφαρμογή του φορτίου, δύναται να συμπεραθεί πως ο τρόπος διάδοσης της ρωγμής επιδρά σημαντικά στη συμπεριφορά του υλικού, εκτός των τεχνικών και φυσικών χαρακτηριστικών του δοκιμίου. Καθώς σε μικρές τιμές  $P_f$ , παρατηρούνται πιο συχνά φαινόμενα παγίδευσης και μικρότερες τιμές μέσου μήκους, δηλαδή συγκεντρώνεται η ρωγμή σε μια περιοχή, μια πρώτη εκτίμηση είναι πως για τις τιμές αυτές, προκύπτει ψαθυρή αστοχία του υλικού, ενώ για τις υψηλές τιμές, προκύπτει μια όλκιμη συμπεριφορά. Το αποτέλεσμα αυτό αποτελεί μια πρώτη εκτίμηση και απαιτείται περαιτέρω μελλοντικής έρευνας.

### **Επίδραση θερμοκρασίας**

Παρατηρήθηκε στη ενότητα 5.4 πως για όλα τα μεγέθη της ρωγμής, οι τιμές της ενέργειας  $KT = 0.025, 0.1$  δείχνουν μια διαφοροποίηση στη συμπεριφορά του μοντέλου, καθώς για τις μεγαλύτερες τιμές θερμοκρασίας, τα μεγέθη της ρωγμής έχουν περίπου την ίδια τιμή για  $KT = 0.1$ . Με την αύξηση της θερμοκρασίας, το μέσο μήκος αυξάνεται εκθετικά, ενώ η μέση και η ενεργή ταχύτητα λογαριθμικά. Αντίθετα, το ενεργό μήκος μειώνεται λογαριθμικά και παρατηρείται μείωση του συνολικού χρόνου.

### **Επίδραση ενεργειών σύνδεσης**

Βάση των αποτελεσμάτων στις ενότητες 5.5, 5.6 παρατηρήθηκε μια διαφοροποίηση μεταξύ των ενεργειακών διαφορών  $\Delta E \leq 0.1$  και  $\Delta E > 0.1$  για τα χαρακτηριστικά μεγέθη της ρωγμής και για όλες τις παραμέτρους συγκέντρωσης,  $P_f$ , θερμοκρασίας.

### **Διαφοροποίηση ως προς $\Delta E$**

Η μέση τιμή και τα error bars του μέσου μήκους είναι περίπου σταθερά για όλες τις συγκεντρώσεις και για ίδια τιμή  $P_f$ , για  $\Delta E \leq 0.1$ , ενώ μια μικρή πτώση παρατηρείται στις μεγαλύτερες τιμές  $\Delta E$ . Στο ενεργό μήκος, παρατηρείται μια πτώση με λογαριθμικό ρυθμό παρόμοιο για  $\Delta E \leq 0.1$ , ενώ μεγαλύτερη διαφορά προκύπτει για  $\Delta E = 0.3$ . Στην τιμή  $\Delta E = 0.5$ , υπάρχει μια μικρή αύξηση σε σύγκριση με  $\Delta E = 0.1, 0.3$ . Με την αύξηση  $\Delta E$ , παρατηρείται σταδιακή αύξηση στα error bars. Εκπτωτική τάση με την αύξηση  $\Delta E$  φαίνεται για την μέση και ενεργή ταχύτητα, ενώ για τα error bars ισχύει η περιγραφή που δόθηκε αντίστοιχα για το μέσο και ενεργό μήκος.

### **Διαφοροποίηση ως προς $\Delta E$ , συγκέντρωση**

Για όλες τις τιμές της συγκέντρωσης, όπως φάνηκε στην ενότητα 5.6.1 το μέσο μήκος είναι περίπου σταθερό, ειδικά για  $\Delta E \leq 0.1$ . Για το ενεργό μήκος, μέση και ενεργή ταχύτητα, με την αύξηση  $\Delta E$ , παρατηρείται μείωση των τιμών των μεγεθών αυτών, ενώ παρατηρείται και αύξηση της διαφοράς μεταξύ των διαφορετικών τιμών συγκεντρώσεων για την ίδια τιμή διαφοράς ενέργειας σύνδεσης, ειδικά για

$\Delta E > 0.1$ . Συμπεραίνεται πως η συγκέντρωση παίζει σημαντικό ρόλο στο ενεργό μήκος και τον ρυθμό μείωσης και των δύο ταχυτήτων.

#### **Διαφοροποίηση ως προς $\Delta E$ - $P_f$**

Σημαντική διαφορά στην συμπεριφορά του ενεργού μήκους σε σχέση με την ενεργειακή διαφορά  $\Delta E$ , παρουσιάζεται για  $P_f = 0.9$ , όπως σχολιάστηκε στην ενότητα 5.6.2. Εκτός της σημαντικής μεγαλύτερης τιμής μέσου μήκους για όλες τις τιμές  $\Delta E$ , με την αύξηση  $\Delta E$ , παρατηρείται μείωση λογαριθμικά. Αντίθετα, για  $P_f = 0.5, 0.7$  το μέσο μήκος είναι περίπου σταθερό. Το ενεργό μήκος, μέση και ενεργή ταχύτητα μειώνεται με την αύξηση  $\Delta E$ . Σημαντική είναι η παρατήρηση ότι για  $\Delta E = 0.5$ , υπάρχει μια μικρή αύξηση σε σχέση με  $\Delta E = 0.1, 0.3$  όπως παρατηρήθηκε και για τις διαφορετικές συγκεντρώσεις.

#### **Διαφοροποίηση ως προς $\Delta E$ -θερμοκρασία**

Στη ενότητα 5.6.3, έγινε ξεκάθαρο πως οι ταχύτητες  $K\tau = 0.025, 0.1$  έχουν διαφορετική επίδραση στα αποτελέσματα. Για το μέσο μήκος, για  $KT = 0.025$  υπάρχει μια μικρή μείωση ενώ για  $KT = 0.1$  μια μικρή αύξηση για τις τιμές  $\Delta E \leq 0.1$ . Για τις τιμές  $\Delta E > 0.1$ , υπάρχει ταύτιση τιμών και error bars για τις δύο θερμοκρασίες. Στο ενεργό μήκος ισχύει η αντίστροφη περίπτωση και για  $KT = 0.025$  υπάρχει μια αύξηση στις τιμές ενώ για  $KT = 0.1$  μια σημαντική μείωση. Διαφοροποίηση παρουσιάζεται για την τιμή  $\Delta E = 0.5$ , συμπεριφορά που εν τέλει είναι κοινή για όλες τις παραμέτρους συγκέντρωσης,  $P_f$ ,  $\Delta E$ . Η μέση και ενεργή ταχύτητα μειώνονται με την αύξηση  $\Delta E$ , όπως είναι αναμενόμενο λόγω της αύξησης της σκληρότητας του υλικού.

#### **Ενδοκρυσταλλική-Περικρυσταλλική (Transgranular-Intergranular)**

##### **διάδοση ρωγμής**

Καθώς ο τρόπος διάδοσης της ρωγμής διαπερνώντας εσωτερικά ή περιμετρικά τους κρυσταλλίτες αποτελεί καθοριστικό παράγοντα για την συμπεριφορά ενός υλικού στην ενότητα 5.7 παρουσιάστηκαν τα αποτελέσματα για την επίδραση του συντελεστή  $P_f$ , της θερμοκρασίας, της ενεργειακής διαφοράς σύνδεσης  $\Delta E$  και του πάχους του κρυσταλλίτη  $w$ .

Με την αύξηση του συντελεστή  $P_f$ , ευνοείται ο ενδοκρυσταλλικός τρόπος (transgranular) διάδοσης της ρωγμής (ενότητα 5.7.1). Με την αύξηση της κατευθυντικότητας είναι πιο πιθανό να διαπεράσει τους κρυσταλλίτες και τις γκρίζες ζώνες που έχουν μεγαλύτερη ενέργεια από την άμορφη μήτρα. Ομοίως, με την αύξηση της θερμοκρασίας (ενότητα 5.7.2), ευνοείται η ενδοκρυσταλλική διάδοση (transgranular). Το αποτέλεσμα είναι λογικό, εφόσον με την αύξηση της θερμοκρασίας οι δεσμοί των στοιχείων είναι πιο χαλαροί και επομένως πιο εύκολο να σπάσουν. Αντίθετα με τις παραμέτρους του συντελεστή  $P_f$  και της θερμοκρασίας επιδρούν η αύξηση του πάχους του κρυσταλλίτη και η αύξηση της ενεργειακής διαφοράς σύνδεσης  $\Delta E$ . Με την αύξηση του πάχους του κρυσταλλίτη ευνοείται η περιμετρική διάδοση ρωγμής (intergranular, ενότητα 5.7.3) αποτέλεσμα που είναι σε συμφωνία με τις προτάσεις της βιβλιογραφίας (Karakasidis & Charitidis, 2011), καθώς με την αύξηση του πάχους από βελονοειδές μορφή, ο κρυσταλλίτης αποκτά πιο πυκνή δομή και δρα ως εμπόδιο για την διάδοση της ρωγμής. Αντίστοιχα, με την αύξηση της ενεργειακής διαφοράς σύνδεσης των στοιχείων  $\Delta E$ , παρατηρείται προτίμηση προς την περικρυσταλλική διάδοση, αποτέλεσμα λογικό, καθώς με την σκλήρυνση του υλικού, γίνεται δυσκολότερο να διαπεραστεί ο κρυσταλλίτης.

## 6.2 ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ

- 1) Η βαθμονόμηση του μοντέλου αποτελεί μία πρώτη πρόταση. Ήδη στην παρούσα εργασία εξετάστηκαν διάφορες τιμές για την εκάστοτε παράμετρο, με κάποια συμπεράσματα να εξάγονται για κάποιες από αυτές (βλέπε τιμές θερμοκρασίας). Με την καλύτερη βαθμονόμηση, είναι πιθανό να παράγονται αποτελέσματα και ποσοτικά και ίσως να δοθεί η δυνατότητα μέτρησης των μονάδων στο *S.I.*
- 2) Η κατασκευή του δοκιμίου με τους κρυσταλλίτες δύναται να βελτιωθεί. Η λύση που παρουσιάστηκε στην εργασία αυτή απαιτεί αριθμό επαναλήψεων και δοκιμών. Μια διαφορετική προσέγγιση που θα λαμβάνει υπόψιν όλες τις παραμέτρους και την δέσμευση του χώρου από τους κρυσταλλίτες πιθανόν να είναι αποδοτικότερη από άποψη χρόνου.
- 3) Θα είναι μεγάλης σημασίας να εξεταστεί η επίδραση του διαφορετικού πάχους διεπιφάνειας (γκρίζας ζώνης), καθώς και διαφορετικά μεγέθη κρυσταλλιτών, τα οποία να είναι αντιπροσωπευτικά της πραγματικότητας. Σύμφωνα με τις προτάσεις της βιβλιογραφίας από πειραματικά δεδομένα φαίνεται να παίζει ρόλο στα αποτελέσματα (Karakasidis & Charitidis, 2011).
- 4) Η χρήση μεγαλύτερης μήτρας αποτελεί μία ακόμη πρόταση για μελλοντική εξέταση, προκειμένου να ελεγχθεί εάν υπάρχει επίδραση είτε στην στατιστική ανάλυση των αποτελεσμάτων του μοντέλου είτε στην φύση των αποτελεσμάτων.
- 5) Οι ακριβείς υπολογισμοί για τις ενέργειες σύνδεσης της διεπιφάνειας, όπως και η μετατροπή ώστε το εσωτερικό των κρυσταλλιτών να διαβαθμίζεται σε διαφορετικές ενεργειακές ζώνες, όπως συμβαίνει στην πραγματικότητα (Bitzek κ.ά., 2015) είναι πιθανό να οδηγήσουν σε αποτελέσματα τα οποία θα μπορούν να συγκριθούν ποσοτικά με τα πραγματικά.
- 6) Μετά την μοντελοποίηση για την προσομοίωση του φαινομένου της διάδοσης της ρωγμής στις δύο διαστάσεις, μία επέκταση του μοντέλου για την τρισδιάστατη κατάσταση θα ήταν το επόμενο σημαντικό βήμα. Με τον τρόπο αυτό, θα ήταν εφικτή η καλύτερη απεικόνιση της γεωμετρίας και του σχήματος των κρυσταλλιτών, που πιθανώς να είχε επίδραση στην προσομοίωση και καλύτερη κατανόηση του φαινομένου (Karakasidis & Charitidis, 2011; Falzone κ.ά., 2016).



## 7 ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

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. Cahn, R.W. , Haasen, P., Kramer, E.J., *Processing of Ceramics-Part I. Materials Science and Technology Series*, vol. 17A, VCH editions, 1996.
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. Diagrams illustrating negative and positive skew (2008). Αποσπάστηκε στις 17/9/2019 από <https://en.wikipedia.org/wiki/Skewness>.
7. 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.
8. 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.
9. Möller, J. (2017), *Atomistic Simulations of Crack Front Curvature Effects and Crack-Microstructure Interactions*.
10. Nasikas (2018). Numerical model of crack propagation in materials embedded with square inclusions.
11. Ovid'ko, I. A. (2015). Micromechanics of fracturing in nanoceramics. *Phi. Trans. R. Soc. A*, 373 2014.0129.
12. Razvan, R., in *ASMCSS'09 Proc. 3rd Int. Conf. Appl. Math. Simulation, Model. Circuits, Syst. Signals* (2009) pp. 122-131.
13. Yaghmaee, M. S., Baghbaderani, H. A. (2017). Thermodynamics modeling of cohesive energy of metallic nano-structured materials. *Materials and Design*, 114 521-530.
14. Zhang, S., Sun, D., Fu, Y., Du, H. (2005). Toughening of hard nanostructural thin films: a critical view. *Surf. Coat. Technol.*, 198 2-8.