



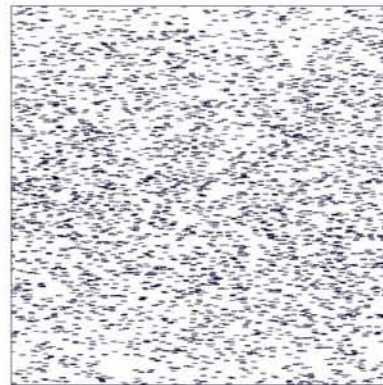
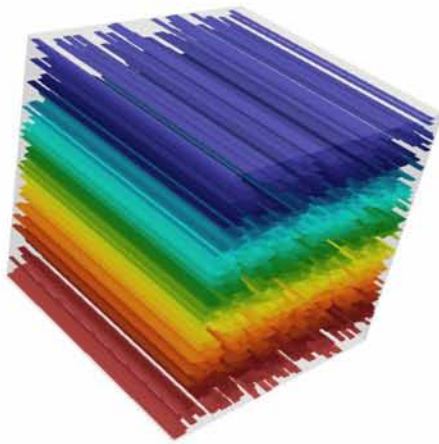
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΦΑΙΝΟΜΕΝΩΝ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΣΕ ΣΥΝΘΕΤΑ ΥΛΙΚΑ ΒΑΘΜΩΤΗΣ ΜΙΚΡΟΔΟΜΗΣ

υπό

ΔΙΑΚΟΝΙΚΟΛΗ ΜΙΧΑΗΛ και ΚΥΡΙΑΚΗ ΓΕΩΡΓΙΟΥ

Διπλωματούχων Μηχανολόγων Μηχανικών Πανεπιστημίου Θεσσαλίας 2020



Διπλωματική Εργασία

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

Βόλος, 2020

© 2020 Διακονικολής Μιχαήλ και Κυριάκης Γεώργιος

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

Εγκρίθηκε από τα Μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:

Πρώτος Εξεταστής
(*Επιβλέπων*)

Δρ. Αθανάσιος Παπαθανασίου
Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Δεύτερος Εξεταστής

Δρ. Μιχάλης Αγόρας
Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Τρίτος Εξεταστής

Δρ. Γεώργιος Χαραλάμπους
Επίκουρος Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Ευχαριστίες

Με την περάτωση της παρούσας εργασίας, θα θέλαμε να εκφράσουμε τις ειλικρινείς ευχαριστίες μας στον επιβλέποντα της διπλωματικής εργασίας μας, Καθηγητή Δρ. Αθανάσιο Παπαθανασίου, για την υπόδειξη του θέματος καθώς και για την πολύτιμη βοήθεια και καθοδήγησή που μας παρείχε κατά τη διάρκεια της υλοποίησης της εργασίας.

Επίσης, είμαστε ευγνώμονες στα υπόλοιπα μέλη της εξεταστικής επιτροπής της διπλωματικής εργασίας μας, Καθηγητές κκ. Μιχάλη Αγόρα και Γεώργιο Χαραλάμπους για την προσεκτική ανάγνωση της εργασίας μας και για τις πολύτιμες υποδείξεις τους.

Ευχαριστούμε, επίσης, τον διδάκτορα του τμήματος Μηχανολόγων Μηχανικών, κ. Ανδρέα Τσιαντή για τη βοήθεια και τις συμβουλές που μας παρείχε κατά τη διεξαγωγή των προσομοιώσεων καθώς και για τις υποδείξεις του για τη σωστή χρήση του cluster στο Εργαστήριο Ρευστομηχανικής & Στροβιλομηχανών του τμήματος Μηχανολόγων Μηχανικών του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας και του λογισμικού που χρησιμοποιήθηκε για την παρούσα εργασία.

Τέλος, δε θα μπορούσαμε να μην ευχαριστήσουμε ιδιαίτερα τις οικογένειες και τους φίλους μας, καθώς και ο ένας τον άλλο, για την υπομονή και κατανόηση τους καθ' όλο το χρονικό διάστημα που απαιτήθηκε για την ολοκλήρωση της διπλωματικής μας εργασίας.

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΦΑΙΝΟΜΕΝΩΝ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΣΕ ΣΥΝΘΕΤΑ ΥΛΙΚΑ ΒΑΘΜΩΤΗΣ ΜΙΚΡΟΔΟΜΗΣ

ΔΙΑΚΟΝΙΚΟΛΗΣ ΜΙΧΑΗΛ και ΚΥΡΙΑΚΗΣ ΓΕΩΡΓΙΟΣ

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, 2020

Επιβλέπων Καθηγητής: Δρ. Αθανάσιος Παπαθανασίου,
Καθηγητής τμήματος Μηχανολόγων Μηχανικών

Περίληψη

Ο σχεδιασμός νέων πολυμερικών προϊόντων με βέλτιστες θερμικές, ρεολογικές, μηχανικές και οπτικές ιδιότητες, μειωμένο κόστος παραγωγής, μέγιστη διάρκεια χρήσης και φιλικότητα προς το περιβάλλον, αποτελεί σημαντικό τομέα της σύγχρονης έρευνας με τεράστια τεχνολογική και βιομηχανική σημασία. Στην περίπτωση των σύνθετων υλικών πολυμερικής μήτρας, η κατασκευή νέων προϊόντων με όσο το δυνατόν καλύτερα χαρακτηριστικά ανάλογα με την αντίστοιχη χρήση, απαιτούν τη συσχέτιση της μικροδομής του υλικού –χημική σύσταση, μοριακή αρχιτεκτονική, μορφολογία του υλικού– με τις φυσικές του ιδιότητες.

Η παρούσα διπλωματική εργασία αφορά τη μελέτη φαινομένων μεταφοράς και συγκεκριμένα φαινομένων διάχυσης μάζας και μεταφοράς θερμότητας στο εσωτερικό σύνθετων υλικών με βαθμωτή μικροδομή σε σταθερές και σε χρονικά μεταβαλλόμενες συνθήκες αντίστοιχα. Εξετάζονται οι εξισώσεις διάχυσης του Fick και μεταφοράς θερμότητας του Fourier και εφαρμόζονται σε μοντέλα σύνθετων υλικών τα οποία αποτελούνται από ένα κύριο υλικό και ενισχυτικά πρόσθετα με μορφή φυλλιδίων (flakes).

Αρχικά, με τη βοήθεια υπολογιστικών μεθόδων και διάφορων πακέτων λογισμικού (OpenFOAM, GMSH, Paraview καθώς και λογισμικό που αναπτύχθηκε στα πλαίσια της διπλωματικής εργασίας του κ. Τσιαντή), γίνεται μελέτη υπό μόνιμες συνθήκες από την οποία εξάγονται συμπεράσματα για τη συσχέτιση του συντελεστή διάχυσης με τις γεωμετρικές αναλογίες, το ποσοστό πλήρωσης των φυλλιδίων στο υλικό καθώς και με την κατανομή τους μέσα σε αυτή. Έπειτα, γίνεται μελέτη της μεταφοράς θερμότητας σε χρονικά μεταβαλλόμενες συνθήκες απ' όπου προκύπτουν συμπεράσματα για το πώς οι γεωμετρικές αναλογίες, το ποσοστό πλήρωσης και η κατανομή επηρεάζουν τον συντελεστή θερμικής αγωγιμότητας και τον χαρακτηριστικό χρόνο του υλικού.

Οι παραπάνω υπολογισμοί διεξάγονται σε γεωμετρίες δύο διαστάσεων (2D) για σύνθετα υλικά που περιλαμβάνουν ευθυγραμμισμένα φυλλίδια με ορισμένο προσανατολισμό. Η γεωμετρία είναι περιοδική σε δύο διαστάσεις με περιοδικές συνοριακές συνθήκες και τα μοντέλα επιλύονται χρησιμοποιώντας τον κώδικα ανοικτού λογισμικού OpenFOAM καθώς και λογισμικό που αναπτύχθηκε από τον κ. Τσιαντή. Τέλος, παρουσιάζονται και σχολιάζονται τα αποτελέσματα που προκύπτουν.

NUMERICAL ANALYSIS OF TRANSPORT PHENOMENA THROUGH GRADED COMPOSITE MATERIALS

DIAKONIKOLIS MICHAIL and KIRIAKIS GEORGIOS

Department of Mechanical Engineering, University of Thessaly, 2020

Supervisor: Dr. Athanasios Papathanasiou

Professor of Mechanical Engineering

Abstract

The design of new polymer products with optimal thermal, rheological, mechanical and optical properties, reduced production costs, maximum life expectancy and environmental friendliness, is an important area of modern research with enormous technological and industrial importance. In the case of composite materials with polymer matrix, the construction of new products with the best possible characteristics, depends on the respective use and require the correlation of the microstructure of the material - chemical composition, molecular architecture, morphology of the material - with its natural properties.

The present study focuses on the transfer phenomena, specifically mass diffusion and heat transfer phenomena, inside graded composite materials in steady-state and time-dependent conditions respectively. Fick's equation for mass diffusion and Fourier's equation for heat transfer are examined and applied to models of composite materials which consist of a main material and reinforcing additives in the form of flakes.

Initially, with the help of computational methods and various software packages (OpenFOAM, GMSH, Paraview as well as software developed in the context of Mr. Tsiantis' Master thesis), a study is carried out under steady-state conditions from which conclusions are drawn for the correlation of the diffusion coefficient with the geometric properties, the percentage of filling of the flakes in the material as well as with their distribution within it. Then, the heat transfer study is carried out in time-dependent conditions from which conclusions are drawn as to how the geometric proportions, the filling and distribution of the flakes affect the thermal conductivity coefficient and the characteristic time of the material.

The above calculations are performed in two-dimensional (2D) geometries for composite materials that include aligned flakes with a certain orientation. The geometry is periodic in two dimensions with periodic boundary conditions and the models are solved using the OpenFOAM open source software as well as software developed by Mr. Tsiantis. Finally, the results are presented and discussed.

Περιεχόμενα

1.	Εισαγωγή	1
2.	Βιβλιογραφική Ανασκόπηση	6
2.1.	Πολυμερή Υλικά.....	6
2.2.	Σύνθετα Υλικά.....	10
2.3.	Σύνθετα Πολυμερή Υλικά.....	13
2.4.	Σύνθετα Πολυμερή Υλικά με Βαθμωτή Μικροδομή.....	16
3.	Φαινόμενα Μεταφοράς.....	18
3.1.	Διάχυση Μάζας.....	18
3.2.	Μεταφορά Θερμότητας	21
4.	Διάχυση υπό Σταθερές Συνθήκες	23
4.1.	Κατανομές.....	23
4.1.1.	Ημι-κανονική Κατανομή (Half Normal).....	26
4.1.2.	Γραμμική Κατανομή	30
4.1.3.	Τριγωνική Κατανομή	32
4.1.4.	Κανονική Κατανομή.....	34
4.2.	Ανάλυση – Σύγκριση Δεδομένων	37
4.3.	Υπολογισμός Θερμοκρασιών μέσα στο Υλικό	44
4.3.1.	Ημι-κανονική Κατανομή.....	44
4.3.2.	Κανονική Κατανομή.....	46
4.3.3.	Γραμμική – Τριγωνική Κατανομή	48
5.	Χρονικά Μεταβαλλόμενη Μεταφορά Θερμότητας	50
5.1.	Χρόνος Προσομοίωσης	50
5.2.	Επίλυση Θεωρητικού Προβλήματος	51
5.3.	Ακολουθία Επίλυσης Υπολογιστικών Μοντέλων	59
5.4.	Αποτελέσματα Προσομοιώσεων.....	63
5.5.	Υπολογισμός Time Lag	66
5.6.	Χαρακτηριστικός Χρόνος	68
5.7.	Υπολογισμός Θερμικής Αγωγιμότητας	70
6.	Σχολιασμός Αποτελεσμάτων.....	74

Appendices 75

<i>Appendix A – AutoPilot Tsiantis</i>	75
<i>Appendix B – Χωρική Σύγκλιση Πλέγματος (Παρεμβολή Richardson)</i>	77
<i>Appendix C – Περιπτώσεις Μικροδομών</i>	80
<i>Appendix D – MATLAB/Το Θεωρητικό Πρόβλημα</i>	92
<i>Appendix E – MATLAB/Υπολογισμός Time Lag</i>	93
<i>Appendix F – MATLAB/Υπολογισμός Χαρακτηριστικού Χρόνου</i>	95
<i>Appendix G – MATLAB/Υπολογισμός Θερμικής Αγωγιμότητας</i>	96
<i>Appendix H – Θερμοκρασιακή Αναπαράσταση μέσω ParaView</i>	98

Βιβλιογραφία 107

1. Εισαγωγή

Στη φυσική, ως φαινόμενα μεταφοράς ορίζονται οι μη-αντιστρεπτές διεργασίες στατιστικής φύσης που απορρέουν από την τυχαία ή τη συνεχή κίνηση των μορίων.^[1] Περιλαμβάνουν τρεις γνωστικές περιοχές που σχετίζονται μεταξύ τους: τη μεταφορά μάζας, τη μετάδοση θερμότητας και τη ρευστομηχανική.^[1] Η μεταφορά μάζας αφορά τη μεταφορά μάζας διάφορων χημικών ουσιών με αγωγή ή συναγωγή, η μετάδοση θερμότητας αφορά τη μεταφορά ενέργειας με αγωγή, συναγωγή ή ακτινοβολία ενώ η ρευστομηχανική ασχολείται με τη μεταφορά ορμής σε ένα ρευστό.^[1]

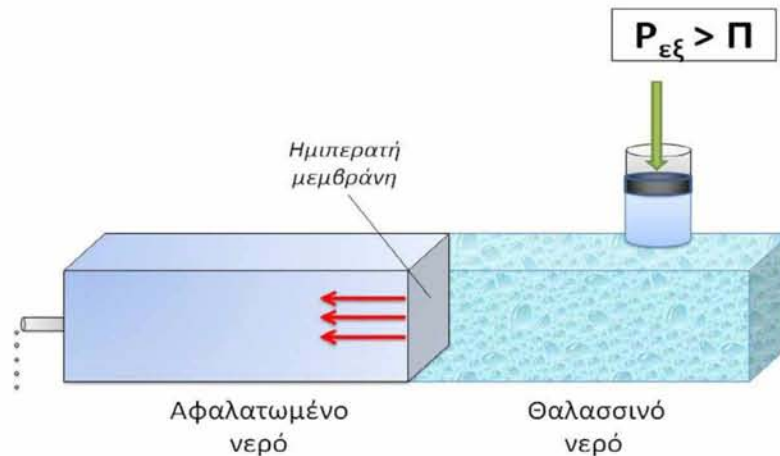
Στην παρούσα διπλωματική εργασία θα αναφερθούμε στα φαινόμενα μεταφοράς που αφορούν τη μεταφορά μάζας και θερμότητας με τον μηχανισμό της αγωγής διαμέσου σύνθετων πολυμερών υλικών που διαθέτουν ενισχυτικά πρόσθετα με μορφή φυλλιδίων (flakes).

Η μεταφορά μάζας είναι μια διεργασία η οποία μπορεί να παρατηρηθεί συχνά στη φύση. Εάν μια ποσότητα από ένα υλικό βρίσκεται σε μεγαλύτερη συγκέντρωση σε κάποια περιοχή του χώρου τότε το υλικό διαχέεται από την περιοχή υψηλής συγκέντρωσης προς την περιοχή χαμηλής συγκέντρωσης. Μερικά παραδείγματα που παρουσιάζονται στη φύση είναι η εξάτμιση του νερού λόγω της διάχυσης των μορίων του νερού στον αέρα, η ζάχαρη που διαλύεται στον καφέ μας και τον γλυκαίνει, ο εμπλουτισμός των ημιαγωγών στα τρανζίστορ και πολλά άλλα.

Τις τελευταίες δεκαετίες, χάρη στην ανάπτυξη πολυμερικών μεμβρανών από διάφορα σύνθετα υλικά με αξιόλογες ιδιότητες, ο μηχανισμός της μεταφοράς μάζας έχει αρχίσει να εκμεταλλεύεται και σε μεγάλη πληθώρα άλλων εφαρμογών όπως η νανοϊατρική, σε βιομηχανίες παραγωγής ηλεκτρικής ενέργειας, στην αφαλάτωση νερού και στη συσκευασία τροφίμων.

Για παράδειγμα, η ανάπτυξη μεμβρανών υψηλής διαπερατότητας από πολυσουλφόνη διαθέτει μια εσωτερική στοιβάδα που μπορεί να ελεγχθεί σε επίπεδο νανοκλίμακας και να χρησιμοποιηθεί στην εξωνεφρική κάθαρση. Ακόμη, πόροι με εκλεκτική διαπερατότητα έχουν οδηγήσει στην κατασκευή μεμβρανών με ‘νοημοσύνη’ και μπορούν να ενσωματωθούν για συνεχή λειτουργία σε φορητό ή εμφυτεύσιμο σύστημα τεχνητού νεφρού.

Νανοςύνθετες πολυμερικές μεμβράνες χρησιμοποιούνται επίσης σε εγκαταστάσεις επεξεργασίας αστικών αποβλήτων με σκοπό την επαναχρησιμοποίησή τους. Σημαντική εφαρμογή έχουν και στην περίπτωση της αφαλάτωσης του νερού, μέσω της διεργασίας της αντίστροφης όσμωσης και της αντίστροφης ηλεκτροδιάλυσης.



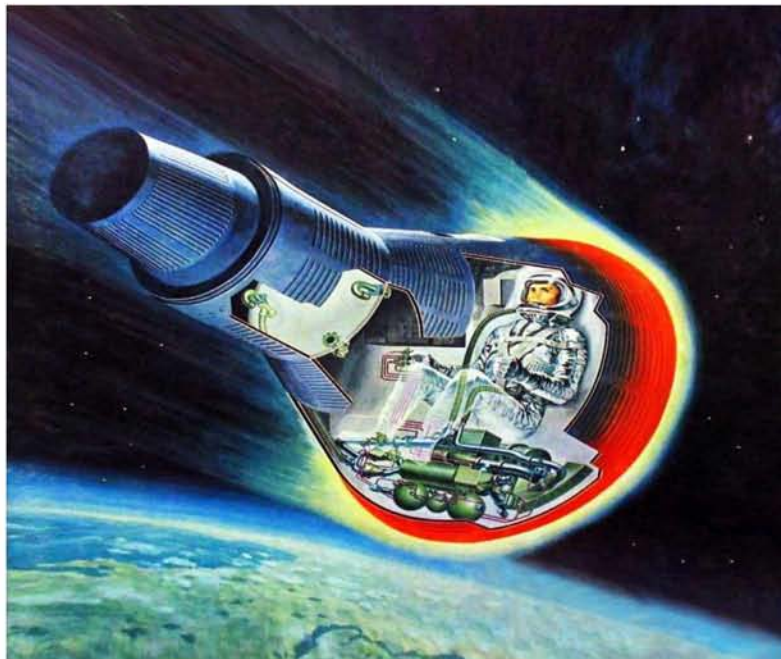
Σχ. 1 – Αναπαράσταση αντίστροφης όσμωσης θαλασσινού νερού

Στην περίπτωση της μεταφοράς θερμότητας δε χρειάζεται κανείς να ψάξει πάρα πολύ για να βρει ορισμένες εφαρμογές της.^[2] Συναντάται σε μηχανικά συστήματα καθώς και στο ίδιο το ανθρώπινο σώμα και η κινητήρια δύναμη της είναι η διαφορά θερμοκρασίας ανάμεσα σε δύο σώματα, που αναγκάζει τη θερμότητα να ρέει από το ζεστό προς το κρύο σώμα.

Πολλές συνηθισμένες οικιακές συσκευές είναι σχεδιασμένες είτε εξ' ολοκλήρου είτε εν μέρει, σύμφωνα με τις αρχές μεταφοράς θερμότητας.^[2] Ορισμένα παραδείγματα περιλαμβάνουν τη σειρά ηλεκτρικών συσκευών ή συσκευών αερίου, το σύστημα θέρμανσης και κλιματισμού, το ψυγείο και τον καταψύκτη, τον θερμαντήρα νερού, το ηλεκτρικό σίδερο καθώς και συσκευές όμως ο υπολογιστής και η τηλεόραση.^[2] Επιπλέον, η μεταφορά θερμότητας παίζει καθοριστικό ρόλο και στο σχεδιασμό πολλών άλλων διατάξεων όπως τα καλοριφέρ αυτοκινήτων, οι ηλιακοί συλλέκτες, τα διάφορα εξαρτήματα των εργοστασίων παραγωγής ενέργειας, οι εναλλάκτες θερμότητας, οι λέβητες, οι συμπυκνωτές καθώς και ποικίλες χρήσεις στους κλάδους της αεροναυπηγικής και αεροδιαστημικής.^[2] Η επιλογή του υλικού που χρησιμοποιείται στην εκάστοτε εφαρμογή για τη σωστή διαχείριση της θερμότητας αποτελεί ένα απ' τα σημαντικότερα σημεία της μελέτης ενός μηχανικού. Κατά τη λειτουργία τους οι παραπάνω συσκευές παράγουν αυξημένα ποσά θερμότητας και, για να επιτευχθούν όσο το δυνατόν υψηλότερες αποδόσεις καθώς και για την αποφυγή αστοχιών, θα πρέπει η απαγωγή θερμότητας από αυτές να γίνεται κατά τον βέλτιστο επιθυμητό τρόπο.

Σε διάφορα ηλεκτρονικά στοιχεία, είναι επιθυμητό τα παραγόμενα ποσά θερμότητας να απομακρύνονται από αυτά όσο το δυνατόν συντομότερα και να καταλήγουν σε δεξαμενές θερμότητας ή σε μονάδες αποθήκευσης ενέργειας.^[3] Με αυτόν τον τρόπο εξασφαλίζεται η βέλτιστη, αξιόπιστη και διαχρονικότερη λειτουργία τους.^[3] Το θέμα της απαγωγής θερμότητας στον τομέα της ηλεκτρονικής είναι τόσο σημαντικό, ώστε μελετάται και η πιθανή χρήση ακριβών υλικών, όπως το διαμάντι και διάφορα υψηλής ποιότητας σύνθετα υλικά.^[4]

Άλλη περίπτωση όπου η σωστή διαχείριση της θερμότητας παίζει σημαντικό ρόλο είναι αυτή των θερμικών ασπίδων που χρησιμοποιούνται στην αεροδιαστημική και εξασφαλίζουν την ασφάλεια της κάψουλας και των αστροναυτών κατά τη διάρκεια της επανεισόδου τους στη γήινη ατμόσφαιρα. Οι θερμικές ασπίδες εκμεταλλεύονται τα σύνθετα υλικά που τις απαρτίζουν και τα οποία λειτουργούν ως μόνωση μειώνοντας αισθητά την αγωγή θερμότητας ενώ ταυτόχρονα τη διασκορπίζουν μακριά από το σκάφος. Με αυτόν τον τρόπο η θερμοκρασία της κάψουλας, που περιέχει τους αστροναύτες καθώς και ευαίσθητο εξοπλισμό, δεν εκτίθεται στις θερμοκρασίες των χιλιάδων βαθμών Κελσίου που εκτίθεται η θερμική ασπίδα.



Σχ. 2 – Η θερμική ασπίδα στο κάτω μέρος της κάψουλας προστατεύει τον αστροναύτη και τον ευαίσθητο εξοπλισμό από την έκθεση τους σε θερμοκρασίες που αγγίζουν τους 3000K

Τα τελευταία χρόνια έχει παρουσιαστεί αξιοσημείωτο ενδιαφέρον για σύνθετα υλικά στα οποία γίνεται χρήση ανόργανων ενισχυτικών μέσων σε μορφή φυλλιδίων, με υψηλές τιμές του λόγου του μήκους του φυλλιδίου προς το πάχος του (aspect ratio). Αυτά τα σύνθετα υλικά χρησιμοποιούνται τόσο σε εφαρμογές μεταφοράς μάζας όσο και σε μεταφοράς θερμότητας. Περιλαμβάνουν φυλλίδια με διαστάσεις της τάξεως του μικρομέτρου, από ανόργανα υλικά όπως η μίκα, το αλουμίνιο και το ασήμι και πιο πρόσφατα σε διαστάσεις νανοκλίμακας, χρησιμοποιώντας γραφίτη και ορυκτά αργίλου όπως Hectorite, Saponite και Montmorillonite.^[5]

Παρά το γεγονός ότι η ενίσχυση των σύνθετων υλικών είναι μια γνωστή κατηγορία έρευνας, η εξάρτηση των ιδιοτήτων τους από παράγοντες μικροδομής όπως η χωρική κατανομή, το εύρος μεγέθους και ο προσανατολισμός των ενισχυτικών μέσων στην πολυμερική μήτρα δεν είναι πολύ κατανοητά. Μέσα από ένα πλήθος ερευνών που πραγματοποιήθηκαν στον τομέα αυτό, προκειμένου να κατανοηθεί ακόμη περισσότερο το κομμάτι της εξάρτησης των φαινομένων μεταφοράς των σύνθετων υλικών από παράγοντες μικροδομής των ενισχυτικών μέσων, προέκυψαν διάφορα ενδιαφέροντα αποτελέσματα που θα αναλυθούν και θα σχολιαστούν στη συνέχεια της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

Η μελέτη τέτοιων συστημάτων (μεγάλης γεωμετρικής πολυπλοκότητας) απαιτεί την αποδοχή ορισμένων υποθέσεων καθώς και ορισμένων παραδοχών προκειμένου να υλοποιηθεί. Παραδείγματος χάριν, για ένα διάλυμα που περιλαμβάνει φυλλίδια με τιμή aspect ratio (α) ίση με 100, θα πρέπει να έχει ένα ποσοστό φόρτισης μικρότερο του 0.01% έτσι ώστε να είναι αραιό και επομένως να μπορεί να προσεγγισθεί με αναλυτικές μεθόδους. Για ένα μη-αραιό διάλυμα η μεταφορά μάζας δια μέσου του κάθε φυλλίδιο διαταράσσεται λόγω της παρουσίας των γειτονικών φυλλιδίων, πράγμα το οποίο καθιστά την προσομοίωση με αναλυτικές μεθόδους δύσκολη έως και αδύνατη και την αριθμητική προσέγγιση τους μονόδρομο. Στην περίπτωση της μεταφοράς θερμότητας η παρουσία των φυλλιδίων χαμηλής θερμικής αγωγιμότητας εμποδίζει τη θερμότητα να περάσει δια μέσου τους, επιβραδύνοντας έτσι την αγωγή της. Η συγκέντρωση των φυλλιδίων, και πιο συγκεκριμένα το γινόμενο ($\alpha\phi$) (γινόμενο του λόγου aspect ratio (α) πολλαπμένο με το ποσοστό (%) φόρτισης των φυλλιδίων (ϕ)) είναι ένας σημαντικό παράγοντας που θα πρέπει να λαμβάνεται υπόψη κατά την ανάλυση τέτοιων συστημάτων.

Η παρούσα διπλωματική εργασία παρουσιάζει, αρχικά, μια άμεση αριθμητική προσέγγιση για την πρόβλεψη των ιδιοτήτων μόνωσης διαμέσου σύνθετων πολυμερικών

υλικών ενισχυμένων με φυλλίδια. Ειδικότερα μελετούμε την μεταβολή του συντελεστή διάχυσης σε μόνιμες συνθήκες, σαν συνάρτηση των παραμέτρων όπως οι γεωμετρικές αναλογίες, το ποσοστό πλήρωσης των φυλλιδίων στο υλικό καθώς και με την κατανομή τους μέσα σε αυτό. Η έμφαση στην ανάλυση μας δίδεται στη μελέτη της επίδρασης της μη ομοιόμορφης κατανομής των φυλλιδίων. Έπειτα, αφού διεξαχθούν αποτελέσματα για τον συντελεστή διάχυσης, γίνεται μελέτη της μεταφοράς θερμότητας υπό χρονικά μεταβαλλόμενες συνθήκες απ' όπου προκύπτουν συμπεράσματα για το πώς οι γεωμετρικές αναλογίες, το ποσοστό πλήρωσης και η κατανομή επηρεάζουν το χρόνο ανταπόκρισης του υλικού.

Οι παραπάνω υπολογισμοί διεξάγονται σε γεωμετρίες δύο διαστάσεων (2D) για σύνθετα υλικά που περιλαμβάνουν ευθυγραμμισμένα φυλλίδια με ορισμένο προσανατολισμό. Τα φυλλίδια είναι τοποθετημένα έτσι ώστε η χωρική κατανομή τους να είναι, γενικά, μεταβλητή. Η γεωμετρία είναι περιοδική σε δύο διαστάσεις με περιοδικές συνοριακές συνθήκες και τα μοντέλα επιλύονται χρησιμοποιώντας τον κώδικα ανοικτού λογισμικού OpenFOAM καθώς και λογισμικό που αναπτύχθηκε από τον κ. Τσιαντή κατά τη διάρκεια εκπόνησης της μεταπτυχιακής του εργασίας.

Τέλος, παρουσιάζονται και σχολιάζονται τα αποτελέσματα που προκύπτουν.

2. Βιβλιογραφική Ανασκόπηση

Στα παρακάτω κεφάλαια θα γίνει μια αναφορά στα πολυμερή σύνθετα υλικά που διαθέτουν βαθμωτή μικροδομή, σε τι οφείλουν τον ορισμό τους, στα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματα τους καθώς και στις διάφορες εφαρμογές που επιλέγονται να αξιοποιηθούν οι ιδιαίτερες ιδιότητες τους.

2.1. Πολυμερή Υλικά

Τα πολυμερή είναι υλικά αποτελούμενα από μεγάλα μόρια (μακρομόρια) τα οποία δημιουργούνται από την επανάληψη δομικών μονάδων (μονομερή) τα οποία συνδέονται μεταξύ τους με ομοιοπολικούς χημικούς δεσμούς.

Ο κόσμος μας είναι γεμάτος από πολυμερή υλικά. Τα αντικείμενα που χρησιμοποιούμε καθημερινά, το χαρτί που γράφουμε, τα ρούχα μας, ακόμα και εμείς οι ίδιοι είμαστε φτιαγμένοι από πολυμερείς δομές. Τα πολυμερή μπορούν να χωριστούν σε δύο ευρείς κατηγορίες, στα φυσικά και στα συνθετικά πολυμερή.

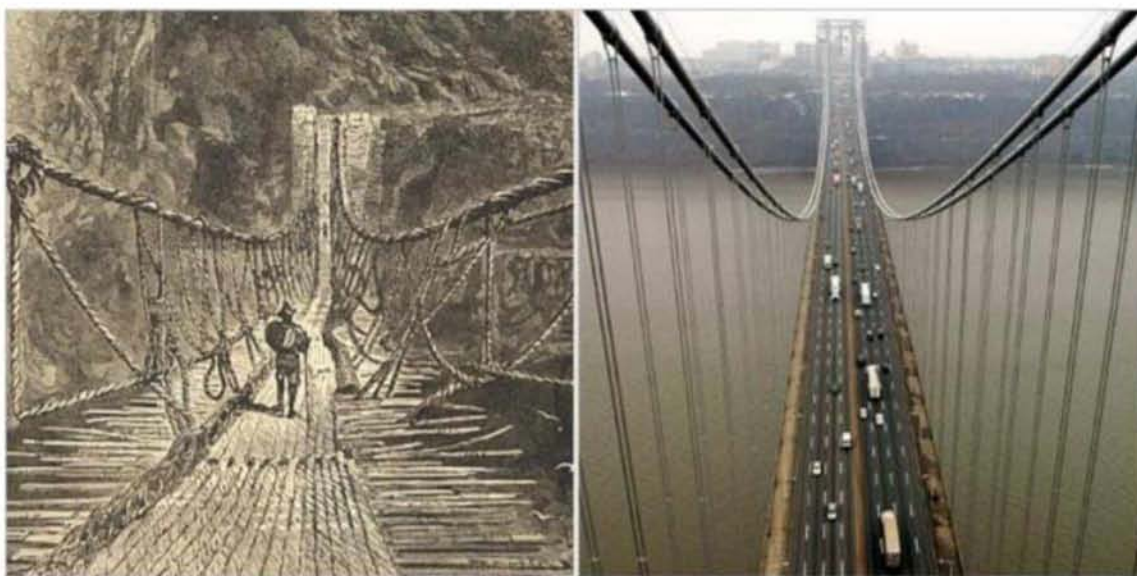
Στην κατηγορία των φυσικών πολυμερών ανήκουν το ξύλο, το μετάξι, το βαμβάκι, οι ίνες των οργανισμών, τα οστά και το DNA των κυττάρων. Σε αυτή την εργασία θα ασχοληθούμε με τα συνθετικά πολυμερή, εκείνα που έχουν κατασκευαστεί από τον άνθρωπο. Τα συνθετικά πολυμερή καλύπτουν ένα ευρύ φάσμα εφαρμογών και προέρχονται από οργανικές πρώτες ύλες, βασισμένες στο πετρέλαιο. Σε αυτή την κατηγορία των υλικών κατατάσσονται ο βακελίτης, το nylon, το PVC, το πολυστυρένιο κ.α. Για να μην υπάρξουν παρερμηνείες, από εδώ και στο εξής ο όρος πολυμερές θα αναφέρεται στα συνθετικά πολυμερή.

Τα πολυμερή μπορούν να μορφοποιηθούν εύκολα και να δώσουν προϊόντα πολύπλοκης γεωμετρίας, διαθέτουν διαφάνεια οπότε μπορούν να αντικαταστήσουν το γυαλί, έχουν χαμηλή πυκνότητα, καλές μηχανικές ιδιότητες και αρκετά χαμηλό κόστος.

Παρόλα αυτά παρουσιάζουν και κάποια σημαντικά μειονεκτήματα. Όπως έχει αποδειχθεί ήδη, η χρήση των πλαστικών υλικών προκαλεί μια από τις σημαντικότερες αιτίες μόλυνσης του περιβάλλοντος. Συγχρόνως, το γεγονός ότι πολλά από αυτά είναι βασισμένα

στο πετρέλαιο, σημαίνει ότι η παραγωγή τους έχει άμεση εξάρτηση από την τιμή και την πολιτική του πετρελαίου. Ακόμη, μιας και το πετρέλαιο αποτελεί μη ανανεώσιμη πρώτη ύλη επιβαρύνει το περιβάλλον ακόμη περισσότερο.

Ετυμολογικά, η λέξη πολυμερές προέρχεται από τις ελληνικές λέξεις *πολύ+μέρος*, ο οποίος είναι ένας ορισμός που περιγράφει κατάλληλα τον τεράστιο αριθμό των μορίων που απαρτίζουν το μακρομόριο.

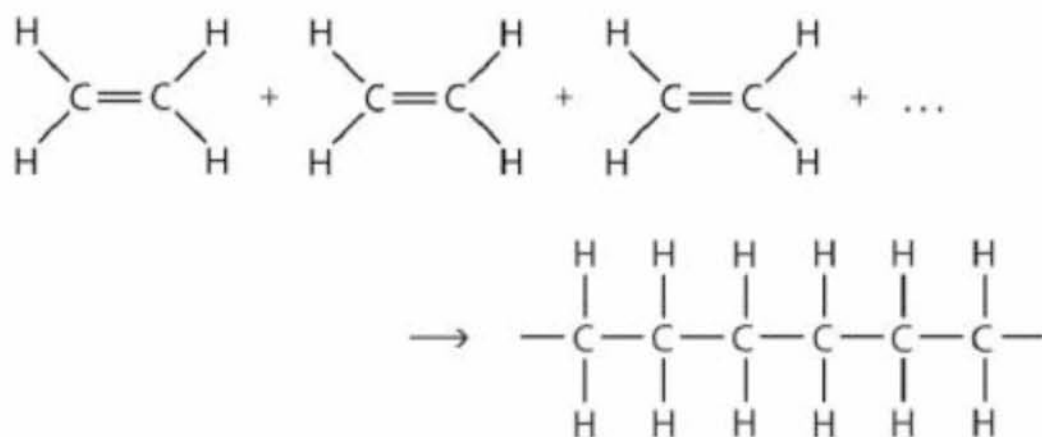


Σχ. 3 – Κατασκευή γέφυρας με χρήση φυσικών πολυμερών (αριστερά) και σύγχρονη έκδοση της με χρήση βιομηχανικών σύνθετων πολυμερών (δεξιά)

Η κατασκευή των πολυμερών, δηλαδή η συνένωση πολλών ίδιων μορίων, των μονομερών, πραγματοποιείται με τις διαδικασίες του *πολυμερισμού* και της *πολυσυμπύκνωσης*.

Με τη μέθοδο του *πολυμερισμού* παρασκευάζονται πολυμερή που έχουν την ίδια σύσταση με τα αρχικά μονομερή όπως π.χ. ο πολυμερισμός του αιθυλενίου προς τον σχηματισμό του πολυαιθυλενίου. Κατά τον πολυμερισμό μπορούν να σχηματιστούν προϊόντα διπλάσιου, τριπλάσιου και γενικά πολλαπλάσιου μοριακού βάρους. Η διαδικασία γίνεται με την επίδραση της θερμότητας, των ελεύθερων ριζών, των καταλυτών ή της ακτινοβολίας με αποτέλεσμα ο πολυμερισμός να ονομάζεται θερμικός, ριζικός, καταλυτικός ή ραδιενεργός αντίστοιχα.

Σε πολυμερισμό υποβάλλεται το καθαρό μονομερές και τα διαλύματα ή τα γαλακτώματά του. Η ποιότητα και οι ιδιότητες των πολυμερών που παρασκευάζονται κατ' αυτόν τον τρόπο επηρεάζονται από διάφορους φυσικούς και χημικούς παράγοντες από τους οποίους σπουδαιότεροι είναι: οι ιδιότητες του μονομερούς, η πίεση, το περιβάλλον στο οποίο γίνεται ο πολυμερισμός, η θερμοκρασία και η παρουσία προσμειξέων, διεγερτών ή σταθεροποιητών. Ανάλογα με τις προσθήκες και τις συνθήκες διεργασίας παράγονται πολυμερή διαφορετικού μοριακού βάρους των οποίων οι ιδιότητες ποικίλλουν.^{[5][6]}



Σχ. 4 – Πολυμερισμός αιθυλενίου

Η δεύτερη μέθοδος κατασκευής πολυμερών ονομάζεται *πολυσυμπύκνωση* και χωρίζεται σε δύο διαφορετικές κατηγορίες ανάλογα με το είδος των μονομερών που λαμβάνουν μέρος σε αυτή. Εάν η διεργασία γίνεται ανάμεσα σε *ίδια* μονομερή – π.χ. αμινοξέα – τότε ονομάζεται ομοπολυσυμπύκνωση ενώ εάν αυτά είναι διαφορετικά μεταξύ τους –π.χ. το δικαρθονικό οξύ και διαμίνη– ονομάζεται ετεροπολυσυμπύκνωση.

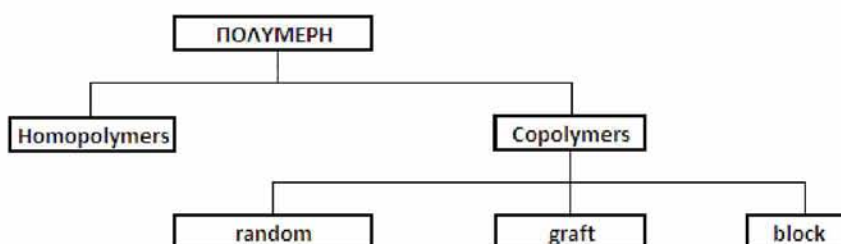
Οι κυριότεροι παράγοντες που επηρεάζουν την πορεία της πολυσυμπύκνωσης και καθορίζουν τις ιδιότητες των παραγόμενων προϊόντων είναι η θερμοκρασία της αντίδρασης, η δομή του αρχικού μονομερούς, τα είδη και οι ποσότητες των καταλυτών κ.α. Στη βιομηχανία με τη μέθοδο της πολυσυμπύκνωσης παρασκευάζονται συνθετικές ρητίνες, πολυαμίδια, πολυεστέρες κ.λπ.^[7]

Τα πολυμερή μπορούν, επίσης, να καταταχθούν ανάλογα με τη μηχανική τους απόκριση σε υψηλές θερμοκρασίες. Αυτή η κατάταξη φαίνεται στο Σχήμα 5 που ακολουθεί:



Σχ. 5 – Κατάταξη πολυμερών βάσει των μηχανικών τους ιδιοτήτων σε υψηλές θερμοκρασίες

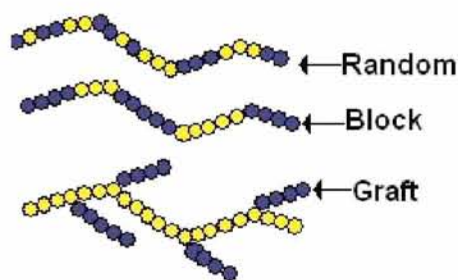
Μια ακόμη σημαντική διάκριση των πολυμερών, μπορεί να γίνει με κριτήριο αν το μονομερές της μοριακής αλυσίδας είναι το ίδιο ή διαφορετικό. Έτσι διακρίνουμε τα homopolymer (ομοπολυμερή) και τα copolymer (συμπολυμερή), αν έχουμε το ίδιο μονομερές ή διαφορετικό, αντίστοιχα. Στο Σχήμα 6 παρακάτω διακρίνεται αυτή η κατάταξη:



Σχ. 6 – Κατάταξη πολυμερών βάσει των δομικών τους μονάδων (μονομερή)

Από το παραπάνω σχήμα φαίνεται ότι τα copolymers (συμπολυμερή) διακρίνονται σε τρεις ομάδες, random, graft και block. Αυτή η διάκριση γίνεται ανάλογα με τον τρόπο που τα δομικά στοιχεία (μονομερή) εναλλάσσονται επάνω στην πολυμερική αλυσίδα.

Στο Σχήμα 7 που ακολουθεί φαίνονται οι περιπτώσεις της μοριακής αλυσίδας για ένα copolymer (συμπολυμερές):



Σχ. 7 – Περιπτώσεις της δομής των συμπολυμερών

2.2. Σύνθετα Υλικά

Ως σύνθετο υλικό ορίζεται ο συνδυασμός δύο ή περισσότερων υλικών όπου το καθένα έχει διαφορετικές ιδιότητες. Σε αυτές τις περιπτώσεις λαμβάνουμε ένα εξαιρετικό συνδυασμό ιδιοτήτων με την ανάμειξη δύο ή περισσότερων υλικών. Αυτή η βελτιωμένη συμπεριφορά αναφέρεται σαν αρχή της συνδυασμένης δράσης.

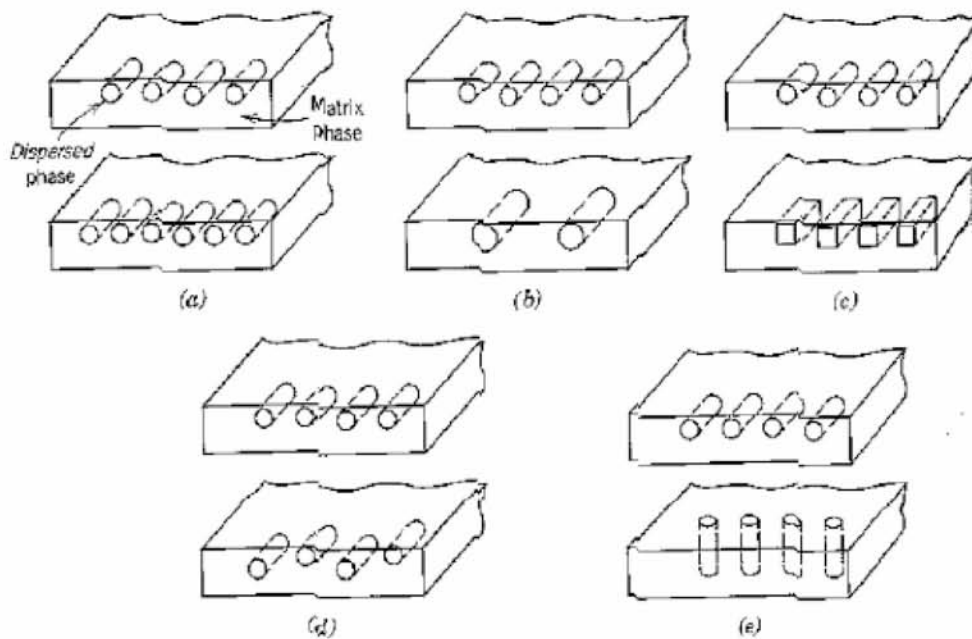
Το μικρό βάρος, η υψηλή αντοχή, η πολύ καλή συμπεριφορά σε κόπωση, σε κρούση και στη διάδοση ρωγμών, η εξαιρετική αντοχή σε διάβρωση, το μικρό κόστος συντήρησης και οι σχετικά εύκολες διαδικασίες παραγωγής είναι απλώς μερικοί από τους παράγοντες που έχουν οδηγήσει τα σύνθετα υλικά στην πρώτη θέση μεταξύ των κατασκευαστικών υλικών για μεγάλο πλήθος εφαρμογών. Μερικά μειονεκτήματα των σύνθετων υλικών, όπως: τα υψηλά επίπεδα ερπυσμού, η ιδιαίτερη και πολλές φορές ευαίσθητη συμπεριφορά σε δυσμενείς συνθήκες περιβάλλοντος (υψηλές θερμοκρασίες, χημικό περιβάλλον, θαλάσσιο περιβάλλον κλπ.) η μικρή αντίσταση σε μηχανική φθορά, καθώς και το αρκετά υψηλό αρχικό τους κόστος, βαθμιαία αντιμετωπίζονται πιο αποτελεσματικά μέσω της συνεχούς τεχνολογικής ανάπτυξης στην παραγωγή νέων και καλύτερων ινών, ρητινών και εξέλιξης των μεθόδων παραγωγής.

Τα σύνθετα υλικά αποτελούνται από δύο φάσεις: τη *μήτρα*, που είναι συνεχής και περιβάλλει την άλλη φάση, και τη *δισπαρμένη φάση* ή *συστατικό ενίσχυσης*. Η μήτρα των σύνθετων υλικών είναι ζωτικό κομμάτι της σύστασης αυτών, διαθέτει συνήθως χαμηλή πυκνότητα και η συμμετοχή της στο σύνθετο εξασφαλίζει τη μέγιστη δυνατή εκμετάλλευση των ιδιοτήτων της ενίσχυσης. Η επιλογή κατάλληλης μήτρας εξαρτάται από τη θερμοκρασία και το περιβάλλον χρήσης του υλικού.^[8] Από την άλλη πλευρά, η δισπαρμένη φάση είναι εκείνη που προσδίδει στο σύνθετο υλικό τις βελτιωμένες θερμικές, μηχανικές και άλλες ιδιότητες. Η καλή συνάφεια μεταξύ της δισπαρμένης φάσης και της μήτρας είναι πολύ σημαντική για την καλή λειτουργία του συνθέτου. Η κοινή επιφάνεια μεταξύ των δύο συστατικών υλικών καθώς και η περιοχή στα σύνορα αυτής της επιφάνειας ορίζεται ως *διεπιφάνεια*.

Όμως πέρα από την δομή και την επιφανειακή μορφολογία των σύνθετων υλικών με ενισχυτικά μέσα, υπάρχουν και οι μικροσκοπικοί παράγοντες που αφορούν τα ενισχυτικά αυτά μέσα και που επηρεάζουν τις τελικές ιδιότητες των συνθέτων όπως είναι η

συγκέντρωση, το μέγεθος, το σχήμα, η κατανομή/ευθυγράμμιση, ο προσανατολισμός καθώς και το μήκος τους.

Οι ιδιότητες του σύνθετου υλικού είναι συνάρτηση των ιδιοτήτων των δύο φάσεων, των σχετικών τους ποσοστών αναλογίας και της γεωμετρίας της διεσπαρμένης φάσης. Η τελευταία σημαίνει το σχήμα και το μέγεθος των διεσπαρμένων σωματιδίων, την κατανομή τους και τον προσανατολισμό τους. Τα χαρακτηριστικά αυτά φαίνονται στο Σχήμα 8 που βρίσκεται παρακάτω:



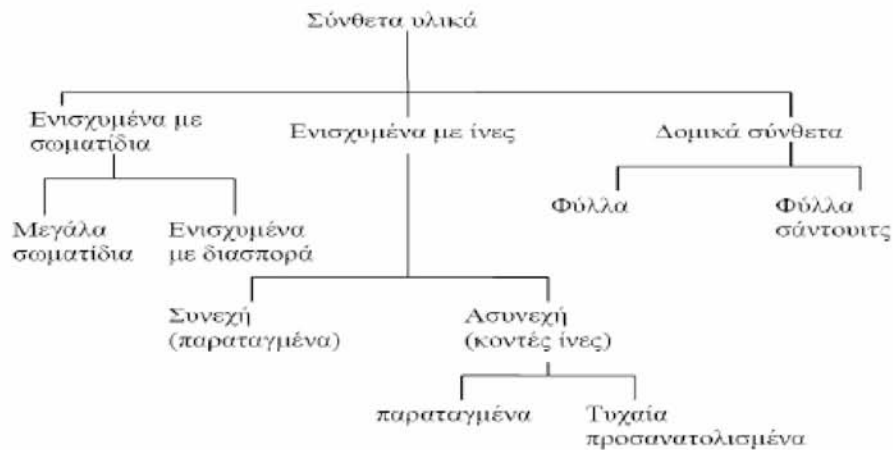
Σχ. 8 – Διάφορα γεωμετρικά χαρακτηριστικά που επηρεάζουν τις ιδιότητες των σύνθετων υλικών: (α) συγκέντρωση, (β) μέγεθος, (γ) σχήμα, (δ) κατανομή, (ε) προσανατολισμός

Τα σύνθετα υλικά μπορούν να ταξινομηθούν σε τρεις γενικές κατηγορίες ανάλογα με το σχήμα και τη γεωμετρία του ενισχυτικού υλικού (βλ. Σχήμα 9):

- (α) ενισχυμένα με σωματίδια,
- (β) ενισχυμένα με ίνες,
- (γ) δομικά σύνθετα.

Κάθε κατηγορία έχει τουλάχιστον δύο υποδιαίρεσεις. Στην πρώτη περίπτωση η διεσπαρμένη φάση έχει ίδιες περίπου διαστάσεις σε όλες τις κατευθύνσεις. Στη δεύτερη

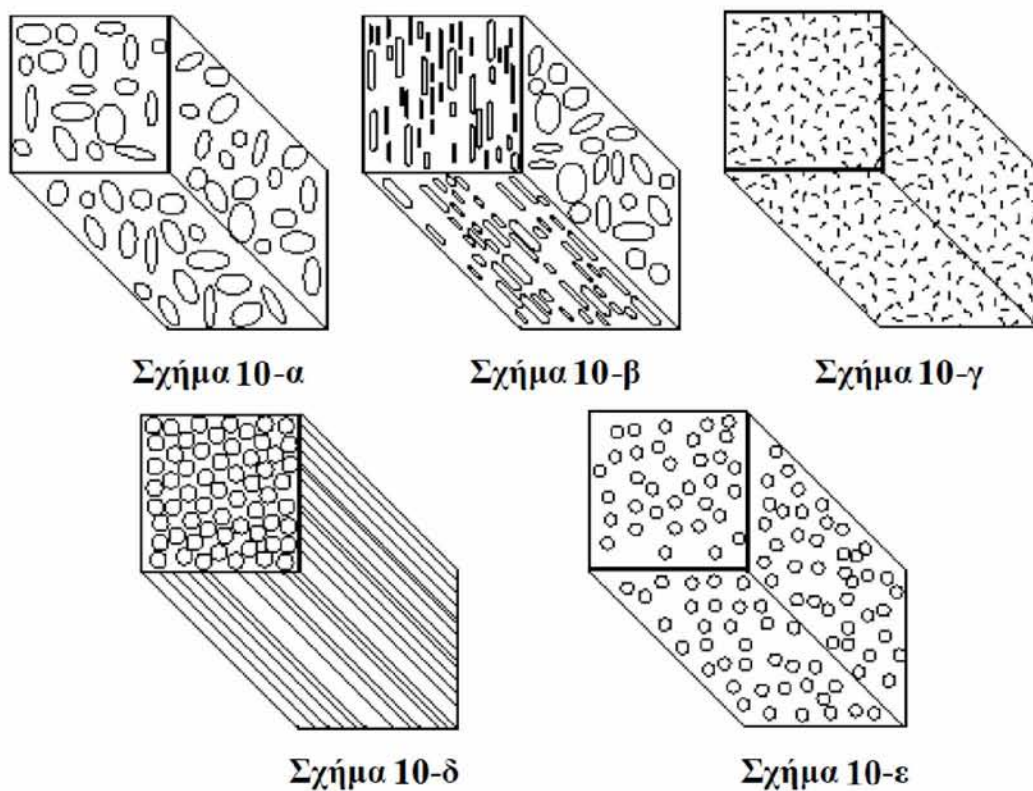
περίπτωση, η διεσπαρμένη φάση έχει τη γεωμετρία φυλλιδίου (δηλ. μεγάλη αναλογία λόγου μήκους/πάχους). Στην τρίτη περίπτωση υπάρχει συνδυασμός σύνθετων και ομοιογενών υλικών. Με βάση αυτή την ταξινόμηση ακολουθεί η παρουσίαση των παρακάτω κατηγοριών των υλικών.^[9]



Σχ. 9 – Ταξινόμηση των διάφορων τύπων σύνθετων υλικών

2.3. Σύνθετα Πολυμερή Υλικά

Τον όρο σύνθετα πολυμερή υλικά τον χρησιμοποιούμε για να περιγράψουμε τα πολυμερή που είναι ενισχυμένα με σωματίδια τα οποία συναντώνται σε διάφορες μορφές, όπως είναι τα φυλλίδια (flakes), τα σφαιρικά σωματίδια και οι ίνες. Ο προσανατολισμός της ενίσχυσης μπορεί να είναι συγκεκριμένος ή τυχαίος, οπότε και έχουμε τα aligned ή random συστήματα, αντίστοιχα. Στο Σχήμα 10 φαίνονται οι διάφορες περιπτώσεις σύνθετων πολυμερών.^[10]



Σχ. 10-(α): Φυλλίδια τυχαίου προσανατολισμού

Σχ. 10-(β): Φυλλίδια ορισμένου προσανατολισμού (κάθετα στις πάνω και κάτω επιφάνειες της μήτρας)

Σχ. 10-(γ): Ίνες μικρού μήκους και τυχαίου προσανατολισμού

Σχ. 10-(δ): Ίνες μεγάλου μήκους και συγκεκριμένου προσανατολισμού

Σχ. 10-(ε): Σφαιρικά σωματίδια

Ορισμένες απ' τις εφαρμογές των σύνθετων υλικών σε διάφορες βιομηχανίες παρουσιάζονται στον Πίνακα 1:

ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑ	ΕΦΑΡΜΟΓΗ
Αθλητικών ειδών	Καλάμια ψαρέματος, μπαστούνια γκολφ, πισίνες, βάρκες, σκι κτλ.
Οικιακού εξοπλισμού	Προκατασκευασμένες οικίες, καρέκλες, τραπέζια, σκάλες κτλ.
Χημική	Σωλήνες, δεξαμένες, δοχεία υψηλής πίεσης κτλ.
Ηλεκτρική	Διακόπτες, μονωτικά υλικά κτλ.
Αυτοκινήτων	Τμήματα σκελετού, προφυλακτήρες, πλαίσιο οργάνων, άξονες κτλ.
Ναυπηγική	Σκαριά πλοίων, κατάστρωμα, κατάρτια κτλ.
Αεροσκαφών	Πτερύγια, σκελετός αεροσκάφους, σύστημα προσγείωσης, πτερύγια ελικοπτέρων κτλ.

Πίνακας 1 – Εφαρμογές σύνθετων πολυμερών για διάφορους τομείς της βιομηχανίας

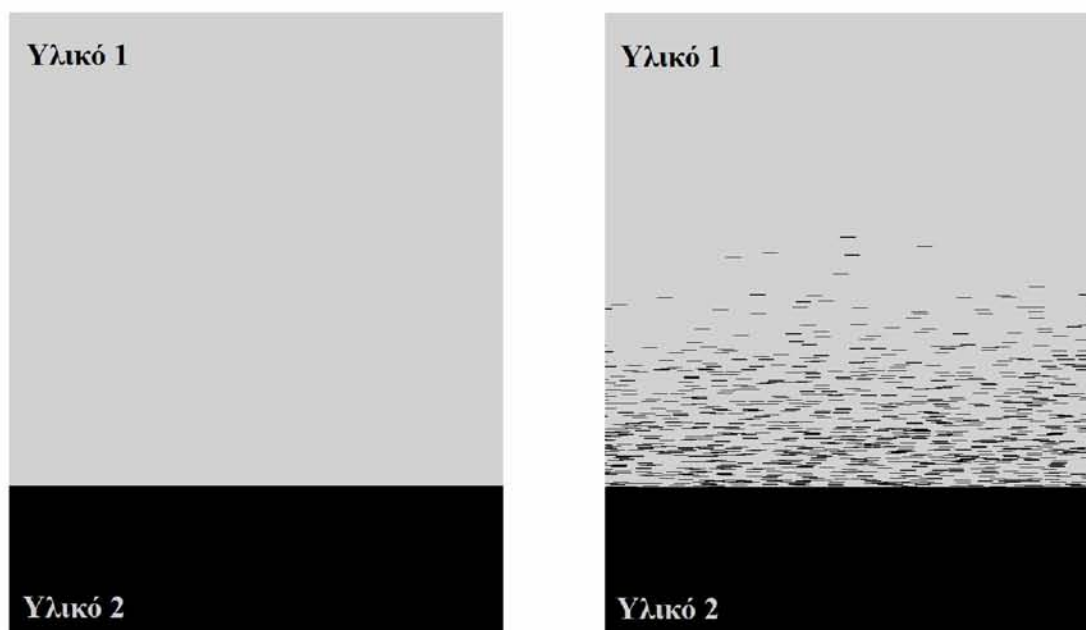
Στα πλαίσια αυτής της διπλωματικής δίνουμε ιδιαίτερη έμφαση σε σύνθετα πολυμερή που διαθέτουν ενισχυτικό υλικό με τη μορφή φυλλιδίων. Σύνθετα υλικά με παρόμοια δομή χρησιμοποιούνται ευρέως σε πολλές εφαρμογές, κυρίως σαν υλικά μόνωσης, όπως για παράδειγμα σε συσκευασίες φαγητών, όπου στόχος είναι η παρεμπόδιση της διάχυσης του οξυγόνου, ατμών H₂O και/ή CO₂. Τα ενισχυτικά μέσα είναι κατασκευασμένα είτε από ανόργανα υλικά, όπως το γυαλί, ο άνθρακας ή διάφορα μέταλλα και κεραμικά, είτε από οργανικά υλικά όπως διάφορα πολυμερή.

Για παράδειγμα, τα τελευταία χρόνια, έρευνες γύρω από το γραφένιο έχουν γίνει πολύ δημοφιλείς και υπόσχονται σύνθετα υλικά με βελτιωμένες ιδιότητες μόνωσης. Το γραφένιο διαθέτει εξαιρετικές μηχανικές, θερμικές και οπτικές ιδιότητες, υψηλή ηλεκτρική και κρυσταλλική ποιότητα και μεγάλη επιφάνεια. Όλα αυτά το καθιστούν ιδανικό ενισχυτικό υλικό σε σύνθετα πολυμερή υλικά που χρησιμοποιούνται στην αποθήκευση και την παραγωγή ενέργειας όπως οι ηλιακοί συλλέκτες, σε ποικίλα ηλεκτρικά προϊόντα, σε βιολογικούς και χημικούς αισθητήρες, σε τεχνολογίες περιβαλλοντικής απολύμανσης και αφαλάτωσης νερού και πολλές άλλες εφαρμογές.

Επιπλέον, βαφές με φυλλίδια από mica βοηθούν στην καταστολή της διάβρωσης των μετάλλων, επιστρώσεις με φυλλίδια από πηλό που απορροφούν νερού προστατεύουν ηλεκτρονικές συσκευές και γυάλινα φυλλίδια βρίσκουν εφαρμογή στην επικάλυψη μεγάλων δεξαμενών αφού παρέχουν μεγάλη αντίσταση στη διείσδυση υγρών και αέριων ουσιών.

2.4. Σύνθετα Πολυμερή Υλικά με Βαθμωτή Μικροδομή

Στην επιστήμη των υλικών, τα Σύνθετα Υλικά με Βαθμωτή Μικροδομή, ή για συντομία FGCMs – *Functionally Graded Composite Materials* –^[12] χαρακτηρίζονται από τη βαθμωτή διακύμανση της σύνθεσης, της δομής και της πυκνότητας της ενίσχυσης μέσα στη μήτρα του σύνθετου υλικού. Πιο συγκεκριμένα, στα FGCMs, η μετάβαση από το ένα υλικό στο άλλο ακολουθεί μια ομαλή μετάβαση, εξαλείφοντας έτσι τις αποτυχίες του υλικού που οφείλονται στην ‘απότομη’ μετάβαση που διακρίνεται στα απλά σύνθετα υλικά. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα το τελικό υλικό να συνδυάζει τις καλύτερες ιδιότητες και των δύο υλικών που το απαρτίζουν. Είτε πρόκειται για θερμική ή διαβρωτική αντοχή, ελαστικότητα και ανθεκτικότητα, μπορούν να χρησιμοποιηθούν τα δυνατά σημεία και των δύο υλικών για την αποφυγή διάβρωσης, κόπωσης, θραύσης ή αστοχίας του υλικού.^[13]



Σχ. 11 – Σύνθετο Υλικό με ‘απότομη’ μετάβαση από το ένα υλικό στο άλλο (αριστερά) και Σύνθετο Υλικό με Βαθμωτή Μικροδομή (FGCM) με ομαλή μετάβαση από το ένα υλικό στο άλλο (δεξιά)

Η έρευνα για την κατασκευή των FGCMs πραγματοποιείται ήδη από το 1984 ενώ τα τελευταία χρόνια η χρήση τους έχει γίνει αρκετά δημοφιλής. Η βιομηχανία των αεροσκαφών και της αεροδιαστημικής καθώς και η βιομηχανία των κυκλωμάτων υπολογιστών,

ενδιαφέρονται πολύ για τις θερμικές ιδιότητες των FGCMs που μπορούν να αντέξουν ιδιαίτερα υψηλές θερμοκρασίες. Οι ιδιότητες αυτές επιτυγχάνονται χρησιμοποιώντας ένα κεραμικό στρώμα που συνδέεται με ένα μεταλλικό στρώμα.^[13]

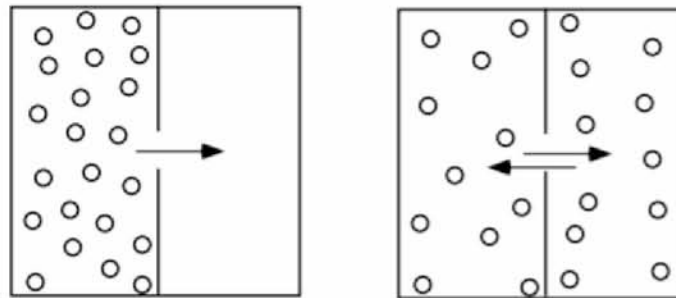
Καθώς η διαδικασία παρασκευής των FGCMs βελτιώνεται, το κόστος κατασκευής τους μειώνεται με αποτέλεσμα να κατακτούν συνεχώς και μεγαλύτερο έδαφος σε διάφορους τομείς όπως η αυτοκινητοβιομηχανία, η ιατρική, ο αθλητισμός, η παραγωγή και διανομή ενέργειας, σε αισθητήρες κτλ.^[14]

Στα πλαίσια αυτής της διπλωματικής εργασίας θα ασχοληθούμε με σύνθετα υλικά ενισχυμένα με φυλλίδια, στα οποία η κατανομή των φυλλιδίων δεν είναι ομοιόμορφη, αλλά διαθέτουν βαθμωτή μικροδομή (FGCMs). Το σχήμα της διεσπαρμένης φάσης που έχουμε επιλέξει είναι εκείνο των φυλλιδίων. Όλα τα φυλλίδια είναι aligned μεταξύ τους και διαθέτουν προσανατολισμό παράλληλο προς τις επάνω και κάτω επιφάνειες της μήτρας. Θα μελετήσουμε με ποιόν τρόπο επηρεάζεται ο συντελεστής διάχυσης και θερμικής αγωγιμότητας μεταβάλλοντας την κατανομή του ενισχυτικού υλικού μέσα στη μήτρα καθώς και αλλάζοντας τη συγκέντρωση και το μέγεθος των φυλλιδίων. Για τη μελέτη της επίδρασης των παραπάνω στο συντελεστή διάχυσης θα εφαρμοστούν προσομοιώσεις σε μόνιμες συνθήκες. Στις ίδιες γεωμετρίες θα εφαρμοστούν και προσομοιώσεις υπό χρονικά μεταβαλλόμενες συνθήκες.

3. Φαινόμενα Μεταφοράς

3.1. Διάχυση Μάζας

Σε οποιαδήποτε θερμοκρασία διαφορετική του απόλυτου μηδενός, όλα τα άτομα, ανεξάρτητα από την κατάσταση στην οποία βρίσκονται (αέρια, υγρή, στερεή) είναι συνεχώς σε κίνηση. Στην περίπτωση της διάχυσης της μάζας, αυτή η μετατόπιση, παρατηρείται να συμβαίνει από περιοχές υψηλής συγκέντρωσης προς περιοχές χαμηλότερης συγκέντρωσης. Η κινητήρια δύναμη, λοιπόν, της διάχυσης της μάζας είναι η ύπαρξη μιας βαθμίδας συγκέντρωσης (gradient).^[15] Μάλιστα, όπως θα δούμε παρακάτω, ο ρυθμός με τον οποίο μεταφέρεται η μάζα είναι ανάλογος με τη βαθμίδα εκείνη και πιο συγκεκριμένα με την αρνητική βαθμίδα.



Σχ. 12 – Μεταφορά μάζας ως αποτέλεσμα της διαφοράς συγκέντρωσης ανάμεσα στις δύο περιοχές

Οι διαδικασίες της διάχυσης μάζας χωρίζονται σε δύο κατηγορίες: σε αυτές που πραγματοποιούνται σε **μόνιμες συνθήκες** (*steady state*) και σε αυτές που πραγματοποιούνται σε **χρονομεταβαλλόμενες συνθήκες** (*time dependent*). Ανάλογα με την κατάσταση την οποία μελετάμε υπάρχουν και οι αντίστοιχες εξισώσεις που μας βοηθούν να κατανοήσουμε καλύτερα το πείραμα.

Στην περίπτωση των μόνιμων συνθηκών, η διάχυση μάζας λαμβάνει χώρα υπό σταθερό ρυθμό. Μόλις η διαδικασία ξεκινά, ο αριθμός των ατόμων που διασχίζουν μια συγκεκριμένη επιφάνεια, δηλαδή η **ροή μάζας**, παραμένει σταθερή σε σχέση με το χρόνο. Επομένως, αυτό σημαίνει ότι για όλο το σύστημα ισχύει ότι $dC/dx = \text{σταθερό}$ και $dC/dt = 0$, όπου C είναι η συγκέντρωση, x ή χωρική διάσταση κατά την οποία εμφανίζεται η βαθμίδα συγκέντρωσης και t ο χρόνος.

Η μαθηματική σχέση που εξηγεί τη διάχυση μάζας υπό μόνιμες συνθήκες ονομάζεται *1^{ος} Νόμος του Fick* και έχει την παρακάτω μορφή:

$$J = -D \cdot \nabla C \quad 3.1$$

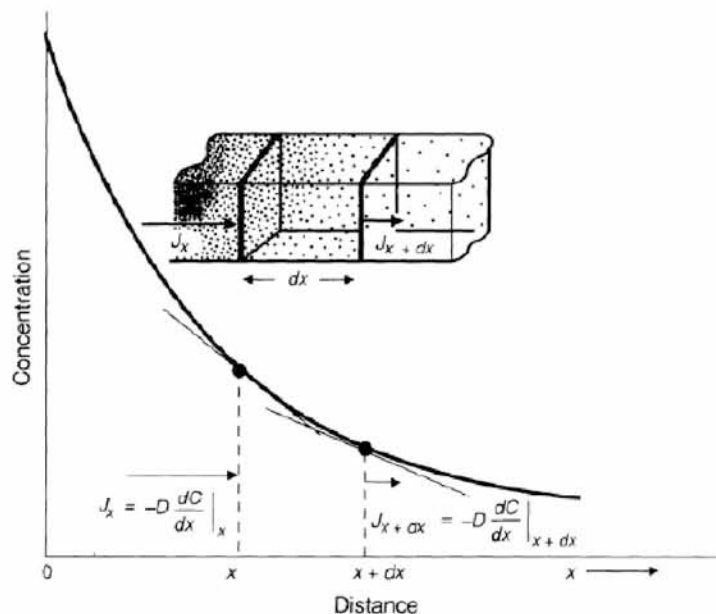
όπου:

J: ροή μάζας ανά μονάδα επιφάνειας ανά μονάδα χρόνου (σε $kg / (m^2 \cdot sec)$)

D: ο συντελεστής διάχυσης ο οποίος εκφράζει την ικανότητα των ατόμων προς διάχυση (σε m^2 / sec)

∇C : Ανάδελτα συγκέντρωσης, ο διανυσματικός διαφορικός τελεστής των μερικών παραγώγων της συγκέντρωσης ως προς τις τρεις διαστάσεις του χώρου. Δείχνει τον τρόπο με τον οποίο μεταβάλλεται η συγκέντρωση στο χώρο. ^[16]

Αυτό που μας λέει ο 1^{ος} Νόμος του Fick είναι ότι η ταχύτητα με την οποία διαχέεται μια ουσία μέσα από μια επιφάνεια, δηλαδή η ταχύτητα με την οποία γίνεται η ροή μάζας της ουσίας, είναι ανάλογη του εμβαδού της επιφάνειας, που περιλαμβάνεται στον όρο J, και της αρνητικής βαθμίδας της συγκέντρωσης. Το αρνητικό πρόσημο δηλώνει ότι η διάχυση πραγματοποιείται αντίθετα από τη βαθμίδα συγκέντρωσης δηλαδή, όπως προαναφέρθηκε, από περιοχές μεγάλης συγκέντρωσης προς περιοχές μικρότερης συγκέντρωσης.



Σχ. 13 – 1^{ος} Νόμος του Fick, βαθμίδα συγκέντρωσης και κατεύθυνση διάχυσης

Ο συντελεστής διάχυσης D , αντικατοπτρίζει την ικανότητα των διαχεόμενων μορίων να κινηθούν σύμφωνα με το περιβάλλον που βρίσκονται, για παράδειγμα ο συντελεστής διάχυσης των αερίων είναι αρκετά μεγαλύτερος από εκείνον των υγρών ή των στερεών.^[15]

Στην περίπτωση της διάχυσης υπό χρονομεταβαλλόμενες συνθήκες, οι εξισώσεις αποκτούν άλλη μορφή αφού πλέον η συγκέντρωση αλλάζει με το χρόνο. Πλέον μιλάμε για το *2^ο Νόμο του Fick* και η μαθηματική του έκφραση είναι η εξής:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot \nabla^2 C \quad 3.2$$

όπου:

C: η συγκέντρωση (σε kg / m^3)

t: ο χρόνος (σε sec)

D: ο συντελεστής διάχυσης (σε m^2 / sec)

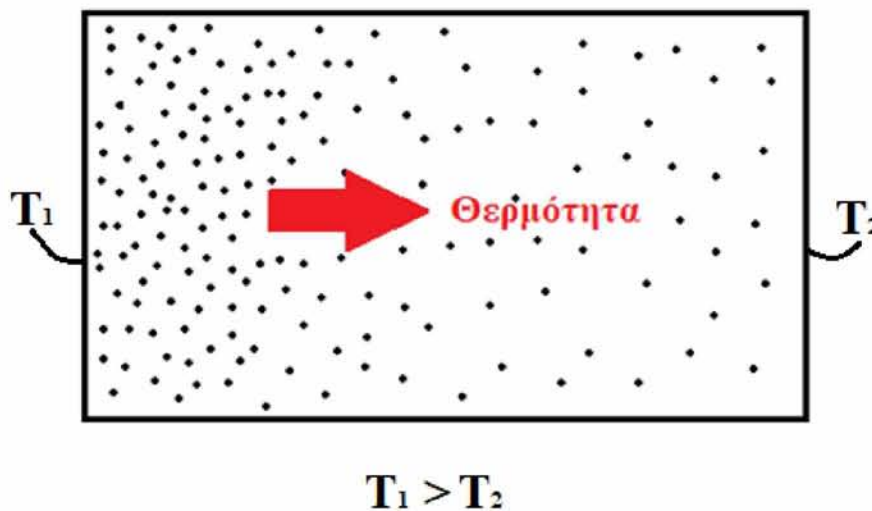
$\nabla^2 C$: ο Λαπλασιανός συντελεστής $\frac{\partial^2}{\partial x^2} C + \frac{\partial^2}{\partial y^2} C + \frac{\partial^2}{\partial z^2} C$.^[17]

Τέλος, είναι σημαντικό να αναφερθεί ότι, παρόλο που οι βασικοί νόμοι της μεταφοράς μάζας είναι παντού ίδιοι, η μεγάλη ποικιλία των φαινομένων μεταφοράς μάζας που παρατηρούμε και μελετάμε στη φύση και στο εργαστήριο εξαρτάται σημαντικά από τις συνοριακές συνθήκες που χρησιμοποιούνται καθώς και από τη μικροδομή ή τη γεωμετρία του μέσου δια του οποίου πραγματοποιείται η μεταφορά μάζας.

3.2. Μεταφορά Θερμότητας

Αφιερώσαμε ήδη λίγο χρόνο στη μελέτη της διάχυσης μάζας και τώρα θα πρέπει να αφιερώσουμε άλλο τόσο στη μελέτη της μεταφοράς θερμότητας. Ωστόσο, οι μηχανισμοί μεταφοράς μάζας και θερμότητας είναι ανάλογοι μεταξύ τους και για το λόγο αυτό μπορούμε να κατανοήσουμε τη μεταφορά θερμότητας πιο εύκολα και γρήγορα, επισημαίνοντας απλά κάποιους παραλληλισμούς ανάμεσα στα δύο φαινόμενα μεταφοράς. Κατασκευάζοντας τέτοιου είδους ‘γέφυρες’ ανάμεσα σε αυτές τις δύο φαινομενικά άσχετες διεργασίες, είναι δυνατό να επιλύσουμε προβλήματα μεταφοράς θερμότητας από τις γνώσεις που έχουμε αποκομίσει από τη μελέτη της διάχυσης μάζας.^[2]

Σε αναλογία με τη μεταφορά μάζας, η κινητήρια δύναμη που προκαλεί τη μεταφορά θερμότητας είναι η διαφορά θερμοκρασίας. Εάν δεν υπάρχει διαφορά θερμοκρασίας ανάμεσα στις δύο περιοχές τότε δεν υπάρχει και μεταφορά θερμότητας.^[2]



Σχ. 14 – Η μεταφορά θερμότητας γίνεται από περιοχές υψηλής ενθαλπίας (δηλ. υψηλής θερμοκρασίας) προς περιοχές χαμηλότερης ενθαλπίας (δηλ. χαμηλής θερμοκρασίας)

Όπως και στη διάχυση μάζας, έτσι και στη μεταφορά θερμότητας, τα προβλήματα που καλούμαστε να μελετήσουμε και να επιλύσουμε χωρίζονται σε δύο κατηγορίες: τα προβλήματα υπό **μόνιμες συνθήκες** (*steady state*) και τα προβλήματα υπό **χρονομεταβαλλόμενες συνθήκες** (*time dependent*). Ανάλογα με τις συνθήκες αλλάζουν και οι αντίστοιχες εξισώσεις που χρησιμοποιούμε.

Στην περίπτωση της μεταφοράς θερμότητας το ρόλο της ροής μάζας παίρνει η ροή θερμότητας, το ρόλο του συντελεστή διαχυτότητας παίρνει ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας και της βαθμίδας συγκέντρωσης (gradient) παίρνει η βαθμίδα θερμοκρασίας.

Έτσι, για μόνιμες συνθήκες η μεταφορά θερμότητας με αγωγή περιγράφεται από τον **Νόμο του Fourier**, η μαθηματική έκφραση του οποίου είναι η εξής:

$$\mathbf{q} = -\mathbf{k} \cdot \nabla T \quad 3.3$$

όπου:

q: ροή θερμότητας ανά μονάδα επιφάνειας ανά μονάδα χρόνου (σε *Joule / (m² · sec)*)

k: ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας ο οποίος εκφράζει την ικανότητα ενός υλικού να άγει τη θερμότητα (σε *W / m · K*)

∇T: Ανάδελτα θερμοκρασίας

Στην περίπτωση της μεταφοράς θερμότητας σε χρονομεταβαλλόμενες συνθήκες ο Νόμος του Fourier γίνεται:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \cdot \nabla^2 T \quad 3.4$$

όπου:

T: η θερμοκρασία (σε *K*)

t: ο χρόνος (σε *sec*)

∇²T: ο Λαπλασιανός συντελεστής που σε καρτεσιανές συντεταγμένες έχει την εξής μορφή:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} T + \frac{\partial^2}{\partial y^2} T + \frac{\partial^2}{\partial z^2} T \quad [17]$$

α: η θερμική διαχυτότητα που ορίζεται ως το πηλίκο: $k/(\rho \cdot c_p)$ με μονάδες *m²/sec* και

όπου:

k: συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας (σε *W / m · K*)

ρ: η πυκνότητα του υλικού (σε *kg/m³*)

c_p: η θερμοχωρητικότητα του υλικού (σε *J/kg · K*)

4. Διάχυση υπό Σταθερές Συνθήκες

4.1. Κατανομές

Οι υπολογισμοί μας έγιναν σε δισδιάστατο κελί (Representative Volume Element RVE) ορθογώνιου σχήματος το οποίο δημιουργήθηκε προσθέτοντας 4000 ξεχωριστά φυλλίδια σε μία υπάρχουσα γεωμετρία χρησιμοποιώντας αλγόριθμο τυχαίας κατανομής. Οι συντεταγμένες στο επίπεδο, των κέντρων των φυλλιδίων δημιουργούνται χρησιμοποιώντας μία γεννήτρια τυχαίων αριθμών, ενώ η γωνία προσανατολισμού (θ) είναι σταθερή και ίδια για όλα τα φυλλίδια. Ο αλγόριθμος ελέγχει για επικάλυψη του προηγούμενου φυλλιδίου από το επόμενο σε μία υπο-περιοχή γύρω από το κέντρο του προηγούμενου. Αν δεν βρεθεί κάποια επικάλυψη, η διαδικασία συνεχίζει με την τοποθέτηση του επόμενου φυλλιδίου μέχρι να καλυφθεί ο επιθυμητός αριθμός που έχει οριστεί, ή μέχρι να μην μπορεί να τοποθετηθεί άλλο φυλλίδιο μετά από 10^5 προσπάθειες. Στην τελευταία περίπτωση ο αλγόριθμος τερματίζει χωρίς να δίνει αποτέλεσμα και ξεκινά νέα προσπάθεια. Επιβάλλεται να υπάρχει ελάχιστη απόσταση μεταξύ των φυλλιδίων και αυτή ορίζεται ως $2t$, όπου το t είναι ένα ιδεατό πάχος αυτών, έτσι ώστε η γεωμετρία να μπορεί να συνδεθεί και να μπορεί σε αυτήν να κατασκευαστεί ένα υπολογιστικό πλέγμα. Αν οι διστάσεις της κυψελίδας (RVE) είναι (H) και (L) και αν περιέχει (N) φυλλίδια με διαστάσεις (t, l), το κλάσμα εμβαδού του φυλλιδίου (φ) είναι $\varphi = \frac{Nat^2}{LH}$ και το μήκος του (l) είναι $l = \sqrt{LH(\alpha\varphi)/N}$.

Στην περίπτωση μας έχουν χρησιμοποιηθεί κυκλικές συνοριακές συνθήκες στο δεξί και αριστερό άκρο. Πιο συγκεκριμένα, $C_{left}(0, y) = C_{right}(L, y)$, όπου το C είναι η συγκέντρωση της διαλυμένης ουσίας. Η συγκέντρωση C είναι σταθερή στα άνω και κάτω όρια, έτσι ώστε να δημιουργείται μια μακροσκοπική διαφορά συγκέντρωσης ΔC . Καθώς τα φυλλίδια είναι μη διαπερατά ισχύει $\frac{\partial C}{\partial n} = 0$ στην επιφάνεια τους. Για κάθε $\alpha\varphi$ παράγουμε 10 διαφορετικές γεωμετρίες, οι οποίες διαφοροποιούνται ως προς τη θέση τοποθέτησης των φυλλιδίων. Για τον σχηματισμό του υπολογιστικού πλέγματος χρησιμοποιείται το πρόγραμμα GMSH όπου στην κάθε περίπτωση περιλαμβάνονται 4×10^6 τριγωνικά στοιχεία. Αυτά τα πλέγματα εισάγονται στον OpenFOAM για την επίλυση σε μόνιμες συνθήκες της διαφορικής εξίσωσης $\nabla^2 C = 0$, της οποίας τα αποτελέσματα δίνονται στον τομέα ενδιαφέροντος της κάθε μελέτης. Η λύση μας παρέχει, επίσης, την τιμή του $\frac{\partial C}{\partial n}$ σε κάθε

συνοριακό σημείο. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα η μαζική ροή στο άνω ή κάτω σύνορο, στο οποίο το C είναι σταθερό μπορεί να υπολογιστεί χρησιμοποιώντας τη σχέση:

$$J_n = -D_0 \int_0^L \left(\frac{\partial C}{\partial n}\right) dx \quad 4.1$$

όπου n είναι το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα και L είναι το πλάτος της κυψελίδας. Αν το D_{eff} είναι ο ενεργός συντελεστής διάχυσης σε ένα ισοδύναμο αντιπροσωπευτικό υλικό, εξισώνοντας την παραπάνω ροή με τον νόμο του Fick λαμβάνουμε το εξής:

$$D_{eff} = \frac{HD_0}{\Delta C \times L} \int_0^L \left(\frac{\partial C}{\partial n}\right) dx \quad 4.2$$

Οι μονωτικές ιδιότητες των μεμβρανών ποσοτικοποιούνται με τη χρήση του συντελεστή βελτίωσης των ιδιοτήτων μόνωσης, BIF (Barrier Improvement Factor) που ορίζεται ως ο λόγος $BIF = D_0/D_{yy}$ όπου το D_0 είναι ο συντελεστής διάχυσης της μήτρας χωρίς τα φυλλίδια και D_{yy} ο συντελεστής διάχυσης με φυλλίδια προσανατολισμένα κάθετα προς την κατεύθυνση της διάχυσης. Αν $N(y)$ είναι η συχνότητα εμφάνισης των φυλλιδίων στον άξονα y (με μονάδες flakes/m) και N_T είναι ο συνολικός αριθμός των φυλλιδίων τότε έχουμε:

$$N_T = \int_0^H N(y) dy \quad 4.3$$

Αν το τοπικό BIF (στην θέση y όπου η συγκέντρωση εκφράζεται από το γινόμενο $\alpha\varphi(y)$) δίνεται από τη σχέση:

$$BIF(y) = \left(1 + \frac{\alpha\varphi(y)}{\lambda}\right)^2 \quad 4.4$$

οπού (λ) είναι μια γεωμετρική παράμετρος, τότε το μέσο BIF σε ολόκληρο το υλικό θα δίνεται από τη σχέση:

$$\overline{BIF} = \frac{1}{H} \int_0^H \left(1 + \frac{\alpha\varphi(y)}{\lambda} \right)^2 dy \quad 4.5$$

Για το αφ ισχύει:

$$\alpha\varphi(y) = \left(\frac{l}{H}\right)N(y) \quad 4.6$$

Συνδυάζοντας τις σχέσεις (4.5) και (4.6) προκύπτει:

$$\overline{BIF} = 1 + \frac{2}{\lambda} \left(\frac{l}{H}\right)^2 N_T + \frac{l^4}{\lambda^2 H^3} \int_0^H N(y)^2 dy \quad 4.7$$

Προφανώς $N_T = \overline{\alpha\varphi} \left(\frac{H}{l}\right)^2$ και επομένως ο δεύτερος, στο δεξί μέρος της εξίσωσης (4.7), όρος είναι $\frac{2}{\lambda} (\overline{\alpha\varphi})$. Αν το $N(y)$ είναι μία γενική εξίσωση τότε ο δεύτερος όρος στην εξίσωση (4.7) μπορεί να γραφεί ως:

$$\frac{N_T^2 l^4}{\lambda^2 H^4} \times \frac{H}{N_T^2} \int_0^H N(y)^2 dy = \left(\frac{\overline{\alpha\varphi}}{\lambda}\right)^2 \times \beta \quad 4.8$$

όπου το $\beta = \frac{H}{N_T^2} \int_0^H N(y)^2 dy$ είναι ένας παράγοντας βελτίωσης ο οποίος εκφράζει την αυξημένη αποτελεσματικότητα ενός διαβαθμισμένου συστήματος έναντι ενός κατά τα άλλα ισοδύναμου ομογενούς.

Σύμφωνα με τα παραπάνω έχουμε εξάγει τη σχέση για το συνολικό BIF ως:

$$\overline{BIF} = 1 + \frac{2}{\lambda} \times \overline{\alpha\varphi} + \beta \times \left(\frac{\overline{\alpha\varphi}}{\lambda}\right)^2 \quad 4.9$$

όπου το $a\phi$ είναι το μέσο $\overline{a\phi}$ που αντιστοιχεί σε κατανομή των N φυλλιδίων μέσα στον χώρο του υπολογιστικού κελιού – $a\phi = N_T \left(\frac{l}{H}\right)^2$.

4.1.1. Ημι-κανονική Κατανομή (Half Normal)

Σε αυτές τις περιπτώσεις, η συγκέντρωση παίρνει την μέγιστη τιμή στην μία πλευρά του υλικού και την ελάχιστη στην άλλη πλευρά, ακολουθώντας την συνάρτηση της ημι-κανονικής κατανομής στο ενδιάμεσο διάστημα. Η εξίσωση της κατανομής δίνεται από την σχέση:

$$N(y) = \frac{A\sqrt{2}}{\sigma\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma^2}\right)$$

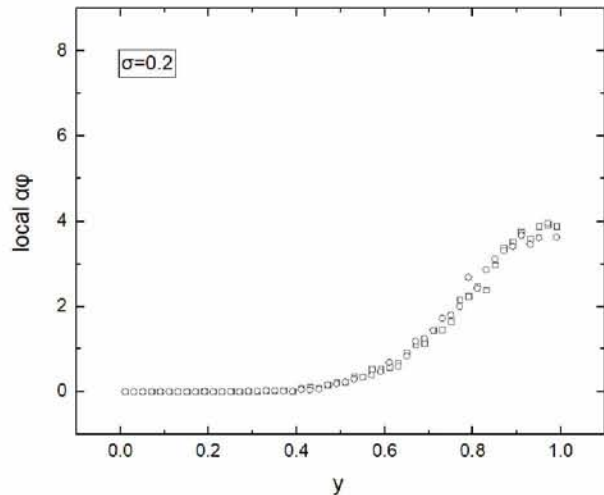
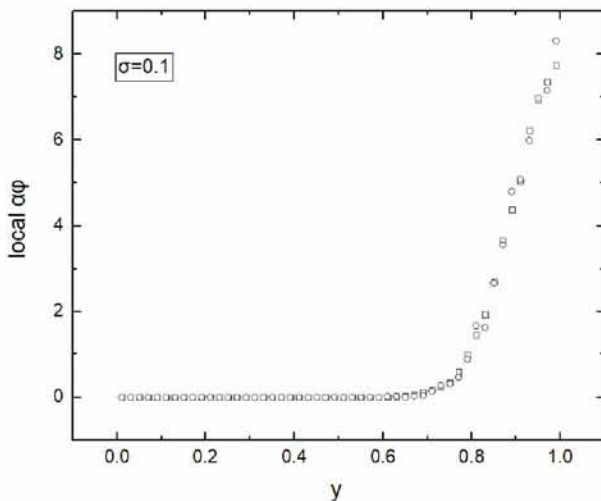
με την σταθερά (A) να συνδέεται με τον συνολικό αριθμό φυλλιδίων ως:

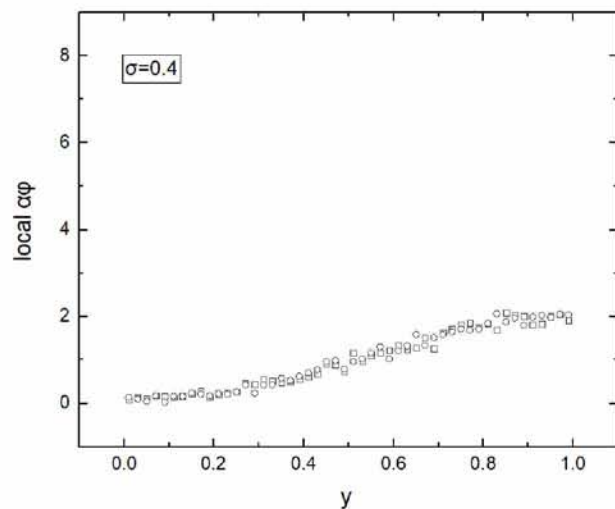
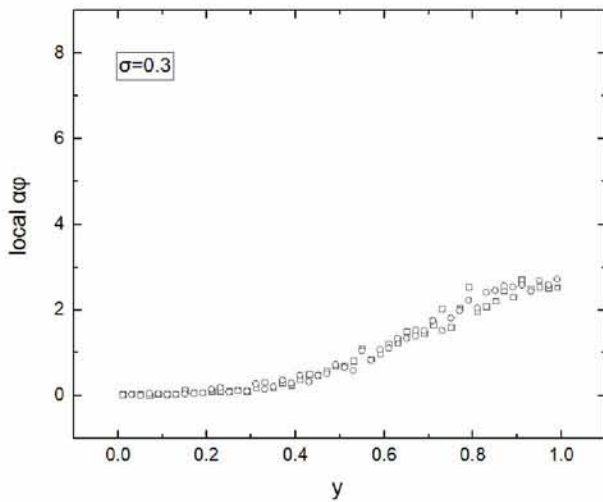
$$N_T = \int_0^H N(y) dy,$$

επομένως

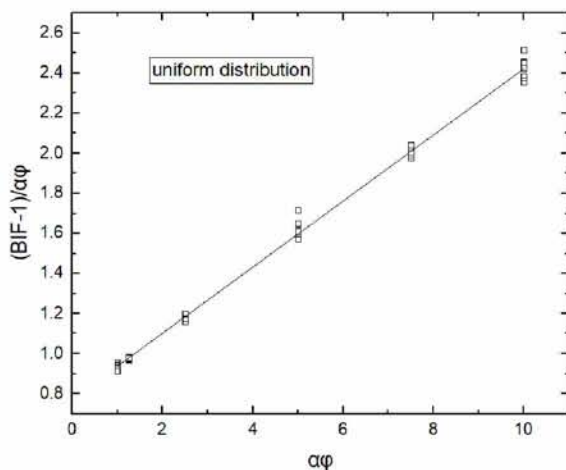
$$A = N_T / \text{erf}\left(\frac{H}{\sigma 2^{0.5}}\right)$$

Τυπικές γραφικές παραστάσεις για την ημι-κανονική κατανομή των φυλλιδίων μέσα στο υλικό για διάφορα σ εμφανίζονται στις εικόνες που ακολουθούν. Το εύρος τους κάθετου άξονα έχει κρατηθεί σταθερός για να δείξουμε τη διαφορά στην κατανομή τους για τις διάφορες τιμές του σ . Η τοπική τιμή του ($a\phi$) υπολογίζεται σαν $a\phi(y) = N(y) * (l^2/H)$.





Με βάση τις προσομοιώσεις που διεξήγαμε ακολουθούμε τα παρακάτω βήματα ώστε να βρούμε το β και να το συγκρίνουμε με τα αποτελέσματα της ημι-κανονικής κατανομής. Αρχικά βρίσκουμε το $\lambda \sim 2.46$ χαράσσοντας τα αποτελέσματα από την ομογενή κατανομή των φυλλιδίων στο υλικό (ομογενής δείγμα $\beta=1$) ως $(BIF-1)/\alpha\phi$ προς $\alpha\phi$. Η τομή της συνάρτησης με τον άξονα $\alpha\phi$ θα είναι $(2/\lambda)$ και η κλίση $(1/\lambda^2)$.

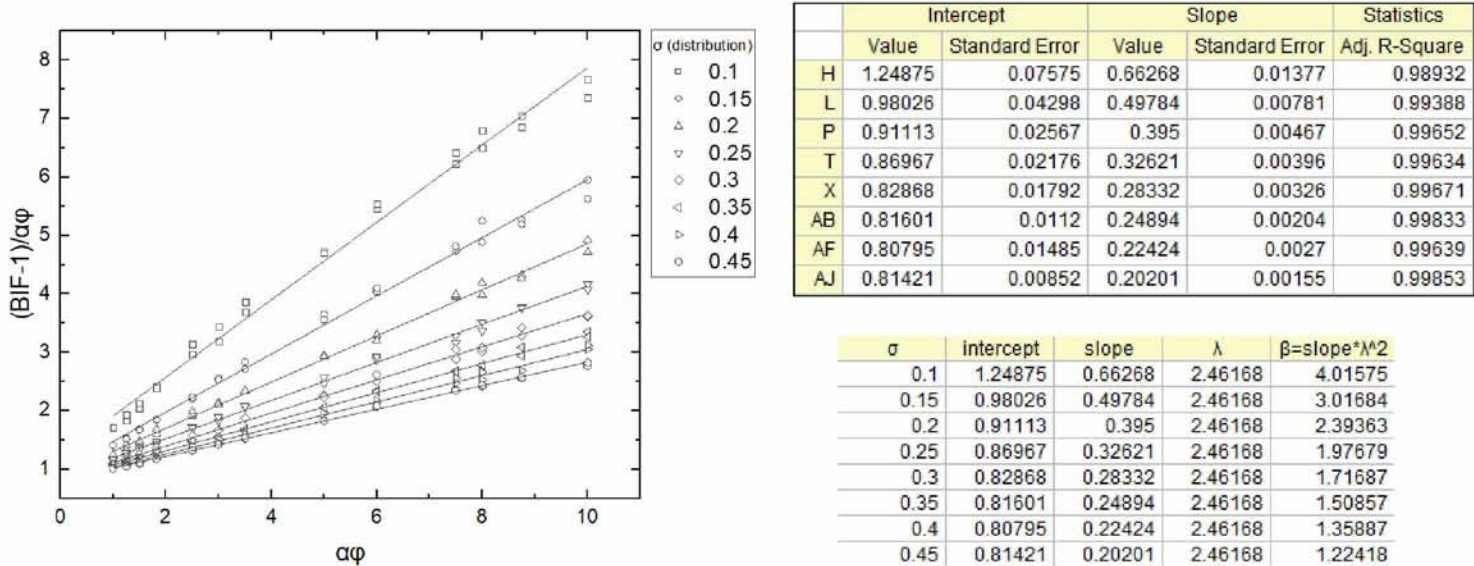


Intercept		Slope		Statistics
Value	Standard Error	Value	Standard Error	Adj. R-Square
0.77172	0.00784	0.16502	0.00138	0.99657

intercept	slope	$\lambda=1/\text{SQRT}(\text{slope})$
0.77172	0.16502	2.46168

Σχ. 15 - Απεικόνιση κατά σειρά της διαδικασίας εξαγωγής του λ . Στην αριστερή εικόνα φαίνεται το διάγραμμα των δεδομένων ως γραμμική συνάρτηση. Στη πάνω δεξιά εικόνα φαίνονται το αποτέλεσμα της χάραξης όπου παίρνουμε τις τιμές της τομής και της κλίσης της συνάρτησης, καθώς και των σφαλμάτων της προσέγγισης. Τέλος, στην κάτω δεξιά εφαρμόζουμε τη θεωρία όπου η κλίση είναι $1/\lambda^2$ και εξαγωγή το λ από την ομογενή κατανομή το οποίο είναι $\lambda=2.46$

Έπειτα βρίσκουμε το β σε σχέση με το σ , ($\beta(\sigma)$), από τα δεδομένα σε μικρότερη κατανομή ινών μέσα στο υλικό ως την κλίση της γραμμής από το διάγραμμα (BIF-1)/ $\alpha\phi$ προς $\alpha\phi$, όπως προκύπτει από την εξίσωση (4.9).



Σχ. 16 - Απεικόνιση κατά σειρά της διαδικασίας εξαγωγής του β . Στην αριστερή εικόνα φαίνονται τα διαγράμματα των δεδομένων ως γραμμικές συναρτήσεις. Στη πάνω δεξιά εικόνα φαίνονται τα αποτελέσματα της χάραξης όπου παίρνουμε τις τιμές των τομών και των κλίσεων των συναρτήσεων, καθώς και τον σφαλμάτων της προσέγγισης. Τα D, F, ..., R αντιπροσωπεύουν κατά αύξουσα σειρά τη κατανομή των φυλλιδίων (σ) από 0.1, 0.15, ..., 0.45. Τέλος, στην κάτω δεξιά εφαρμόζουμε τη θεωρία όπου η κλίση είναι β/λ^2 με $\lambda=2.46$ (Σχ. 15) και εξαγωγήμε διάφορες τιμές του β για τα διάφορα σ .

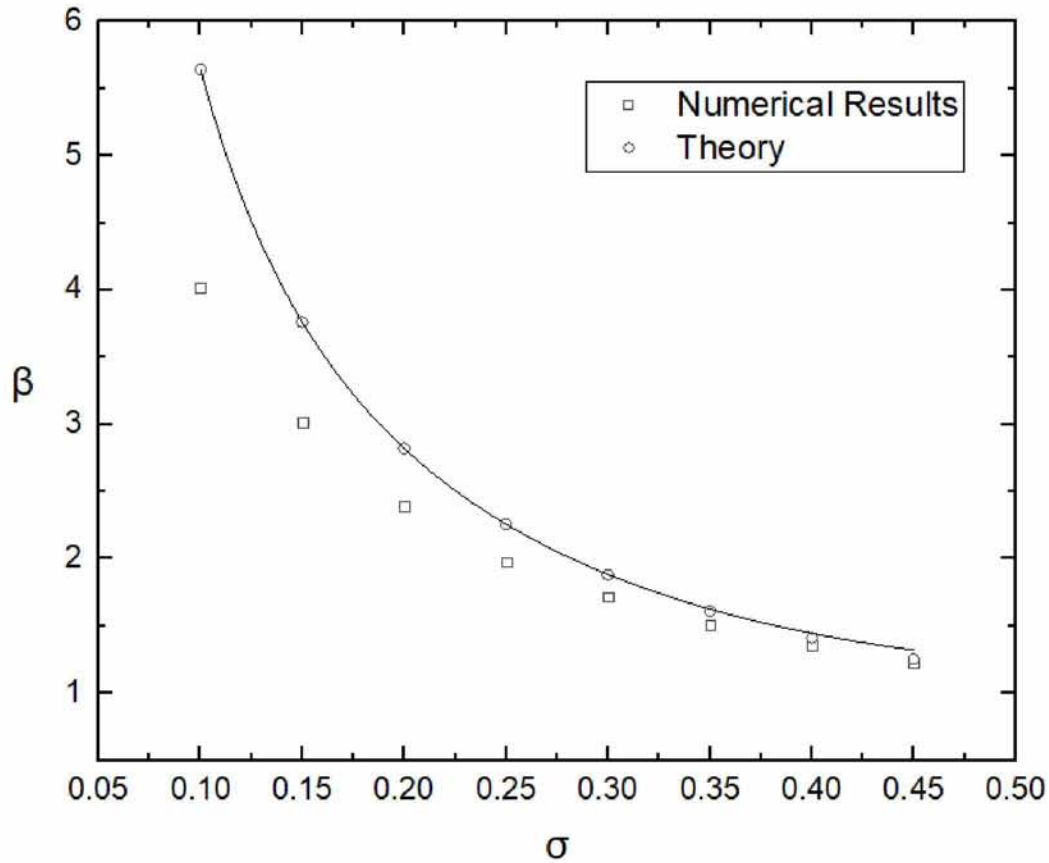
αυτές οι τιμές του (β) συγκρίνονται με τις τιμές που προκύπτουν από την σχέση:

$$\beta(\sigma) = \frac{\text{erf}\left(\frac{1}{\sigma}\right)}{\sqrt{\pi} \times \sigma \times \text{erf}\left(\frac{1}{\sigma \times 2^{0,5}}\right)^2} \quad 4.10$$

η οποία προκύπτει από τον τύπο (4.7) αν αντικαταστήσουμε το $N(y)$ με αυτό που αντιστοιχεί στην ημι-κανονική κατανομή.

$$N_T = A \times \text{erf}\left(\frac{H}{\sigma \times \sqrt{2}}\right) \quad 4.11$$

Χαράσσοντας τα αποτελέσματα του τύπου (4.10) σε σχέση με τα αποτελέσματα της προσομοίωσης προκύπτει το παρακάτω διάγραμμα:



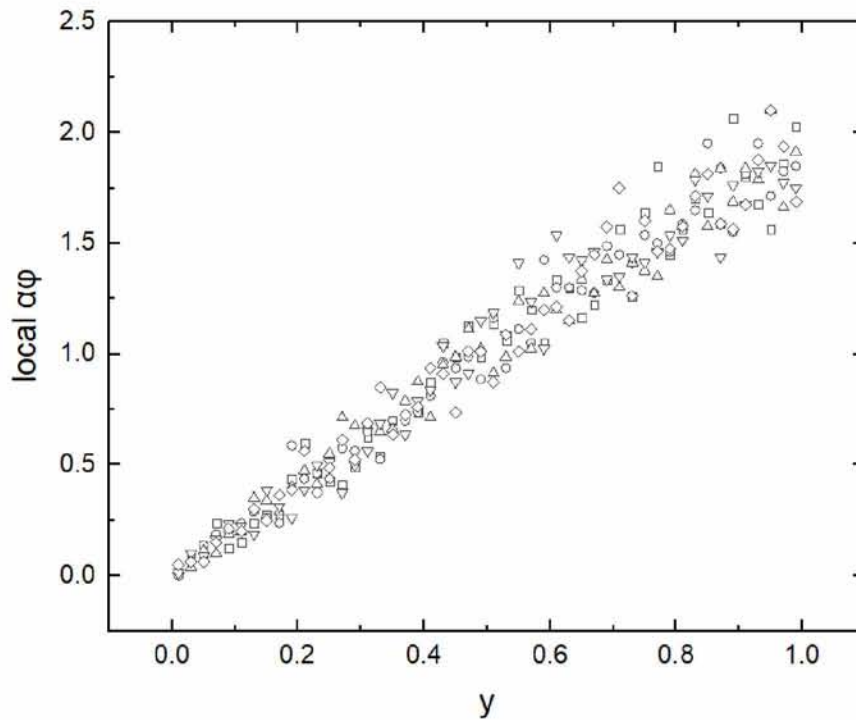
Σχ. 17 - Σύγκριση του β με βάση τη θεωρία της ημι-κανονικής κατανομής σε σχέση με τα αποτελέσματα της προσομοίωσης

Παρατηρούμε, λοιπόν, ότι για μικρή διασπορά φυλλιδίων μέσα στο υλικό τα αποτελέσματα διαφέρουν αρκετά, όμως καθώς η διασπορά αυξάνεται τα δύο μοντέλα συγκλίνουν.

4.1.2. Γραμμική Κατανομή

(Με μέγιστη συγκέντρωση στην πάνω επιφάνεια.)

Τυπική αναπαράσταση της κατανομής σύμφωνα με την οποία υπάρχει μία γραμμική κατανομή της συγκέντρωσης.



Σχ. 18 - Τα διάφορα σύμβολα που παρουσιάζονται στο γράφημα αποτελούν το πλήθος των γεωμετριών που παρήχθησαν στις προσομοιώσεις.

Για την γραμμική κατανομή εργαζόμαστε με τον ίδιο τρόπο όπως παραπάνω με τη μόνη διαφορά ότι στην εξίσωση (4.8) τον δεύτερο όρο το β τροποποιείται θέτοντας το $N(y)$ με βάση τον παρακάτω τύπο:

$$N(y) = ky$$

με το k να είναι σταθερό. Έτσι έχουμε:

$$N_T = \int_0^H ky dy$$

$$k = \frac{2N_T}{H^2}$$

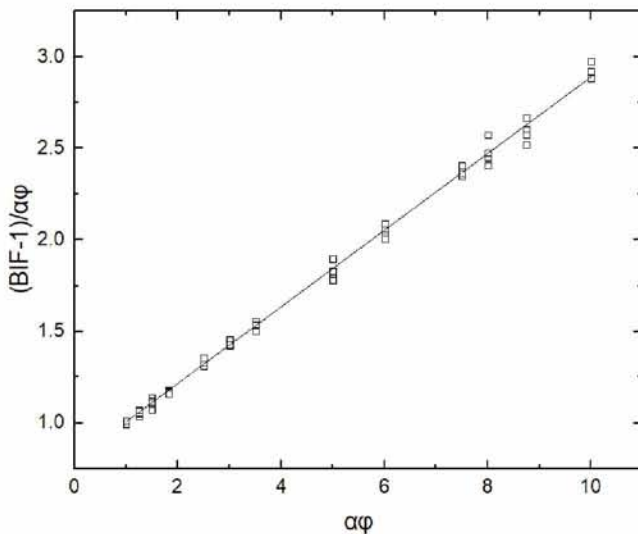
$$N(y) = \frac{2N_T}{H^2} \times y \quad 4.12$$

Οπότε έχουμε ότι η εξίσωση (4.7) με χρήση της (4.12) γίνεται:

$$BIF = \frac{1}{H} \int_0^H \left(1 + \frac{\alpha\varphi(y)}{\lambda} \right)^2 dy = 1 + \frac{2}{\lambda} \times \overline{\alpha\varphi} + \frac{4}{3} \times \left(\frac{\overline{\alpha\varphi}}{\lambda} \right)^2 \quad 4.13$$

Και σε αυτή την περίπτωση διεξήγαμε προσομοιώσεις για διαφορετικά $\alpha\varphi$ και σ και με βάση τα αποτελέσματα που πήραμε θα τα συγκρίνουμε και θα τα αναλύσουμε με αυτά που προκύπτουν από τους παραπάνω τύπους. Αρχικά το λ , από εδώ και πέρα, το παίρνουμε το ίδιο για όλες τις κατανομές (normal, half-normal, γραμμική) και ίσο με 2.46 καθώς το αποτέλεσμα του καθορίζεται από την ομογενή κατανομή των φυλλιδίων μέσα στο υλικό κατά την οποία δεν υπάρχει εξάρτηση από κάποια μορφή κατανομής. Έπειτα χαράσσουμε τα αποτελέσματα από τις προσομοιώσεις για μικρότερη κατανομή ινών μέσα στο υλικό από ότι στην γραμμική κατανομή ως $(BIF-1)/\alpha\varphi$ προς $\alpha\varphi$. Το επόμενο βήμα είναι να αποδείξουμε ότι το β είναι κοντά στην τιμή $4/3$ η οποία φαίνεται στην εξίσωση (4.13).

Τα αποτελέσματα φαίνονται στο παρακάτω διάγραμμα όπου παρατηρούμε ότι το (β) προκύπτει ~ 1.27 το οποίο είναι αρκετά κοντά στο $4/3$ (1.333).



	Intercept		Slope		Statistics
	Value	Standard Error	Value	Standard Error	Adj. R-Square
D	0.79718	0.00762	0.20945	0.00139	0.99721

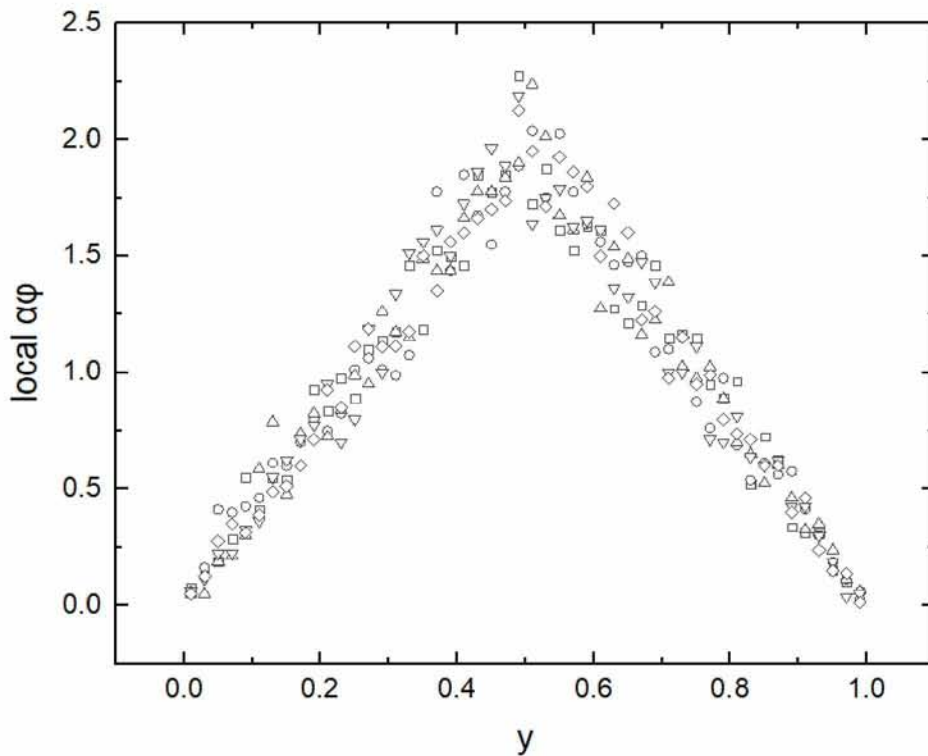
intercept	slope	λ	$\beta = \text{slope} * \lambda^2$
0.79718	0.20945	2.46168	1.26923

Σχ. 19 - Απεικόνιση σταδίων για την εύρεση του β της γραμμικής κατανομής. Η πάνω αριστερά εικόνα δείχνει το διάγραμμα που προέκυψε από τα αποτελέσματα. Πάνω δεξιά φαίνεται τα αποτελέσματα από την χάραξη μιας γραμμικής καμπύλης, ενώ στην κάτω δεξιά διακρίνεται το τελικό αποτέλεσμα του β .

4.1.3. Τριγωνική Κατανομή

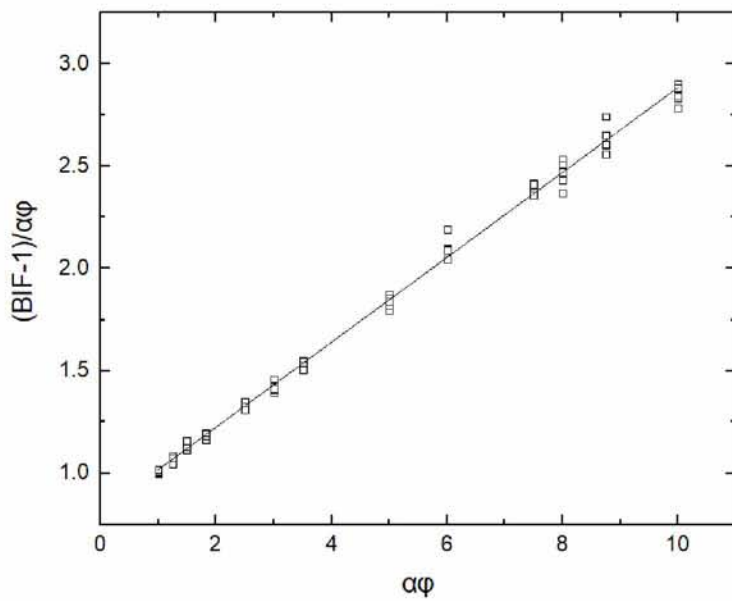
(Με μέγιστο στη μέση του υλικού)

Τυπική αναπαράσταση της κατανομής. Στη θεωρία πιθανοτήτων και στη στατιστική, η τριγωνική κατανομή είναι μία συνεχής κατανομή πιθανοτήτων με κατώτερο όριο a (κάτω αριστερά) και ανώτερο όριο b (κάτω δεξιά) και με επικρατούσα τιμή c (μέγιστο), όπου $a < b$ και $a \leq c \leq b$. Η τιμή που θα παίρνει το c στον κάθετο άξονα είναι $2/(b - a)$.



Σχ. 20 - Τα διάφορα σύμβολα που παρουσιάζονται στο γράφημα αποτελούν το πλήθος των γεωμετριών που παρήχθησαν στις προσομοιώσεις

Σε αυτή την περίπτωση της τριγωνικής κατανομής εργαζόμαστε με τον ίδιο τρόπο με την γραμμική κατανομή έτσι ώστε να αποδείξουμε ότι το (β) έχει τιμή κοντά στα $4/3$ (1.333). Στην περίπτωση μας η τιμή που λαμβάνεται από τις προσομοιώσεις είναι $\beta \sim 1.26$, τιμή η οποία είναι αρκετά κοντά στην επιθυμητή ($4/3=1.333$). Τα βήματα και τα αποτελέσματα από τις προσομοιώσεις παρουσιάζονται παρακάτω.



	Intercept		Slope		Statistics
	Value	Standard Error	Value	Standard Error	Adj. R-Square
E	0.80925	0.00884	0.20767	0.00161	0.99618

intercept	slope	λ	$\beta = \text{slope} * \lambda^2$
0.80925	0.20767	2.46168	1.25845

Σχ. 21 - Απεικόνιση σταδίων για την εύρεση του β της τριγωνικής κατανομής. Η πάνω αριστερά εικόνα δείχνει το διάγραμμα που προέκυψε από τα αποτελέσματα. Πάνω δεξιά φαίνεται τα αποτελέσματα από την χάραξη μίας γραμμικής καμπύλης, ενώ στην κάτω δεξιά διακρίνεται

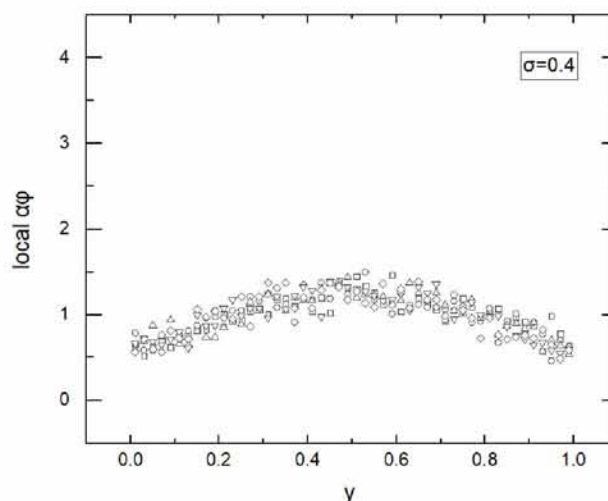
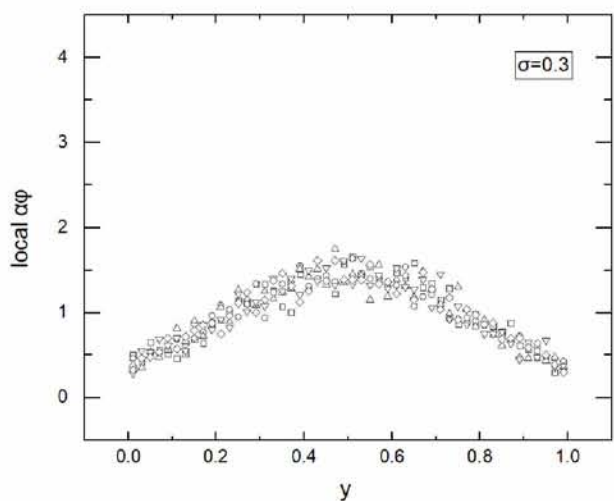
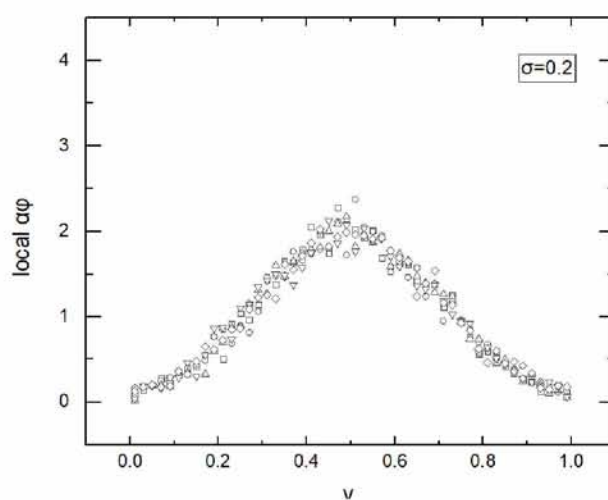
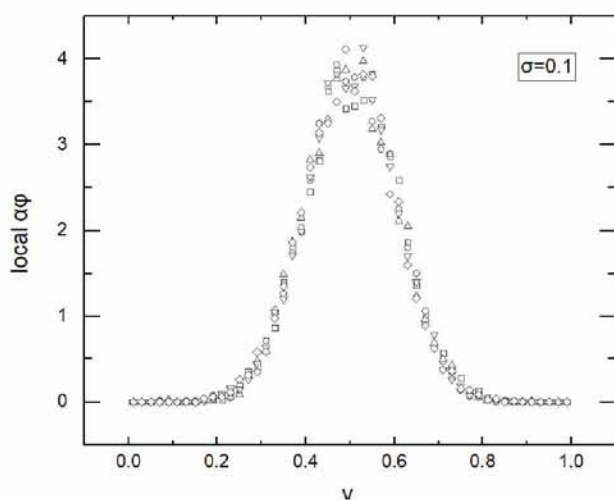
4.1.4. Κανονική Κατανομή

Σε αυτές τις περιπτώσεις, η συγκέντρωση παίρνει την μέγιστη τιμή στη μέση του υλικού, ακολουθώντας την συνάρτηση την κανονικής κατανομής.

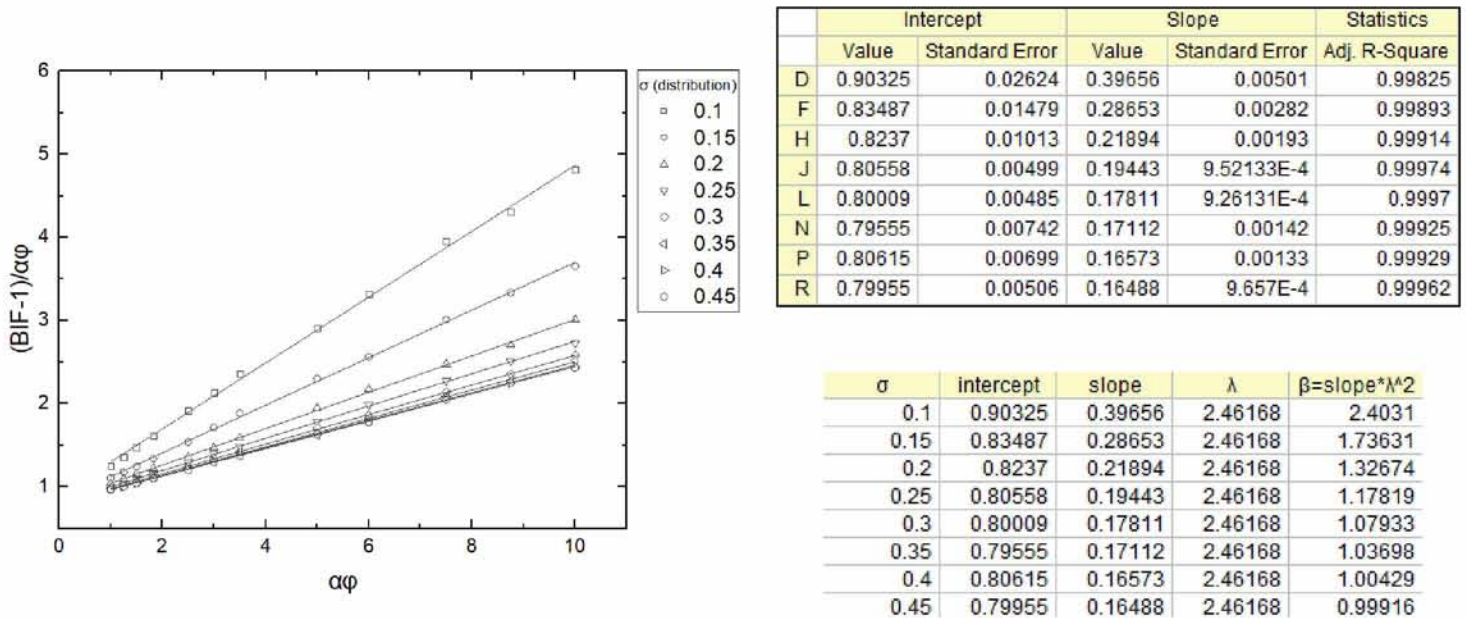
Η εξίσωση της κατανομής δίνεται από τη σχέση:

$$N(y) = \frac{A}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y - 0.5}{\sigma}\right)^2\right] \quad 4.14$$

Τυπικές γραφικές παραστάσεις για την κανονική κατανομή των φυλλιδίων μέσα στο υλικό για διάφορα σ . Ο άξονας της πυκνότητας των φυλλιδίων έχει κρατηθεί σταθερός για να δείξουμε τη διαφορά στην κατανομή τους για τις διάφορες τιμές του σ .



Για να βρίσκουμε το β σε σχέση με το σ , ($\beta(\sigma)$), από τα δεδομένα των προσομοιώσεων σε μικρότερη κατανομή ινών μέσα στο υλικό, σε σχέση με την ομογενής κατανομή, το θέτουμε ως την κλίση της γραμμής από το διάγραμμα (BIF-1)/αφ προς αφ, όπως προκύπτει από την εξίσωση (4.9).



Σχ. 22 - Απεικόνιση κατά σειρά της διαδικασίας εξαγωγής του β . Στην αριστερή εικόνα φαίνονται τα διαγράμματα των δεδομένων ως γραμμικές συναρτήσεις. Στη πάνω δεξιά εικόνα φαίνονται τα αποτελέσματα της χάραξης όπου παίρνουμε τις τιμές των τομών και των κλίσεων των συναρτήσεων, καθώς και τον σφαλμάτων της προσέγγισης. Τα D, F, ..., R αντιπροσωπεύουν κατά αύξουσα σειρά τη κατανομή των φυλλιδίων (σ) από 0.1, 0.15, ..., 0.45. Τέλος, στην κάτω δεξιά εφαρμόζουμε τη θεωρία όπου η κλίση είναι β/λ^2 με $\lambda = 2.46$ (Εικόνα 1) και εξαγωγή διαφορες τιμές του β για τα διάφορα σ .

Για την κανονική κατανομή ισχύει ότι:

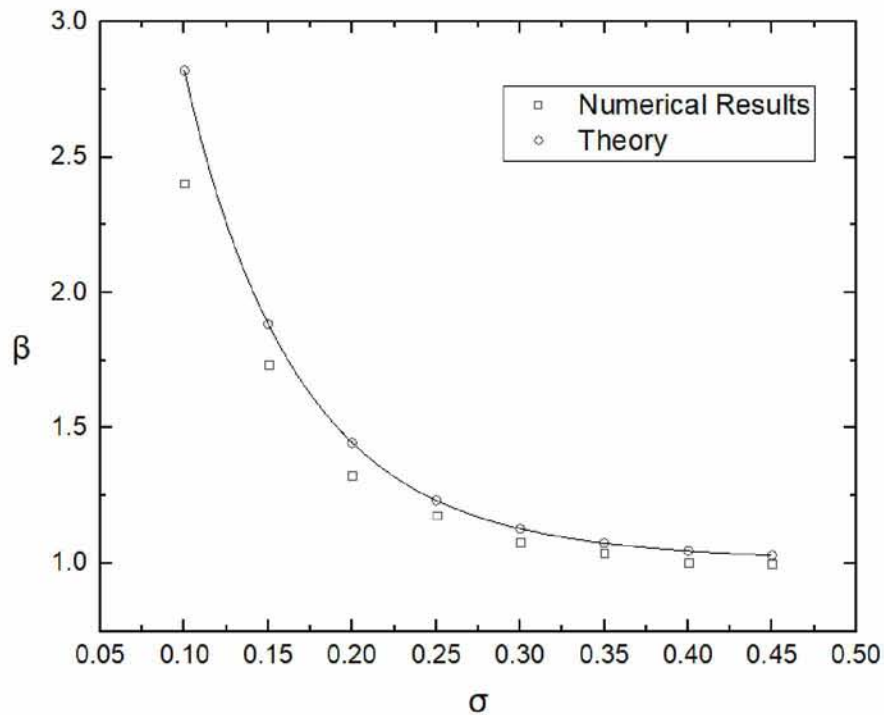
$$N_T = \frac{A}{2} \times \left(\operatorname{erf} \left(\frac{H - 0.5}{\sigma 2^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(-\frac{0.5}{\sigma 2^{0.5}} \right) \right) \rightarrow \quad 4.15$$

$$A = \frac{2N_T}{\operatorname{erf} \left(\frac{H - 0.5}{\sigma 2^{0.5}} \right) - \operatorname{erf} \left(-\frac{0.5}{\sigma 2^{0.5}} \right)}$$

Για την εύρεση του β συνδυάζουμε τις σχέσεις (4.14), (4.15) και (4.8)

$$\beta = \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{0.5}{\sigma}\right) - \operatorname{erf}\left(-\frac{0.5}{\sigma}\right)}{\sigma \times \sqrt{\pi} \times \left(\operatorname{erf}\left(\frac{0.5}{\sigma\sqrt{2}}\right) - \operatorname{erf}\left(-\frac{0.5}{\sigma\sqrt{2}}\right)\right)^2} \quad 4.16$$

Τις τιμές του (β) που φαίνονται στο Σχ. 22 συγκρίνονται με αυτές που εξάγονται από την εξίσωση (4.16) και παρουσιάζονται στο παρακάτω διάγραμμα:



Σχ. 23 - Σύγκριση θεωρητικού μοντέλου με υπολογιστικό μοντέλο

Παρατηρούμε, λοιπόν, ότι για μικρή διασπορά φυλλιδίων μέσα στο υλικό τα αποτελέσματα που προκύπτουν έχουν μικρή απόκλιση, όμως καθώς η διασπορά αυξάνεται τα δύο μοντέλα συγκλίνουν σε μεγάλο βαθμό.

4.2. Ανάλυση - Σύγκριση Δεδομένων

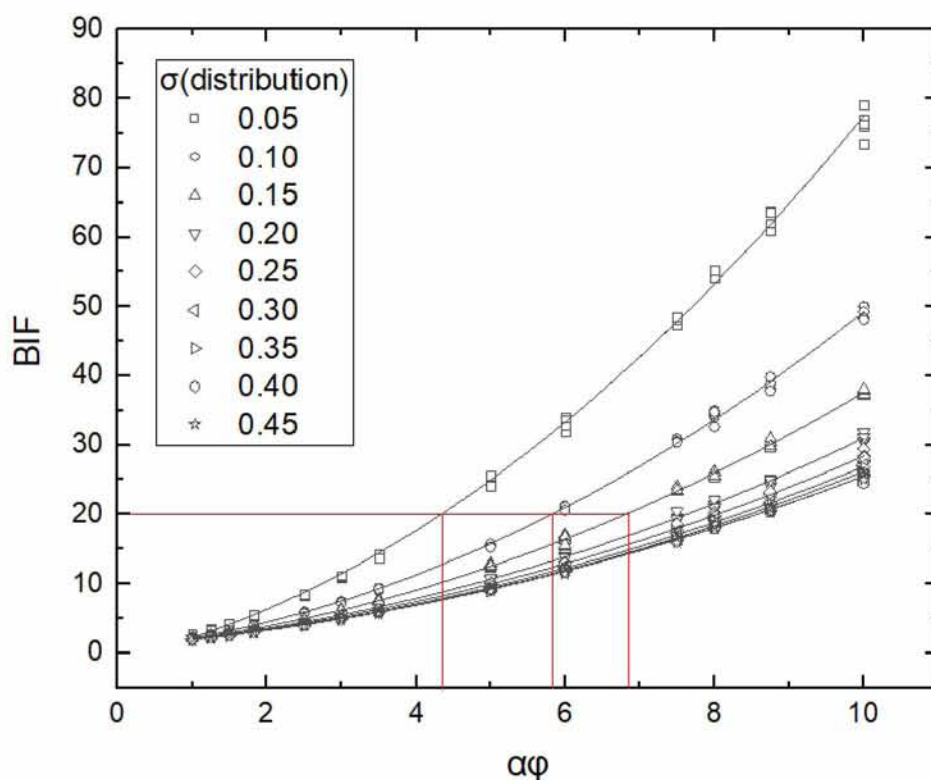
Σε αυτή την παράγραφο θα εξάγουμε ορισμένα συμπεράσματα όσον αφορά το συντελεστή βελτίωσης BIF καθώς και της ενεργώς διαχυτότητας D_{eff} και θα τα συγκρίνουμε μεταξύ των διαφόρων κατανομών που μελετήθηκαν σε αυτή την εργασία.

Οι δύο συντελεστές που επηρεάζουν τα παραπάνω είναι το μέσο αφ των φυλλιδίων καθώς και η κατανομή τους μέσα στο υλικό (σ).

Όπως έχουμε αναφέρει στην αρχή του κεφαλαίου, Υπολογιστικό κομμάτι, το ισούται με $BIF = D_0/D_{\gamma\gamma}$. Θεωρώντας το συντελεστή διάχυσης της μήτρας ίσο με 1 το

$BIF = 1/D_{eff}$. Οι προσομοιώσεις που έχουμε τρέξει μας δίνουν ως αποτέλεσμα το D_{eff} του υλικού μας μαζί με τα φυλλιδίων, οπότε εύκολα υπολογίζουμε το BIF.

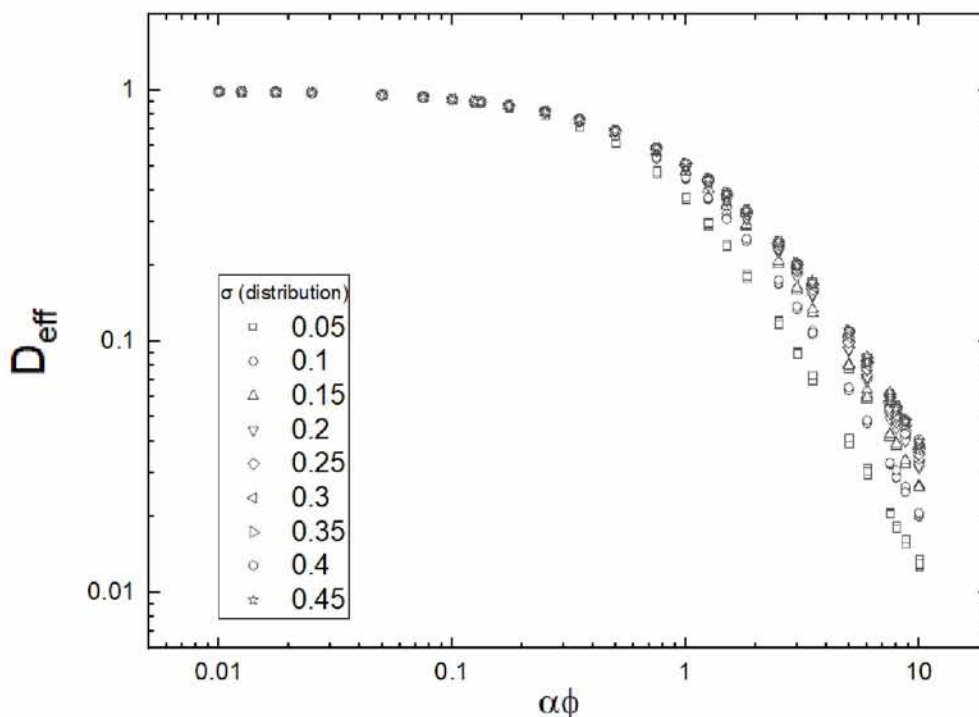
Για την κανονική κατανομή έχουμε:



Σχ. 24 - Διάγραμμα BIF-αφ για διάφορες τιμές του σ , κανονικής κατανομής

Παρατηρούμε λοιπόν ότι για σταθερά σ και μεταβλητά $\alpha\phi$ οι καμπύλες του BIF έχουν εκθετική μορφή. Αυτό σημαίνει ότι για μεγαλύτερα $\alpha\phi$ το υλικό έχει καλύτερη συμπεριφορά εμποδίζοντας τη διάχυση. Αν τώρα κρατήσουμε σταθερό το $\alpha\phi$ και το σ να μεταβάλλεται

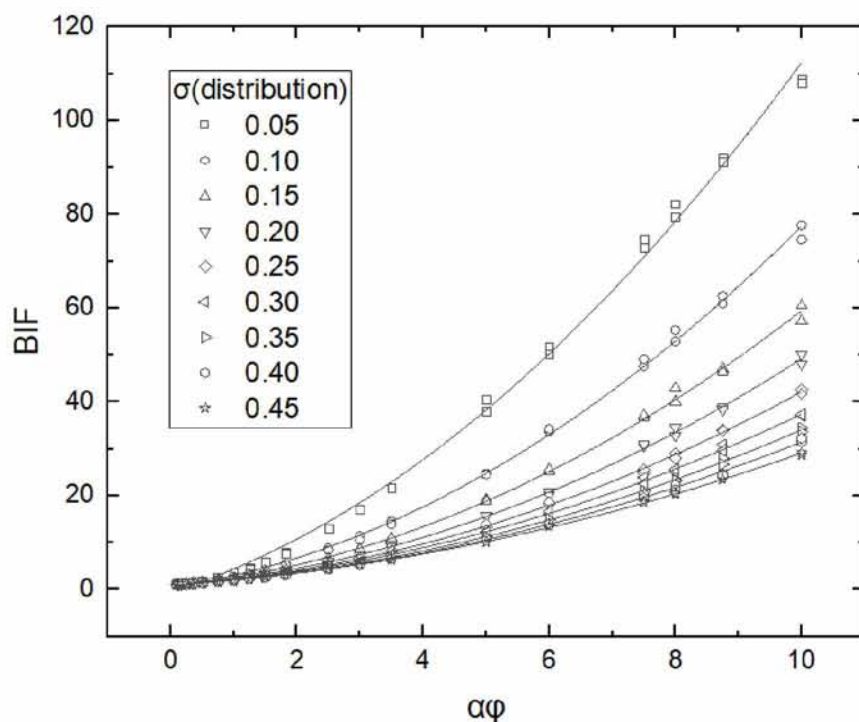
διακρίνουμε ότι μεγαλύτερο BIF δίνουν οι πιο πυκνές κατανομές. Πιο συγκεκριμένα, όπως φαίνεται στο *Appendix C* που βρίσκεται στο τέλος της διπλωματικής εργασίας, για μικρότερα σ η διάχυση εμποδίζεται καλύτερα σε σύγκριση με πιο αραιές κατανομές. Ενδιαφέρον αποτελούν οι ευθείες (οριζόντια και κάθετες) γραμμές που έχουν σχεδιαστεί στο διάγραμμα. Αν χρειαζόμαστε ένα υλικό με ένα συγκεκριμένο BIF μπορούμε να το παράγουμε με διαφορετικές γεωμετρίες, για παράδειγμα, αν μας ζητηθεί ένα υλικό με BIF=20, μπορούμε να το κατασκευάσουμε είτε με συνδυασμό $\sigma=0.05$ και $\alpha\phi=4.2$, είτε με $\sigma=0.1$ και $\alpha\phi=5.9$, είτε με $\sigma=0.15$ και $\alpha\phi=6.9$, και ου το καθεξής. Αυτό μπορεί να εξαρτηθεί με βάση τα οικονομικά κριτήρια κατασκευής μίας πιο πυκνής σε σχέση με μια πιο αραιής γεωμετρία καθώς επίσης και το μέγεθος των φυλλιδίων. Επιπλέον, ένας ακόμα περιορισμός μπορεί να είναι η δυνατότητα κατασκευής των διάφορων γεωμετριών στην παραγωγική διαδικασία. Τα μέσα που χρησιμοποιούνται μπορεί να μην έχουν τη δυνατότητα παραγωγής, για παράδειγμα, πιο πυκνών γεωμετριών και να αρκούνται σε πιο αραιές. Η συγκεκριμένη πρόταση μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε κατανομές όπως η κανονική και η ημι-κανονική αλλά δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί στην ομοιόμορφη καθώς αυτή δεν έχει εξάρτηση από το σ . Παρόλα αυτά μπορεί να βρεθεί ένας κοινός τύπος για όλες τις κατανομές που αποδίδουν ίδια BIF. Όπως θα φανεί και παρακάτω σε εύρος $0 < \text{BIF} < 30$ μπορούν να ανταποκριθούν και οι τέσσερις κατανομές.



Σχ. 25 - Διάγραμμα D_{eff} - $\alpha\phi$ για διάφορες τιμές του σ , κανονικής κατανομής

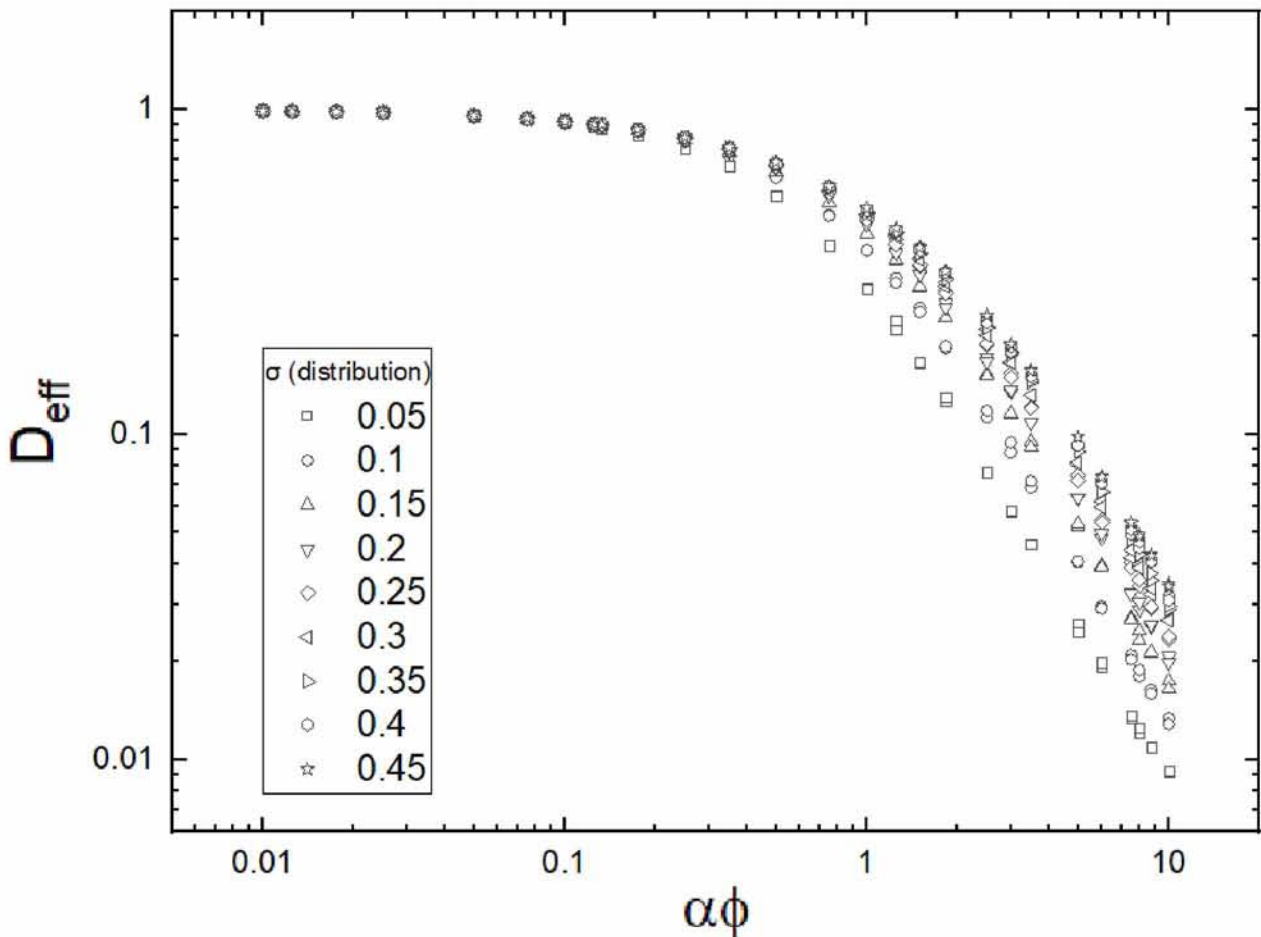
Στο παραπάνω διάγραμμα όπως ήταν αναμενόμενο από την ανάλυση του BIF, για σταθερά σ , ο ενεργός συντελεστής διαχυτότητας μειώνεται όσο αυξάνεται το $\alpha\phi$, το οποίο σημαίνει ότι η διάχυση δυσχεραίνεται. Για την περίπτωση που κρατήσουμε σταθερό το $\alpha\phi$ και μεταβάλλουμε τα σ παρατηρούμε ότι για πιο πυκνά κατανεμημένα φυλλίδια ο συντελεστής De_{eff} μειώνεται, δηλαδή η διάχυση εμποδίζεται περισσότερο. Πάλι, όπως και παραπάνω αν μας ζητηθεί υλικό με συγκεκριμένο De_{eff} , μέσα από το διάγραμμα μπορούμε να φτιάξουμε αρκετά υλικά με διαφορετικούς συνδυασμούς σ - $\alpha\phi$.

Για την ημι-κανονική κατανομή έχουμε:



Σχ. 26 - Διάγραμμα BIF- $\alpha\phi$ για διάφορες τιμές του σ , ημικανονική κατανομή

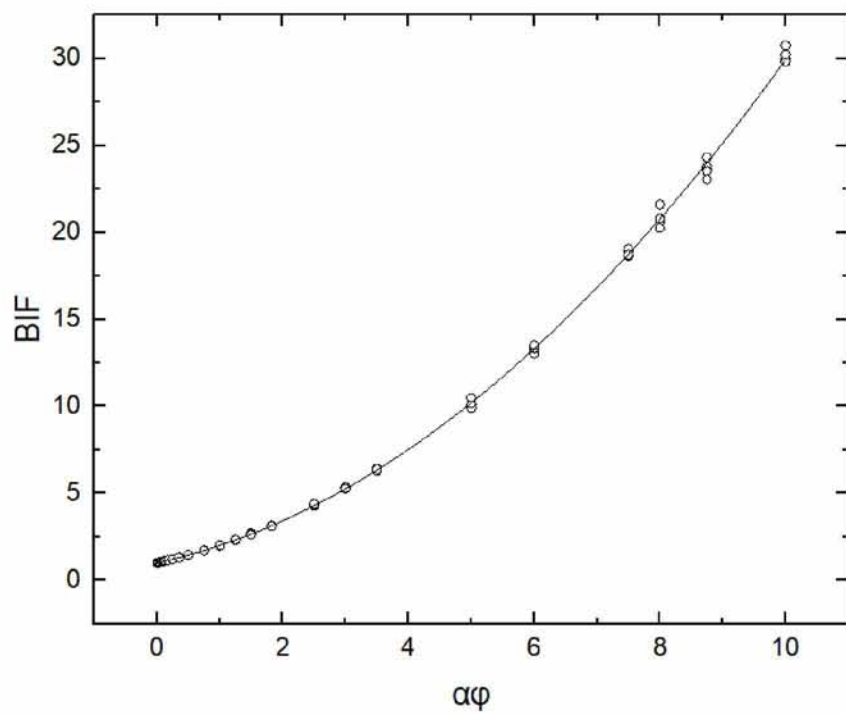
Παρατηρούμε λοιπόν ότι στην ημι-κανονική κατανομή η συμπεριφορά του BIF σε σχέση με τα σ και $\alpha\phi$ είναι ίδια με την κανονική κατανομή. Όπως ακριβώς βλέπουμε και στο παρακάτω διάγραμμα του De_{eff} σε σχέση με τα σ και $\alpha\phi$.



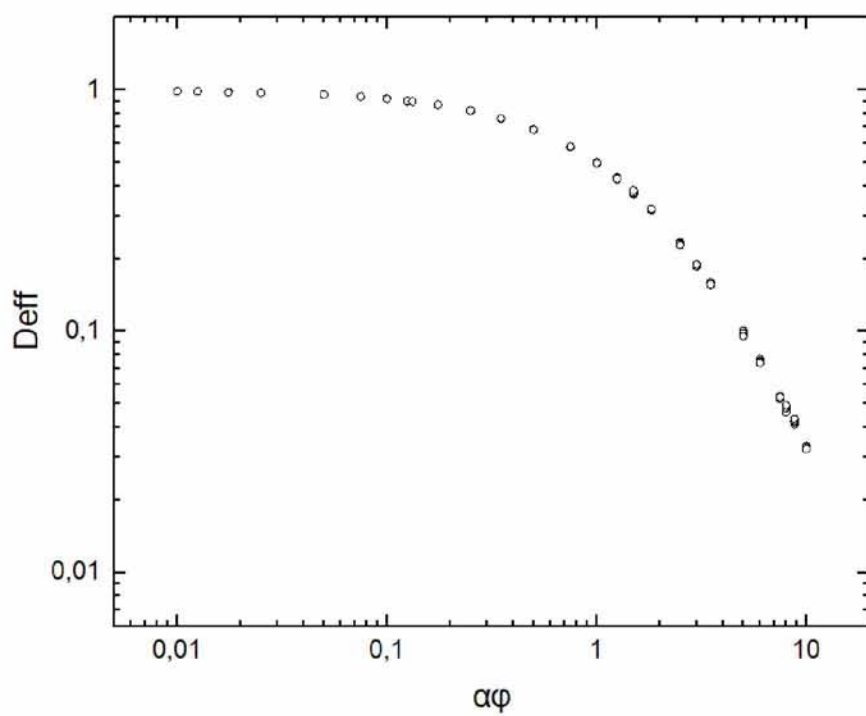
Σχ. 27 - Διάγραμμα D_{eff} - $\alpha\phi$ για διάφορα σ , ημι-κανονική κατανομή

Γραμμική κατανομή:

Όπως ήταν αναμενόμενο στη γραμμική κατανομή τα διαγράμματα των BIF- $\alpha\phi$ και D_{eff} - $\alpha\phi$ ακολουθούν την ίδια μορφή με αυτά της κανονικής και της ημι-κανονικής κατανομής, με το BIF να αυξάνεται εκθετικά με την αύξηση του $\alpha\phi$ και το D_{eff} να μειώνεται με αντίστροφη εκθετική συμπεριφορά με την αύξηση του $\alpha\phi$.



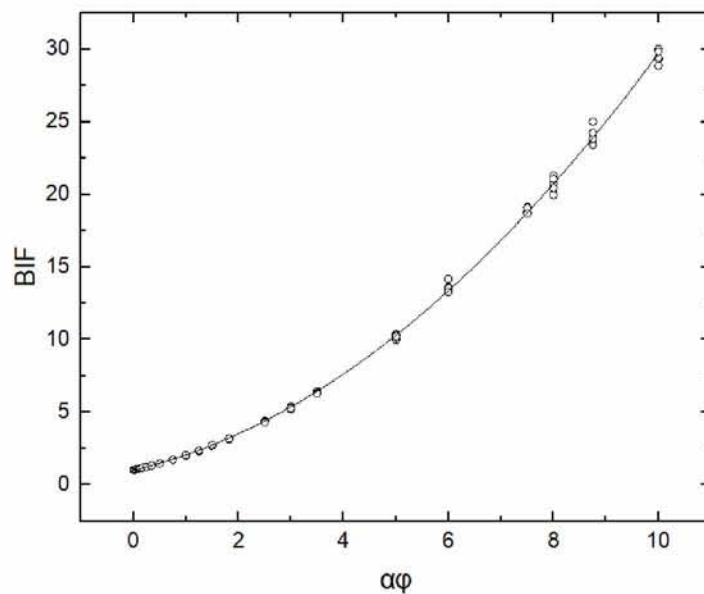
Σχ. 28 - Διάγραμμα BIF-αφ, ομοιόμορφη κατανομή άνω άκρο



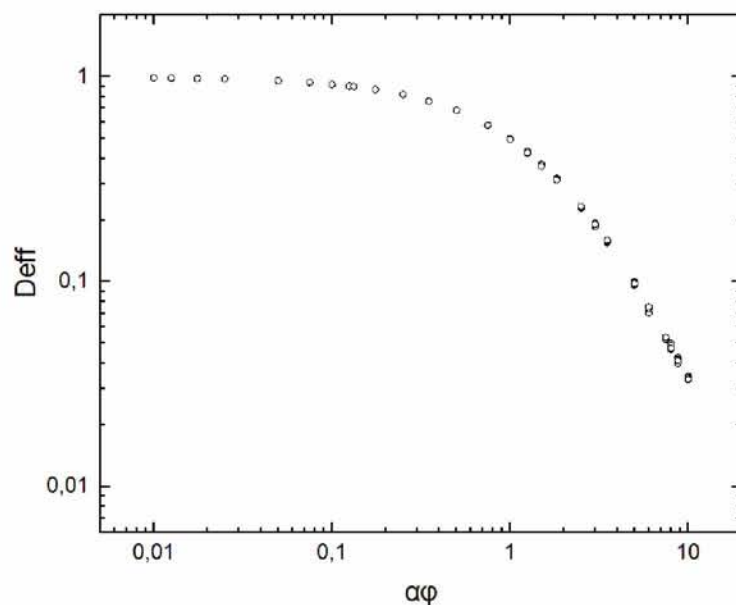
Σχ. 29 - Διάγραμμα Deff-αφ, ομοιόμορφη κατανομή στο άνω άκρο

Τριγωνική κατανομή:

Τριγωνική κατανομή με την επικρατούσα τιμή να βρίσκεται το μέσο του υλικού.
Η τριγωνική κατανομή φαίνεται να συμπεριφέρεται ακριβώς όπως η γραμμική κατανομή όσον αφορά τις τιμές του BIF και Deff για τα διάφορα αφ. Και σε αυτή την περίπτωση τα παρακάτω διαγράμματα συμπεριφέρονται όπως αυτά των προηγούμενων κατανομών.



Σχ. 30 - Διάγραμμα BIF-αφ, ομοιόμορφη κατανομή στο μέσο του υλικού



Σχ. 31 - Διάγραμμα Deff-αφ, ομοιόμορφη κατανομή στο μέσο του υλικού

Συγκρίνοντας και τις τέσσερις κατανομές μεταξύ τους μπορούμε να εξάγουμε τα εξής συμπεράσματα. Αν μελετήσουμε προσεκτικά τα διαγράμματα των BIF-αφ (εικόνες 7,9,11,13) καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι η ημι-κανονική κατανομή, δηλαδή η κατανομή όπου τα φυλλίδια είναι, ως επί το πλείστον, συγκεντρωμένα στην άνω επιφάνεια του υλικού, μας δίνει καλύτερα αποτελέσματα στην αντίσταση κατά της διάχυσης. Το BIF δίνει μεγαλύτερες τιμές, δηλαδή η ολική μας γεωμετρία δεν επιτρέπει να γίνει εύκολα η διάχυση. Αμέσως επόμενη καλύτερη κατανομή αποδεικνύεται η κανονική ενώ οι κατανομές της γραμμικής και τριγωνικής έχουν μεγάλη διαφορά στην αντίσταση κατά της διάχυσης από τις δύο προηγούμενες. Παρόλα αυτά, αυτή η κατάσταση συμβαίνει μόνο αν στην ημι-κανονική κατανομή το σ είναι μικρότερο από 0.25 καθώς για μεγαλύτερα σ η γραμμική και τριγωνική κατανομή δίνουν καλύτερα αποτελέσματα. Για την κανονική κατανομή αυτό συμβαίνει για ακόμα μικρότερα σ , δηλαδή για $\sigma=0.15$. Από αυτή την τιμή και μεγαλύτερη πάλι η γραμμική και η τριγωνική υπερτερούν. Ανάλογη συμπεριφορά έχουν και τα διαγράμματα των Deff-αφ, όπου ο ενεργός συντελεστής διάχυσης για ημι-κανονική κατανομή και για σ μικρότερα του 0.25 υπερτερούν των άλλων κατανομών, ενώ για κανονική κατανομή και για σ μικρότερα του 0.15 παρατηρούμε ότι υπερτερεί των γραμμικών κατανομών.

4.3. Υπολογισμός Θερμοκρασιών μέσα στο Υλικό

Ο OpenFOAM παρέχει ένα σύνολο από συναρτήσεις δειγματοληψίας είτε για την χάραξη μίας καμπύλης 1D είτε ενός επιπέδου 2D και επιφάνειες 3D για την απεικόνιση εικόνων. Η δειγματοληψία τιμών από μια προσομοίωση και η σύνταξή τους σε ένα αρχείο γίνεται με επεξεργασία του αρχείου sampleDict στο φάκελο συστήματος της υπόθεσης που εκτελείτε. Χρησιμοποιήσαμε το ParaView για να πάρουμε δείγματα για τις θερμοκρασίες σε διάφορες συντεταγμένες του υλικού μας.

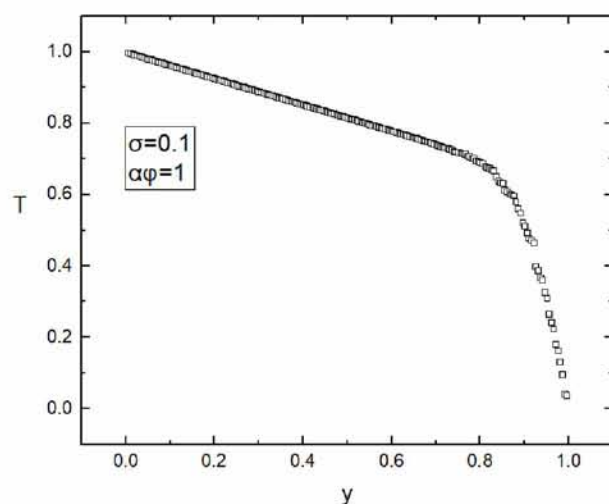
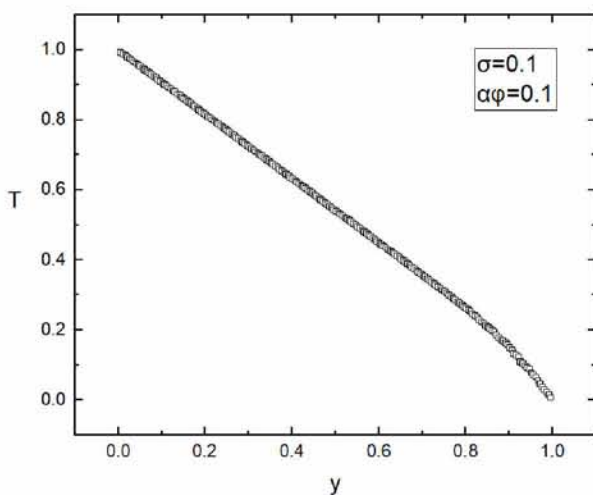
Όπως αναφέρθηκε και στην παράγραφο 3.2 Μεταφορά Θερμότητας, στην περίπτωση της μεταφοράς θερμότητας το ρόλο της ροής μάζας παίρνει η ροή θερμότητας, το ρόλο του συντελεστή διαχυτότητας παίρνει ο συντελεστής θερμικής αγωγιμότητας και της βαθμίδας συγκέντρωσης (gradient) παίρνει η βαθμίδα θερμοκρασίας. Έτσι λοιπόν για τις θερμοκρασίες που παίρνουμε δεν χρειάζεται να λύσουμε από την αρχή την εξίσωση (3.3)

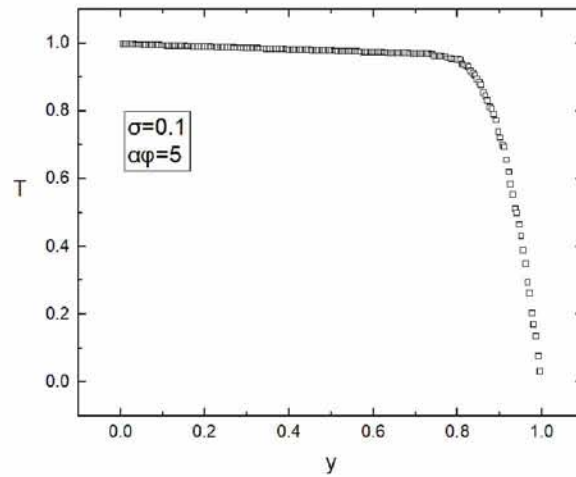
Τα αποτελέσματα για τις διάφορες κατανομές παρουσιάζονται παρακάτω.

4.3.1. Ημι-κανονική Κατανομή

- Σταθερό σ και μεταβλητό $\alpha\phi$

Οι γεωμετρίες από τις οποίες δημιουργήθηκαν τα παρακάτω διαγράμματα φαίνονται στο *Appendix C*.

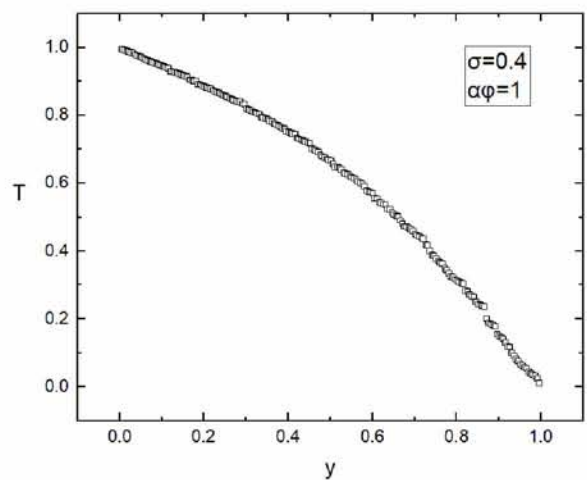
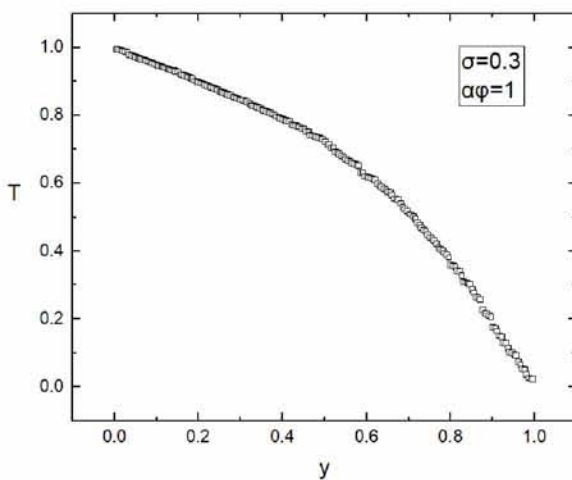
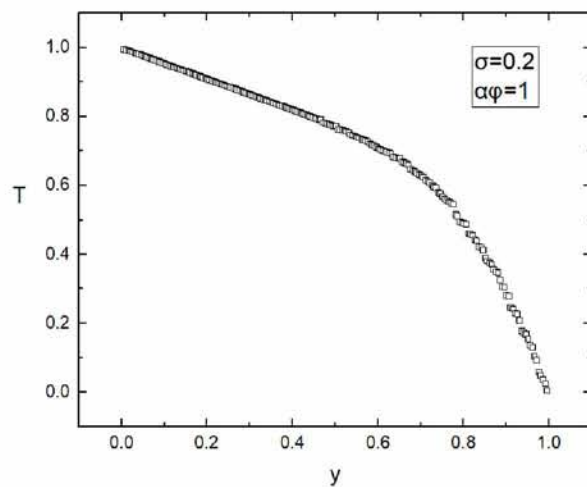
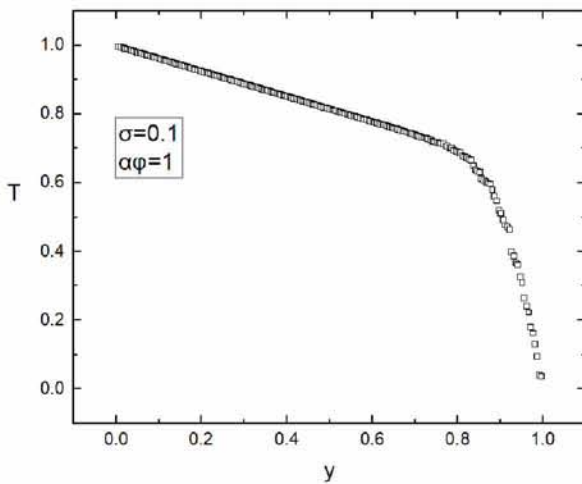




Παρατηρούμε λοιπόν ότι όσο το $\alpha\phi$ μεγαλώνει οι θερμοκρασιακές μεταβολές γίνονται πιο απότομες. Γεγονός που υποδηλώνει ότι η μεταφορά θερμότητα σε περιοχές που το υλικό καλύπτεται με μεγαλύτερο ποσοστό από φυλλίδια δυσχεραίνει.

- Σταθερό $\alpha\phi$ και μεταβλητό σ

Οι γεωμετρίες από τις οποίες δημιουργήθηκαν τα παρακάτω διαγράμματα φαίνονται στο *Appendix C*.

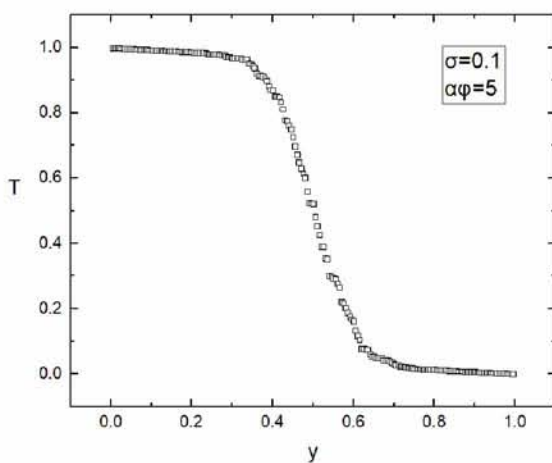
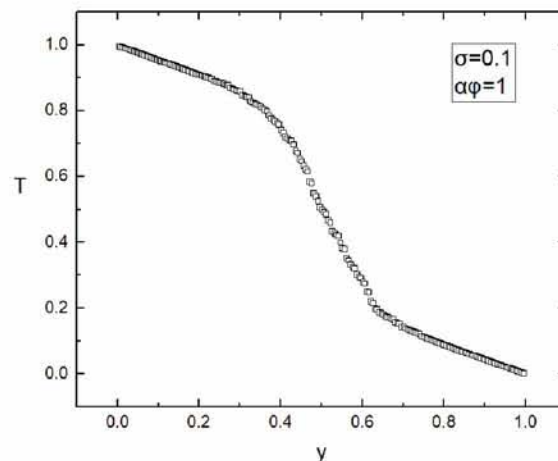
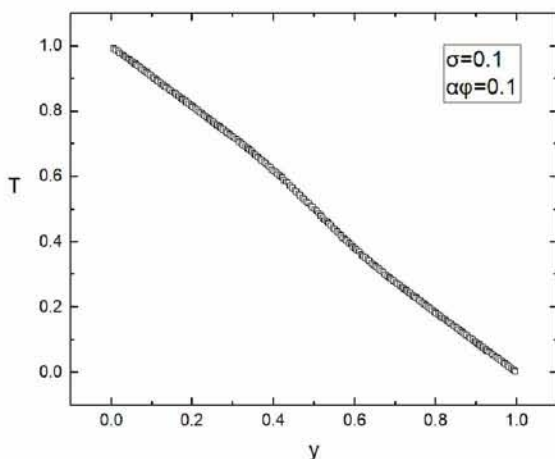


Ανάλογη παρατήρηση γίνεται και σε αυτή την περίπτωση όπου όταν τα φυλλίδια είναι πιο πυκνά τοποθετημένα η θερμοκρασιακές διαφορές ακολουθούν πιο απότομες μεταβολές. Συνεπώς αφού έχουμε το ίδιο υλικό σε όλες τις περιπτώσεις, οι μεταφορά θερμότητας δυσχεραίνει σε όταν τα φυλλίδια είναι πυκνά κατανεμημένα. Γεγονός το οποίο συμβαίνει και κατά το φαινόμενο της διάχυσης.

4.3.2. Κανονική Κατανομή

- Σταθερό σ και μεταβλητό $\alpha\phi$

Οι γεωμετρίες από τις οποίες δημιουργήθηκαν τα παρακάτω διαγράμματα φαίνονται στο *Appendix C*.

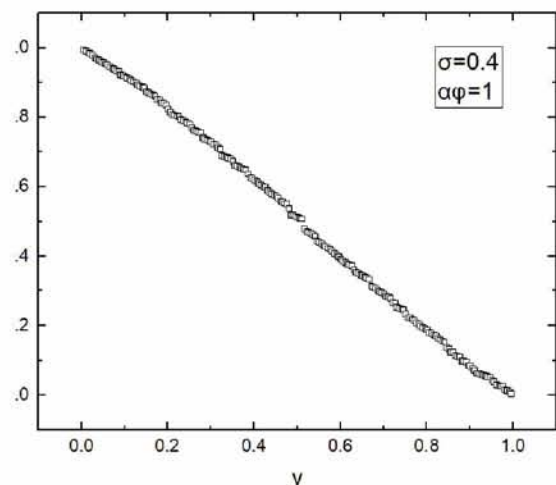
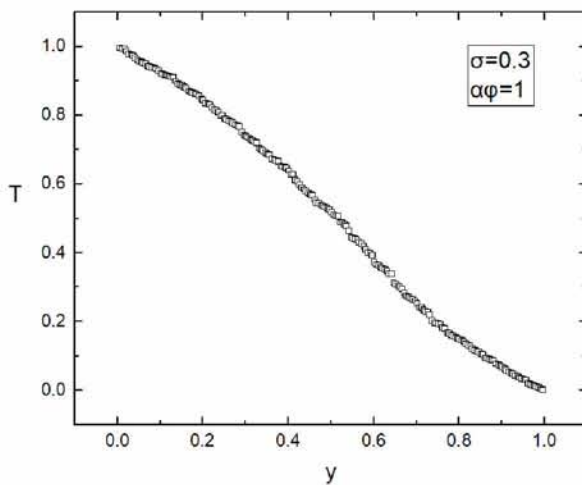
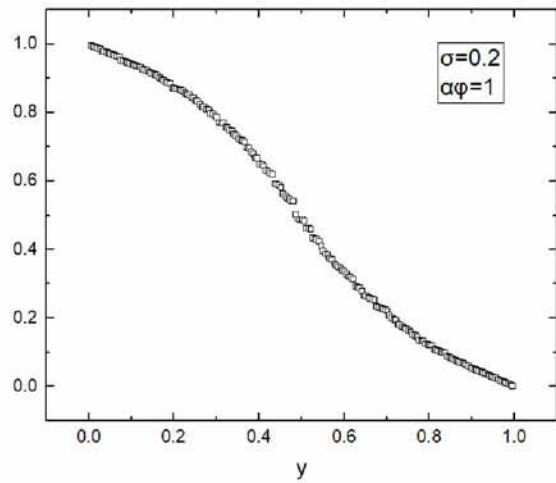
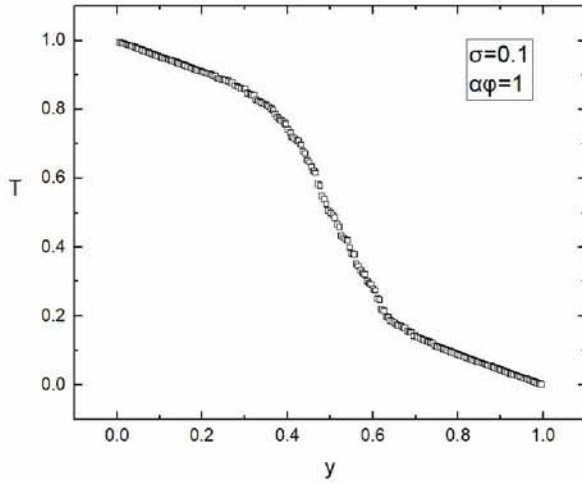


Παρατηρούμε ότι και σε αυτή την κατανομή η συμπεριφορά της θερμοκρασίας είναι ανάλογη με τη περίπτωση τη ημι-κανονικής κατανομής με την μόνη διαφορά ότι επειδή τα φυλλίδια σε αυτή την περίπτωση ακολουθούν την κανονική κατανομή ο μέσος όρος αυτών βρίσκεται στο κέντρο του υλικού. Μεγαλύτερα φυλλίδια ισούται με μεγαλύτερο εμπόδιο για την μετάδοση της

θερμότητας.

- Σταθερό $\alpha\phi$ και μεταβλητό σ

Οι γεωμετρίες από τις οποίες δημιουργήθηκαν τα παρακάτω διαγράμματα φαίνονται στο *Appendix C*.

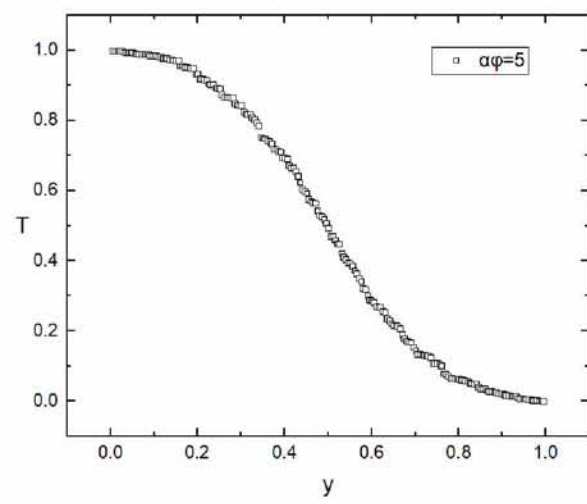
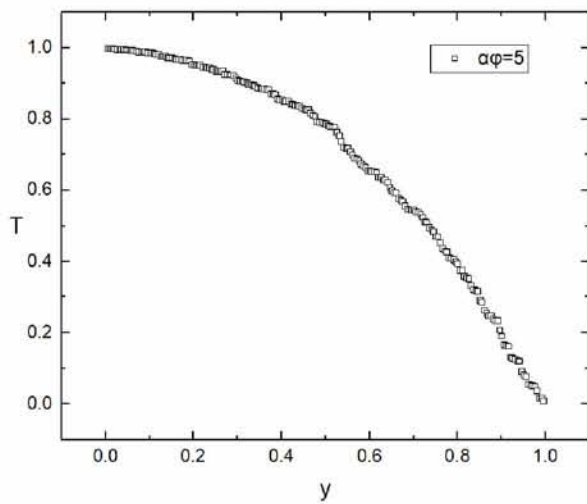
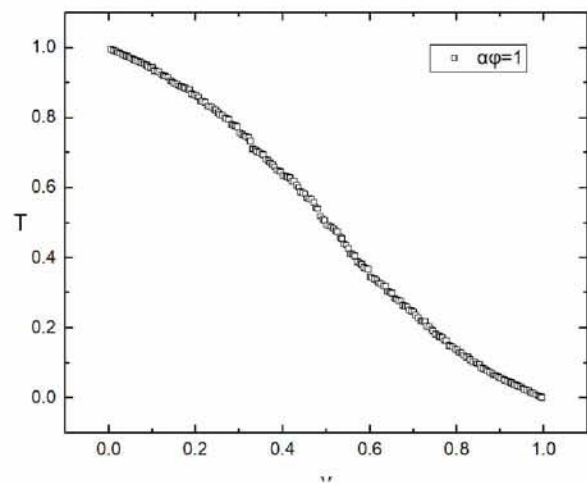
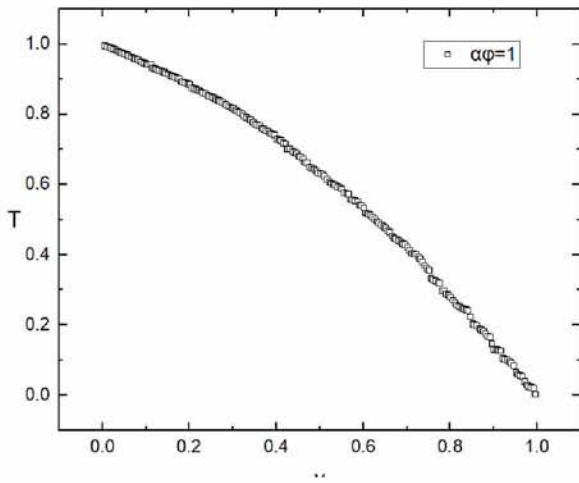
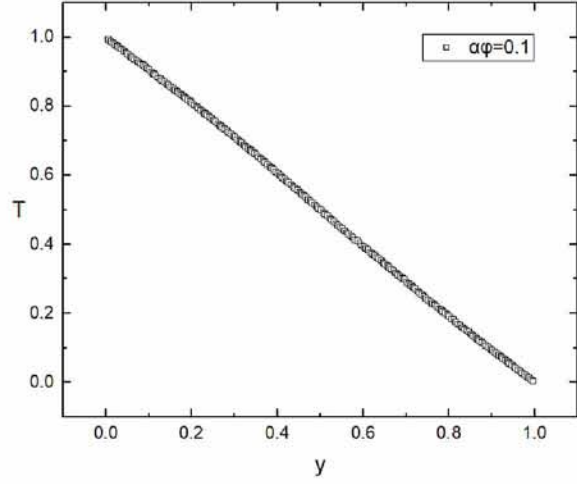
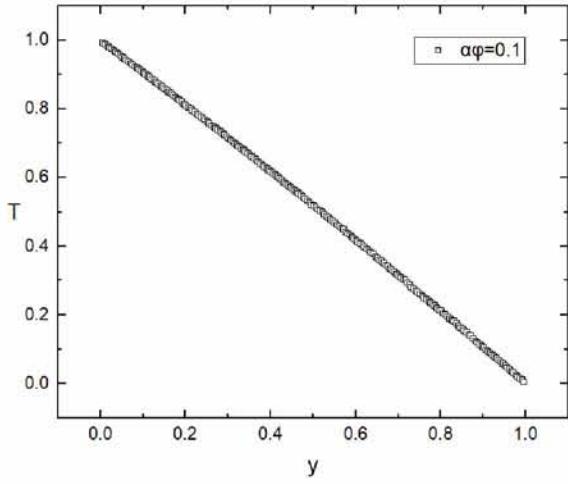


Όπως στην περίπτωση της ημι-κανονικής κατανομής έτσι και στην περίπτωση της κανονικής κατανομής η πυκνή τοποθέτηση των φυλλιδίων εμποδίζει καλύτερα την μετάδοση της θερμότητας.

4.3.3. Γραμμική - Τριγωνική Κατανομή

Γραμμική κατανομή

Τριγωνική κατανομή



Σύμφωνα με τα παραπάνω διαγράμματα παρατηρούμαι ότι η γραμμική σε σύγκριση με την τριγωνική κατανομή δίνουν διαφορετικά αποτελέσματα όσον αφορά τις τιμές της θερμοκρασίας στα διάφορα σημεία του υλικού. Στη τριγωνική κατανομή παρατηρείται η γραμμικότητα στα μικρά αφ αλλά όταν το αφ μεγαλώνει φαίνεται να συμπεριφέρεται όπως η κανονική, δηλαδή στο μέσο που συναντά η θερμότητα τον μεγαλύτερο όγκο των φυλλιδίων. Στην 1^η περίπτωση της γραμμικής κατανομής παρατηρείται σε χαμηλά αφ γραμμική συμπεριφορά της θερμοκρασίας ενώ καθώς το αφ μεγαλώνει η τιμές της θερμοκρασίας φαίνεται να ακολουθούν μία ελλειπτική τροχιά.

Οι γεωμετρίες από τις οποίες δημιουργήθηκαν τα παραπάνω διαγράμματα φαίνονται στο *Appendix C* και η κατανομή των θερμοκρασιών μέσα στο κελί φαίνεται στο *Appendix H*.

5. Χρονικά Μεταβαλλόμενη Μεταφορά Θερμότητας

5.1. Χρόνος Προσομοίωσης

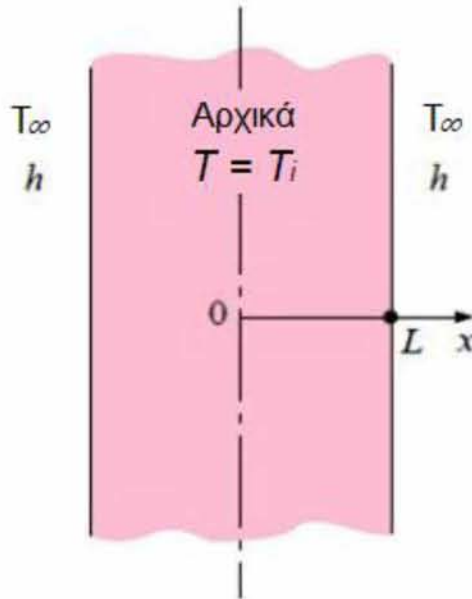
Στο προηγούμενο κεφάλαιο μελετήσαμε το φαινόμενο της διάχυσης σε χρονικά σταθερές συνθήκες, όπου η συγκέντρωση της μεταφερόμενης ποσότητας παρέμενε σταθερή σε σχέση με το χρόνο. Σε αυτό το κεφάλαιο θα συζητήσουμε για την περίπτωση της μεταφοράς θερμότητας σε συνθήκες όπου η συγκέντρωση της μεταφερόμενης ποσότητας εξαρτάται από το χρόνο. Οι συνθήκες του προβλήματος μας αλλάζουν από μόνιμες σε χρονομεταβαλλόμενες. Αυτό συνεπάγεται σε διαφοροποιήσεις στον σχετικό κώδικα που θα τρέξει ο OpenFOAM για να συμπεριληφθούν οι παράμετροι που απαιτούνται στην τελική προσομοίωση.

Μια σημαντική παράμετρος στις χρονομεταβαλλόμενες προσομοιώσεις είναι ο συνολικός χρόνος του φαινομένου, που συμβολίζεται με t_{final} και είναι ο χρόνος στον οποίο το υλικό θα προσεγγίσει συνθήκες σταθερής θερμοκρασίας. Είναι η στιγμή στην οποία παύει να υπάρχει πλέον μεταφορά θερμότητας. Το t_{final} θα μπορούσε να υπολογισθεί αυθαίρετα, τρέχοντας την κάθε μικροδομή πολλές φορές και αυξάνοντας ή μειώνοντας το ανάλογα με τα αποτελέσματα που προέκυπταν. Όμως, όπως θα δούμε παρακάτω, το t_{final} διαφέρει από μικροδομή σε μικροδομή και κάτι τέτοιο θα ήταν εξαιρετικά χρονοβόρο.

Για το λόγο αυτό επιλύουμε στο MATLAB το θεωρητικό πρόβλημα της μονοδιάστατης μεταφοράς θερμότητας με αγωγή διαμέσου ενός τοίχου, ή στην περίπτωση μας, ενός κελιού με πλευρά 1 χιλιοστού, για να λάβουμε την αναλυτική λύση και να αποκτήσουμε μια εικόνα για τη σωστή επιλογή του t_{final} χωρίς να χρειαστεί να εκτελέσουμε παραπάνω προσομοιώσεις. Στις παρακάτω παραγράφους γίνεται αναφορά στο θεωρητικό πρόβλημα της μονοδιάστατης μεταφοράς θερμότητας με αγωγή διαμέσου ενός τοίχου.

5.2. Επίλυση Θεωρητικού Προβλήματος

Το θεωρητικό πρόβλημα της περίπτωσης μας αντιστοιχεί στη μονοδιάστατη μεταβατική μεταφορά θερμότητας σε ένα επίπεδο τοίχο. Ας θεωρήσουμε ένα επίπεδο τοίχο πάχους $2L$ που αρχικά βρίσκεται σε ομοιόμορφη θερμοκρασία T_i , όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα:



Σχ. 32 – Μονοδιάστατη μεταβατική μεταφορά θερμότητας διαμέσου επίπεδου τοίχου

Τη χρονική στιγμή $t = 0$, ο τοίχος βυθίζεται μέσα σε ένα ρευστό θερμοκρασίας T_∞ και υφίσταται διαδικασία μεταφοράς θερμότητας μέσω συναγωγής και από τις δύο πλευρές του, με συντελεστή μεταφοράς θερμότητας με συναγωγή h . Το ύψος και το πλάτος του τοίχου θεωρούνται μεγάλα σε σχέση με το πάχος του και επομένως, η αγωγή θερμότητας στον τοίχο μπορεί να προσεγγιστεί ως μονοδιάστατη. Επίσης, υπάρχει θερμική συμμετρία γύρω από το επίπεδο που διέρχεται από τη θέση $x = 0$ και επομένως, η κατανομή θερμοκρασίας θα πρέπει να είναι συμμετρική ως προς αυτό το μέσο επίπεδο. Επομένως, η τιμή της θερμοκρασίας σε κάθε θέση $-x$ στην περιοχή $-L \leq x \leq 0$ σε κάθε χρονική στιγμή t , θα πρέπει να είναι ίση με τη θερμοκρασία σε κάθε θέση $+x$ στην περιοχή $0 \leq x \leq L$ και για την ίδια ακριβώς χρονική στιγμή. Αυτό σημαίνει ότι μπορούμε να λύσουμε το πρόβλημα αγωγής θερμότητας για το θετικό μισό του τοίχου και ύστερα να εφαρμόσουμε τη λύση και στο άλλο μισό.

Υπό το καθεστώς της ισχύος των παραδοχών περί των σταθερών θερμοφυσικών ιδιοτήτων, της απουσίας μηχανισμού παραγωγής θερμότητας, της θερμικής συμμετρίας γύρω από το μέσο επίπεδο, της ομοιόμορφης αρχικής θερμοκρασίας και του σταθερού συντελεστή συναγωγής, το πρόβλημα της μονοδιάστατης μεταβατικής αγωγής θερμότητας στο ήμισυ του επίπεδου τοίχου που ορίζεται ως $0 \leq x \leq L$ μπορεί να εκφραστεί ως:

$$\text{Διαφορική εξίσωση: } \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} \quad 5.1.\alpha$$

$$\text{Οριακές Συνθήκες: } \frac{\partial T(0,t)}{\partial x} = 0 \quad \text{και} \quad -k \frac{\partial T(L,t)}{\partial x} = h[T(L,t) - T_\infty] \quad 5.1.\beta$$

$$\text{Αρχική Συνθήκη: } T(x, 0) = T_i \quad 5.1.\gamma$$

με την παράμετρο $\alpha = k/(\rho \cdot c_p)$ να εκφράζει τη θερμική διαχυτότητα του υλικού.

Ορίζοντας μια αδιάστατη χωρική μεταβλητή $X = x / L$ και μια αδιάστατη θερμοκρασία $\theta(x,t) = [T(x,t) - T_\infty] / [T_i - T_\infty]$ γίνεται η αδιαστατοποίηση του προβλήματος.

Με τις κατάλληλες αντικαταστάσεις των αδιάστατων μεγεθών στις εξισώσεις του προβλήματος καταλήγουμε στο αδιάστατο πρόβλημα το οποίο περιγράφεται από τις παρακάτω εξισώσεις:

$$\text{Αδιάστατη Διαφορική εξίσωση: } \frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} = \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \quad 5.2.\alpha$$

$$\text{Αδιάστατες Οριακές Συνθήκες: } \frac{\partial \theta(0,\tau)}{\partial X} = 0 \quad \text{και} \quad \frac{\partial \theta(1,\tau)}{\partial X} = -Bi\theta(1,\tau) \quad 5.2.\beta$$

$$\text{Αδιάστατη Αρχική Συνθήκη: } \theta(X, 0) = 1 \quad 5.2.\gamma$$

Στις παραπάνω εξισώσεις οι όροι που εμφανίζονται είναι οι εξής:

$$\text{Αδιάστατη θερμοκρασία: } \theta(X, \tau) = \frac{T(x,t) - T_{\infty}}{T_i - T_{\infty}} \quad 5.3.\alpha$$

$$\text{Αδιάστατη απόσταση από το κέντρο: } X = \frac{x}{L} \quad 5.3.\beta$$

$$\text{Αδιάστατος συντελεστής μεταφοράς θερμότητας (αριθμός Biot): } Bi = \frac{hL}{k} \quad 5.3.\gamma$$

$$\text{Αδιάστατος χρόνος (αριθμός Fourier): } \tau = Fo = \frac{at}{L^2} \quad 5.3.\delta$$

Η παραπάνω διαδικασία αδιαστατοποίησης καταφέρνει να ελαττώσει το πλήθος των ανεξάρτητων μεταβλητών από 8 σε 3, πράγμα που καθιστά πολύ πρακτική τη διεξαγωγή παραμετρικών μελετών, ενώ μας απαλλάσσει από την παρουσίαση αποτελεσμάτων σε γραφική μορφή.

Για την ακριβή λύση του παραπάνω αδιαστατοποιημένου προβλήματος που περιγράφεται από τις εξισώσεις 5.2 θα χρησιμοποιηθεί η μέθοδος χωρισμού μεταβλητών. Αρχικά, εκφράζουμε τη συνάρτηση της αδιάστατης θερμοκρασίας $\theta(X, \tau)$ ως ένα γινόμενο μιας συνάρτησης μόνο του X και μιας συνάρτησης μόνο του τ . Θα είναι λοιπόν:

$$\theta(X, \tau) = F(X)G(\tau) \quad 5.4$$

Αντικαθιστώντας την εξίσωση 5.4 στην εξίσωση 5.2.α και διαιρώντας με το γινόμενο FG , θα λάβουμε:

$$\frac{1}{F} \frac{d^2 F}{dX^2} = \frac{1}{G} \frac{dG}{d\tau} \quad 5.5$$

Το αριστερό μέλος αυτής της εξίσωσης είναι συνάρτηση μόνο του X ενώ το δεξί μέλος είναι συνάρτηση μόνο του τ . Λαμβάνοντας υπόψη πως τόσο το X όσο και το τ μπορούν να μεταβάλλονται ανεξάρτητα το ένα από το άλλο, η ισότητα στην εξίσωση 5.5 μπορεί να ισχύσει για κάθε τιμή του X και του τ , μόνο ένα η εξίσωση 5.5 είναι ίση με μια σταθερά. Επιπλέον, αυτή η σταθερά θα πρέπει να είναι αρνητική, κάτι που το υποδηλώνουμε

γράφοντας $-\lambda^2$, αφού μια θετική σταθερά θα αναγκάσει τη συνάρτηση $G(\tau)$ να αυξηθεί απεριόριστα με το χρόνο (τείνοντας στο άπειρο), κάτι που βέβαια είναι αφύσικο, ενώ από την άλλη πλευρά, μια μηδενική τιμή γι' αυτή τη σταθερά οδηγεί σε ανεξαρτησία από το χρόνο, κάτι που ανά δεν είναι σύμφωνο με το φυσικό πρόβλημα που πραγματευόμαστε. Θέτοντας λοιπόν την εξίσωση 5.5 ίση με $-\lambda^2$ θα λάβουμε:

$$\frac{d^2F}{dX^2} + \lambda^2 F = 0 \quad \text{και} \quad \frac{dG}{d\tau} + \lambda^2 G = 0 \quad 5.6.\alpha$$

οι γενικές λύσεις των οποίων είναι:

$$F = C_1 \cos(\lambda X) + C_2 \sin(\lambda X) \quad \text{και} \quad G = C_3 e^{-\lambda^2 \tau} \quad 5.6.\beta$$

και

$$\theta = FG = e^{-\lambda^2 \tau} [A \cos(\lambda X) + B \sin(\lambda X)] \quad 5.6.\gamma$$

όπου $A=C_1C_2$ και $B=C_2C_3$ είναι αυθαίρετες σταθερές. Για να καταλήξουμε στη λύση του προβλήματος χρειάζεται να καθορίσουμε μόνο τις σταθερές A , B . Εφαρμόζοντας τις συνοριακές συνθήκες, δηλαδή τις εξισώσεις 5.2 καταλήγουμε στα εξής:

$$\frac{\partial \theta(0, \tau)}{\partial X} = 0 \rightarrow e^{-\lambda^2 \tau} (A \lambda \sin 0 + B \lambda \cos 0) = 0 \rightarrow B = 0 \rightarrow \theta = A e^{-\lambda^2 \tau} \cos(\lambda X)$$

$$\frac{\partial \theta(1, \tau)}{\partial X} = -Bi \theta(1, \tau) \rightarrow -A e^{-\lambda^2 \tau} \lambda \sin \lambda = -Bi A e^{-\lambda^2 \tau} \cos \lambda \rightarrow \lambda \tan \lambda = Bi$$

Αλλά γνωρίζουμε ότι η εφαπτομένη είναι μια περιοδική συνάρτηση με περίοδο π και πως η εξίσωση $\lambda \tan \lambda = Bi$ έχει ρίζα λ_1 ανάμεσα στο 0 και π , τη ρίζα λ_2 ανάμεσα στο π και το 2π , τη ρίζα λ_n ανάμεσα στο $(n-1)\pi$ και στο $n\pi$, κ.ο.κ. Προκειμένου να δείξουμε πως η υπερβατική εξίσωση $\lambda \tan \lambda = Bi$ έχει άπειρο πλήθος ριζών, τη διατυπώνουμε με τη μορφή:

$$\lambda_n \tan \lambda_n = Bi \quad 5.7$$

Η παραπάνω εξίσωση ονομάζεται **χαρακτηριστική εξίσωση** ή **ιδιοσυνάρτηση**, ενώ οι ρίζες της ονομάζονται **χαρακτηριστικές τιμές** ή **ιδιοτιμές**. Στην προκειμένη περίπτωση, η χαρακτηριστική εξίσωση είναι πεπλεγμένη και έτσι οι χαρακτηριστικές τιμές θα πρέπει να προσδιοριστούν αριθμητικά. Κατά συνέπεια, υπάρχουν άπειρες λύσεις της μορφής

$Ae^{-\lambda^2\tau} \cos(\lambda X)$, ενώ η λύση αυτού του γραμμικού προβλήματος αγωγής θερμότητας δεν είναι παρά ένας γραμμικός συνδυασμός της μορφής:

$$\theta = \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{-\lambda_n^2\tau} \cos(\lambda_n X) \quad 5.8$$

όπου ο συντελεστής A_n δίνεται από τον παρακάτω τύπο:

$$A_n = \frac{4 \sin \lambda_n}{2\lambda_n + \sin(2\lambda_n)} \quad 5.9$$

Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται οι ιδιοτιμές της εξίσωσης $\lambda_n \tan \lambda_n = Bi$ για έναν επίπεδο τοίχο και για διάφορες τιμές του αριθμού Biot.

$Bi = \frac{hL}{k}$	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4
0	0	3.1416	6.2832	9.4248
0.001	0.0316	3.1419	6.2833	9.4249
0.002	0.0447	3.1422	6.2835	9.4250
0.004	0.0632	3.1429	6.2838	9.4252
0.006	0.0774	3.1435	6.2841	9.4254
0.008	0.0893	3.1441	6.2845	9.4256
0.01	0.0998	3.1448	6.2848	9.4258
0.02	0.1410	3.1479	6.2864	9.4269
0.04	0.1987	3.1543	6.2895	9.4290
0.06	0.2425	3.1606	6.2927	9.4311
0.08	0.2791	3.1668	6.2959	9.4333
0.1	0.3111	3.1731	6.2991	9.4354
0.2	0.4328	3.2039	6.3148	9.4459
0.3	0.5218	3.2341	6.3305	9.4565
0.4	0.5932	3.2636	6.3461	9.4670
0.5	0.6533	3.2923	6.3616	9.4775
0.6	0.7051	3.3204	6.3770	9.4879
0.7	0.7506	3.3477	6.3923	9.4983
0.8	0.7910	3.3744	6.4074	9.5087
0.9	0.8274	3.4003	6.4224	9.5190
1.0	0.8603	3.4256	6.4373	9.5293
1.5	0.9882	3.5422	6.5097	9.5801
2.0	1.0769	3.6436	6.5783	9.6296
3.0	1.1925	3.8088	6.7040	9.7240
4.0	1.2646	3.9352	6.8140	9.8119
5.0	1.3138	4.0336	6.9096	9.8928
6.0	1.3496	4.1116	6.9924	9.9667
7.0	1.3766	4.1746	7.0640	10.0339
8.0	1.3978	4.2264	7.1263	10.0949
9.0	1.4149	4.2694	7.1806	10.1502
10.0	1.4289	4.3058	7.2281	10.2003
15.0	1.4729	4.4255	7.3959	10.3898
20.0	1.4961	4.4915	7.4954	10.5117
30.0	1.5202	4.5615	7.6057	10.6543
40.0	1.5325	4.5979	7.6647	10.7334
50.0	1.5400	4.6202	7.7012	10.7832
60.0	1.5451	4.6353	7.7259	10.8172
80.0	1.5514	4.6543	7.7573	10.8606
100.0	1.5552	4.6658	7.7764	10.8871
∞	1.5708	4.7124	7.8540	10.9956

Πίνακας 2 – Οι τέσσερις πρώτες λύσεις της εξίσωσης $\lambda_n \tan \lambda_n = Bi$ για μεταβατική αγωγή θερμότητας σε επίπεδο τοίχο

Το πρόβλημα που καλούμαστε να προσομοιώσουμε σε αυτή τη διπλωματική εργασία μπορεί να προσεγγιστεί ικανοποιητικά με τις παραπάνω εξισώσεις. Οι αρχικές και συνοριακές συνθήκες του προβλήματος μεταβατικής μεταφοράς θερμότητας διαμέσου ενός κελιού με ομοιόμορφα κατανεμημένα φυλλίδια είναι οι έξης:

- Αρχική Συνθήκη: εσωτερική θερμοκρασία κελιού $T(\mathbf{y},0) = T_i = 273\text{K}$
- Συνοριακές Συνθήκες: $T(\mathbf{0},t) = T_b = 373\text{K}$ και $\frac{\partial T}{\partial y} = 0$ για $y=L$ και για κάθε t

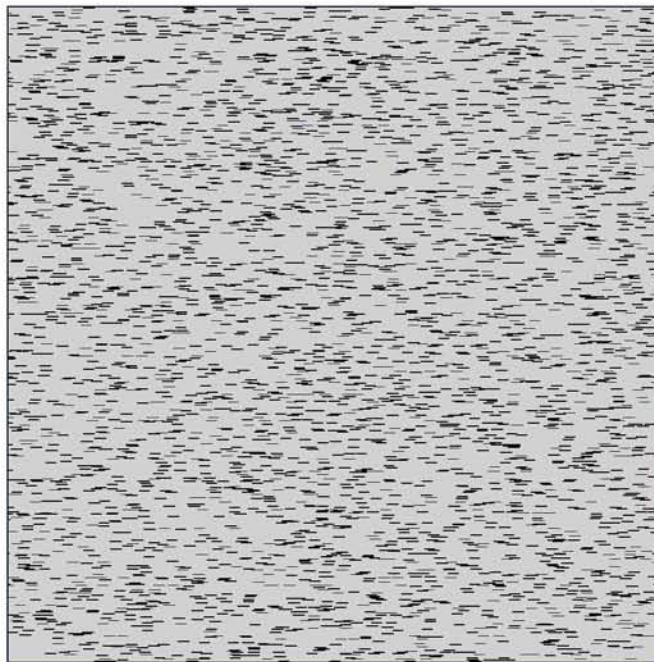
Είναι σημαντικό να σημειωθεί πως, όπως εκφράζει η πρώτη συνοριακή συνθήκη, η θερμοκρασία στην κάτω επιφάνεια παραμένει σταθερή σε κάθε χρονική στιγμή. Τέτοιες περιπτώσεις, κατά τις οποίες οι επιφάνειες του σώματος αποκτούν ξαφνικά θερμοκρασία ίση με T_∞ τη χρονική στιγμή $t=0$ και διατηρούνται συνεχώς σε αυτή τη θερμοκρασία, μπορούν να αντιμετωπιστούν θέτοντας το συντελεστή συναγωγής h σε άπειρη τιμή. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα να απειριστεί και ο αριθμός Biot, επομένως καταφεύγουμε στις αντίστοιχες τιμές των ιδιοτιμών που παρουσιάστηκαν στον Πίνακα 2.

Μια ακόμη σημαντική παρατήρηση είναι ότι, σύμφωνα με τη δεύτερη συνοριακή συνθήκη, το πρόβλημα μας αντιστοιχεί στο θεωρητικό πρόβλημα της μονοδιάστατης μεταβατικής αγωγής θερμότητας στο ήμισυ του επίπεδου τοίχου που ορίζεται ως $0 \leq x \leq L$ και όχι στο θεωρητικό πρόβλημα που αντιστοιχεί σε όλο το μήκος του τοίχου που ορίζεται ως $-L \leq x \leq L$. Αυτό απλοποιεί την εξίσωση υπολογισμού της αδιάστατης θερμοκρασίας θ απαλείφοντας τον όρο του συνημίτονου αφού η επάνω επιφάνεια του κελιού αντιστοιχεί στην αδιάστατη θέση $X=0$ του θεωρητικού προβλήματος. Έτσι, οι εξισώσεις που εισήχθησαν στο MATLAB προς επίλυση είναι οι 5.8 και 5.9, δηλαδή:

$$\theta = \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{-\lambda_n^2 \tau} \quad \text{και} \quad A_n = \frac{4 \sin \lambda_n}{2\lambda_n + \sin(2\lambda_n)}$$

Ο αλγόριθμος στο MATLAB που περιγράφει το παραπάνω θεωρητικό πρόβλημα παρουσιάζεται στο *Appendix D*.

Επόμενο βήμα είναι ο έλεγχος της αξιοπιστίας του παραπάνω κώδικα. Ο κώδικας δεν είναι ικανός να υπολογίσει τη θερμοκρασία της πάνω επιφάνειας σε ένα κελί που περιέχει φυλλίδια με κατανομή $\sigma \neq 1$ και η αναλυτική λύση που προκύπτει αφορά ένα ομογενές υλικό. Γι' αυτό το λόγο, θα γίνει σύγκριση των αποτελεσμάτων της αναλυτικής λύσης του MATLAB με τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τον OpenFOAM (αριθμητική λύση) για μια περίπτωση με ομοιόμορφα κατανεμημένα φυλλίδια. Ένα τέτοιο κελί έχει την παρακάτω γεωμετρία.

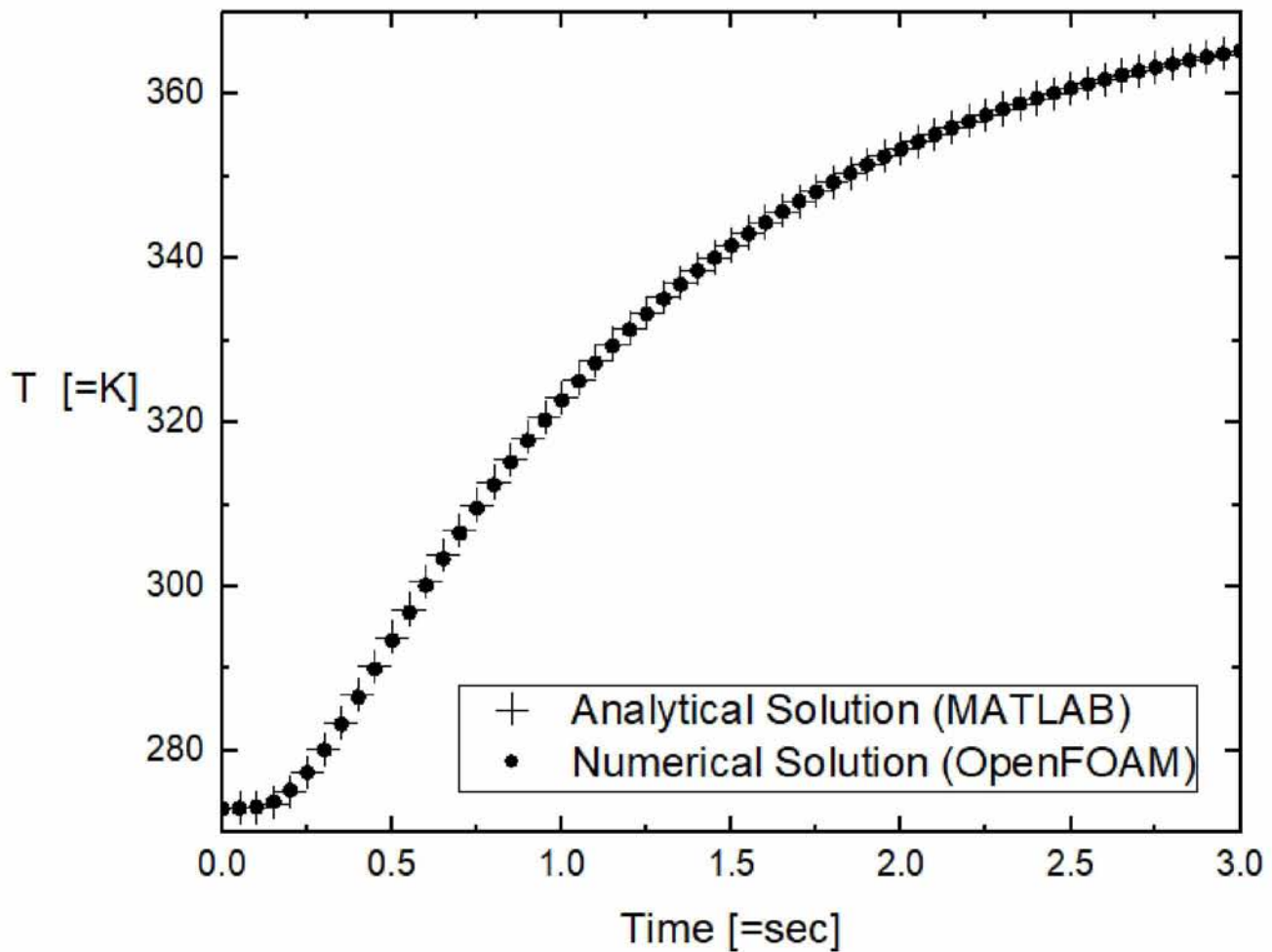


Σχ. 33 – Γεωμετρία κελιού με $N = 4000$, $\alpha\phi = 1.25$ και $\sigma = 1$

Από την επίλυση του προβλήματος σε μόνιμες συνθήκες προέκυψε ένα D_{eff} για την παραπάνω περίπτωση. Αυτή η τιμή εισάγεται στην αναλυτική λύση του MATLAB στη θέση της θερμικής διαχυτότητας α . Με αυτό τον τρόπο προκύπτει η μεταβολή της θερμοκρασίας στην πάνω επιφάνεια του κελιού και ο χρόνος t_{final} που απαιτείται ώστε το υλικό να προσεγγίσει συνθήκες σταθερής θερμοκρασίας.

Για να πάρουμε την αριθμητική λύση που αντιστοιχεί στο ίδιο υλικό με τις ίδιες συνοριακές συνθήκες χρησιμοποιείται ο αντίστοιχος κώδικας του OpenFOAM. Αφού έγιναν οι κατάλληλες αλλαγές και εκτιμήθηκε ο χρόνος προσομοίωσης t_{final} , ο OpenFOAM υπολόγισε την αριθμητική λύση του προβλήματος.

Όπως φαίνεται στο παρακάτω διάγραμμα, η αριθμητική λύση (OpenFOAM) είναι σε απόλυτη συμφωνία με τις προβλέψεις της αναλυτικής λύσης (MATLAB) για ένα ομογενές υλικό.



Σχ. 34 – Η αριθμητική λύση είναι σε συμφωνία με την αναλυτική για ένα ομογενές υλικό.

Στο επόμενο κεφάλαιο γίνεται η περιγραφή της διαδικασίας που ακολουθήθηκε για την προσομοίωση διαφορετικών μικροδομών.

5.3. Ακολουθία Επίλυσης Υπολογιστικών Μοντέλων

Αφού βεβαιωθήκαμε ότι τα αποτελέσματα του OpenFOAM είναι αξιόπιστα, ήρθε η ώρα να τρέξουμε τις προσομοιώσεις. Οι μικροδομές (περιπτώσεις) που επιλέχθηκαν να προσομοιωθούν διαθέτουν συγκεντρώσεις φυλλιδίων (**αφ**) με τιμές που κυμαίνονται από 0.01, δηλαδή για αραιά διαλύματα, έως και 10, δηλαδή για πυκνά διαλύματα. Τα φυλλίδια μέσα σε αυτά τα διαλύματα είναι ευθυγραμμισμένα και παράλληλα στις επάνω και κάτω πλευρές του κελιού. Επιπλέον, έγινε μελέτη για το πώς η κατανομή των φυλλιδίων επηρεάζει τη μεταφορά θερμότητας επιτρέποντας την κατανομή σ να λάβει τιμές από 0.1 έως και 1, με βήμα 0.1. Συνολικά προσομοιώθηκαν 140 μικροδομές από δύο φορές η καθεμία, με ημικανονική κατανομή όπως παρουσιάζονται στο *Appendix C*. Τα φυλλίδια είναι συγκεντρωμένα στην πλευρά του κελιού που η θερμοκρασία είναι μεγαλύτερη.

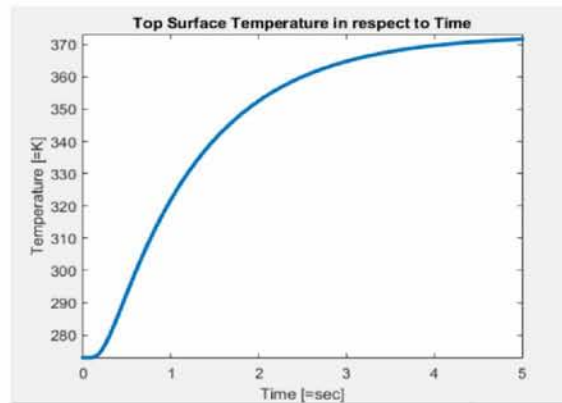
Για την περιγραφή της διαδικασίας επίλυσης του αριθμητικού προβλήματος επιλέχθηκε η περίπτωση με αριθμό φυλλιδίων $N = 500$, $\sigma = 0.3$ και $\alpha\phi = 5$. Σαν υλικό επιλέχθηκε ένα που διαθέτει πυκνότητα $\rho = 3000 \text{ kg/m}^3$ και ειδική θερμοχωρητικότητα $C_p = 450 \text{ J/kgK}$. Το πρόβλημα έχει τις ίδιες αρχικές και συνοριακές συνθήκες με παραπάνω, δηλαδή:

- Αρχική Συνθήκη: εσωτερική θερμοκρασία κελιού $\mathbf{T}(\mathbf{y},0) = \mathbf{T}_i = 273\text{K}$
- Συνοριακές Συνθήκες: $\mathbf{T}(\mathbf{0},t) = \mathbf{T}_b = 373\text{K}$ και $\frac{\partial T}{\partial y} = 0$ για $y=L$ και για κάθε t

Πριν γίνει η κατασκευή της γεωμετρίας του κελιού και η εισαγωγή της στον OpenFOAM για επίλυση, πρέπει να γίνει υπολογισμός των χρονικών παραμέτρων. Υπολογίζοντας το D_{eff} για την παραπάνω περίπτωση και εισάγοντας το στο MATLAB καταλήγουμε στο παρακάτω διάγραμμα που φαίνεται η μεταβολή της θερμοκρασίας της επάνω επιφάνειας σε σχέση με το χρόνο για το αντίστοιχο ομογενές υλικό και **όχι** για το υλικό με τα κατανεμημένα φυλλίδια. Το Διάγραμμα 2 προέκυψε για χρόνο προσομοίωσης $t_{\text{final}} = 5 \text{ sec}$.

Παρά το γεγονός ότι το συγκεκριμένο διάγραμμα δημιουργήθηκε για το ομογενές υλικό με το ίδιο D_{eff} που αντιστοιχεί στην περίπτωση που θέλουμε να μελετήσουμε, αυτό δεν μας εμποδίζει να βγάλουμε σημαντικά συμπεράσματα για το χρόνο που απαιτείται μέχρι το υλικό να προσεγγίσει συνθήκες σταθερής θερμοκρασίας. Τα αποτελέσματα της αριθμητικής λύσης είναι ίδια με τα αποτελέσματα της αναλυτικής λύσης μόνο στην περίπτωση που έχουμε $\sigma = 1$,

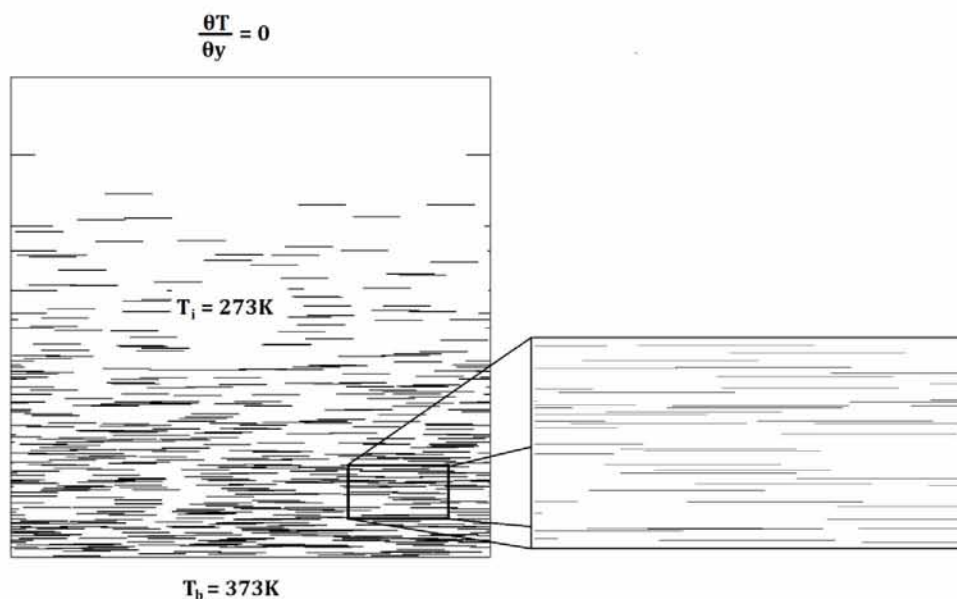
επομένως στη συγκεκριμένη περίπτωση, όπου $\sigma = 0.3$, περιμένουμε να δούμε μια απόκλιση στα αποτελέσματα που όμως δεν επηρεάζει την εγκυρότητα τους.



Σχ. 35 – Μεταβολή θερμοκρασίας στην επάνω επιφάνεια σε σχέση με το χρόνο

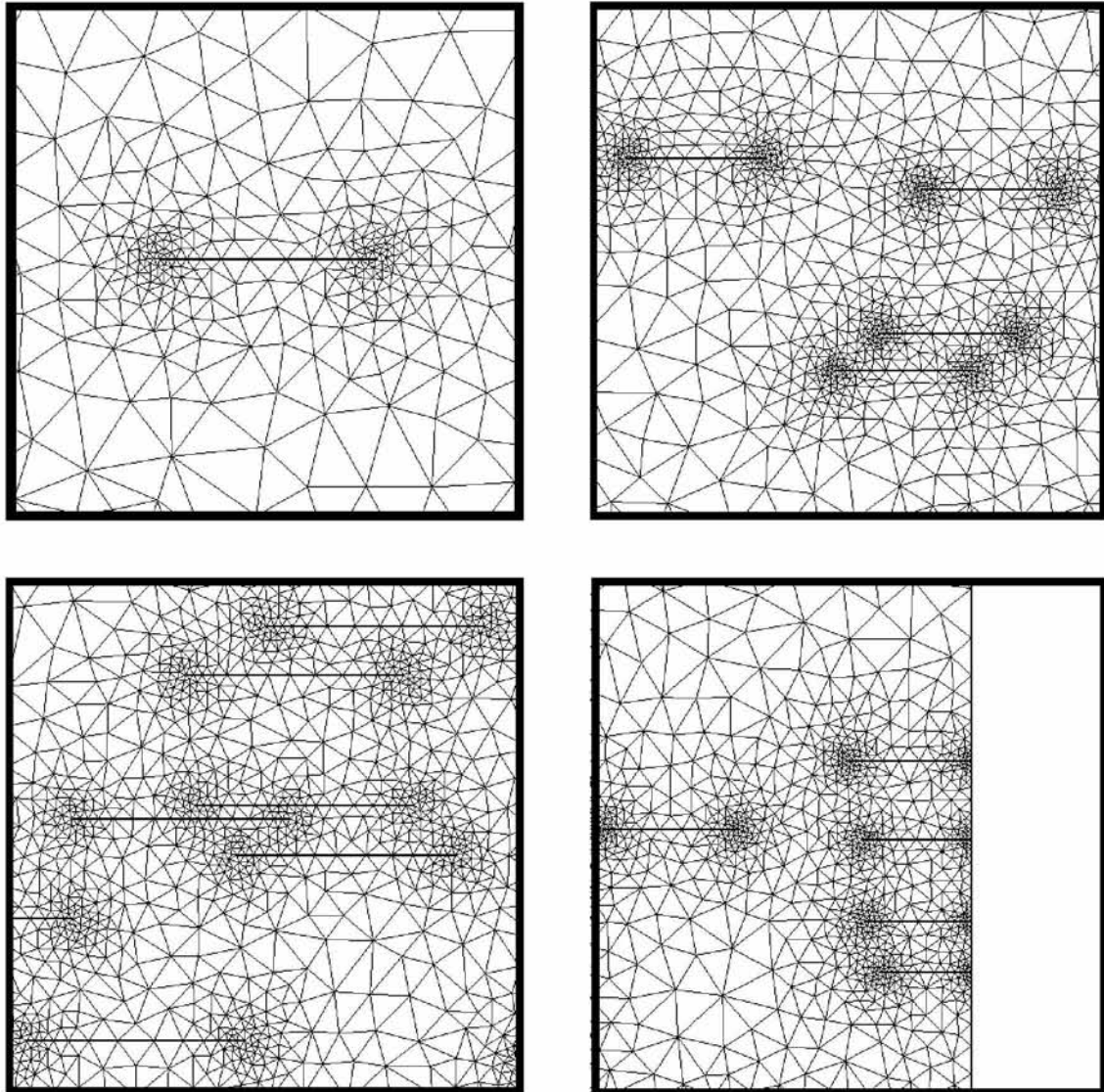
Αφού λάβαμε το t_{final} που αντιστοιχεί στο συγκεκριμένο πρόβλημα, συνεχίζουμε κτίζοντας τη γεωμετρία του κελιού, ορίζοντας την πυκνότητα του πλέγματος (mesh) που ορίζει την ακρίβεια της αριθμητικής λύσης και δημιουργώντας τα απαραίτητα αρχεία και scripts που θα εισαχθούν τελικά στον OpenFOAM. Για το σκοπό αυτό, χρησιμοποιήσαμε το εργαλείο *AutoPilot*^[18], ανεπτυγμένο από τον κ. Τσιαντή στα πλαίσια της διπλωματικής του εργασίας. Πληροφορίες για το εργαλείο *AutoPilot* παρουσιάζονται στο *Appendix A*.

Έτσι, με το πέρας των παραπάνω διαδικασιών, μπορούμε να δούμε τη γεωμετρία του κελιού που φτιάξαμε χρησιμοποιώντας το πρόγραμμα SALOME. Παρακάτω φαίνεται η γεωμετρία της περίπτωσης που μελετάμε, μαζί με τις αρχικές και συνοριακές συνθήκες:



Σχ. 36 – Γεωμετρία, αρχικές και συνοριακές συνθήκες της περίπτωσης $N = 500$, $\alpha\phi = 5$ και $\sigma = 0.3$

Το πρόγραμμα AutoPilot μας βοηθά επίσης να σχεδιάσουμε το πλέγμα που θα χρειαστούμε για την εξαγωγή της αριθμητικής λύσης με τη μέγιστη δυνατή ακρίβεια. Εισάγοντας το αντίστοιχο αρχείο στο GMSH μπορούμε να δούμε το πλέγμα που δημιουργήσαμε και το οποίο φαίνεται παρακάτω.



Σχ. 37 – Τυπικές λεπτομέρειες πλέγματος

Έχοντας αποκτήσει τα απαραίτητα αρχεία και scripts που χρειάζονται για να τρέξουν οι προσομοιώσεις, τα εισάγουμε στο OpenFOAM. Με τη χρήση της εντολής *laplacianFoam*, ο OpenFOAM επιλύει την εξίσωση Laplace για χρονικά μεταβαλλόμενα προβλήματα:

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \nabla^2 (D_T \cdot T) = 0 \quad 5.10$$

όπου το D_T είναι μια σταθερά και στην περίπτωση μας είναι η θερμική διαχυτότητα του υλικού.

Έπειτα υπολογίζεται η θερμοκρασία ανά μονάδα επιφάνειας στην επάνω επιφάνεια του υλικού χρησιμοποιώντας την εντολή *patchAverage* η οποία επιλύει την παρακάτω εξίσωση:

$$\bar{T} = \frac{\sum_i T_i A_i}{\sum_i A_i} \quad 5.11$$

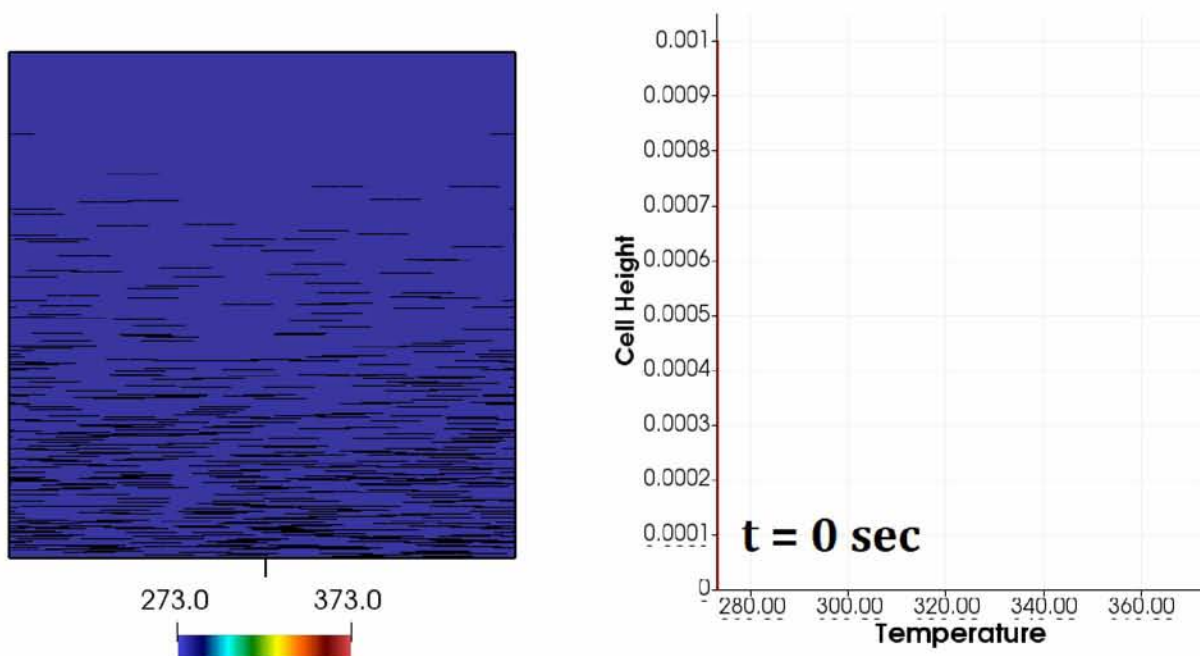
Με τις παραπάνω εντολές υπολογίζουμε τη μεταβολή της θερμοκρασίας στην επάνω επιφάνεια έως ότου προσεγγίσει συνθήκες σταθερής θερμοκρασίας. Πέρα από τους παραπάνω υπολογισμούς, μας ενδιαφέρει και το πως μεταβάλλεται η θερμοκρασία στο εσωτερικό του κελιού σε κάθε χρονικό βήμα κατά μήκος του άξονα που είναι κάθετος στην πάνω και κάτω επιφάνεια. Για την αποθήκευση και προβολή αυτών των θερμοκρασιών χρησιμοποιήσαμε την εντολή *sampleDict* που για κάθε χρονικό βήμα. Έτσι, με το πέρας της προσομοίωσης έχουμε στη διάθεση μας μια πλήρη εικόνα για τη μεταφορά θερμότητας διαμέσου του κελιού. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν παρουσιάζονται στην επόμενη ενότητα.

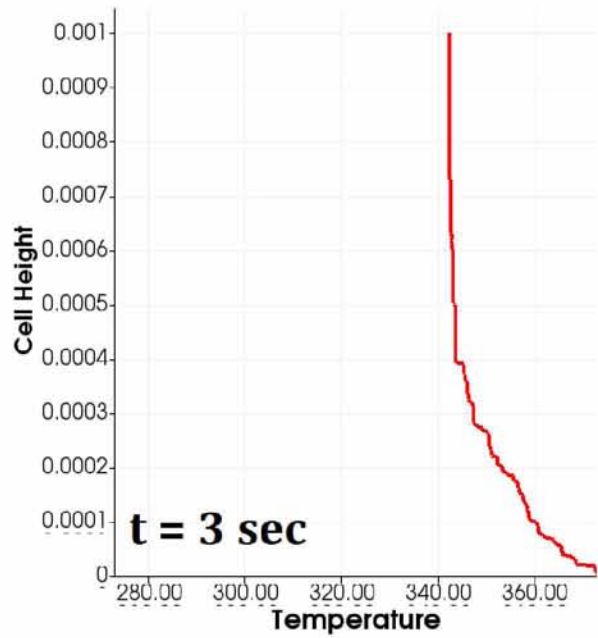
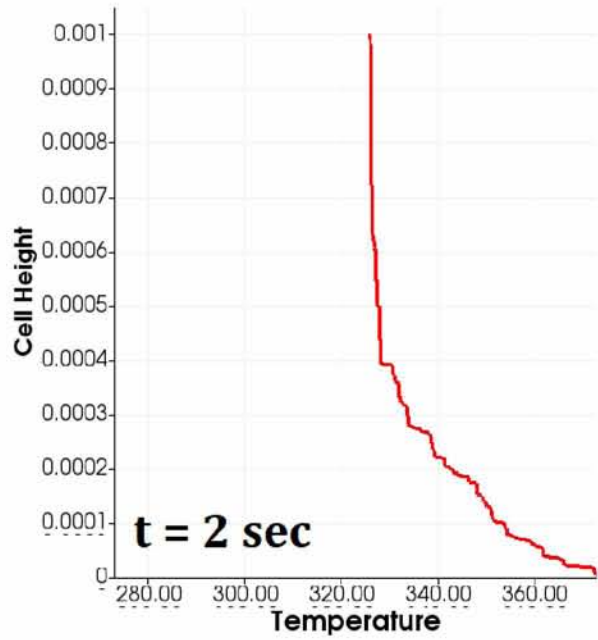
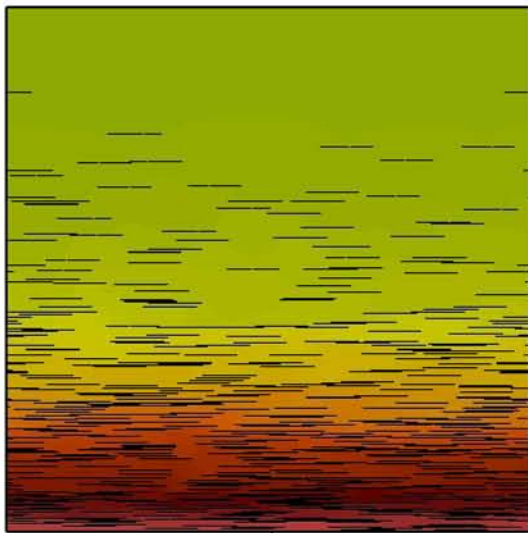
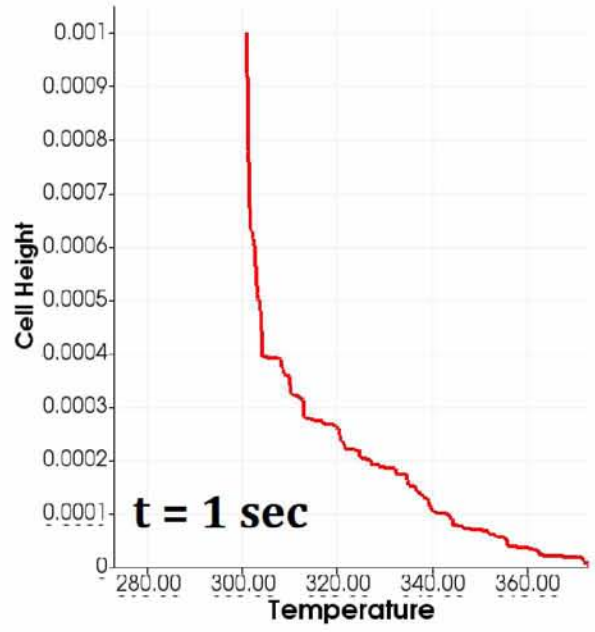
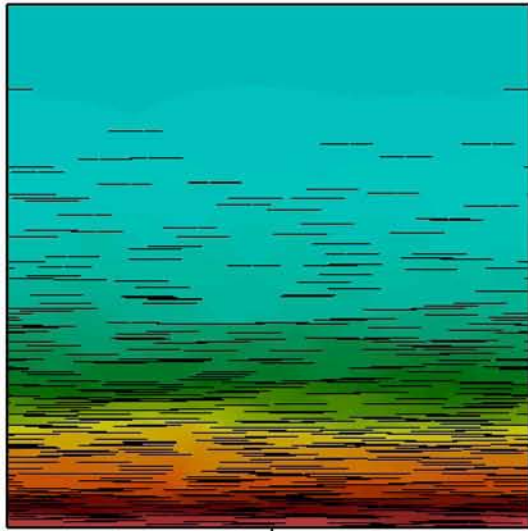
5.4. Αποτελέσματα Προσομοιώσεων

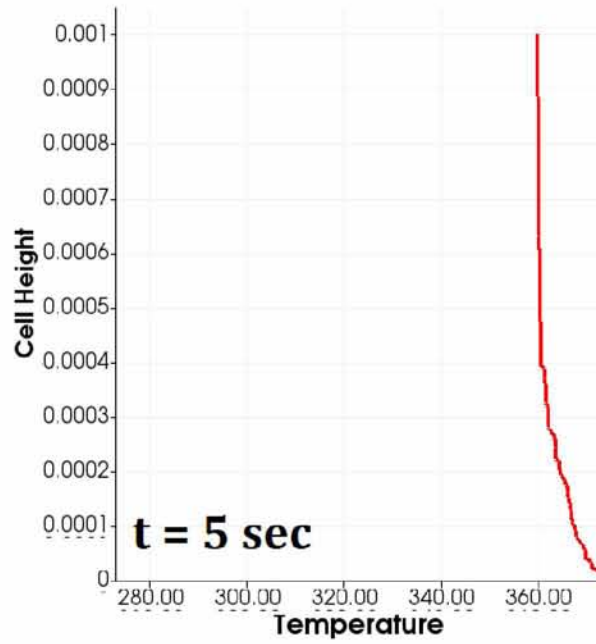
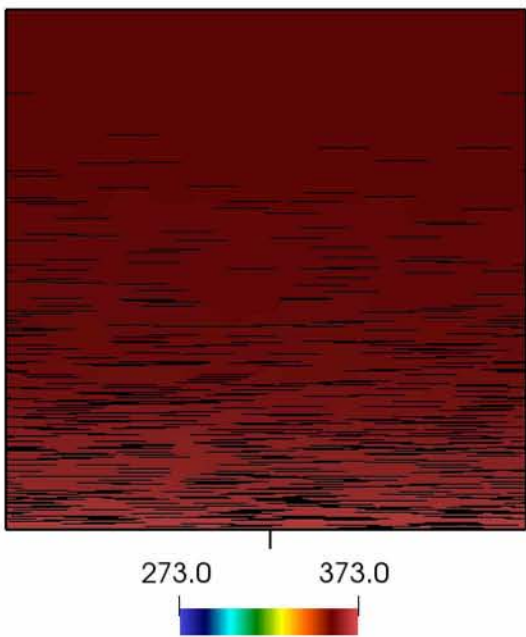
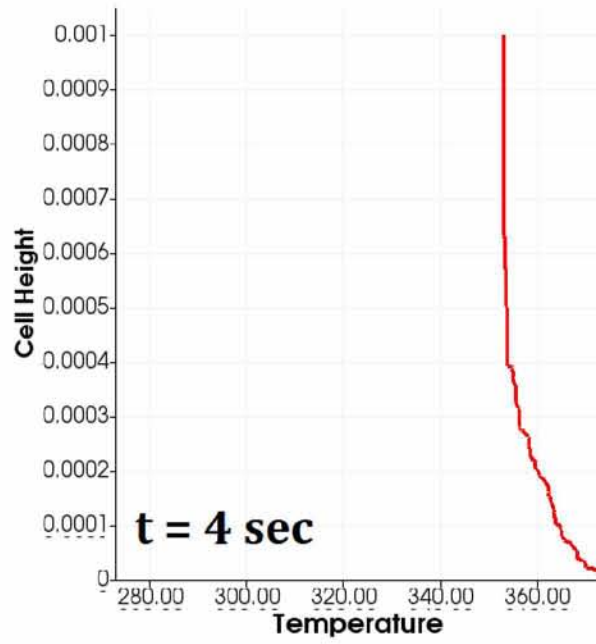
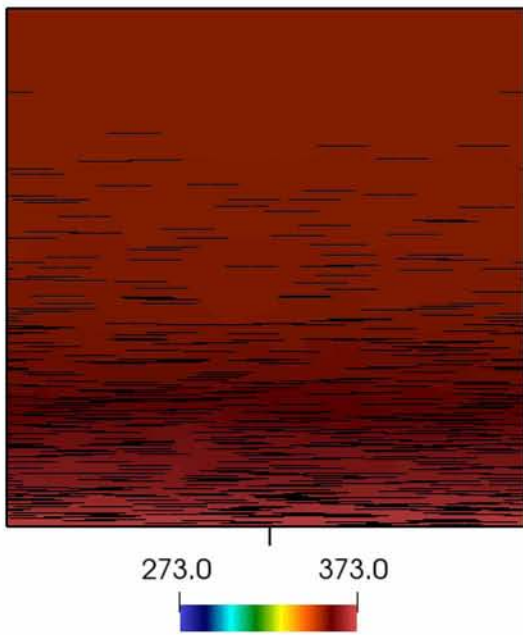
Η σωστή επιλογή των χρονικών παραμέτρων μα βοήθησε στο να τρέξουμε τις προσομοιώσεις σε λογικά χρονικά πλαίσια και στο να πάρουμε τα επιθυμητά αποτελέσματα για την κατανομή της θερμοκρασίας στην επάνω επιφάνεια. Ταυτόχρονα, εμπλουτίζοντας τον κώδικα του OpenFOAM με την εντολή sampleDict καταφέραμε να λάβουμε τιμές για τη θερμοκρασία σε κάθε σημείο του κελιού κατά την κατακόρυφη διεύθυνση.

Για να γίνουν αυτά τα δεδομένα κατανοητά και να διαπιστώσουμε πως πραγματικά λαμβάνει χώρα η μεταφορά θερμότητας μέσα στο κελί, στρεφόμαστε στη βοήθεια προγραμμάτων όπως το ParaView. Στο ParaView εισάγουμε τα δεδομένα που προέκυψαν από την επίλυση του αριθμητικού προβλήματος και τα μετατρέπουμε σε μια αλληλουχία εικόνων και διαγραμμάτων μετατρέποντας τα σε πληροφορίες περισσότερο κατανοητές.

Τα αποτελέσματα που λάβαμε για την περίπτωση που μελετάμε εδώ, δηλαδή εκείνη με αριθμό φυλλιδίων $N = 500$, $\sigma = 0.3$ και $af = 5$, φαίνονται στις εικόνες που ακολουθούν. Το μήκος L της πλευράς του κελιού είναι 0.001m όπως φαίνεται κι από τα διαγράμματα.







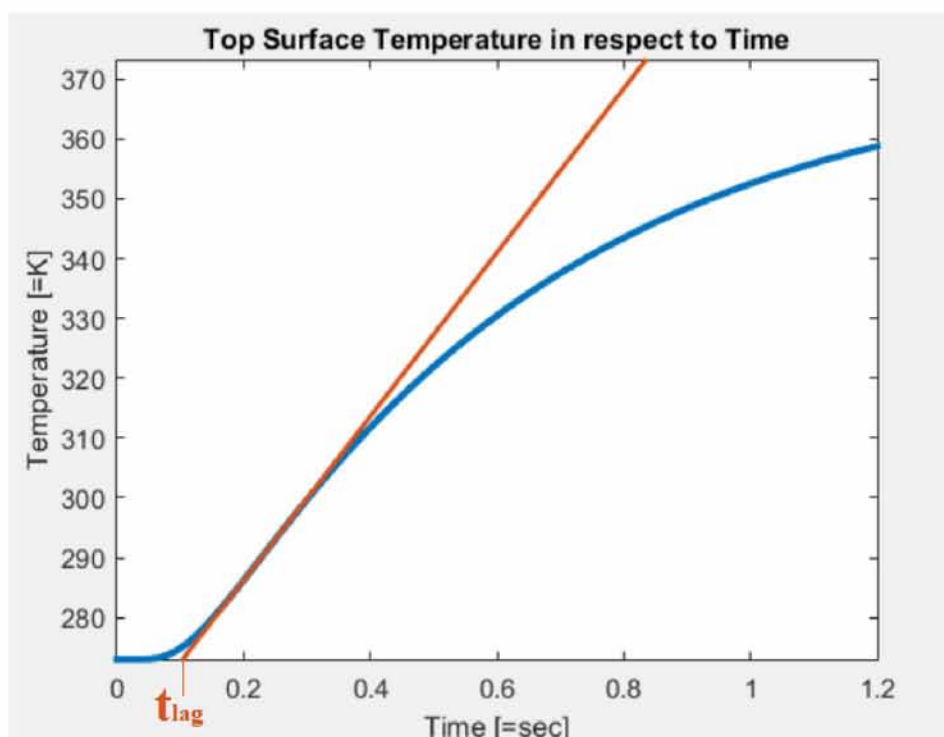
Σχ. 38 – Θερμοκρασιακή κατανομή στο εσωτερικό του κελιού για διάφορες χρονικές στιγμές ($\alpha\phi = 5$, $\sigma = 0.3$)

5.5. Υπολογισμός Time Lag

Έχοντας συλλέξει δεδομένα για την κατανομή της θερμοκρασίας από 140 διαφορετικές μικροδομές μπορούμε να αρχίσουμε να αναρωτιόμαστε πως μπορούμε να τα χειριστούμε για να αποκτήσουμε περισσότερες πληροφορίες για την θερμική απόκριση του υλικού, όπως αυτή εκφράζεται μέσω του *time lag*.

Το *time lag* είναι ο χρόνος που απαιτείται για τη θερμότητα προκειμένου να διαπεράσει το κελί από τη μια άκρη στην άλλη. Μπορεί να υπολογισθεί χρησιμοποιώντας διαφορικές ή ολοκληρωματικές τεχνικές που βασίζονται σε δεδομένα ρυθμών διαπερατότητας. Μια σημαντική πληροφορία που μπορούμε να πάρουμε μέσω του *time lag* ενός υλικού είναι ο ίδιος ο συντελεστής αγωγιμότητας του.

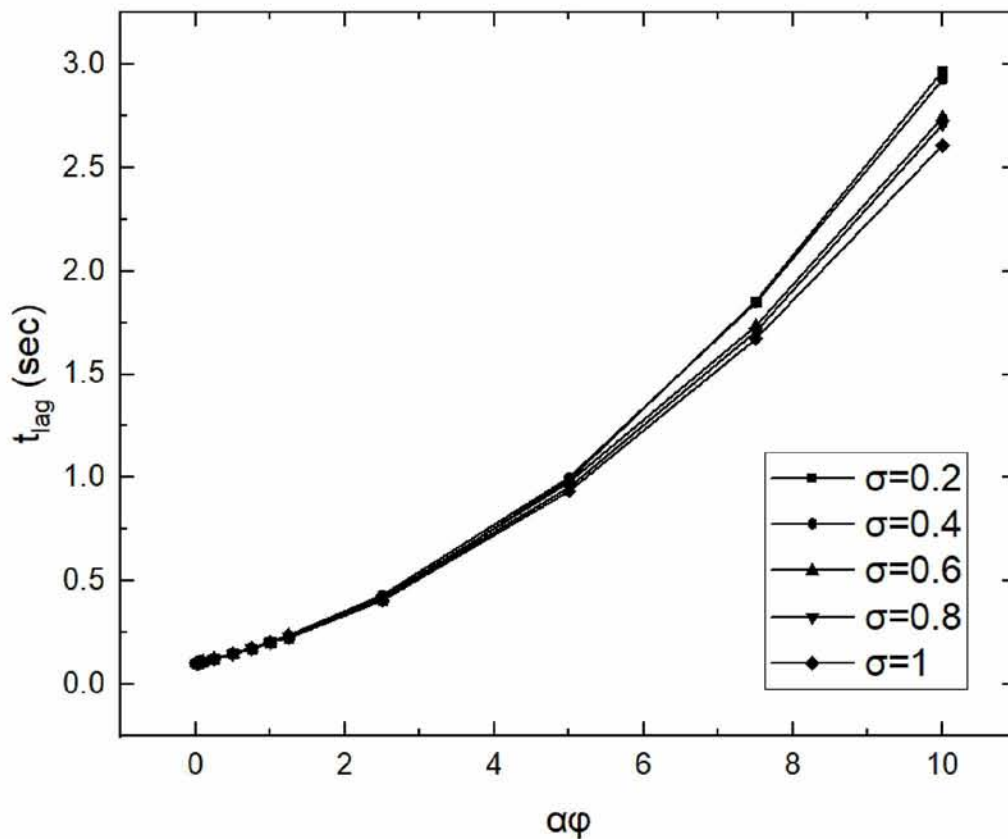
Πως όμως ορίζεται το *time lag* ενός υλικού; Το *time lag* ορίζεται στο σημείο εκείνο όπου η προέκταση της ευθείας του γραμμικού κομματιού της γραφικής παράστασης της θερμοκρασίας σε σχέση με το χρόνο τέμνει τον άξονα των χρόνων. Αυτό μπορεί να φανεί στο παρακάτω διάγραμμα:



Σχ. 39 – Υπολογισμός *time lag* μέσω διαγράμματος θερμοκρασίας - χρόνου

Ο υπολογισμός του *time lag* για καθεμία απ' τις 140 περιπτώσεις έγινε με τη χρήση του MATLAB όπου σχεδιάστηκε αλγόριθμος που να δέχεται σαν inputs τις κατανομές της θερμοκρασίας στην πάνω επιφάνεια και τις αντίστοιχες χρονικές παραμέτρους για κάθε περίπτωση μικροδομής, και σαν output δίνει την τιμή του *time lag* μαζί με το αντίστοιχο διάγραμμα. Αυτό το πρόγραμμα φαίνεται στο *Appendix E*.

Στο παρακάτω διάγραμμα φαίνονται τα *time lags* που προέκυψαν από τις μικροδομές με κατανομή φυλλιδίων $\sigma = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ και $\sigma = 1$ (uniform):



Σχ. 40 – Τα *time lags* που προέκυψαν για μερικές από τις περιπτώσεις που μελετήσαμε.

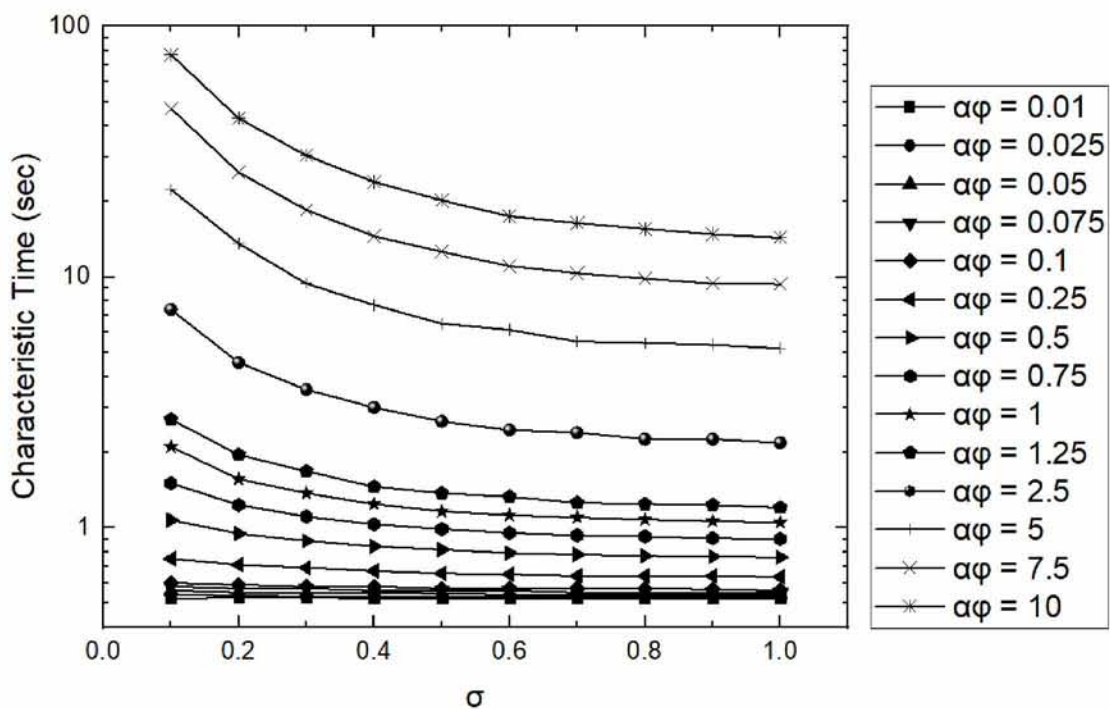
Όπως είναι φανερό, τα *time lags* δεν διαφέρουν πάρα πολύ από περίπτωση σε περίπτωση και δεν μπορεί να βγει κάποιο συμπέρασμα. Επομένως, θα χρειαστεί να καταφύγουμε στον υπολογισμό ενός άλλου χρόνου τον οποίο ονομάζουμε *χαρακτηριστικό χρόνο* και τον οποίο θα μελετήσουμε στην επόμενη ενότητα.

5.6. Χαρακτηριστικός Χρόνος

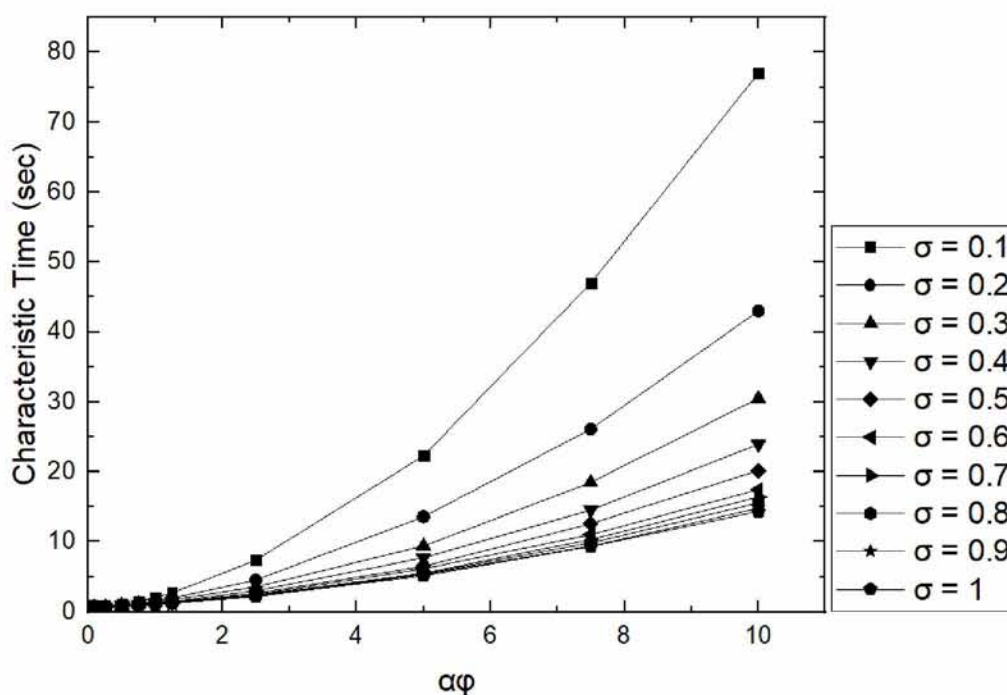
Ως χαρακτηριστικό χρόνο ορίσαμε τον χρόνο εκείνο όπου η θερμοκρασία της επάνω επιφάνειας έχει αυξηθεί κατά 50% της αρχικής διαφοράς θερμοκρασίας ανάμεσα στην κάτω και την πάνω επιφάνεια. Στην περίπτωση μας έχουμε ορίσει τη θερμοκρασία της κάτω επιφάνειας ίση με 373K και την αρχική θερμοκρασία της επάνω επιφάνειας ίση με 273K. Επομένως η διαφορά είναι 100K και ο χαρακτηριστικός χρόνος είναι ο χρόνος στον οποίο η επάνω επιφάνεια φτάνει τους $273 + \Delta T \times 50\% = 323\text{K}$.

Για να γίνει ο εντοπισμός του χαρακτηριστικού χρόνου ανάμεσα στα αποτελέσματα της αριθμητικής λύσης χρειάστηκε και πάλι να ανατρέξουμε στο MATLAB. Αυτό που κάνει αυτό το πρόγραμμα είναι να διαβάζει σαν inputs την κατανομή τις θερμοκρασίας της επάνω επιφάνειας και το t_{final} της κάθε μικροδομής. Από αυτά τα δεδομένα, εντοπίζει το σημείο εκείνο που η θερμοκρασία πλησιάζει όσο το δυνατόν πιο κοντά στο 50% του ΔT . Έπειτα, αποθηκεύει σαν output σε ένα φάκελο τον χρόνο στον οποίο παρουσιάζεται αυτή η θερμοκρασία, δηλαδή τον χαρακτηριστικό χρόνο της κάθε περίπτωσης. Ο κώδικας MATLAB παρουσιάζεται στο *Appendix F*.

Τα δεδομένα που προέκυψαν από τον υπολογισμό του Χαρακτηριστικού Χρόνου για κάθε μικροδομή ξεχωριστά φαίνονται στα παρακάτω διαγράμματα:



Σχ. 41 – Χαρακτηριστικοί Χρόνοι για σταθερό $\alpha\phi$ και μεταβλητό σ



Σχ. 42 – Χαρακτηριστικοί Χρόνοι για σταθερό σ και μεταβλητό $\alpha\phi$

Ο Χαρακτηριστικός Χρόνος μπορεί να μας δείξει το πόσο αργά ή γρήγορα θερμαίνεται ένα υλικό και από το παραπάνω διάγραμμα φαίνεται πως επηρεάζεται ταυτόχρονα και από τη συγκέντρωση των φυλλιδίων ($\alpha\phi$) και από την κατανομή τους (σ) μέσα στη μήτρα. Συγκεκριμένα καθώς η συγκέντρωση των φυλλιδίων ($\alpha\phi$) αυξάνεται, τόσο αυξάνεται και ο Χαρακτηριστικός Χρόνος, δηλαδή το υλικό θερμαίνεται πιο αργά και η θερμική του απόκριση είναι χαμηλή. Το αντίθετο ισχύει καθώς το $\alpha\phi$ μειώνεται. Ενδιαφέρον παρουσιάζει, επίσης, το ότι καθώς το σ αυξάνεται, δηλαδή καθώς το υλικό γίνεται όλο και πιο ομοιόμορφο, τόσο αυξάνεται και η θερμική του απόκριση άρα θερμαίνεται πιο γρήγορα κάτι τέτοιο όμως μπορεί να παρατηρηθεί για τιμές του $\alpha\phi > 2$. Για μικρές τιμές του $\alpha\phi$ φαίνεται πως η κατανομή σ δεν έχει μεγάλη επίδραση στον Χαρακτηριστικό Χρόνο. Ο κατάλληλος συνδυασμός της συγκέντρωσης των φυλλιδίων ($\alpha\phi$) και της κατανομής τους (σ) μέσα στη μήτρα μπορεί να προσδώσει ξεχωριστά θερμικά χαρακτηριστικά στο υλικό που ποικίλλουν από εφαρμογή σε εφαρμογή.

5.7. Υπολογισμός Θερμικής Αγωγιμότητας

Όπως είδαμε, ο Χαρακτηριστικός Χρόνος ενός υλικού μπορεί να μας δώσει ενδείξεις για τη θερμική του απόκριση. Αυτή η πληροφορία είναι σημαντική όταν δεν γνωρίζουμε εξ' αρχής τη θερμική αγωγιμότητα k ενός υλικού αφού, μέσω του Χαρακτηριστικού Χρόνου, μπορούμε να την υπολογίσουμε.

Ο τρόπος με τον οποίο μπορεί να πραγματοποιηθεί ένας τέτοιος υπολογισμός είναι χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις του θεωρητικού προβλήματος της μονοδιάστατης αγωγής θερμότητας μέσα από ένα τοίχωμα, όπως είδαμε στο κεφάλαιο 5.2. , δηλαδή τις εξισώσεις 5.8 και 5.3.δ:

$$\theta = \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{-\lambda_n^2 \tau} \cos(\lambda_n X) ,$$

$$\tau = Fo = \frac{at}{L^2} \quad \text{και} \quad \alpha = k/(\rho \cdot c_p)$$

όπου:

θ : η αδιάστατη θερμοκρασία

τ : ο αδιάστατος χρόνος (αριθμός Fourier)

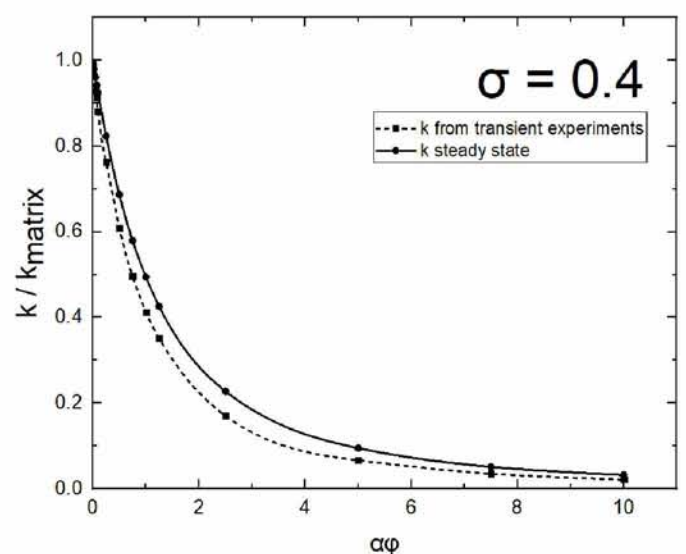
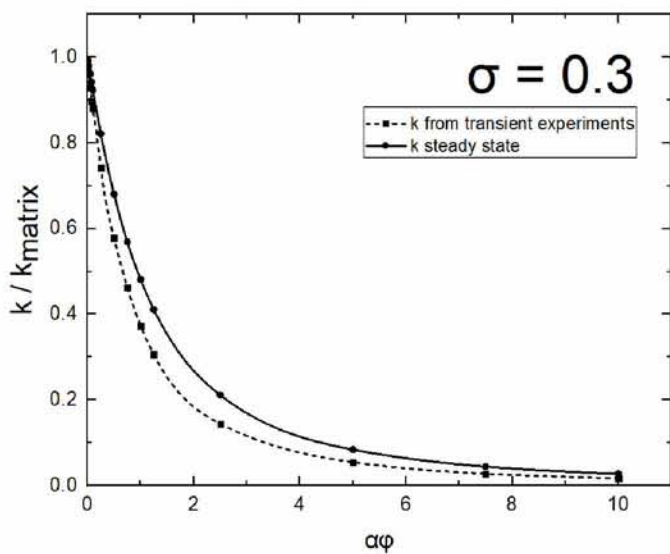
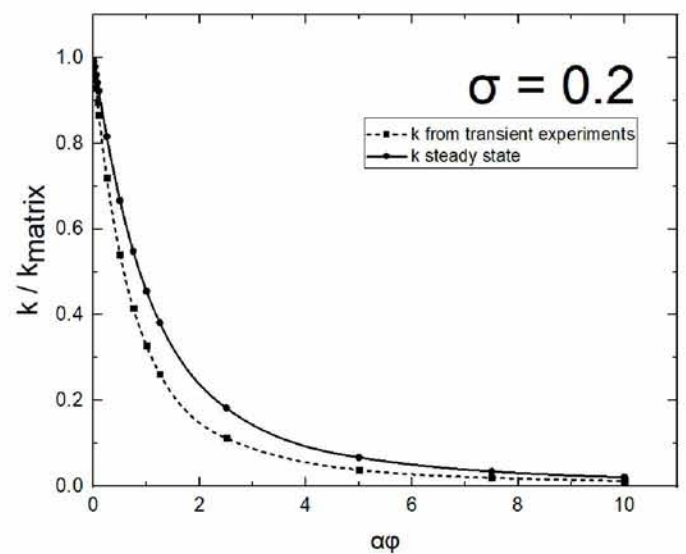
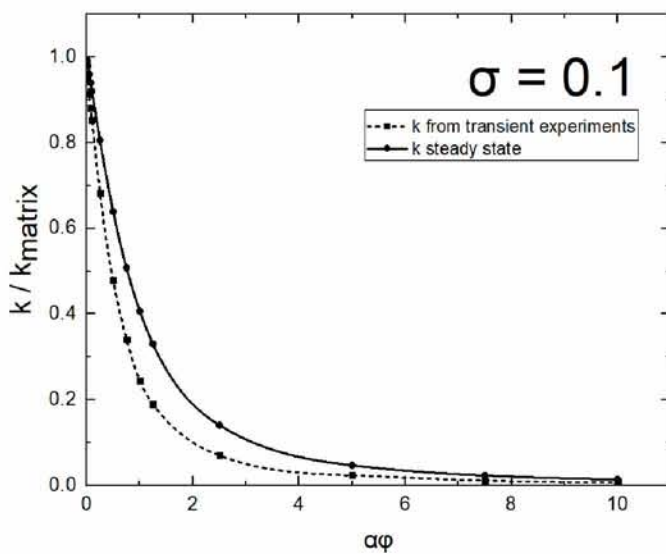
$$A_n = \frac{4 \sin \lambda_n}{2\lambda_n + \sin(2\lambda_n)} \quad \text{και}$$

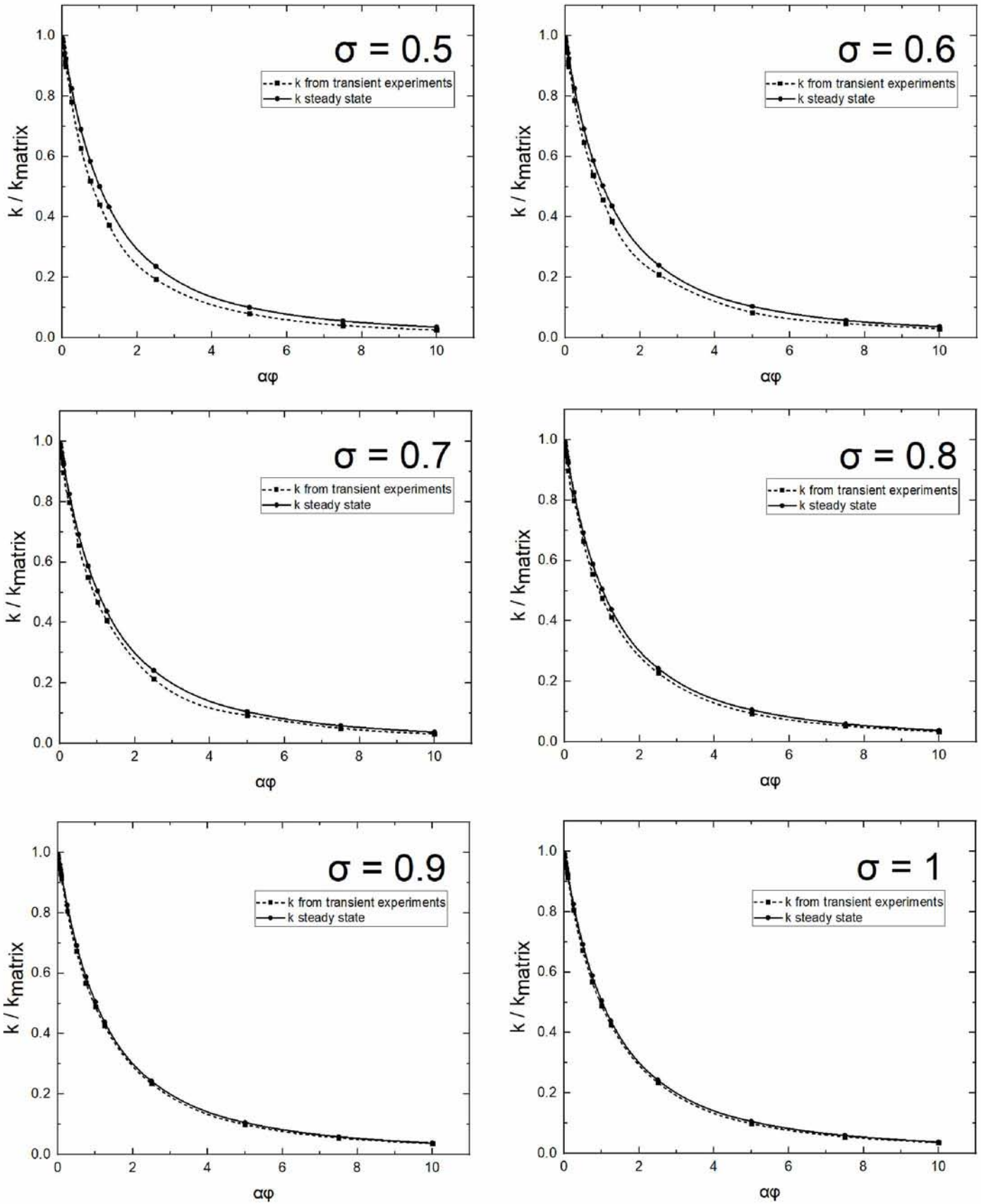
α : η θερμική διαχυτότητα

Στην περίπτωση που δε γνωρίζουμε τη θερμική αγωγιμότητα του υλικού αλλά γνωρίζουμε τη μεταβολή της θερμοκρασίας στο εσωτερικό του καθώς και τον Χαρακτηριστικό Χρόνο, χειριζόμαστε τις παραπάνω εξισώσεις, θέτοντας ως αδιάστατη θερμοκρασία την τιμή $\theta=0.5$. Αυτό το κάνουμε διότι ο Χαρακτηριστικός Χρόνος έχει ορισθεί σαν ο χρόνος στον οποίο η θερμοκρασία της επάνω επιφάνειας έχει αυξηθεί κατά 50% της αρχικής διαφοράς θερμοκρασίας ανάμεσα στην κάτω και την πάνω επιφάνεια. Επομένως μπορούμε να υπολογίσουμε τη θερμική αγωγιμότητα του υλικού ανάλογα με τον Χαρακτηριστικό Χρόνο του.

Εισάγαμε αυτές τις εξισώσεις στο MATLAB για να μπορέσουμε να υπολογίσουμε τη θερμική αγωγιμότητα της κάθε μικροδομής που προσομοιώσαμε στον OpenFOAM. Το πρόγραμμα παρουσιάζεται στο *Appendix F*.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στα παρακάτω διαγράμματα. Η τιμή στον κατακόρυφο άξονα αντιστοιχεί σε μια αδιάστατη θερμική αγωγιμότητα όπου k είναι η θερμική αγωγιμότητα του υλικού με φυλλίδια ενώ το k_{matrix} είναι η θερμική αγωγιμότητα της μήτρας, δηλαδή του υλικού χωρίς τα φυλλίδια.





Σχ. 43 – Σύγκριση θερμικών αγωγιμοτήτων της κάθε περίπτωσης σε χρονικά μεταβαλλόμενες και σταθερές συνθήκες.

Από τα διαγράμματα φαίνεται πως ο προσδιορισμός της θερμικής αγωγιμότητας k ενός υλικού με βαθμωτή μικροδομή δίνει λάθος αποτελέσματα εάν χρησιμοποιηθούν δεδομένα μεταβατικής μεταβολής θερμοκρασίας. Αυτό συμβαίνει διότι ο τρόπος υπολογισμού του k έγινε με βάση μια αναλυτική λύση που είναι κατάλληλη μόνο για ομοιογενή υλικά, δηλαδή για $\sigma=1$.

6. Σχολιασμός Αποτελεσμάτων

Για το κομμάτι της διάχυσης υπό σταθερές συνθήκες, μελετήσαμε τη συμπεριφορά της διάχυσης σε ένα υλικό ορθογωνικής διατομής για διάφορες κατανομές φυλλιδίων μέσα σε αυτό. Οι κατανομές που μελετήθηκαν είναι η κανονική κατανομή, η ημι-κανονική κατανομή, η γραμμική κατανομή και η τριγωνική κατανομή. Με βάση τα αποτελέσματα που πήραμε από τις προσομοιώσεις για το BIF και το Deff μπορούμε να εξάγουμε το συμπέρασμα ότι σε όλες τις κατανομές η αύξηση του (αφ) των φυλλιδίων υπό σταθερό σ δυσχεραίνει τη διάχυση. Επιπλέον για σταθερό αφ και μεταβαλλόμενο σ , όπου αυτό είναι δυνατόν, η μείωση αυτού πάλι δυσχεραίνει τη διάχυση. Τέλος, η ημι-κανονική κατανομή για $\sigma < 0.25$ αποδεικνύεται ότι δίνει καλύτερα αποτελέσματα από τις υπόλοιπες κατανομές, η κανονική κατανομή για $\sigma < 0.15$ δίνει καλύτερα αποτελέσματα από την τριγωνική και τη γραμμική κατανομή, ενώ για όλες τις υπόλοιπες περιπτώσεις οι δύο τελευταίες κατανομές δίνουν καλύτερα αποτελέσματα στην αντίσταση κατά της διάχυσης.

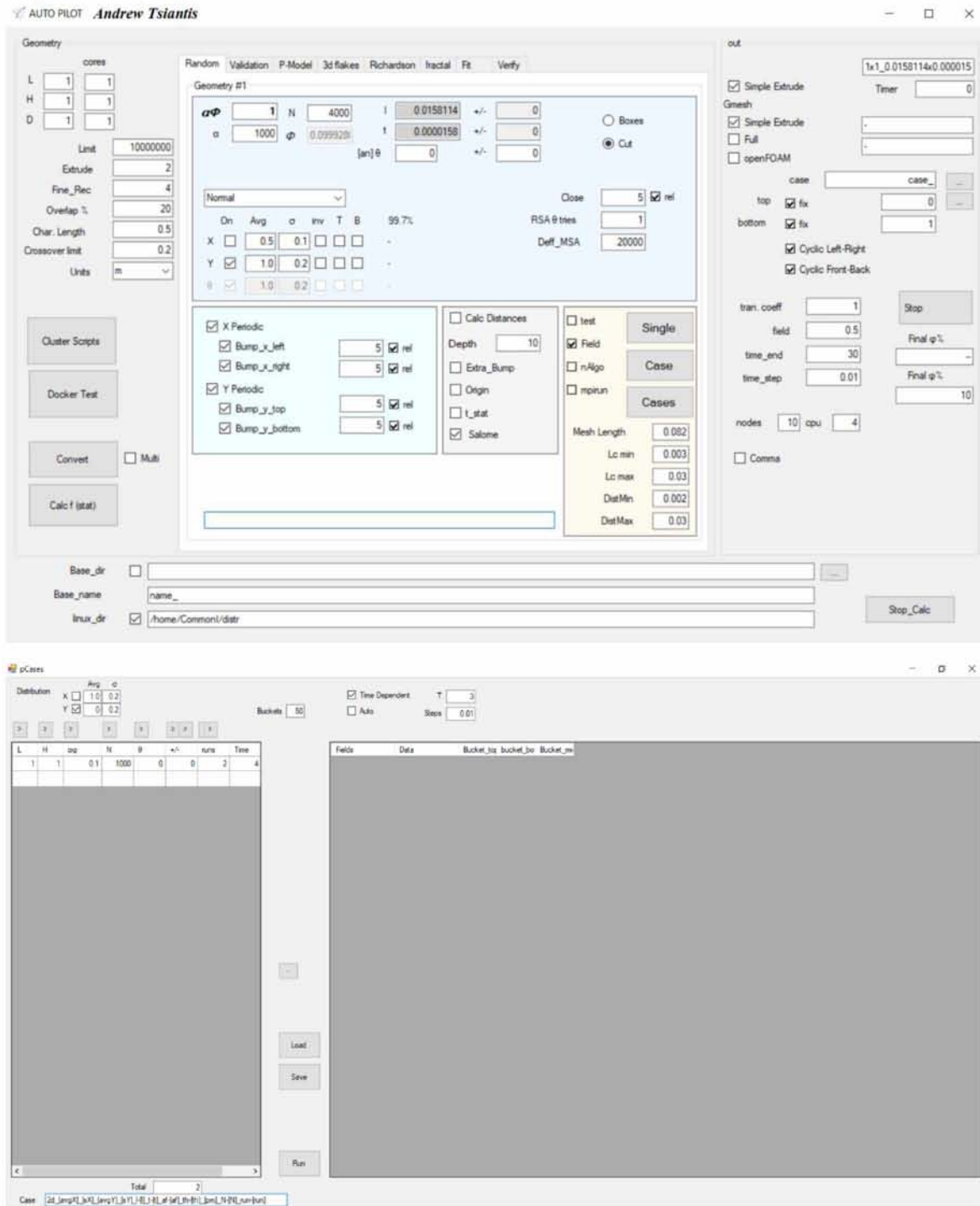
Όσον αφορά το κομμάτι της μεταφοράς θερμότητας σε χρονικά μεταβαλλόμενες συνθήκες τα αποτελέσματα μας δείχνουν πως, για να κρίνουμε ποια δομή δυσχεραίνει ή διευκολύνει τη διάχυση θερμότητας μέσα στο κελί, δεν μπορούμε να βασιστούμε στον χρόνο Time Lag και καταφεύγουμε στον Χαρακτηριστικό Χρόνο. Από εκεί τα συμπεράσματα που διεξάγουμε είναι πως η αύξηση του (αφ) των φυλλιδίων μειώνει τη θερμική απόκριση του υλικού ενώ όσο πιο ομοιόμορφο γίνεται (αύξηση του σ) τόσο η θερμική του απόκριση αυξάνεται. Επιπλέον, για μικρές τιμές του αφ φαίνεται πως η κατανομή σ δεν έχει μεγάλη επίδραση στον Χαρακτηριστικό Χρόνο.

Τέλος, όσον αφορά τον υπολογισμό της θερμικής αγωγιμότητας του υλικού τα αποτελέσματα μας έδειξαν πως δεν μπορούμε να βασιστούμε στον υπολογισμό της από δεδομένα μεταβατικής μεταβολής θερμοκρασίας. Τα δεδομένα αυτά δίνουν σωστά αποτελέσματα μόνο σε περιπτώσεις που το σ ισούται με μονάδα, δηλαδή όταν το υλικό μας είναι ομοιογενές.

Appendices

Appendix A – AutoPilot Tsiantis

Το εργαλείο *AutoPilot* που δημιουργήθηκε από τον κ. Τσιαντή στα πλαίσια της διπλωματικής του εργασίας.



Σχ. 44 – Graphical User Interface (GUI) του προγράμματος AutoPilot

Πιο συγκεκριμένα, το πρόγραμμα AutoPilot, μπορεί να:

- 1) Παράγει αρχεία πλεγμάτων για το Salome και το GMSH
- 2) Παράγει τα απαιτούμενα scripts για τον υπολογισμό πλεγμάτων από το Salome στο περιβάλλον του cluster του εργαστηρίου
- 3) Παράγει τα απαιτούμενα scripts για τη μετατροπή των πλεγμάτων από το βοηθητικό πρόγραμμα του OpenFOAM ideasUnvToFoam
- 4) Παράγει τα αρχεία των αρχικών και συνοριακών συνθηκών για τον OpenFOAM
- 5) Παράγει τα απαιτούμενα αρχεία για την εκτέλεση των υπολογισμών από το cluster
- 6) Παράγει τα απαιτούμενα αρχεία και scripts που περιέχουν τις χρονικές παραμέτρους που θα χρειαστούμε ανάλογα με την περίπτωση μικροδομής
- 7) Παράγει τα απαιτούμενα αρχεία μακροεντολών για τον υπολογισμό των μεταβλητών πεδίου από το ParaView
- 8) Διαβάζει τα παραγόμενα αρχεία από το ParaView Και τα εξάγει για να γίνει χρήση τους από το Microsoft Excel ή από το OriginLab

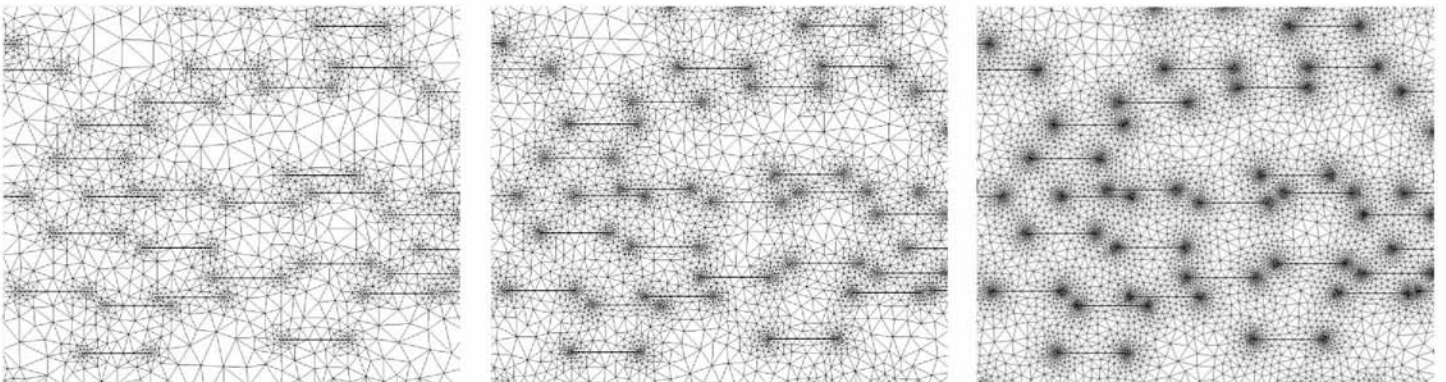
Appendix B – Χωρική Σύγκλιση Πλέγματος (Παρεμβολή Richardson)

Για να προσδιοριστεί η ακρίβεια σε μία προσομοίωση θα πρέπει να ελέγξουμε τη χωρική της σύγκλιση. Ο έλεγχος αυτός είναι μια απλή μέθοδος αλλά ταυτόχρονα και ένα ουσιαστικό βήμα ώστε να εξαλείψουμε τα σφάλματα διακριτοποίησης. Σύμφωνα με την παρεμβολή του Richardson μας επιτρέπει να εξάγουμε την υψηλότερη τιμή μίας συνάρτησης στην ιδανική περίπτωση όπου θα υπήρχε μηδενική απόσταση πλέγματος (άπειρα πυκνό πλέγμα). Αυτό επιτυγχάνεται δημιουργώντας προσομοιώσεις κατά τις οποίες χρησιμοποιούμε προοδευτικά πιο πυκνά πλέγματα. Το πλεονέκτημα αυτής της μεθόδου είναι ότι με τη χρήση πιο αραιών πλεγμάτων και συνεπώς λιγότερης υπολογιστικής ισχύς μπορούμε να εξάγουμε την οριακή τιμή $f_h = 0$.

Η μέθοδος λοιπόν περιλαμβάνει την εκτέλεση δύο ή και περισσότερων προσομοιώσεων με πιο πυκνά πλέγματα. Όσο το πλέγμα γίνεται πιο εκλεπτυσμένο, δηλαδή τα κελία του πλέγματος γίνονται μικρότερα και τα ίδια τα κελία περισσότερα σε αριθμό, τα χωρικά σφάλματα διακριτοποίησης μειώνονται και συνεπώς θα πρέπει να προσεγγίζει ασυμπτωματικά στο όριο της μηδενικής απόστασης πλέγματος. Η σειρά σύγκλισης για τα τρία επίπεδα απόστασης πλέγματος ορίζεται ως:

$$p = \ln\left(\frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1}\right) / \ln(r) \quad (B1)$$

Όπου r είναι η αναλογία πλεγμάτων $r = h_2/h_1$ και f_1, f_2 και f_3 είναι οι τιμές της συνάρτησης που θέλουμε να μελετήσουμε. Στην προκειμένη περίπτωση είναι το D_{eff} . Στις εικόνες παρακάτω φαίνονται τα τρία πλέγματα, αραιό, μεσαίο και πυκνό αντίστοιχα:



Σχ. 45 – Ενδεικτικό αραιό, μεσαίο και πυκνό πλέγμα αντίστοιχα

Χρησιμοποιώντας λοιπόν την εξίσωση (B1) μπορούμε να πάρουμε μία εκτίμηση της τιμής της συνάρτησης f στο σημείο όπου το πλέγμα μας θα έχει μηδενική απόσταση, σύμφωνα με τον παρακάτω τύπο:

$$f_{h=0} \cong f_1 + \frac{f_1 - f_2}{r^p - 1} \quad (\text{B2})$$

Η ποιότητα της παραπάνω εκτίμησης βασίζεται στον υπολογισμό του δείκτη σύγκλισης πλέγματος (GCI).

Ο δείκτης GCI για το πυκνό πλέγμα ορίζεται ως εξής:

$$GCI_{fine} = \frac{F_s |e|}{r^p - 1} \quad (\text{B3})$$

Όπου F_s είναι ένας παράγοντας ασφαλείας που παίρνει τις τιμές 3 ή 1.25 για σύγκριση δύο ή τριών πλεγμάτων αντίστοιχα. Ο δείκτης GCI για το πιο αραιό πλέγμα δίνεται από τον τύπο:

$$GCI_{coarse} = \frac{r^p F_s |e|}{r^p - 1} = r^p GCI_{1.2} \quad (\text{B4})$$

Αν, λοιπόν, η αναλογία του δείκτη GCI για το πυκνό και το αραιό πλέγμα είναι κοντά στη μονάδα ($\frac{GCI_{2.3}}{r^p \times GCI_{1.2}} \cong 1$), οι υπολογισμοί που έγιναν για την εύρεση του $f_{h=0}$ έχουν πραγματοποιηθεί στην περιοχή ασυμπτωτικού εύρους σύγκλισης του προβλήματος μας και συνεπώς η τιμή του $f_{h=0}$ είναι αξιόπιστη.

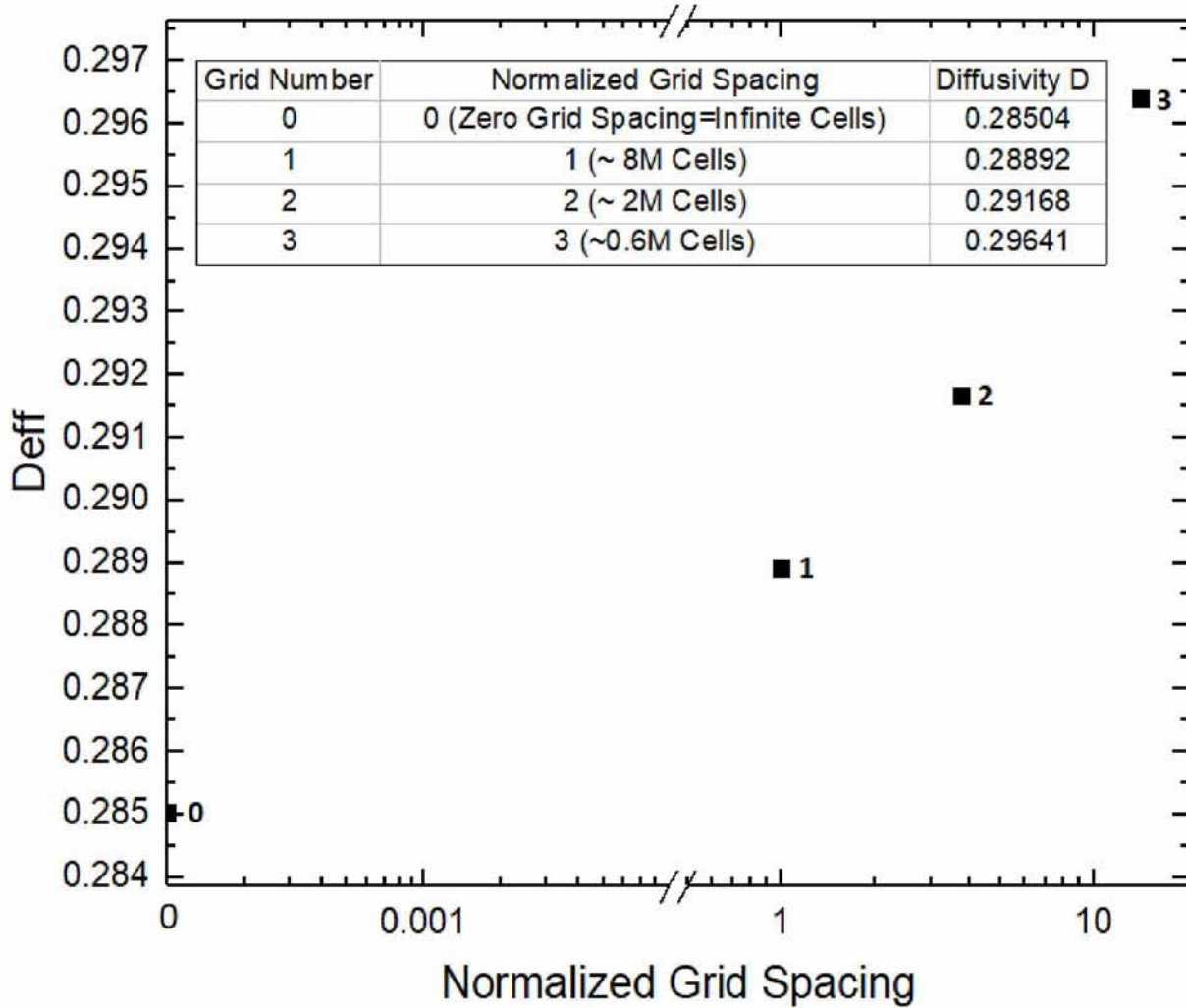
Για να γίνουν τα παραπάνω πλήρως κατανοητά θα παραθέσουμε ένα παράδειγμα. Χρησιμοποιούμε την περίπτωση με $N=4000$ και $\alpha\phi=1$, για την οποία δημιουργήθηκαν στο σύνολο τρία πλέγματα με προοδευτικά πιο αραιό πλέγμα.

Σύμφωνα με την εξίσωση (B1) η σειρά σύγκλισης βρέθηκε

$$p = \ln\left(\frac{0.29641-0.29168}{0.29168-0.28892}\right) / \ln(3.75) = 0.408 \quad \text{και} \quad \text{ο} \quad \text{συντελεστής} \quad \text{διάχυσης}$$

υπολογίστηκε από την εξίσωση (B2) $D_{h=0} = 0.285$. Λόγω του ότι χρησιμοποιήσαμε 3 επίπεδα πυκνότητας του πλέγματος χρησιμοποιούμε συντελεστή $F_s = 1.25$. Ο δείκτης GCI υπολογίζεται για τα πλέγματα 1-2 και για τα 2-3 χρησιμοποιώντας της εξισώσεις (B3) και

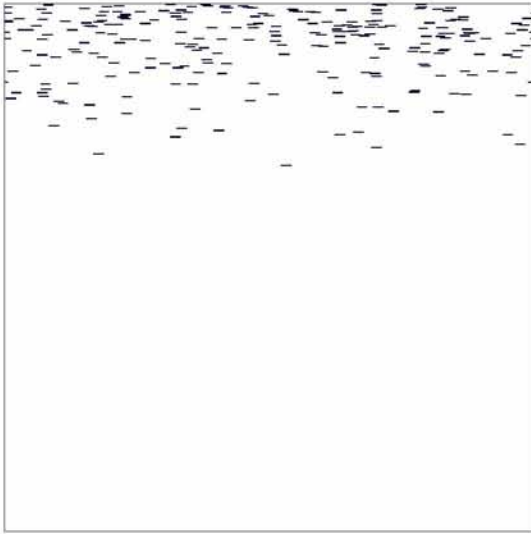
(B4) και μας δίνουν $GCI_{1,2} = 0.0167$ και $GCI_{2,3} = 0.0287$. Συνεπώς η αναλογία του ασυμπτωτικού εύρους σύγκλισης είναι $\frac{0.0287}{2^{0.77717} \times 0.0167} = 1.003 \cong 1$, το οποίο μας δείχνει ότι είμαστε στην περιοχή ασυμπτωτικής σύγκλισης.



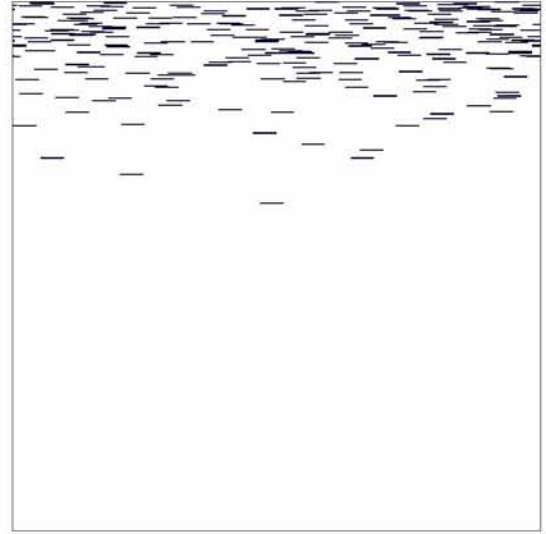
Σχ. 46 – Αριθμητικές τιμές για την ενεργό διαχυτότητα, η οποία έχει εξαχθεί από την ίδια γεωμετρία αλλά με μεταβλητό διάστημα πλέγματος. Όσο το διάστημα πλέγματος μειώνεται ο αριθμός των κελιών αυξάνεται. Το πλέγμα είναι πιο εκλεπτυσμένο κινούμενοι από δεξιά προς τα αριστερά. Το διάγραμμα αναφέρεται στην περίπτωση $\sigma = 0.05$ και $\alpha\phi = 1$.

Appendix C - Περιπτώσεις Μικροδομών

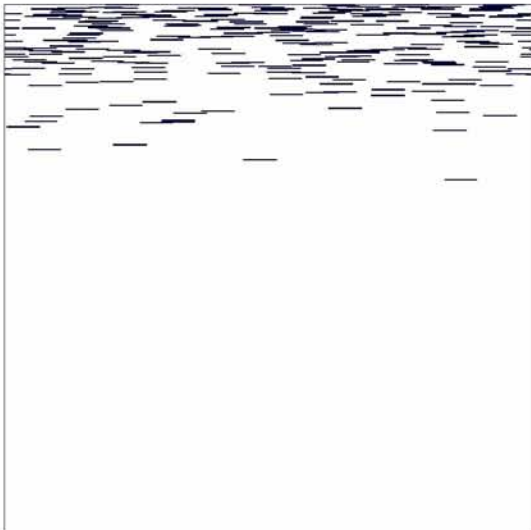
ΗΜΙ-ΚΑΝΟΝΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ (N=250)



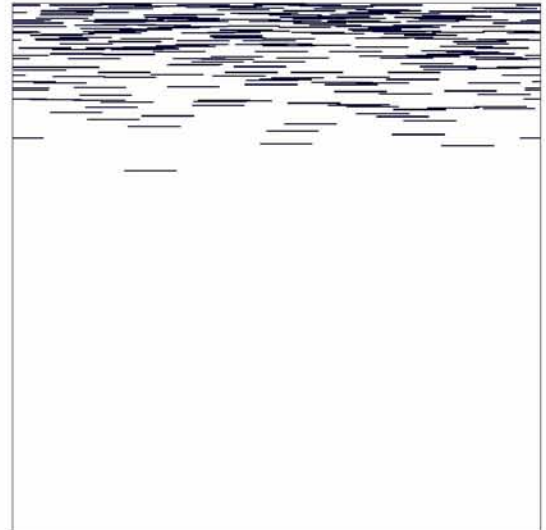
$\sigma=0.1 \alpha\phi=0.1$



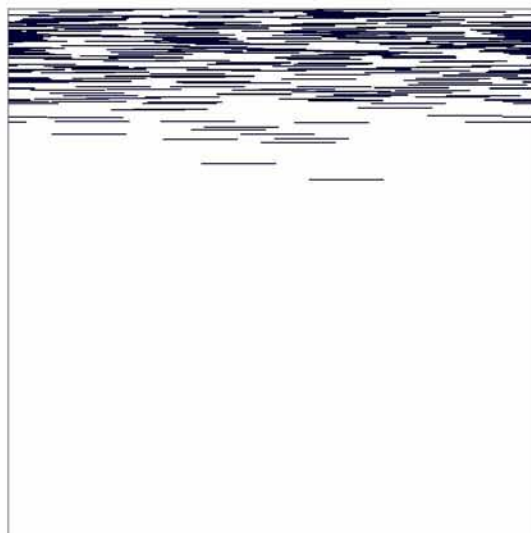
$\sigma=0.1 \alpha\phi=0.5$



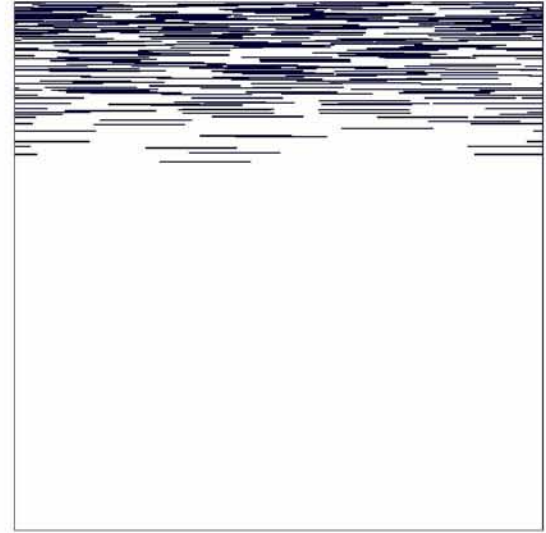
$\sigma=0.1 \alpha\phi=1$



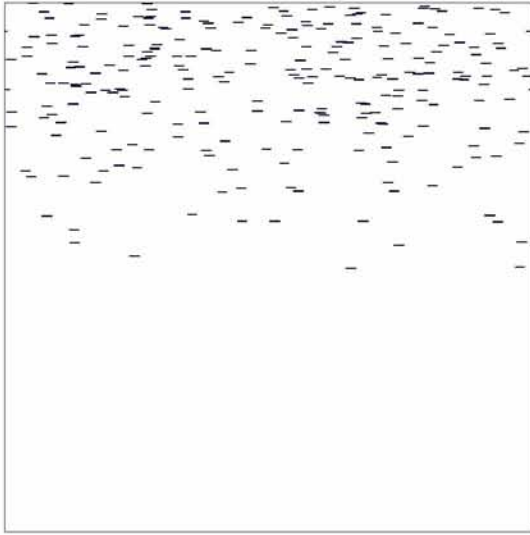
$\sigma=0.1 \alpha\phi=2.5$



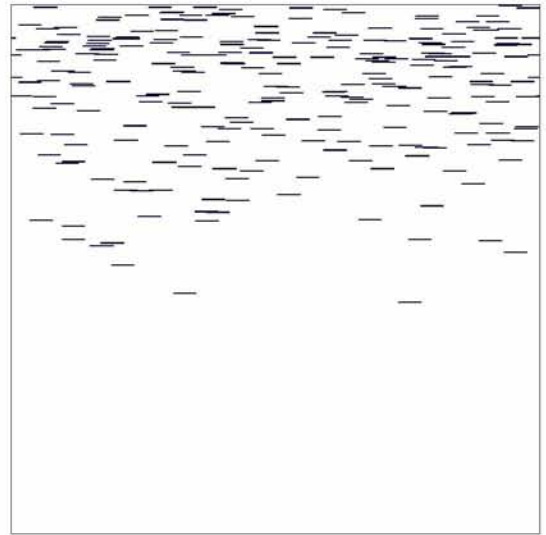
$\sigma=0.1 \alpha\phi=5$



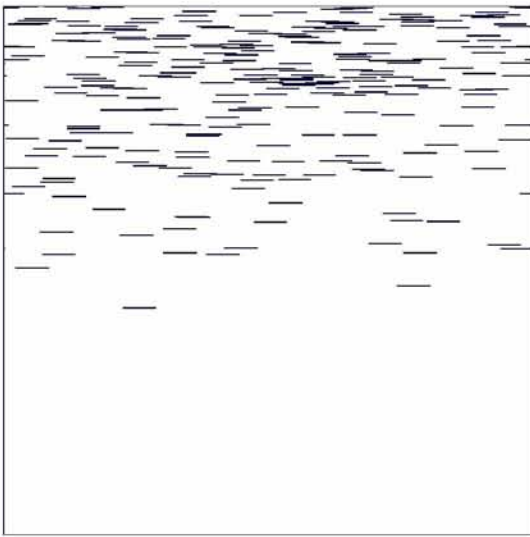
$\sigma=0.1 \alpha\phi=7.5$



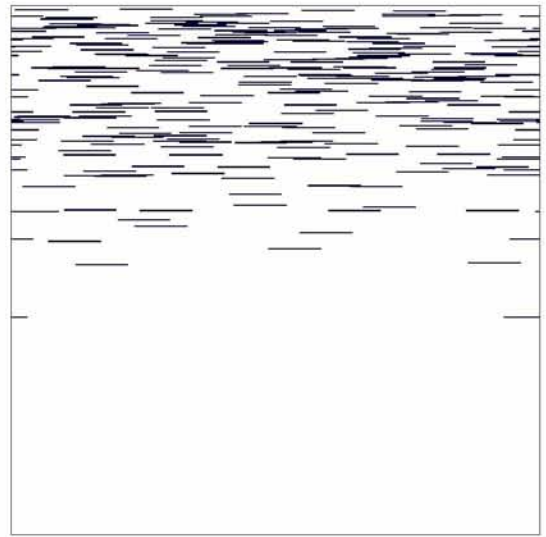
$\sigma=0.2 \quad \alpha\varphi=0.1$



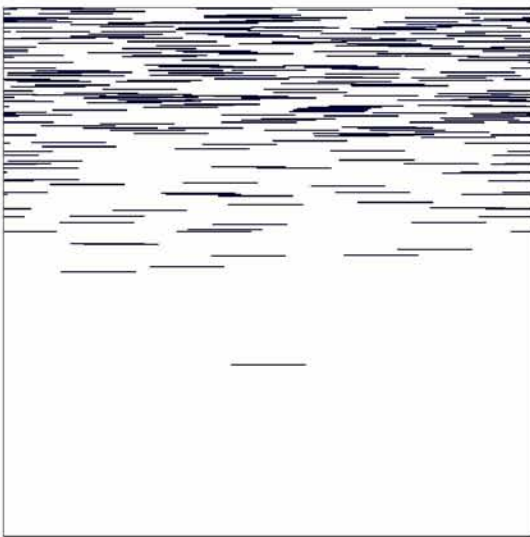
$\sigma=0.2 \quad \alpha\varphi=0.5$



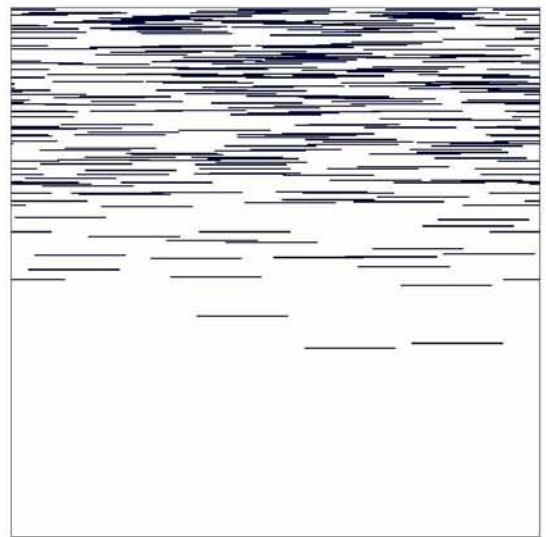
$\sigma=0.2 \quad \alpha\varphi=1$



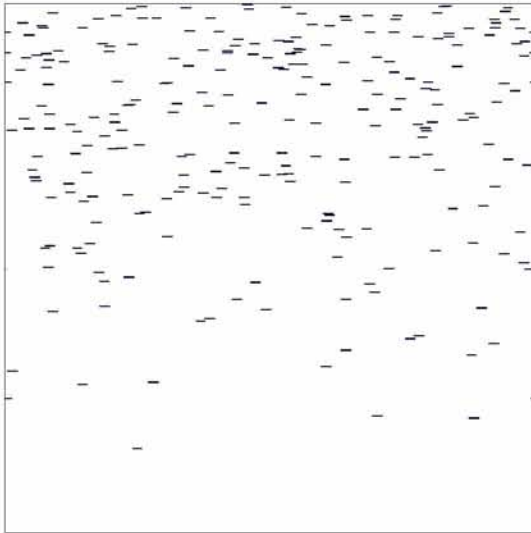
$\sigma=0.2 \quad \alpha\varphi=2.5$



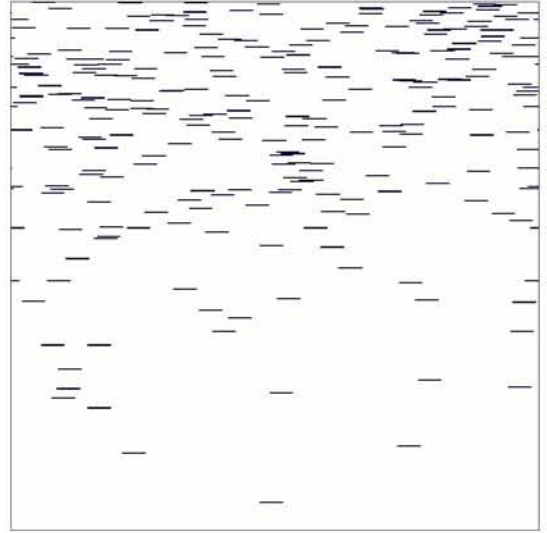
$\sigma=0.2 \quad \alpha\varphi=5$



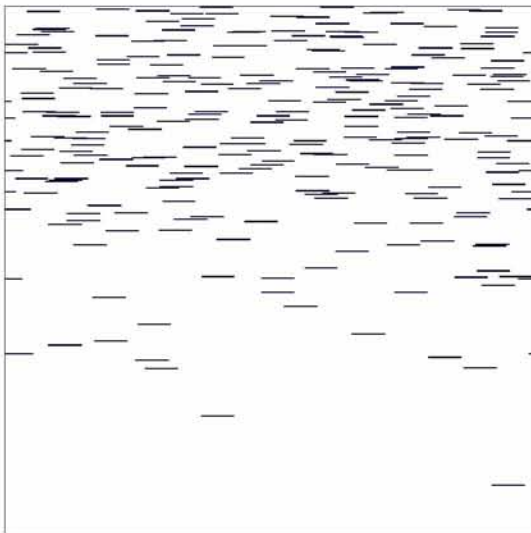
$\sigma=0.2 \quad \alpha\varphi=7.5$



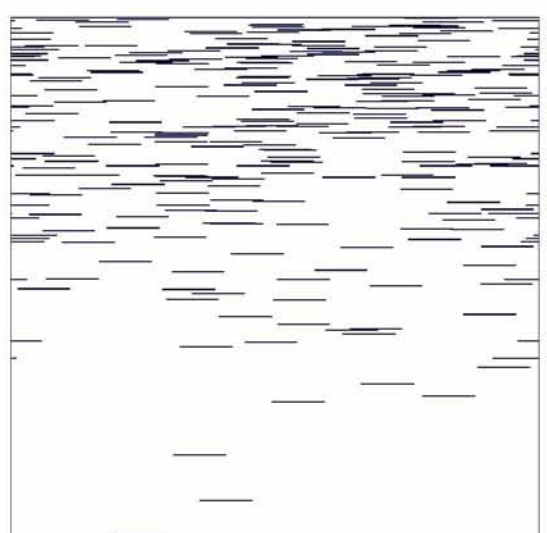
$\sigma=0.3 \quad \alpha\varphi=0.1$



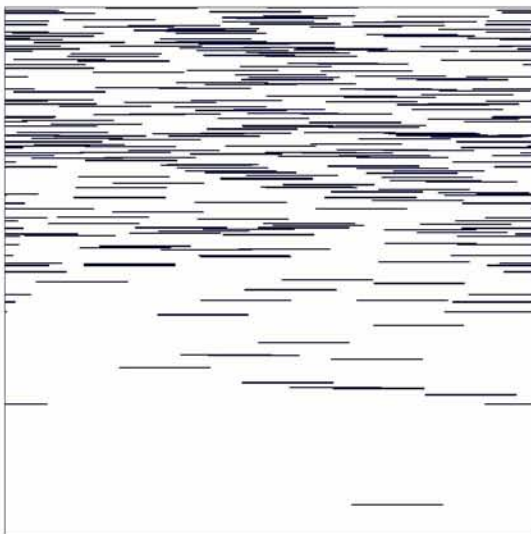
$\sigma=0.3 \quad \alpha\varphi=0.5$



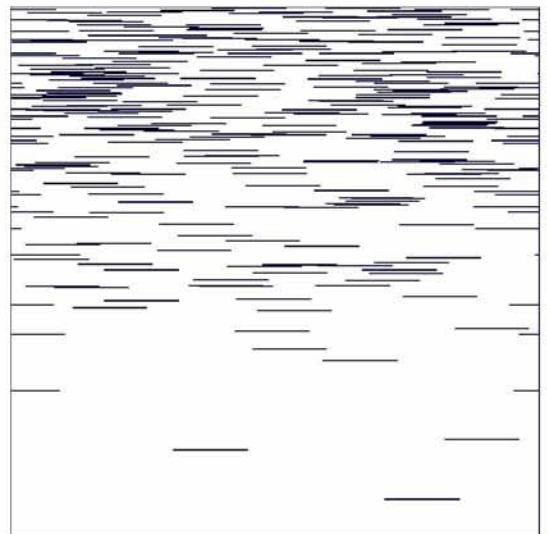
$\sigma=0.3 \quad \alpha\varphi=1$



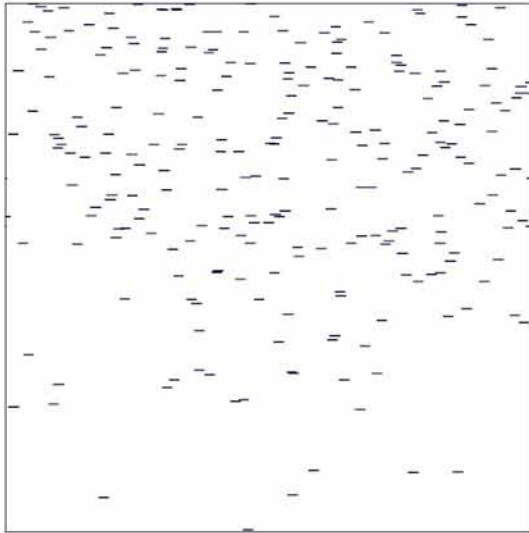
$\sigma=0.3 \quad \alpha\varphi=2.5$



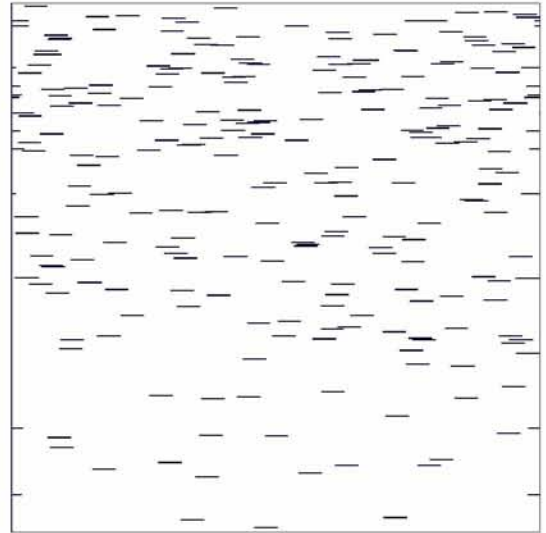
$\sigma=0.3 \quad \alpha\varphi=5$



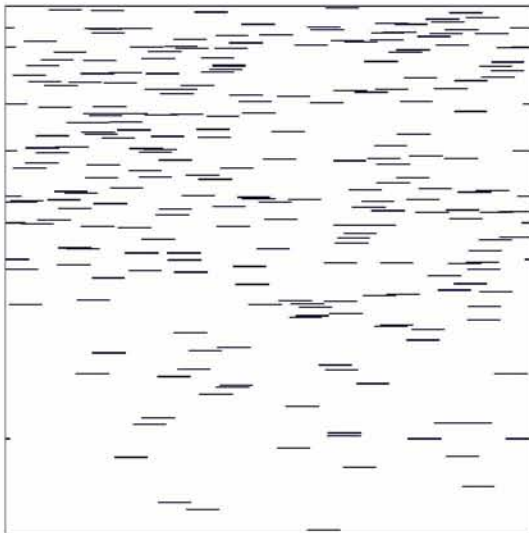
$\sigma=0.3 \quad \alpha\varphi=7.5$



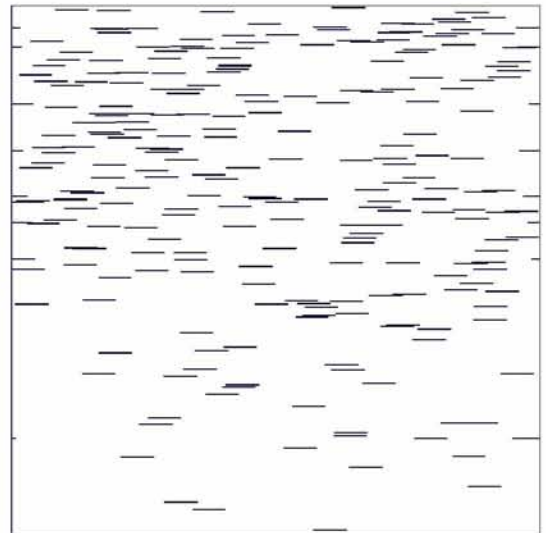
$\sigma=0.4 \quad \alpha\varphi=0.1$



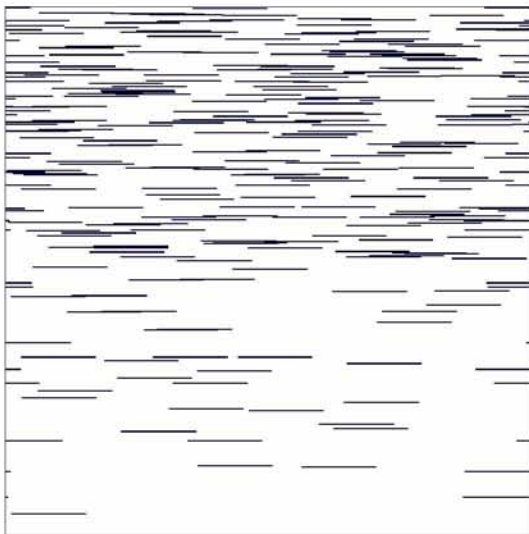
$\sigma=0.4 \quad \alpha\varphi=0.5$



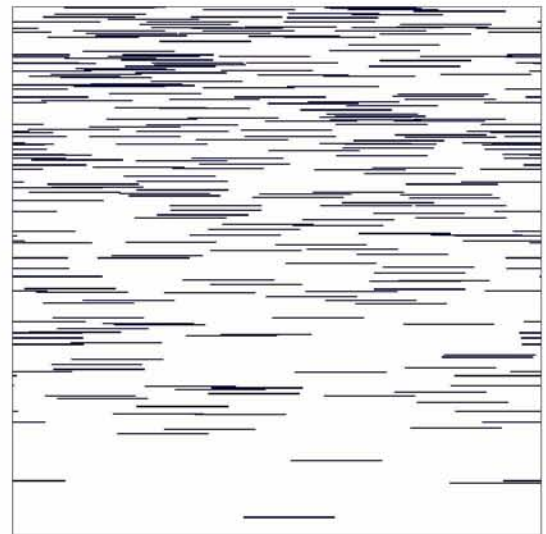
$\sigma=0.4 \quad \alpha\varphi=1$



$\sigma=0.4 \quad \alpha\varphi=2.5$

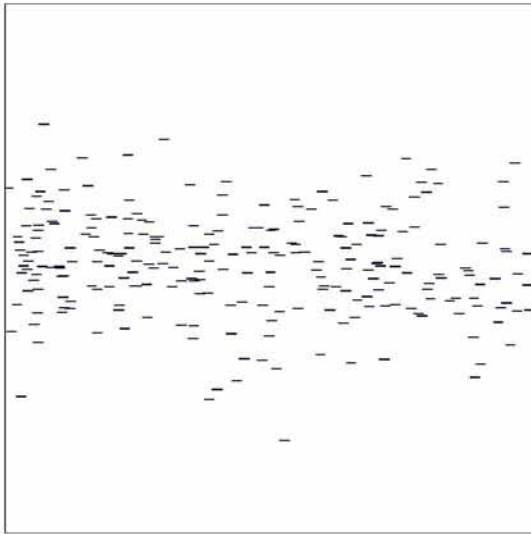


$\sigma=0.4 \quad \alpha\varphi=5$

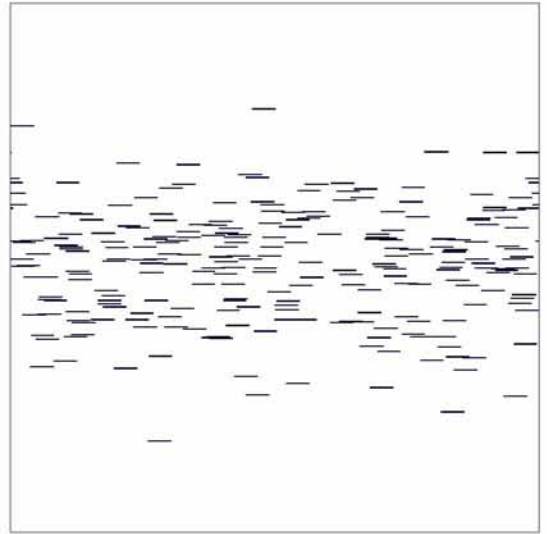


$\sigma=0.4 \quad \alpha\varphi=7.5$

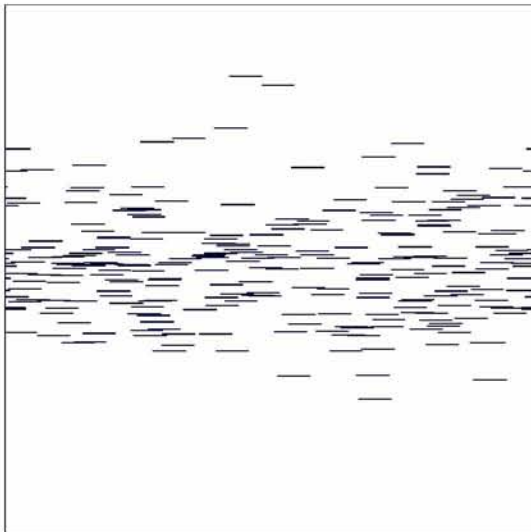
KANONIKH KATANOMH (N=250)



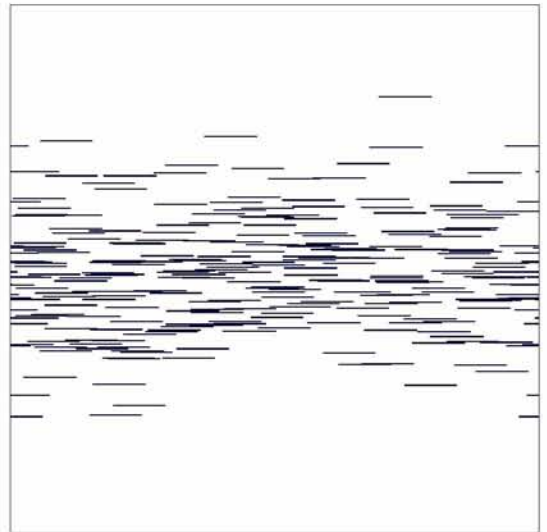
$\sigma=0.1 \alpha\varphi=0.1$



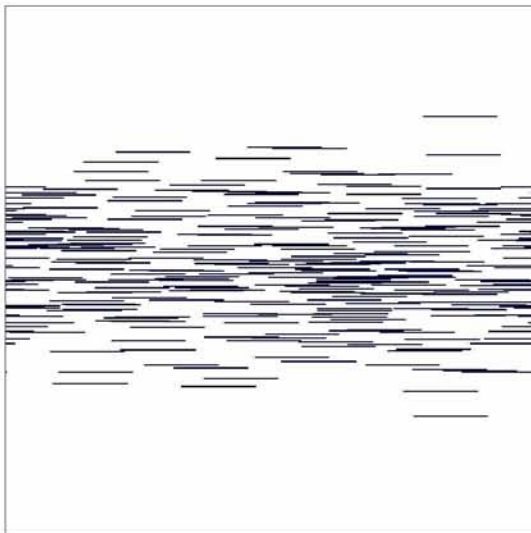
$\sigma=0.1 \alpha\varphi=0.5$



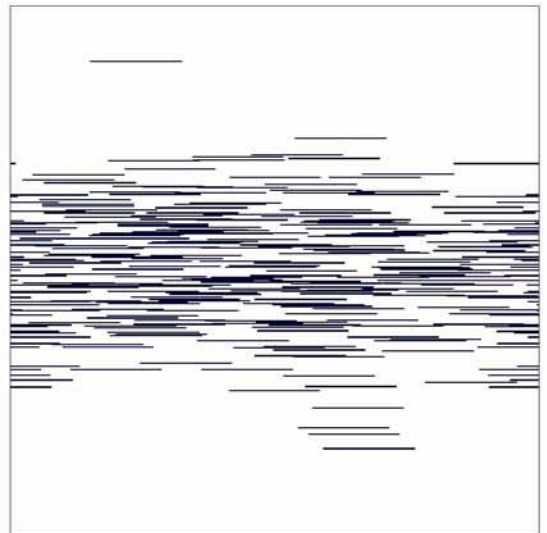
$\sigma=0.1 \alpha\varphi=1$



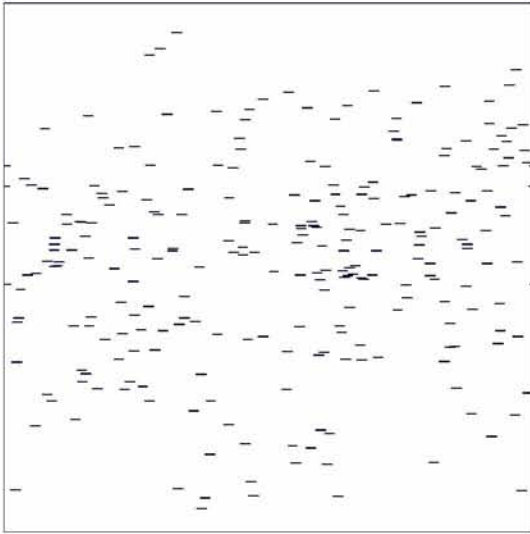
$\sigma=0.1 \alpha\varphi=2.5$



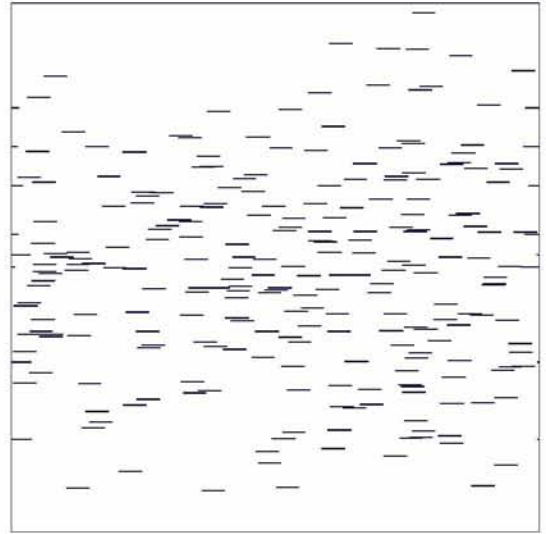
$\sigma=0.1 \alpha\varphi=5$



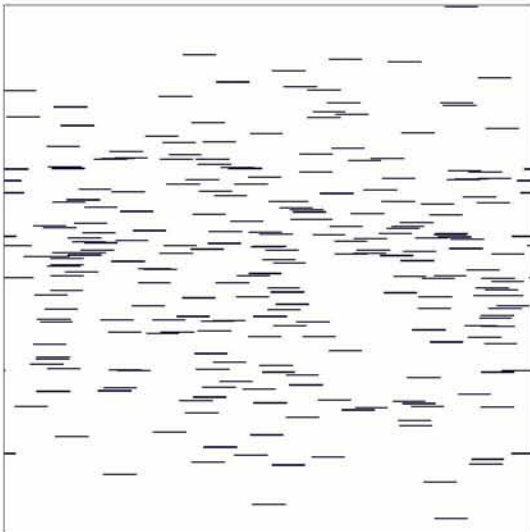
$\sigma=0.1 \alpha\varphi=7.5$



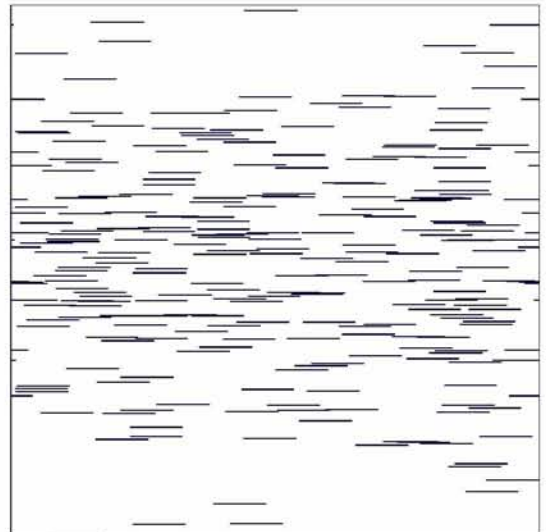
$\sigma=0.2 \ \alpha\varphi=0.1$



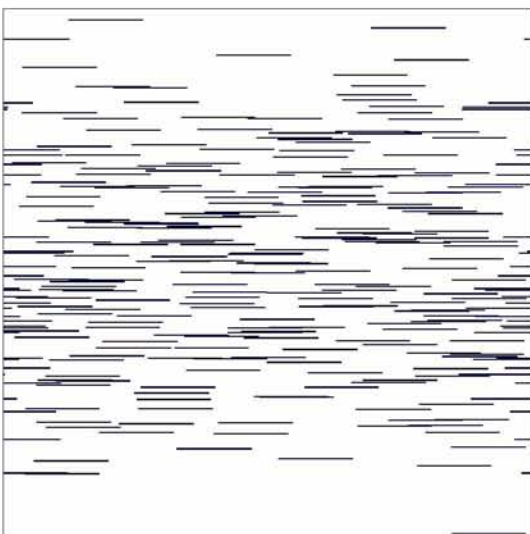
$\sigma=0.2 \ \alpha\varphi=0.5$



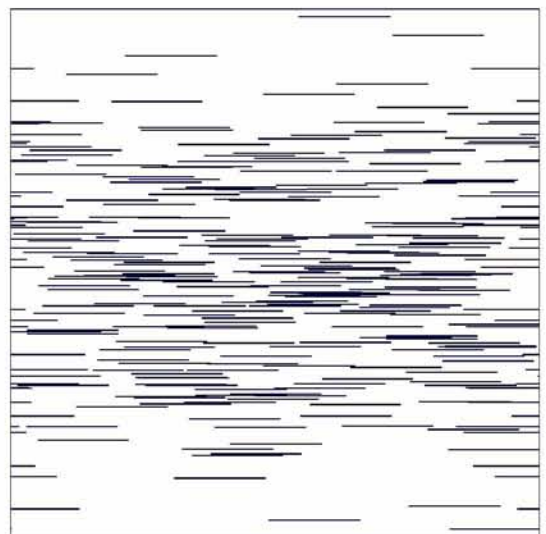
$\sigma=0.2 \ \alpha\varphi=1$



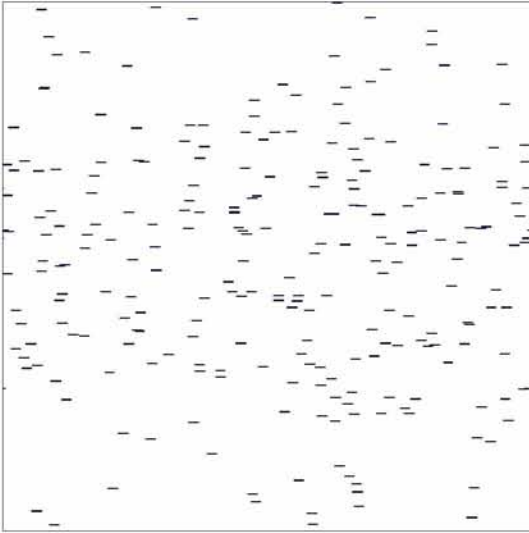
$\sigma=0.2 \ \alpha\varphi=2.5$



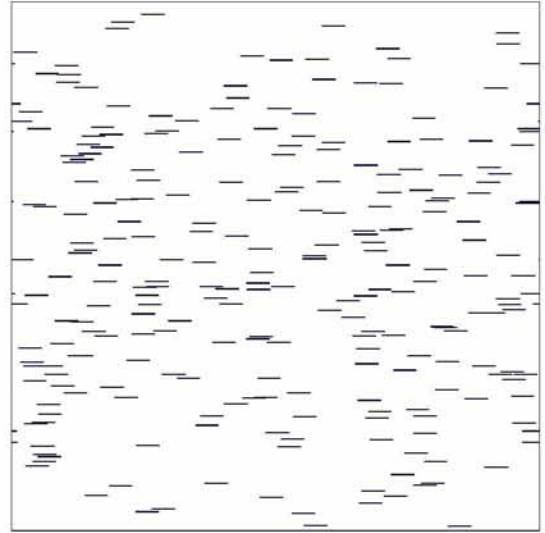
$\sigma=0.2 \ \alpha\varphi=5$



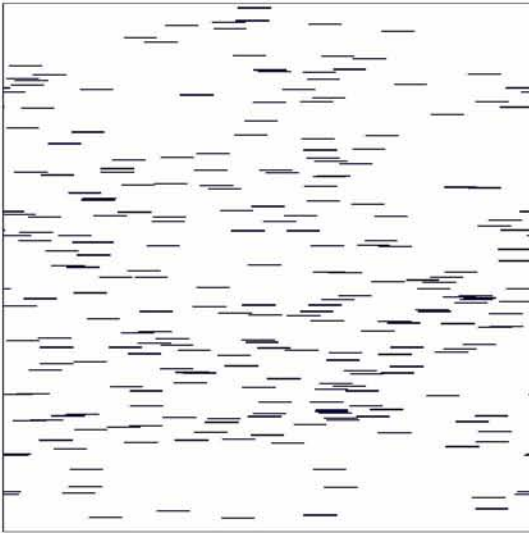
$\sigma=0.2 \ \alpha\varphi=7.5$



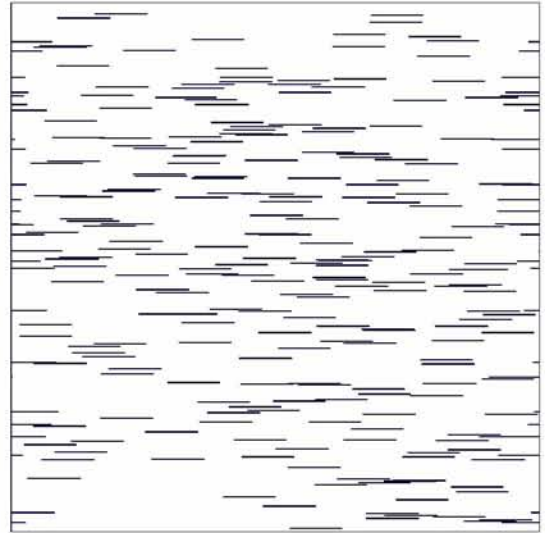
$\sigma=0.3 \alpha\phi=0.1$



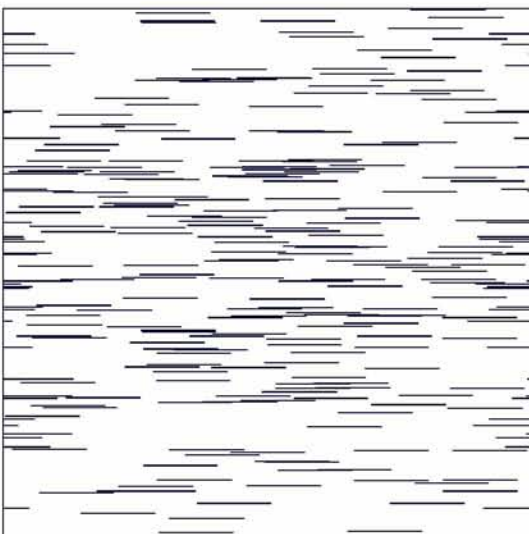
$\sigma=0.3 \alpha\phi=0.5$



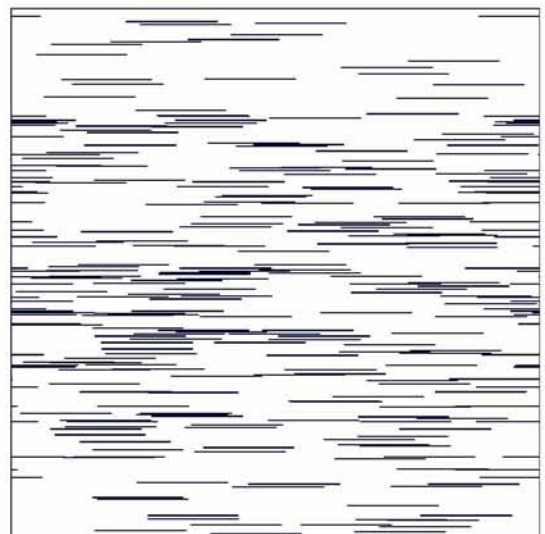
$\sigma=0.3 \alpha\phi=1$



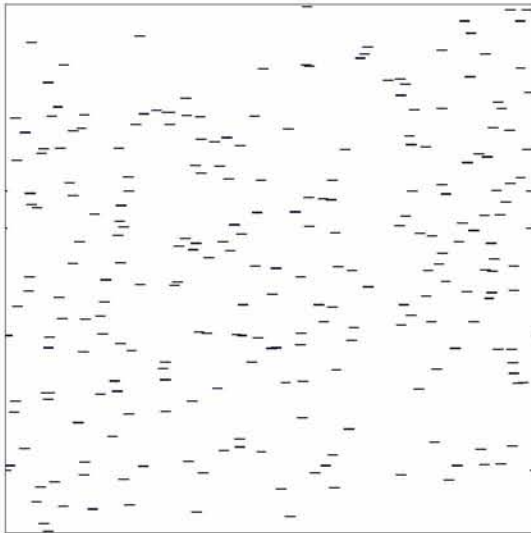
$\sigma=0.3 \alpha\phi=2.5$



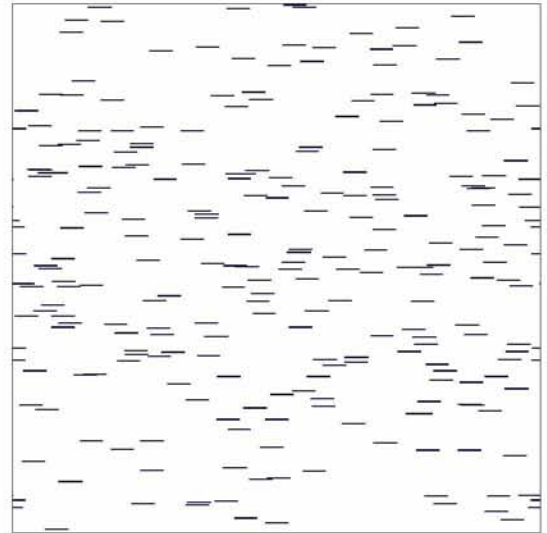
$\sigma=0.3 \alpha\phi=5$



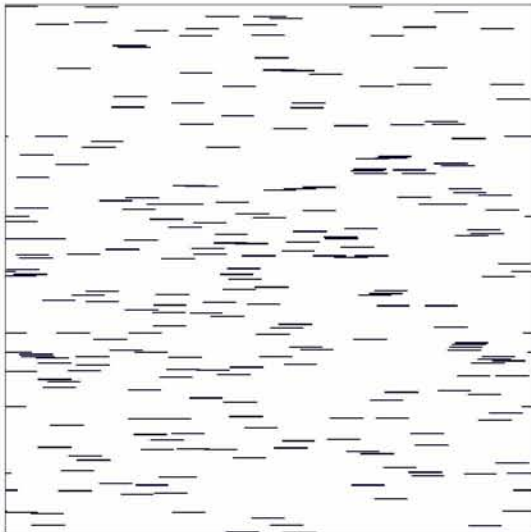
$\sigma=0.3 \alpha\phi=7.5$



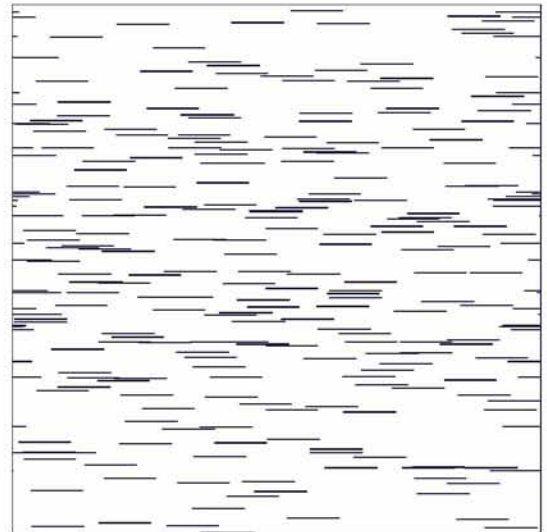
$\sigma=0.4 \quad \alpha\varphi=0.1$



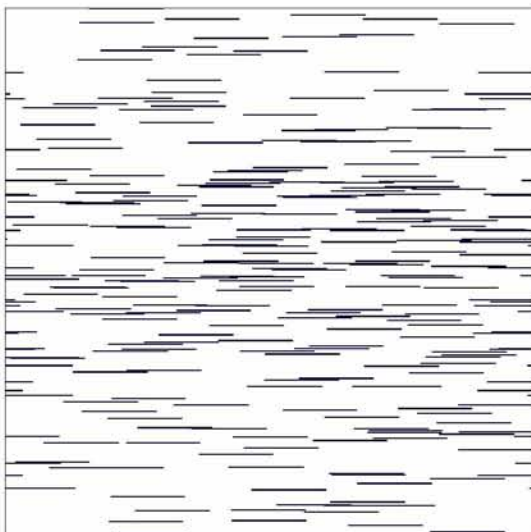
$\sigma=0.4 \quad \alpha\varphi=0.5$



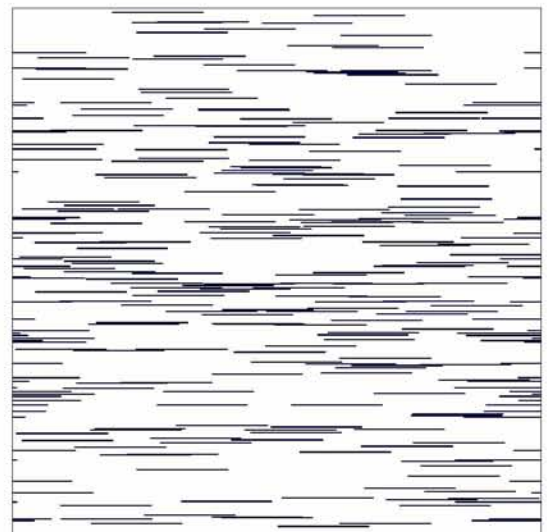
$\sigma=0.4 \quad \alpha\varphi=1$



$\sigma=0.4 \quad \alpha\varphi=2.5$

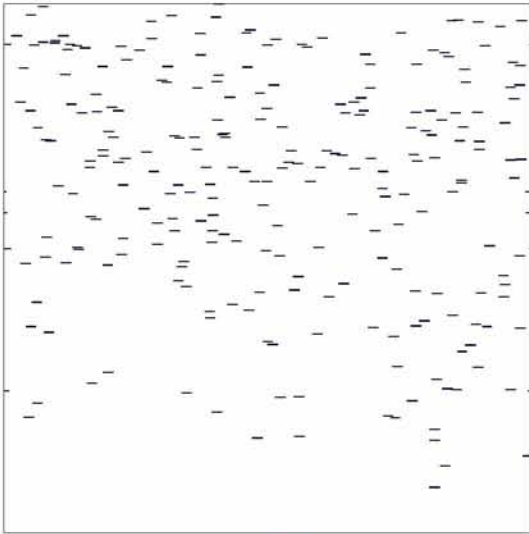


$\sigma=0.4 \quad \alpha\varphi=5$

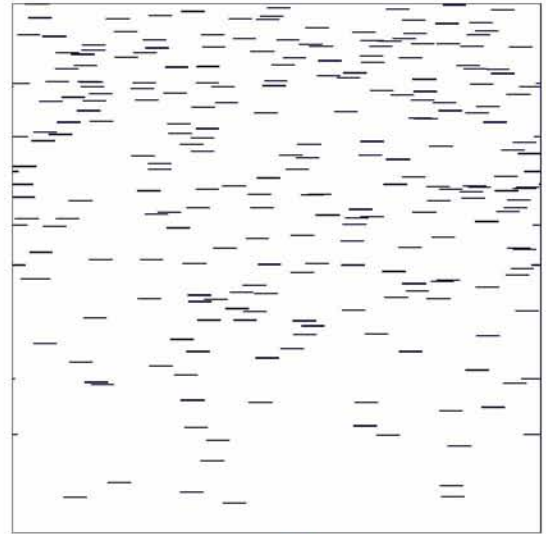


$\sigma=0.4 \quad \alpha\varphi=7.5$

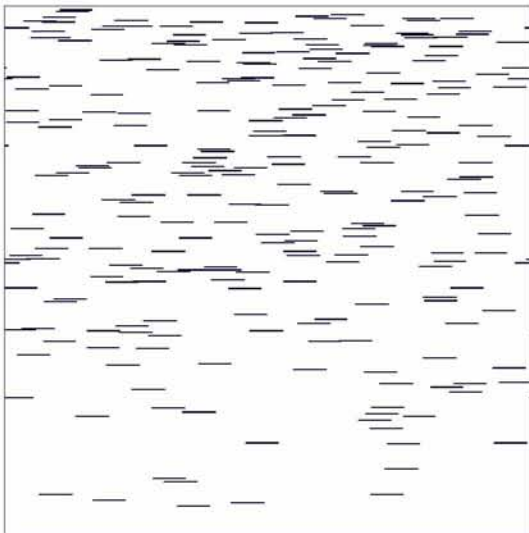
ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ (N=250)



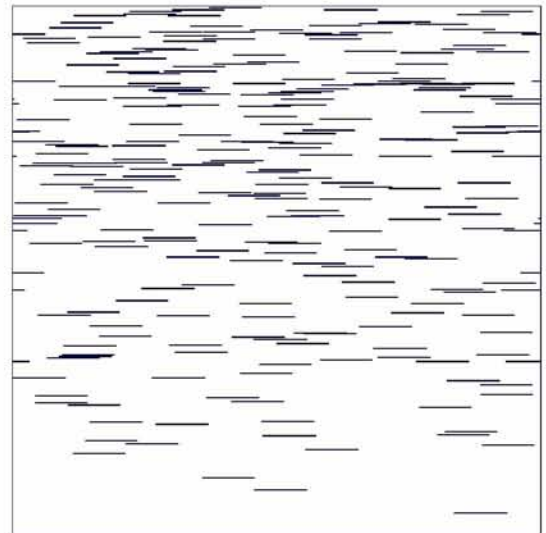
$\alpha\varphi=0.1$



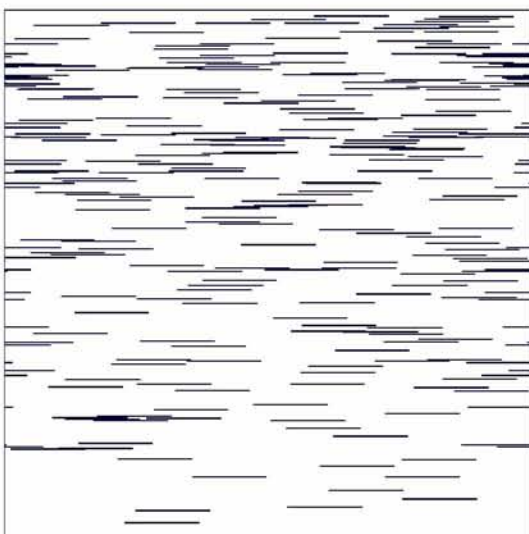
$\alpha\varphi=0.5$



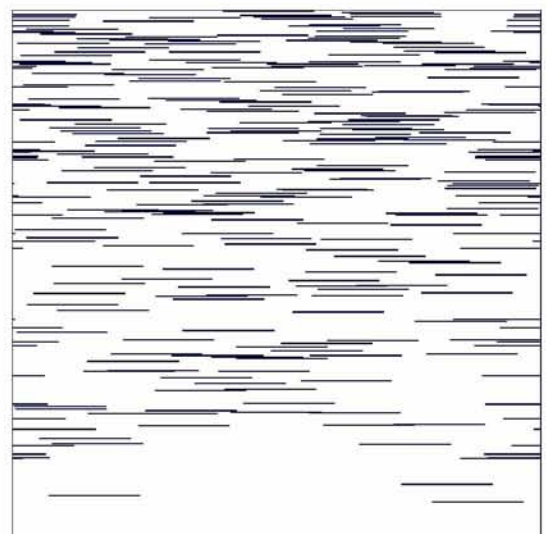
$\alpha\varphi=1$



$\alpha\varphi=2.5$

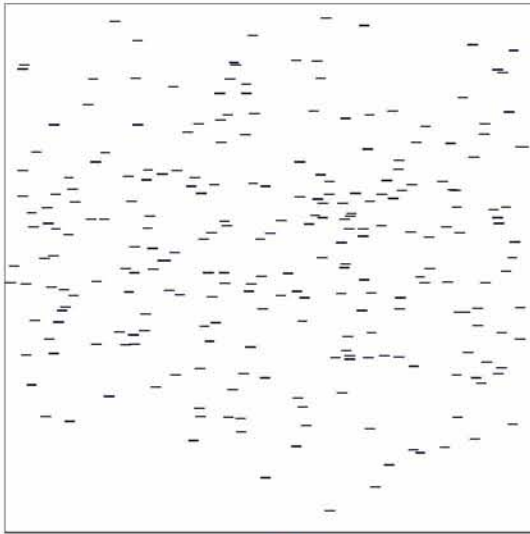


$\alpha\varphi=5$

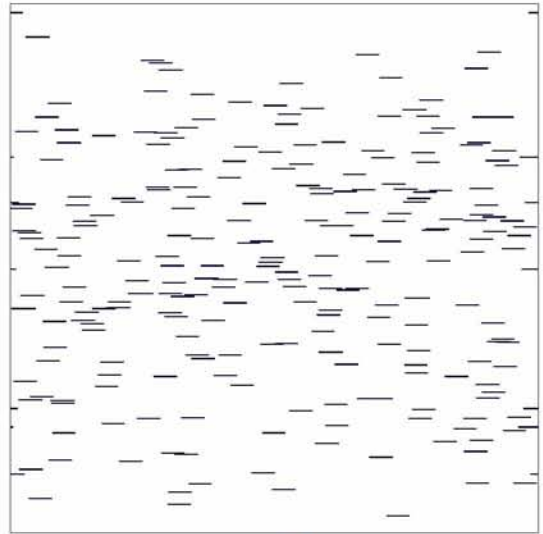


$\alpha\varphi=7.5$

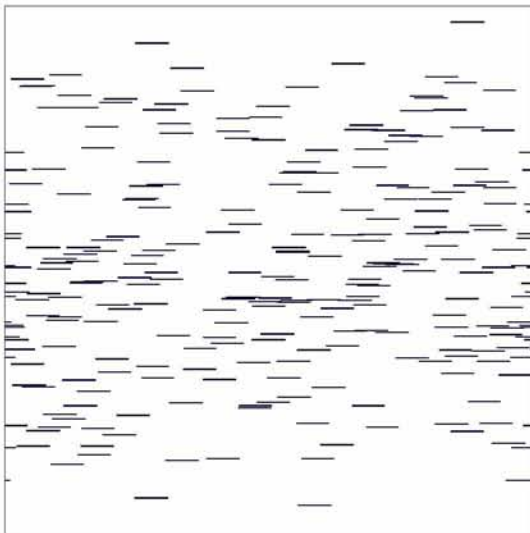
ΤΡΙΓΩΝΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ $N=250$



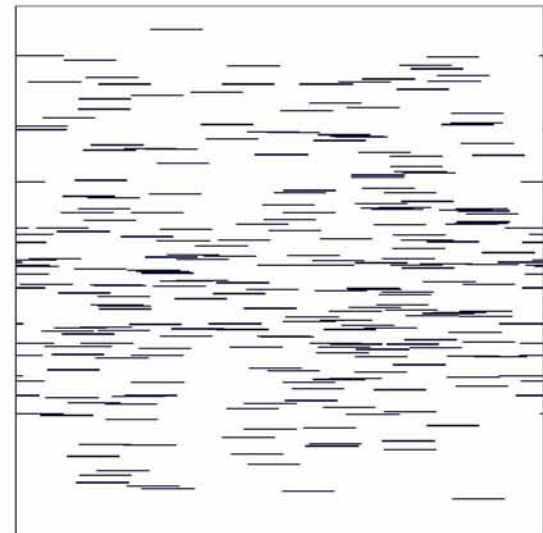
$\alpha\varphi=0.1$



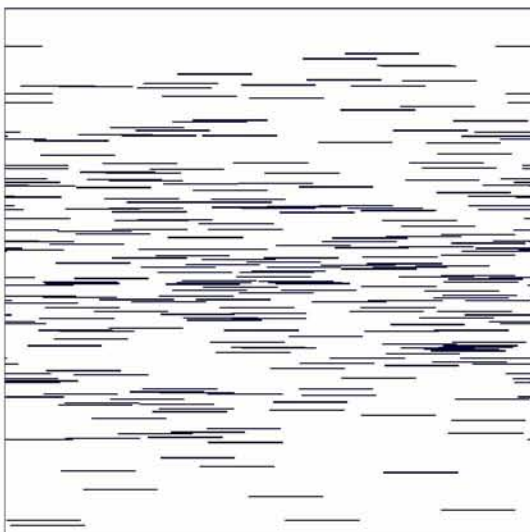
$\alpha\varphi=0.5$



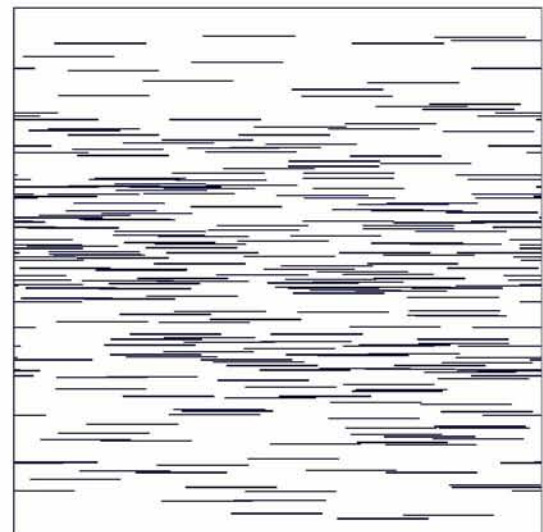
$\alpha\varphi=1$



$\alpha\varphi=2.5$

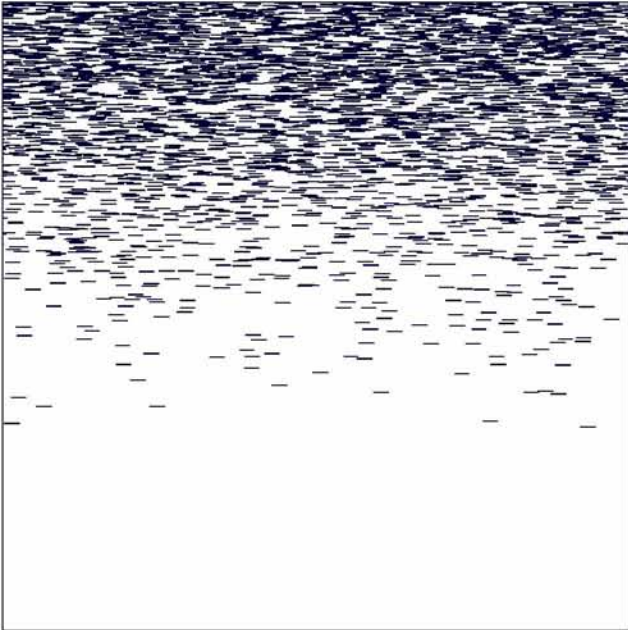


$\alpha\varphi=5$

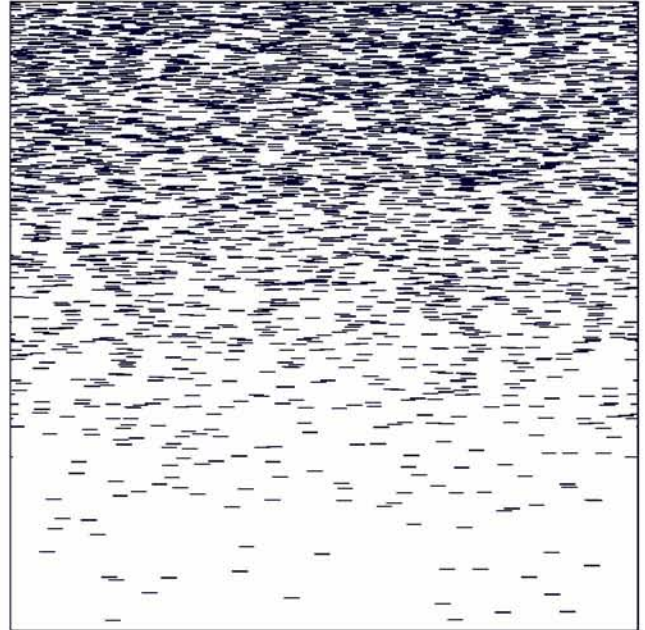


$\alpha\varphi=7.5$

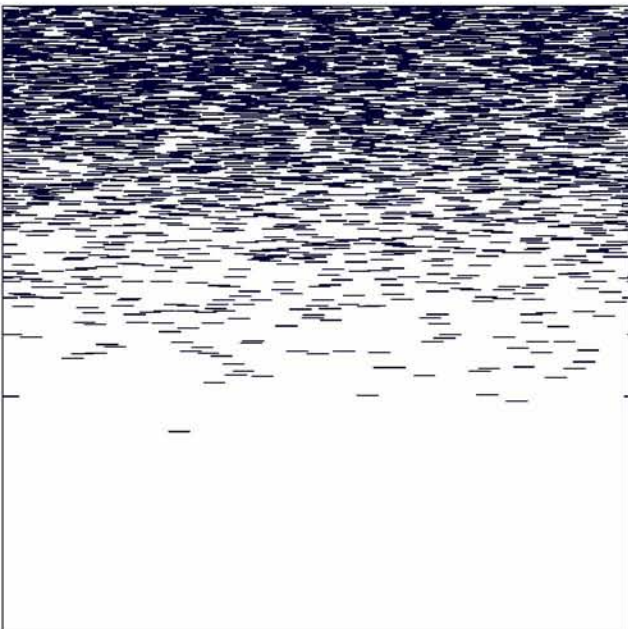
ΜΙΚΡΟΔΟΜΗ ΓΙΑ ΗΜΙ-ΚΑΝΟΝΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ (N=4000)



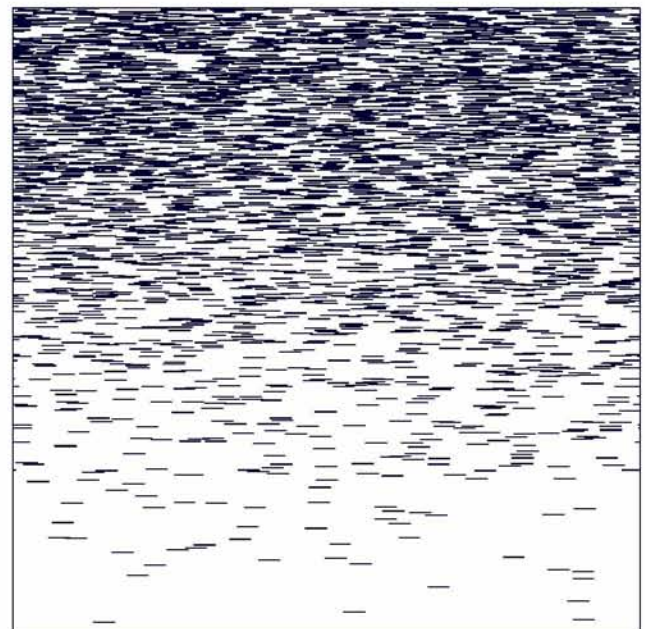
$\sigma=0.2 \alpha\varphi=2.5$



$\sigma=0.2 \alpha\varphi=5$

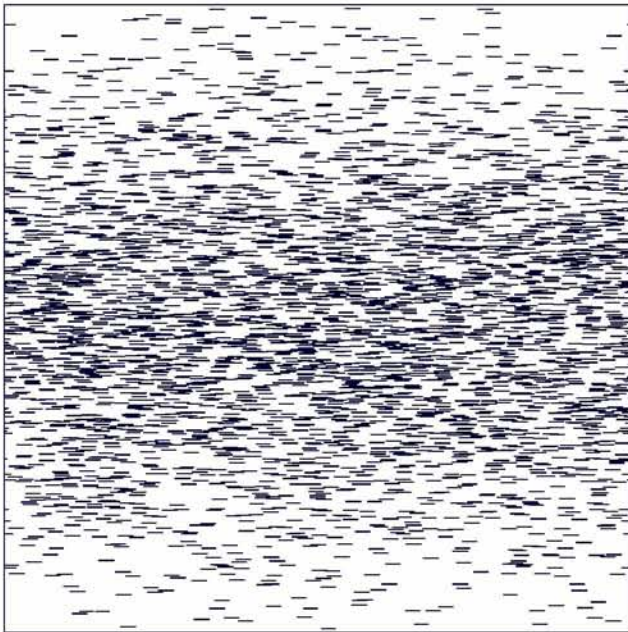


$\sigma=0.3 \alpha\varphi=2.5$

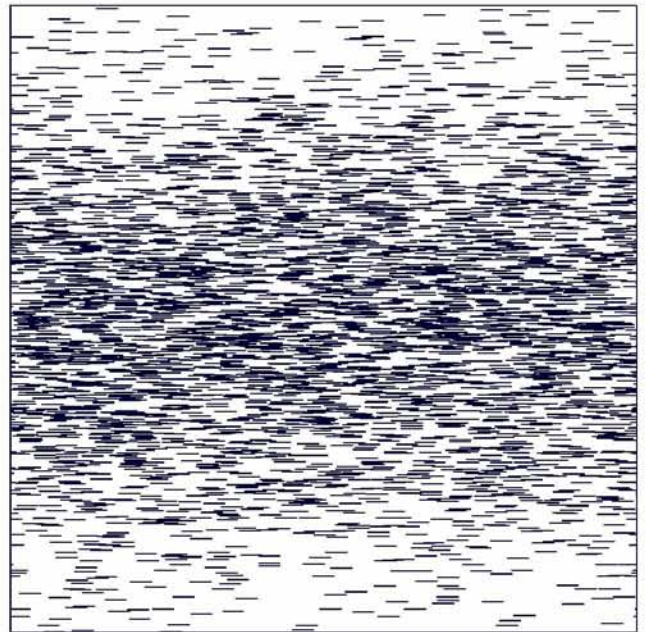


$\sigma=0.3 \alpha\varphi=5$

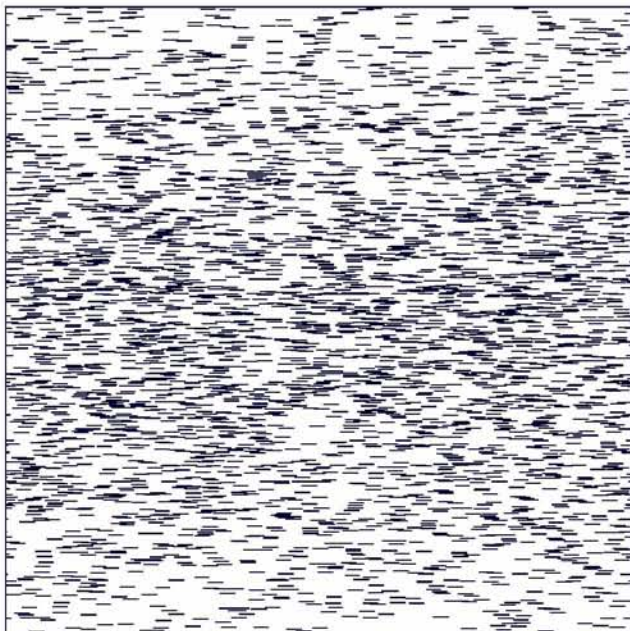
ΠΡΑΓΜΑΤΙΚΗ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΗ ΚΑΝΟΝΙΚΗΣ ΚΑΤΑΝΟΜΗΣ (N=4000)



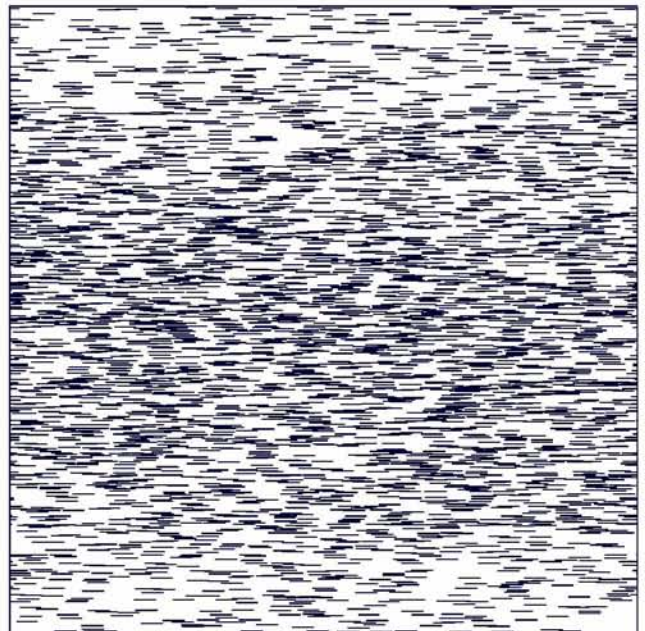
$\sigma=0.2$ $\alpha\varphi=2.5$



$\sigma=0.2$ $\alpha\varphi=5$



$\sigma=0.3$ $\alpha\varphi=2.5$



$\sigma=0.3$ $\alpha\varphi=5$

Appendix D – MATLAB/Το Θεωρητικό Πρόβλημα

Ο κώδικας MATLAB για την επίλυση του θεωρητικού προβλήματος αγωγής θερμότητας σε χρονομεταβαλλόμενες συνθήκες διαμέσου επίπεδου τοίχου:

```
%Θερμοκρασίες -----
Ti = 273;          % Εσωτερική Θερμοκρασία [=K]
Ts = 373;          % Θερμοκρασία κάτω επιφάνειας [=K]

%Διαστάσεις κελιού -----
L = 0.001;        % [=m]

%Σταθερές υλικού -----
k = 0.919;         % Θερμική Αγωγιμότητα
ro = 3000;         % Πυκνότητα [=kg/m3]
cp = 450;          % Θερμοχωρητικότητα [=J/kgK]
a = k/(ro*cp);     % Θερμική Διαχυτικότητα [=m3/s]

%Χρονικές παράμετροι -----
dt = 0.01;         % Χρονικό βήμα
t_final = 3;       % Χρόνος προσομοίωσης
M = t_final/dt;
t = zeros(M,1);

%Κατασκευή εξίσωσης θ* -----
steps=200;
Z = zeros(steps,1);
C = zeros(steps,1);
for n = 0:(steps-1)
    Z(n+1) = 1.5708 + n*pi; % Ρίζες εξίσωσης Zn*tan(Zn)=Bi όπου Bi = άπειρο.
    C(n+1) = (4*sin(Z(n+1)))/(2*Z(n+1) + sin(2*Z(n+1))); % Σταθερές εξίσωσης θ*
end

%Υπολογισμός θερμοκρασίας επάνω επιφάνειας -----
T = ones(M,1)*Ti;
Fo = zeros(M,1);

for i = 2:M+1
    t(i) = t(i-1)+dt;
    Fo(i) = (a*t(i))/L^2; % Αριθμός Fourier
    th = 0;

    for j= 1:steps
        SUM = C(j)*exp((-Z(j)^2)*Fo(i)); % Υπολογισμός θ*
        th = th + SUM;
    end

    T(i) = th*(Ti - Ts) + Ts;
end

%Δημιουργία γραφήματος -----
figure
plot (t(:,1), T(:,1), 'Linewidth', 3)
title('Top Surface Temperature in respect to Time')
xlabel('Time [=sec]')
ylabel('Temperature [=K]')
xlim([0 t_final])
ylim([Ti Ts])
ax = gca;
ax.FontSize = 11;
```


Appendix E – MATLAB/ Υπολογισμός Time Lag

Ο κώδικας MATLAB για τον υπολογισμό του time lag για κάθε περίπτωση μικροδομής ξεχωριστά:

```
%Θερμοκρασίες -----
Ti = 273; % Εσωτερική Θερμοκρασία [=K]
Ts = 373; % Θερμοκρασία κάτω επιφάνειας [=K]

%Εισαγωγή Δεδομένων και Κατασκευή Πίνακα Θερμοκρασιών -----
path1 = 'C:\Users\...'; %Path του φακέλου με τους χρόνους
path2 = 'C:\Users\...'; %Path του φακέλου με τις θερμοκρασίες
ContentInFolder = dir(path1);
SubFolder = ContentInFolder([ContentInFolder.isdir]);

for i = 3:length(SubFolder)

    filetoread1 = fullfile(path1,SubFolder(i).name,'time.txt');
    s1=importdata(filetoread1);
    data1=s1.data;
    t = data1;

    M = length(t);
    t_final = t(end);
    dt = t(2) - t(1);

    filetoread2 = fullfile(path2,SubFolder(i).name,'T2.txt');
    s2=importdata(filetoread2);
    data2=s2.data;
    T = data2;

    %Υπολογισμός Time Lag -----

    %Για μικρούς χρόνους η θερμοκρασία της πάνω επιφάνειας αλλάζει πολύ λίγο
    %και η 2η παράγωγος είναι πολύ κοντά στο 0. Έτσι έχω ορίσει μια
    %'ασφάλεια' για να μην λαμβάνονται υπόψιν οι 2ες παράγωγοι του T σε
    %μικρούς χρόνους:

    T_part = zeros(M,1); %Πίνακας Θερμοκρασίας για 2η Παράγωγο
    t_part = zeros(M,1); %Πίνακας Χρόνων για 2η Παράγωγο

    m =0;
    for k = 2:length(T)
        if T(k)-T(k-1) > 1e-6
            T_part(m+1) = T(k);
            t_part(m+1) = t(k);
            m = m+1;
        end
    end

    T_part(T_part==0)=[];
    t_part(t_part==0)=[];

    crv = abs(diff(diff(T_part))); %Υπολογίζει 2η παράγωγο
    [M,I] = min(crv); %Ελάχιστη 2η παράγωγος M και θέση I στον πίνακα
    tmin = t_part(I); %Χρόνος tmin που ελαχιστοποιείται η 2η παράγωγος

    %Υπολογισμός κλίσης ευθείας για Time Lag
    slope = (T_part(I+1) - T_part(I))/(t_part(I+1)-t_part(I));

    %Υπολογισμός Time Lag
    timelag = (Ti-T_part(I))/slope + t_part(I)
```

```

%Δημιουργία ευθείας -----
x = timelag:dt:t_final;
x1 = timelag;
y1=Ti;
y = slope*(x - x1) + y1;
%Δημιουργία διαγράμματος -----
figure(i)
plot (t(:,1), T(:,1), 'Linewidth', 3)
title('Top Surface Temperature in respect to Time')
xlabel('Time [=sec]')
ylabel('Temperature [=K]')
xlim([0 t_final])
ylim([Ti Ts])
ax = gca;
ax.FontSize = 11;

hold on
plot(x,y)
hold off

%Αποθήκευση Time Lag -----
filespec = fullfile(path2,SubFolder(i).name);
FID1 = fopen(fullfile(filespec,'TimeLag.txt'), 'w');
fprintf(FID1, '%17.15f\n', timelag);
fclose(FID1);

path3 = 'C:\Users\...'; %Φάκελος που αποθηκεύονται τα Outputs
FID2 = fopen(fullfile(path3,'TimeLag.txt' ), 'a+');
fprintf(FID2, '%17.15f\n', timelag);
fclose(FID2);

end

```

Appendix F – MATLAB/ Υπολογισμός Χαρακτηριστικού Χρόνου

Ο κώδικας MATLAB για τον υπολογισμό του Χαρακτηριστικού Χρόνου για κάθε μικροδομή ξεχωριστά:

```
%Θερμοκρασίες -----
Ti = 273;                % Εσωτερική Θερμοκρασία [=K]
Ts = 373;                % Θερμοκρασία κάτω επιφάνειας [=K]
T50 = (Ts -Ti)*0.5 + Ti  % Υπολογισμός του 50%ΔT

%Εισαγωγή Δεδομένων -----
path1 = 'C:\Users\...';  % Path του φακέλου με τους χρόνους
path2 = 'C:\Users\...';  % Path του φακέλου με τις θερμοκρασίες

ContentInFolder = dir(path1);
SubFolder = ContentInFolder([ContentInFolder.isdir]);

for i = 3:length(SubFolder)

    filetoread1 = fullfile(path1,SubFolder(i).name, 'time.txt');
    s1=importdata(filetoread1);
    data1=s1.data;
    t = data1;

    filetoread2 = fullfile(path2,SubFolder(i).name, 'T2.txt');
    s2=importdata(filetoread2);
    data2=s2.data;
    T = data2;

    M = length(T);

    %Εντοπισμός πλησιέστερης θερμοκρασίας και του Χαρακτηριστικού Χρόνου -----
    if T(end)< T50
        tchar = 0;
    else
        [minValue, idx] = min(abs(T - T50));
        closestT = T(idx)
        tchar = t(idx)
    end

    %Αποθήκευση των Χαρακτηριστικών Χρόνων -----
    path3 = 'C:\Users\...';
    FID2 = fopen(fullfile(path3,'Halflife.txt' ), 'a+');
    fprintf(FID2, '%4.2f\n', tchar);
    fclose(FID2);

end
```

Appendix G – MATLAB/ Υπολογισμός Θερμικής Αγωγιμότητας

Ο κώδικας MATLAB για τον υπολογισμό της θερμικής αγωγιμότητας k για κάθε περίπτωση μικροδομής ξεχωριστά με τη χρήση του Χαρακτηριστικού Χρόνου:

```
%Θερμοκρασίες, σταθερές υλικού κλπ
L = 0.001;
rho = 3000;
cp = 450;
th = 0.5;

Ti = 273;
Ts = 373;
T50 = Ti + th*(Ts-Ti);

steps = 10;
Z = zeros(steps,1);
C = zeros(steps,1);
steps = 5;

for n = 1:steps
    Z(n) = 1.5708 + (n-1)*pi;
    C(n) = (4*sin(Z(n)))/(2*Z(n) + sin(2*Z(n)));
end

%Εισαγωγή Δεδομένων και Κατασκευή Πίνακα Θερμοκρασιών
path1 = 'C:\Users\...';
path2 = 'C:\Users\...';
ContentInFolder = dir(path1);
SubFolder = ContentInFolder([ContentInFolder.isdir]);

for i = 3:length(SubFolder)

    filetoRead1 = fullfile(path1,SubFolder(i).name,'time.txt');
    s1=importdata(filetoRead1);
    data1=s1.data;
    t = data1;

    M = length(t);
    t_final = t(end);
    dt = t(2) - t(1);

    filetoRead2 = fullfile(path2,SubFolder(i).name,'T2.txt');
    s2=importdata(filetoRead2);
    data2=s2.data;
    T = data2;

    [minValue, idx] = min(abs(T - T50'));
    closestT = T(idx);
    halft = t(idx)

    func = @(k) C(1)*exp((-Z(1)^2)*k*halft/(rho*cp*L^2)) + C(2)*exp((-
    Z(2)^2)*k*halft/(rho*cp*L^2)) + C(3)*exp((-Z(3)^2)*k*halft/(rho*cp*L^2)) +
    C(4)*exp((-Z(4)^2)*k*halft/(rho*cp*L^2)) + C(5)*exp((-
    Z(5)^2)*k*halft/(rho*cp*L^2)) + C(6)*exp((-Z(6)^2)*k*halft/(rho*cp*L^2)) +
    C(7)*exp((-Z(7)^2)*k*halft/(rho*cp*L^2)) + C(8)*exp((-
    Z(8)^2)*k*halft/(rho*cp*L^2)) + C(9)*exp((-Z(9)^2)*k*halft/(rho*cp*L^2)) +
    C(10)*exp((-Z(10)^2)*k*halft/(rho*cp*L^2)) - th;
    k0 = 0.05; % starting point
    k = fzero(func,k0)

    filespec = fullfile(path2,SubFolder(i).name);
```



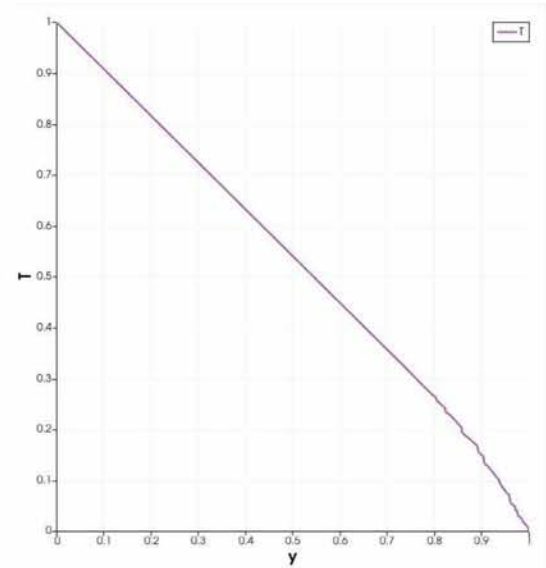
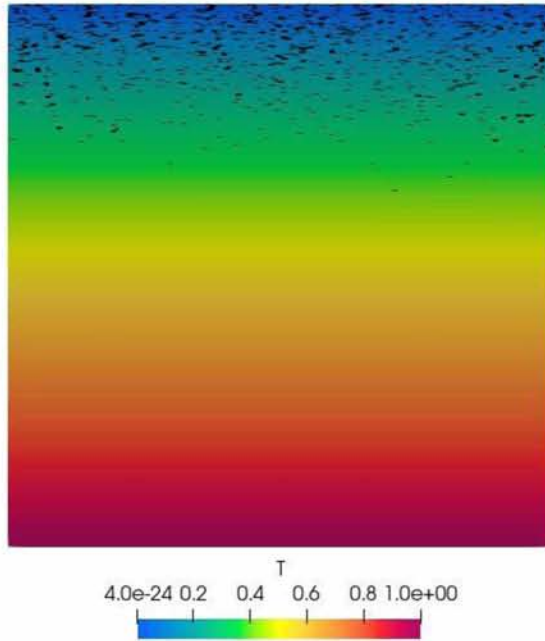
```
FID1 = fopen(fullfile(filespec, 'K.txt'), 'w');
fprintf(FID1, '%17.15f\n', k);
fclose(FID1);

path3 = 'C:\Users\...';
FID2 = fopen(fullfile(path3, 'k.txt' ), 'a+');
fprintf(FID2, '%17.15f\n', k);
fclose(FID2);
end
```

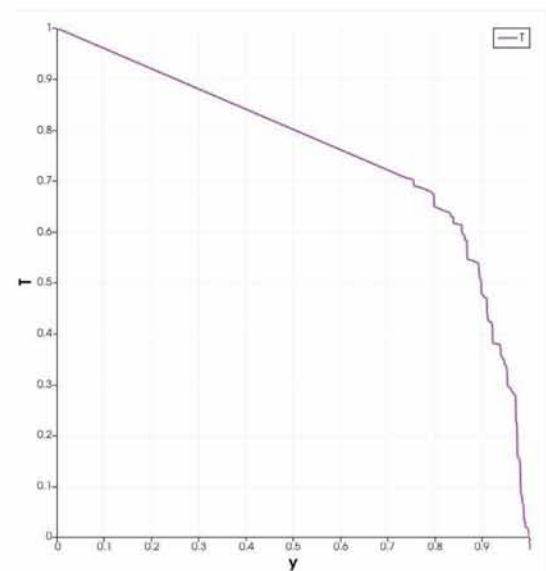
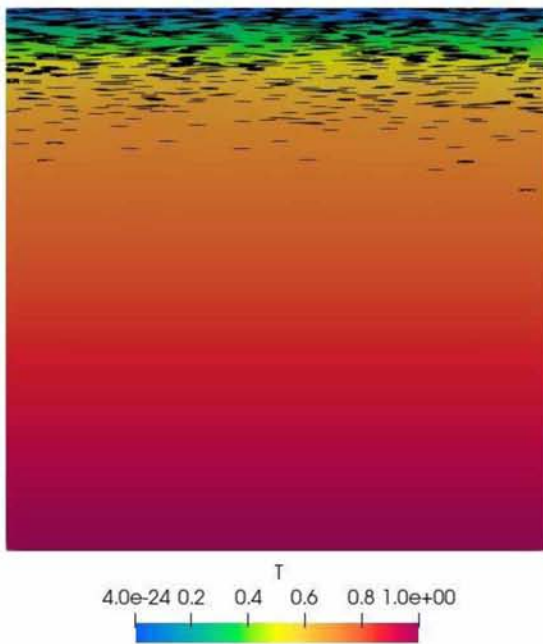
Appendix H – Θερμοκρασιακή Αναπαράσταση μέσω ParaView

HMI-KANONΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ

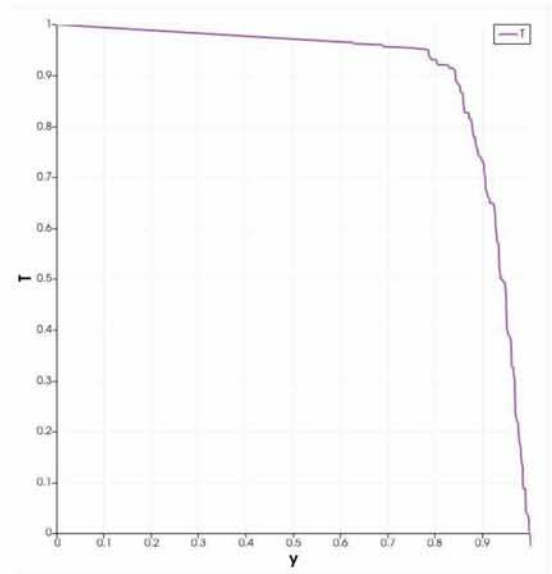
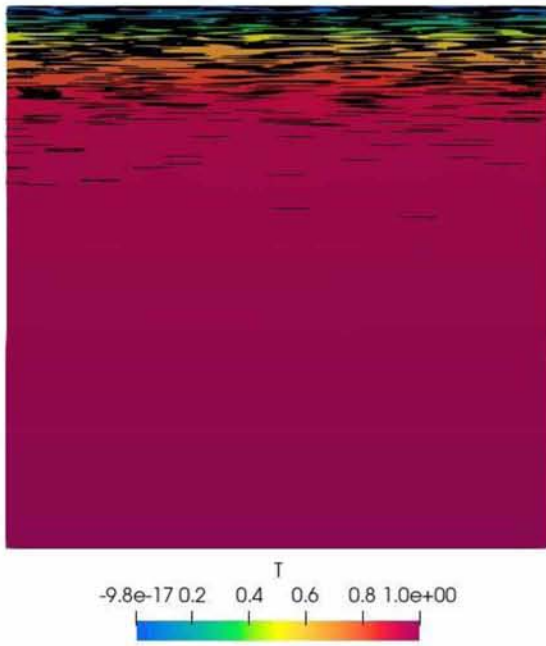
- Σταθερό σ και μεταβαλλόμενο $\alpha\phi$



$\sigma=0.1$ $\alpha\phi=0.1$ $N=250$

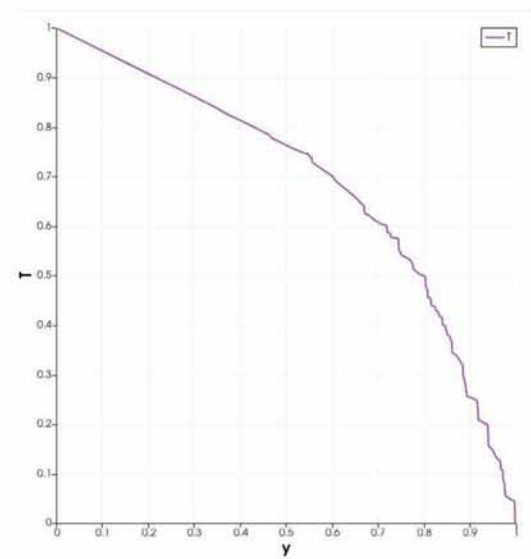
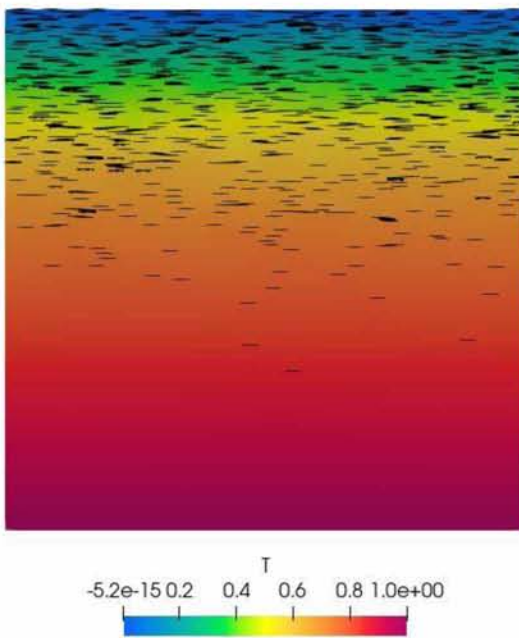


$\sigma=0.1$ $\alpha\phi=1$ $N=250$

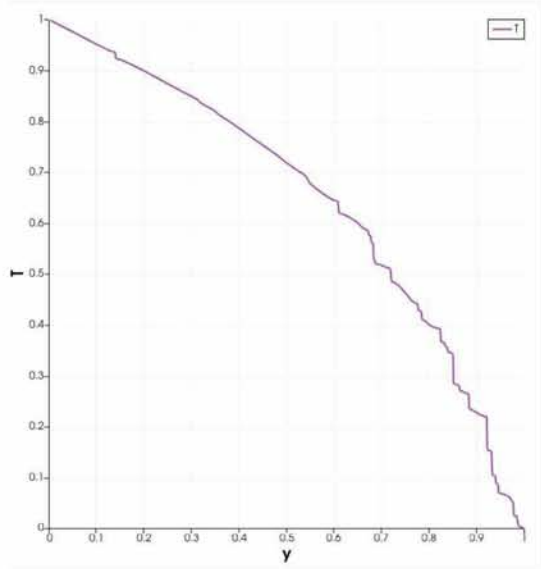
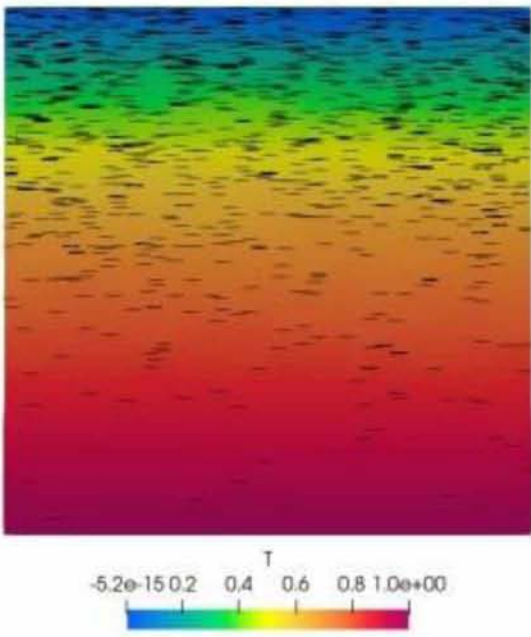


$\sigma=0.1$ $\alpha\phi=5$ $N=250$

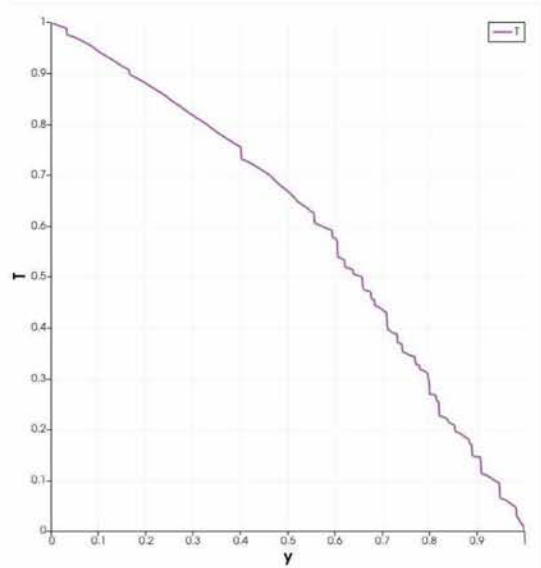
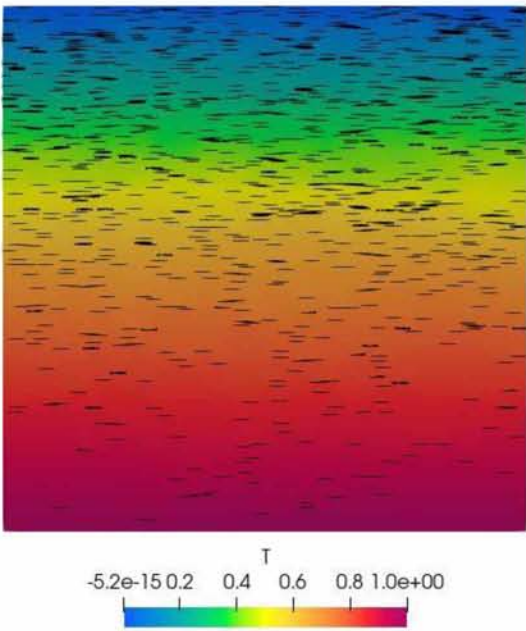
- Σταθερό $\alpha\phi$ και μεταβαλλόμενο σ



$\sigma=0.2$ $\alpha\phi=1$ $N=250$



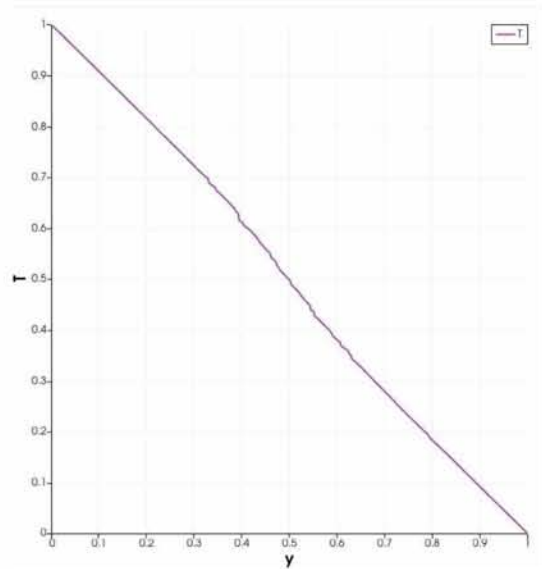
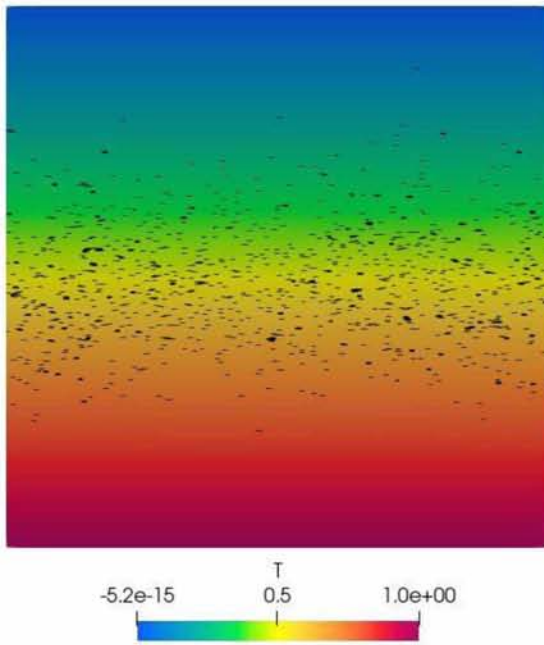
$\sigma=0.3 \alpha\varphi=1 N=250$



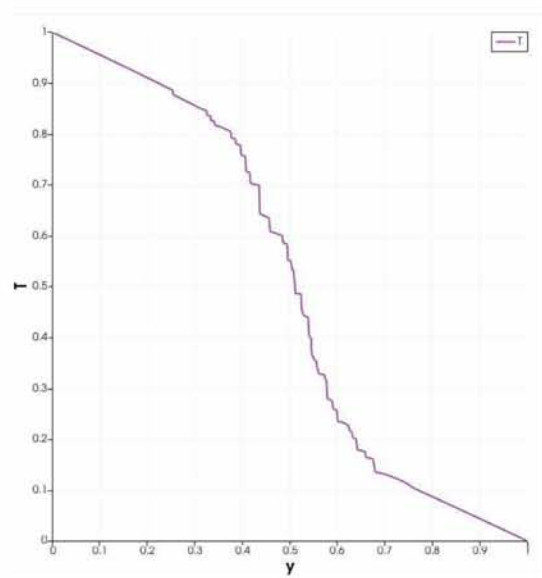
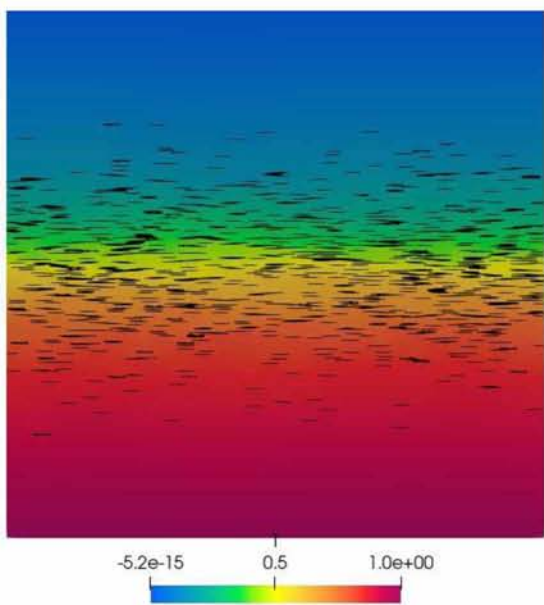
$\sigma=0.4 \alpha\varphi=1 N=250$

ΚΑΝΟΝΙΚΗ ΚΑΤΑΝΟΜΗ

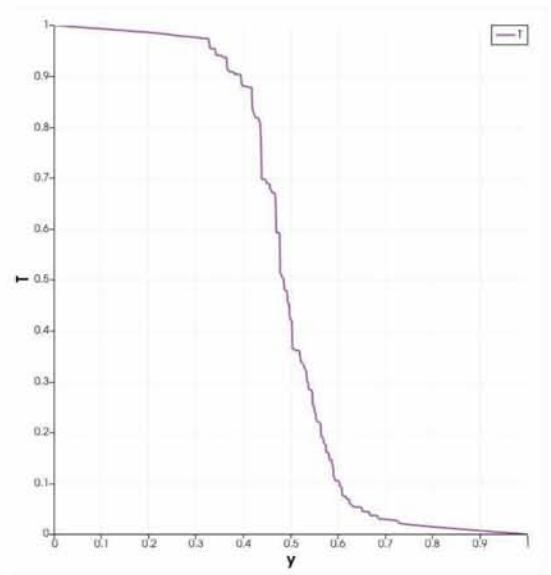
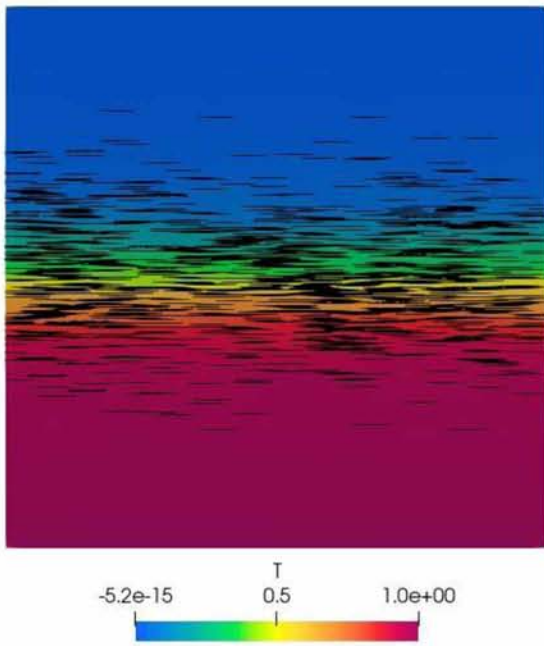
- Σταθερό σ και μεταβαλλόμενο $\alpha\varphi$



$\sigma=0.1$ $\alpha\varphi=0.1$ $N=250$

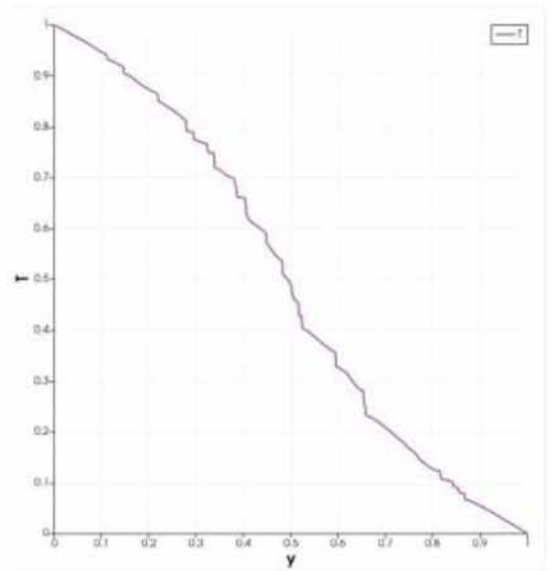
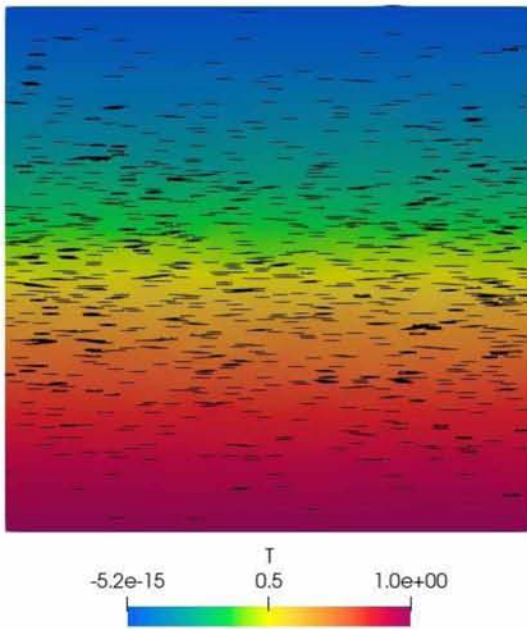


$\sigma=0.1$ $\alpha\varphi=1$ $N=250$

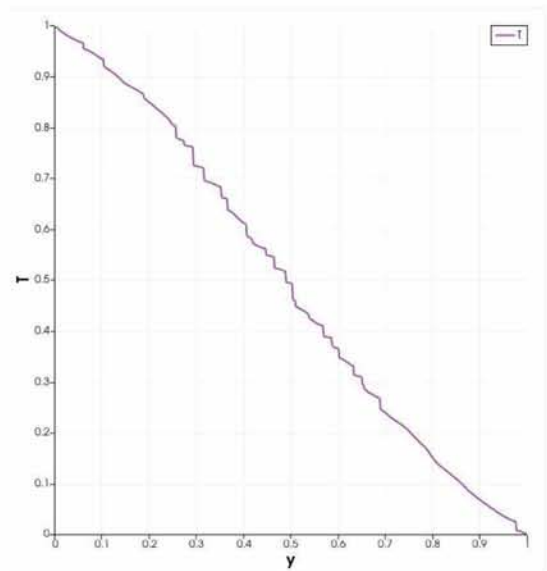
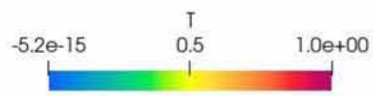
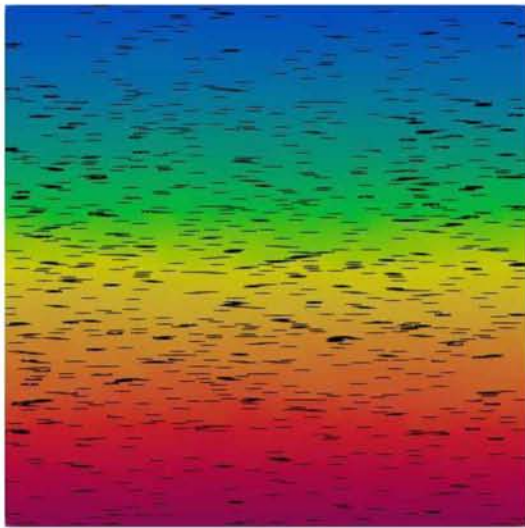


$\sigma=0.1 \alpha\phi=5 N=250$

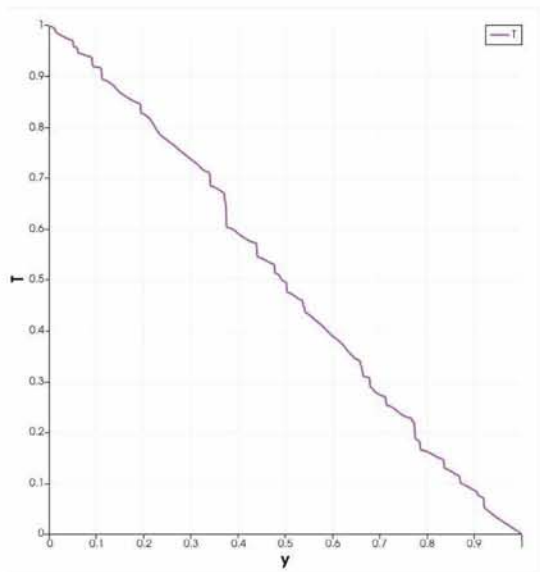
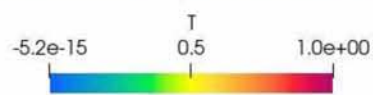
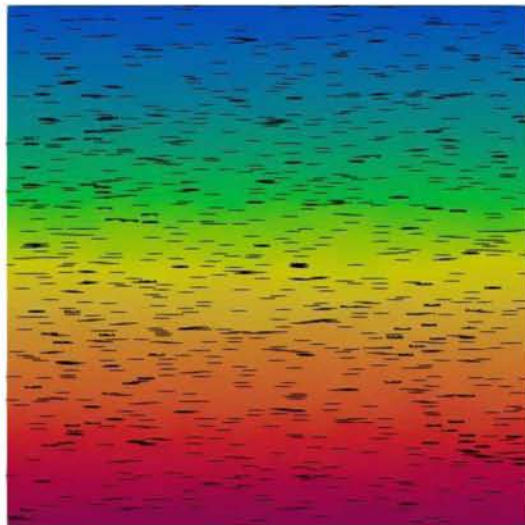
- Σταθερό $\alpha\phi$ και μεταβαλλόμενο σ



$\sigma=0.2 \alpha\phi=1 N=250$

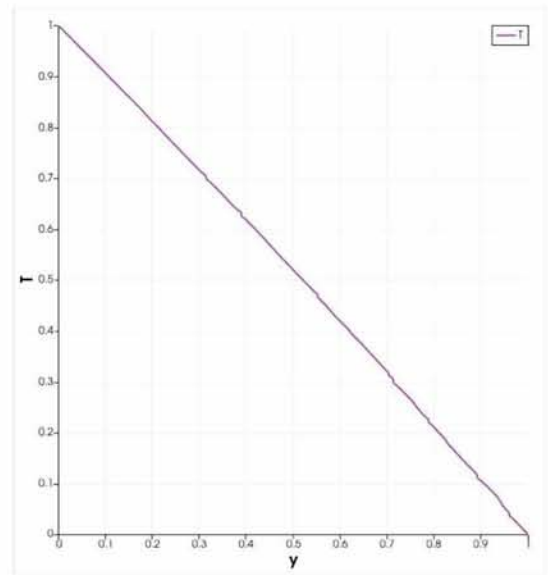
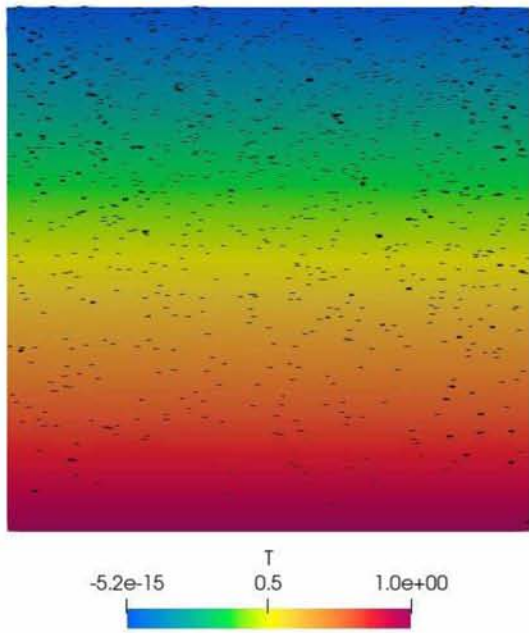


$\sigma=0.3 \alpha\phi=1 N=250$

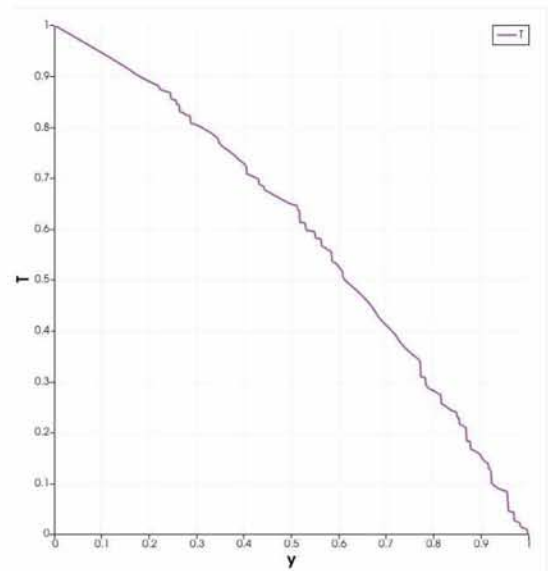
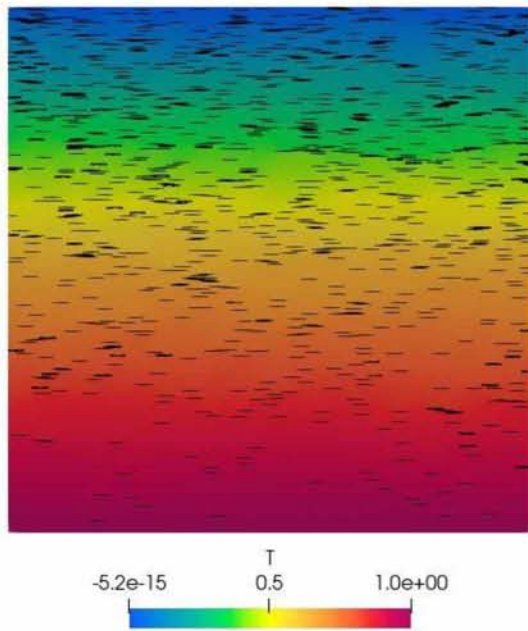


$\sigma=0.4 \alpha\phi=1 N=250$

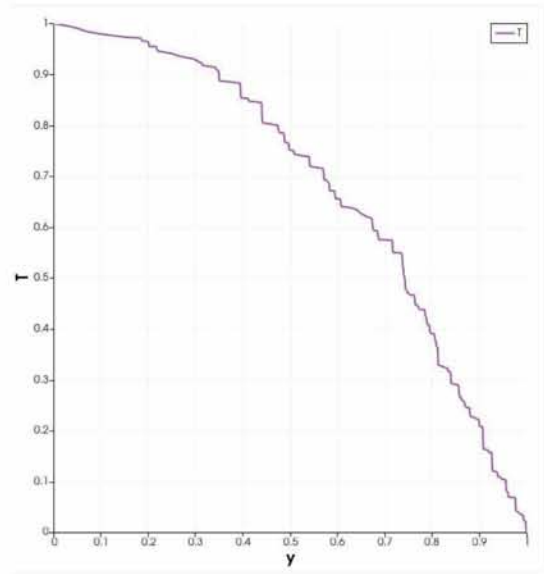
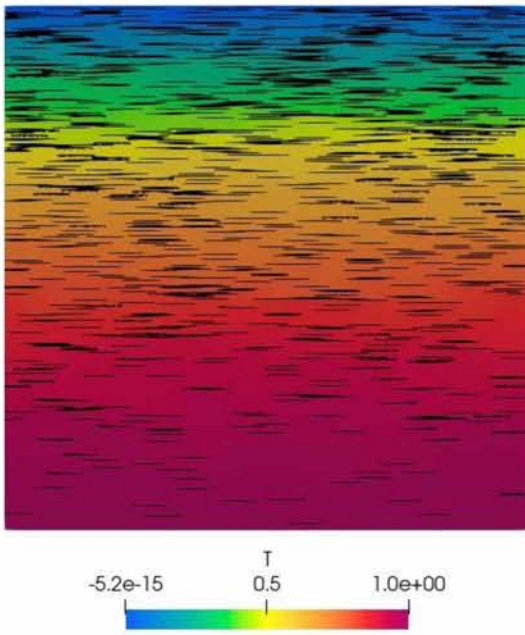
Γραμμική κατανομή



$\alpha\varphi=0.1$ $N=250$

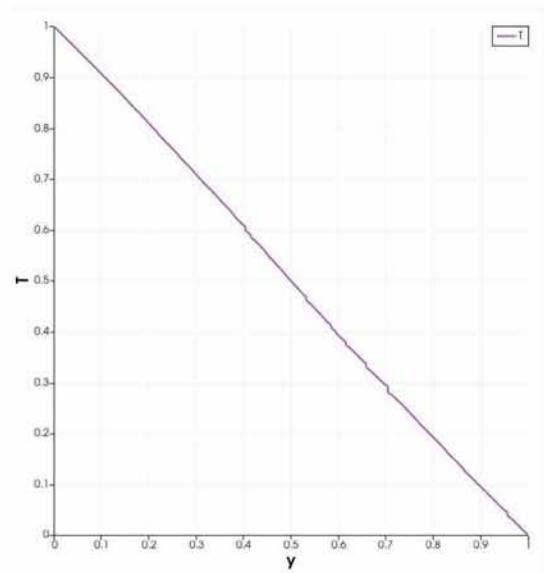
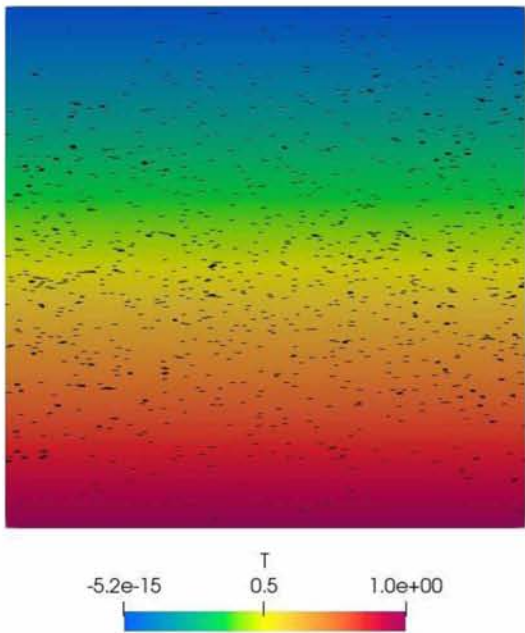


$\alpha\varphi=1$ $N=250$

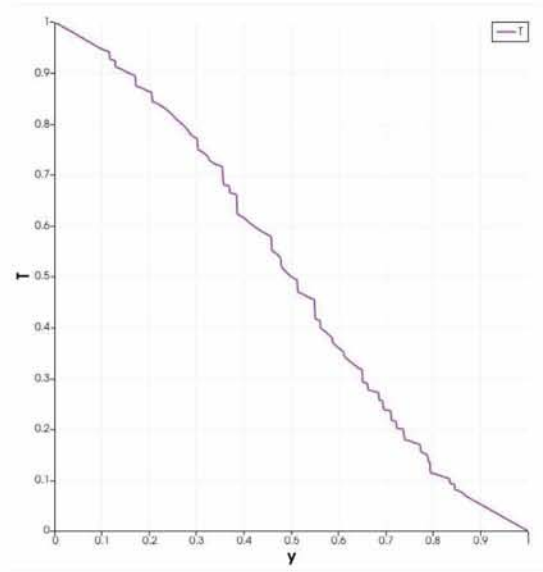
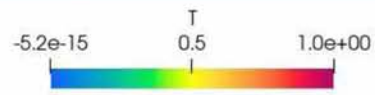
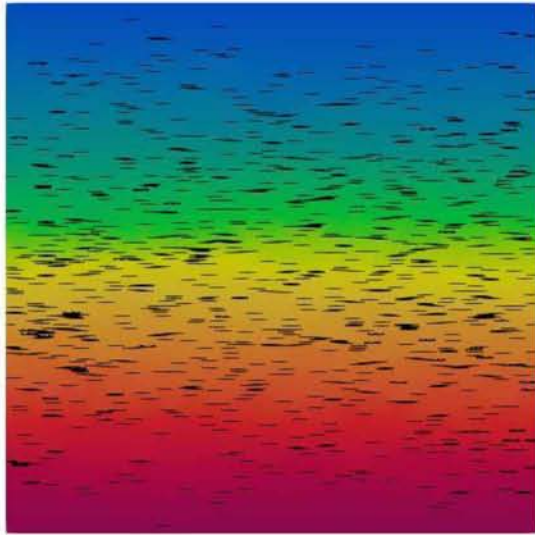


$\alpha=5$ $N=250$

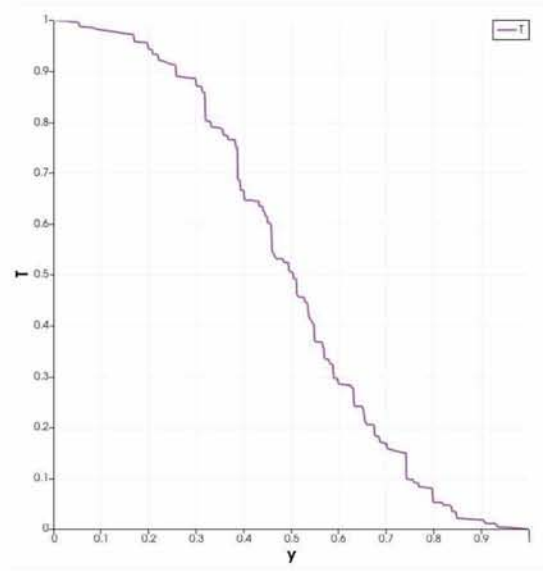
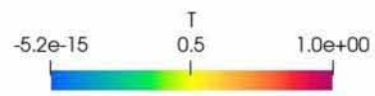
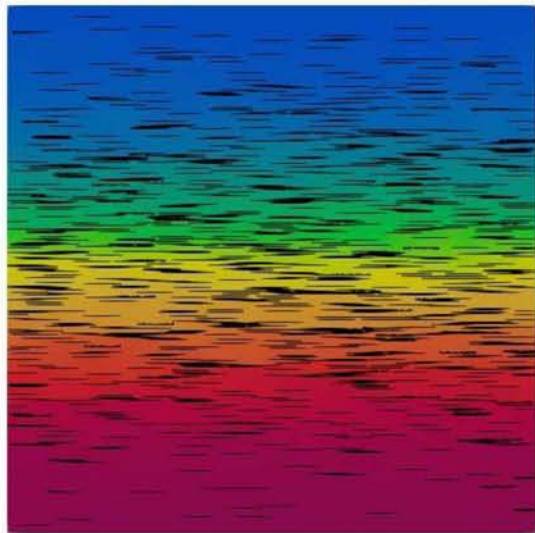
Τριγωνική κατανομή



$\alpha=0.1$ $N=250$



$\alpha\varphi=1$ $N=250$



$\alpha\varphi=5$ $N=250$

Βιβλιογραφία

1. Σημειώσεις μαθήματος “Φαινόμενα Μεταφοράς”, Δρ. Ανδρίτσος Νικόλαος, τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών ΠΘ.
2. Yunus A. Cengel, Afshin J. Ghajar, “Μεταφορά Μάζας και Θερμότητας 5^η έκδοση”.
3. Zhaokun M., Lang L., Feng L., Huaihe S., Jie L., “*Three-Dimensional Thermal Conductive Behavior of Graphite Materials Sintered from Ribbon Mesophase Pitch-Based Fibers*”, Materials Letters, 66, 99-101 (2012).
4. Chung D., “*Materials for Thermal Conduction*”, Applied Thermal Engineering, 21, 1593-1605 (2001).
5. Σημειώσεις μαθήματος “Ρεολογία και μορφοποίηση πολυμερών υλικών”, Δρ. Παπαθανασίου Αθ., τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών ΠΘ.
6. W.D. Callister Jr. “*Materials Science and Engineering, An introduction*” 5th edition, John Willey and Sons, New York, 1999.
7. Potschke, P. Fornes, T. D. Paul, D. R. “*Rheological behaviour of multiwall carbon nanotube / polycarbonate composites*”, Polymer 43 (2002) 11, 3247-3255.
8. Κ. Παναγιώτου, Θεσσαλονίκη 2000, “*Επιστήμη και Τεχνολογία Πολυμερών*”.
9. Γ. Παπανικολάου, Μουζάκης, “*Σύνθετα υλικά*”, εκδόσεις Κλειδάριθμος, 2007.
10. L. E. Nielsen, R. F. Lander, “*Mechanical properties of polymers and composites*”, 2nd edition, Marcell Dekkerv, 1994.
11. Tankara, T., Montanari, G.C. & Mulhaupt R., “*Polymer Nanocomposites as Dielectrics and Electrical Insulation-perspectives for Processing Technologies, Material Characterization and Future Applications*” published at IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation, vol. 11, No. 5, 1070. 9878/04/ 2004 IEEE.
12. Gururaja Udupa, S. Shrikantha Rao, K.V. Gangadharan, “*Functionally Graded Composite Materials: An Overview*”, 2014.
13. Wikipedia page on: “*Functionally Graded Materials*”.
14. Rasheedat M. Mahamood, Esther T. Akinlabi, Mukul Shukla, Sisa Pityana, “*Functionally Graded Material: An Overview*”, 2012.
15. MIT Lecture Notes No. 9 - “*Introduction to Solid State Chemistry - DIFFUSION*”.
16. Wikipedia page on: ‘*Ανάδελτα*’.
17. Wikipedia page on: ‘*Laplacian Operator*’
18. Ανδρέας Τσιαντής, ‘*Υπολογιστική μελέτη φαινομένων μεταφοράς μέσω σύνθετων πολυμερικών μεμβρανών*’.