



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ  
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ  
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

## **ΣΧΕΣΕΙΣ ΜΙΚΡΟΔΟΜΗΣ ΚΑΙ ΔΙΑΠΕΡΑΤΟΤΗΤΑΣ ΣΕ ΙΝΩΔΗ ΜΕΣΑ**

Υπό

**ΧΑΡΑΛΑΜΠΑΚΗ ΚΥΡΙΑΚΟ και ΤΣΟΛΑΚΙΔΗ ΓΕΩΡΓΙΟ**

### **Διπλωματική Εργασία**

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

Βόλος, 2022

© 2022 Χαραλαμπάκης Κυριάκος και Τσολακίδης Γιώργος

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

## **Εγκρίθηκε από τα Μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:**

Πρώτος Εξεταστής      Δρ. Αθανάσιος Παπαθανασίου  
(Επιβλέπων)            Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο  
   Θεσσαλίας

Δεύτερος Εξεταστής    Δρ. Ανδρέας Τσιαντής  
   Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο  
   Θεσσαλίας

Τρίτος Εξεταστής      Δρ. Γεώργιος Χαραλάμπους  
   Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο  
   Θεσσαλίας

## Ευχαριστίες

Θα θέλαμε να εκφράσουμε τις ειλικρινείς ευχαριστίες μας στον επιβλέποντα της διπλωματικής εργασίας μας, Καθηγητή κ. Αθανάσιο Παπαθανασίου, για την υποστήριξη και καθοδήγησή του καθ' όλη τη διάρκεια της συνεργασίας μας.

Επίσης, θα θέλαμε να ευχαριστήσουμε τον Καθηγητή κ. Ανδρέα Τσιαντή για την πολύτιμη βοήθεια και την καθοδήγησή του για την περάτωση της διπλωματικής μας εργασίας, όπως επίσης και τον Καθηγητή κ. Γεώργιο Χαραλάμπους για την προσεκτική ανάγνωση της διπλωματικής μας εργασίας.

Ένα ξεχωριστό ευχαριστώ θα θέλαμε να δώσουμε στους φίλους και συμφοιτητές μας Μιχάλη Σιδηρόπουλο, Γιάννη Όππα, Νίκο Λιάκο, Βαγγέλη Κάργα, Ιωάννη Μανιό, Νίκο Πατεράκη και Χριστόφορο Φιλίππου για όλες εκείνες όμορφες στιγμές κατά τη διάρκεια της φοίτησής μας.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω πάνω από όλα τους γονείς μου, Μανώλη και Μαρία, και την αδερφή μου Βάσια για την καθημερινή υποστήριξη τους όλα αυτά τα χρόνια.

*Χαραλαμπάκης Κυριάκος*

*Βόλος*

*Ιούνιος 2022*

Με τη σειρά μου θα ήθελα να ευχαριστήσω πάνω από όλα τους γονείς μου, Αποστόλη και Κατερίνα, και τον αδερφό μου Γρηγόρη για την αμέριστη υποστήριξη και κατανόηση τους όλα αυτά τα χρόνια.

*Τσολακίδης Α. Γιώργος*

*Βόλος*

*Ιούνιος 2022*

# ΣΧΕΣΕΙΣ ΜΙΚΡΟΔΟΜΗΣ ΚΑΙ ΔΙΑΠΕΡΑΤΟΤΗΤΑΣ ΣΕ ΙΝΩΔΗ ΜΕΣΑ

ΧΑΡΑΛΑΜΠΑΚΗΣ ΚΥΡΙΑΚΟΣ και ΤΣΟΛΑΚΙΔΗΣ ΓΕΩΡΓΙΟΣ

Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, 2022

Επιβλέπων Καθηγητής: Δρ. Αθανάσιος Παπαθανασίου,

Καθηγητής τμήματος Μηχανολόγων Μηχανικών

## Περίληψη

Τα σύνθετα υλικά χρησιμοποιούνται ευρέως σε πληθώρα εφαρμογών, από βιομηχανικά προϊόντα μέχρι την αεροδιαστημική, ηλεκτρονικά συστήματα και ιατρικό εξοπλισμό. Παρότι συσχετίσεις μεταξύ των ιδιοτήτων και της σύστασης των σύνθετων υλικών βρίσκονται σε αρκετά προχωρημένο επίπεδο, υπάρχει σημαντική διασπορά σε μετρήσεις συγκεκριμένων ιδιοτήτων, όπως η υδραυλική διαπερατότητα σε ινώδη μέσα. Εδώ και καιρό εικάζεται πως αυτή η μεταβλητότητα οφείλεται στη μεταβλητότητα των υποκείμενων μικροδομών. Ωστόσο, παρέχεται περιορισμένη άμεση απόδειξη επ' αυτού και υπάρχει σαφής έλλειψη συσχετίσεων μεταξύ μικροδομής και ιδιοτήτων. Τα σύνθετα υλικά που αναλύονται σε αυτή τη μελέτη φέρουν ίνες, παράλληλα διατεταγμένες μεταξύ τους. Αντικείμενο της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι i) η ποσοτικοποίηση της χωρικής κατανομής των ινών και πιο συγκεκριμένα η επίδραση των συσσωματωμάτων και ii) η επίδραση της χωρικής κατανομής στην διαπερατότητα.

Αρχικά, η ανάλυση περιλαμβάνει τη δημιουργία των γεωμετριών με προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής, κάνοντας χρήση του λογισμικού πακέτου HOOMD-blue. Αναφερόμαστε σε ένα κελί δύο διαστάσεων εσωτερικά του οποίου παρουσιάζονται διαφορετικές κατανομές ινών. Η κατανομή χαρακτηρίζεται χρησιμοποιώντας μεθόδους μέτρησης της τοπικής πυκνότητας του υλικού σύμφωνα με τις σχετικές αποστάσεις των ινών, στο υπολογιστικό περιβάλλον του MATLAB αλλά και μέσω του λογισμικού μοριακής δυναμικής Onitο. Στο σημείο αυτό, εισάγεται ένας δείκτης ( $M_D$ ) για την ποσοτικοποίηση του βαθμού συσσωμάτωσης στις γεωμετρίες.

Εν συνεχεία, επιλύεται αριθμητικά, κάνοντας χρήση του ανοιχτού κώδικα λογισμικού OpenFOAM, το πρόβλημα δισδιάστατης ιξώδης ροής και αξιοποιώντας τον νόμο του Darcy υπολογίζεται η διαπερατότητα. Αναπαρίστανται τα ροϊκά πεδία μέσω του λογισμικού Paraview και με αυτό τον τρόπο λαμβάνονται χρήσιμες πληροφορίες για την επίδραση των συσσωματωμάτων στην διαπερατότητα. Τέλος, μελετάται η συμπεριφορά της διαπερατότητας ως προς την κατανομή των ινών, η οποία καταγράφεται ποσοτικά από το δείκτη  $M_D$ .

# **CORRELATIONS BETWEEN MICROSTRUCTURE AND PERMEABILITY IN FIBROUS MEDIA**

CHARALAMPAKIS KYRIAKOS and TSOLAKIDIS GEORGE

Department of Mechanical Engineering, University of Thessaly, 2022

Supervisor: Dr Athanasios Papathanasiou

Professor of Mechanical Engineering

## **Abstract**

Composite materials are widely used in a variety of applications, ranging from industrial products to aerospace, electronics, and medical components. While correlations between the properties the composition of composite material are well advanced, there exists a significant scatter in certain measured properties, such as the hydraulic permeability of fibrous media. It has long been speculated that this variability is due to the variability of the underlying microstructures. However, only limited direct proof has been provided for this and there is a distinct lack of correlations relating microstructures to properties. The composites that are being analyzed in this study include fibers, arranged parallel with each other. The objective of this thesis is (i) the quantification of the spatial distribution of fibers, and more specifically the impact of clusters, and (ii) the effect of this spatial distribution on permeability.

Initially, the analysis involves the generation of geometries via molecular dynamics simulations, using the software package HOOMD-blue. We are considering a two-dimensional cell inside of which different distributions of the fibers are presented. The distribution is characterized by methods of measuring the local density of the material according to the relative distances of the fibers, in the computing environment MATLAB but also through the molecular dynamics software Ovito. At this point a metric ( $M_D$ ) is introduced to quantify the extent of clustering in the geometries.

Consequently, the problem of two-dimensional viscous flow is solved numerically by using the open-source software OpenFOAM and considering Darcy's Law the permeability is calculated. The flow fields are represented through Paraview software, and this gives a

valuable insight into the effect of clustering on permeability. Finally, the behaviour of the permeability in terms of fiber distribution, quantified through the metric  $M_D$ , is studied.



## Πίνακας Περιεχομένων

<b>Κεφάλαιο 1. Εισαγωγή.....</b>	<b>1</b>
<b>Κεφάλαιο 2. Παραγωγή γεωμετριών με προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής .....</b>	<b>5</b>
<b>2.1 Ορισμός παραμέτρων.....</b>	<b>6</b>
<b>2.2 Αρχικοποίηση γεωμετρίας.....</b>	<b>7</b>
2.2.1 Ορισμός κελιού προσομοίωσης .....	7
2.2.2 Περιοδικές οριακές συνθήκες .....	8
<b>2.3 Υπολογισμός δυνάμεων αλληλεπίδρασης των σωματιδίων .....</b>	<b>9</b>
2.3.1 Ορισμός λίστας κελιών και γειτόνων .....	9
2.3.2 Δυναμικό Lennard-Jones .....	11
<b>2.4 Επιλογή μεθόδου ολοκλήρωσης.....</b>	<b>14</b>
2.4.1 Θερμοστάτης Nose-Hoover .....	15
2.4.2 Θερμοστάτης Langevin .....	16
2.4.3 Επιλογή θερμοστάτη .....	17
2.4.4 Ολοκλήρωση Velocity-Verlet.....	18
<b>Κεφάλαιο 3. Στατιστική ανάλυση .....</b>	<b>20</b>
<b>3.1 Ακτινική συνάρτηση κατανομής .....</b>	<b>20</b>
3.1.1 Ορισμός .....	20
3.1.2 Αλγοριθμική επίλυση .....	21
3.1.3 Ερμηνεία αποτελεσμάτων.....	24
<b>3.2 Συνάρτηση Ripley .....</b>	<b>28</b>
3.2.1 Ορισμός .....	28
3.2.2 Ταξινόμηση χωρικών κατανομών.....	29
<b>3.3 Δείκτης <math>M_D</math>.....</b>	<b>34</b>
3.3.1 Κατασκευή δείκτη.....	34
3.3.2 Επίδραση ορίων ολοκλήρωσης .....	35
3.3.3 Επίδραση του αριθμού των σωματιδίων .....	37
3.3.4 Επίδραση του κλάσματος όγκου .....	38
3.3.5 Απόκλιση σε γεωμετρίες με ίδιο σετ παραμέτρων .....	39
3.3.6 Συμπέρασμα .....	40
<b>Κεφάλαιο 4. Ορισμός υπολογιστικού προβλήματος.....</b>	<b>41</b>
<b>4.1 Μαθηματική διατύπωση .....</b>	<b>41</b>
<b>4.2 OpenFOAM .....</b>	<b>43</b>
4.2.1 Μέθοδος πεπερασμένων όγκων .....	44
<b>4.3 Δημιουργία πλέγματος.....</b>	<b>45</b>
4.3.1 Gmsh.....	45
4.3.2 Δομή και ιδιότητες ενός έγκυρου πλέγματος .....	46
4.3.3 Πυκνότητα πλέγματος .....	47
<b>4.4 Υπολογιστική επίλυση .....</b>	<b>50</b>
4.4.1 Διαδικασία διακριτοποίησης.....	50
4.4.2 Επαναληπτική μέθοδος GAMG .....	51
4.4.3 SimpleFOAM .....	51
<b>Κεφάλαιο 5. Αποτελέσματα προσομοιώσεων ροής.....</b>	<b>55</b>
<b>5.1 Παράμετροι υπολογιστικής επίλυσης.....</b>	<b>55</b>
<b>5.2 Ροϊκά πεδία .....</b>	<b>57</b>

5.3	Διαπερατότητα συναρτήσει της παραμέτρου $T^*$ .....	63
5.4	Διαπερατότητα συναρτήσει του δείκτη $M_D$ .....	67
<b>Κεφάλαιο 6. Προτάσεις για μελλοντική έρευνα .....</b>		<b>75</b>
<b>Βιβλιογραφία .....</b>		<b>76</b>
<b>ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ .....</b>		<b>79</b>
Παράρτημα Α. Αρχείο εντολών HOOMD-blue (lj.py) .....		79
Παράρτημα Β. Αναπαράσταση Γεωμετριών .....		79
Παράρτημα Γ. Συναρτήσεις MATLAB .....		87
Παράρτημα Δ. Ακρίβεια επίλυσης MATLAB .....		89
Παράρτημα Ε. Διαγράμματα $g_z(r)$ .....		91
Παράρτημα ΣΤ. Διαγράμματα $K(r)$ και $L(r)$ .....		93
Παράρτημα Ζ. Διαγράμματα $M_D$ .....		97
Παράρτημα Η. AutoPilot.....		99
Παράρτημα Θ. Φάκελοι OpenFOAM .....		100
Παράρτημα Ι. Χωρική σύγκλιση πλέγματος .....		110
Παράρτημα ΙΑ. Ροϊκά πεδία .....		115

## Κατάλογος Σχημάτων

Σχ. 1 - Αναπαράσταση διεργασίας χύτευσης με μεταφορά ρητίνης.....	1
Σχ. 2 - Κατεύθυνση ροής, κάθετη ως προς τον άξονα των ινών.....	2
Σχ. 3 - Αρχική τετραγωνική διάταξη.....	8
Σχ. 4 - Αναπαράσταση της επίδρασης των περιοδικών οριακών συνθηκών στο κελί προσομοίωσης.....	9
Σχ. 5 - Αναπαράσταση της δημιουργίας cells list.....	10
Σχ. 6 - Σχηματική αναπαράσταση του δυναμικού Lennard-Jones.....	13
Σχ. 7 - Μέτρηση της αδιάστατης θερμοκρασίας για κάθε 10000 βήματα προσομοίωσης. Διακύμανση μεταξύ επιλεγμένης τιμής $T^*=0.2$ και πραγματικής μέτρησης.....	14
Σχ. 8 - Ενδεικτικές γεωμετρίες με τη μέθοδο δυναμικής Langevin (αριστερά) και με τη μέθοδο NVT θερμοστάτη Nose-Hover (δεξιά). Αριθμός σωματιδίων 6400, κλάσμα όγκου 0.125 και $T^* 0.3$ .....	17
Σχ. 9 - Σχηματική αναπαράσταση του υπολογισμού.....	23
Σχ. 10 - (Αριστερά) Το διάγραμμα της $g_2(r)$ για $T^*=0.3$ . Η διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά τη $g_2(r)_{\text{Poisson}}$ . (Δεξιά) Η γεωμετρία για την οποία πραγματοποιείται ο υπολογισμός. Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1.....	25
Σχ. 11 - (Αριστερά) Το διάγραμμα της $g_2(r)$ για $T^*=0.5$ . Η διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά τη $g_2(r)_{\text{Poisson}}$ . (Δεξιά) Η γεωμετρία για την οποία πραγματοποιείται ο υπολογισμός. Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1.....	25
Σχ. 12 - (Αριστερά) Το διάγραμμα της $g_2(r)$ για $T^*=0.7$ . Η διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά τη $g_2(r)_{\text{Poisson}}$ . (Δεξιά) Η γεωμετρία για την οποία πραγματοποιείται ο υπολογισμός. Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1.....	26
Σχ. 13 - (Αριστερά) Το διάγραμμα της $g_2(r)$ για $T^*=1$ . Η διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά τη $g_2(r)_{\text{Poisson}}$ . (Δεξιά) Η γεωμετρία για την οποία πραγματοποιείται ο υπολογισμός. Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1.....	27
Σχ. 14 - Διάγραμμα της $g_2(r)$ για δύο διαφορετικά κλάσματα όγκου σε κοινή $T^*$ . Αριθμός σωματιδίων 6400.....	27
Σχ. 15 - Η επίδραση των ακμών του κελιού στον υπολογισμό της $K(r)$ και ο διορθωτικός παράγοντας $w_k(r)=A'/\pi r^2$ .....	28

Σχ. 16 - Αναπαράσταση της συνάρτησης του Ripley για τρεις πρότυπες κατανομές. Η τυχαία κατανομή απεικονίζεται από την $K_{Poisson}$ .....	30
Σχ. 17 - Διάγραμμα $K(r)$ . Η διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά την $K_{Poisson}$ . Η $r_{cut-off} = 22.5D$ αντιστοιχεί στο 10% του υπολογιστικού κελιού (0.1L). Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1 .....	31
Σχ. 18 - Διάγραμμα $K(r)$ . Η διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά την $K_{Poisson}$ . Η $r_{cut-off} = 45D$ αντιστοιχεί στο 20% του υπολογιστικού κελιού (0.2L). Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1 .....	32
Σχ. 19 - Διάγραμμα $K(r)$ . Η διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά την $K_{Poisson}$ . Η $r_{cut-off} = 8D$ αντιστοιχεί στο 3% του υπολογιστικού κελιού (0.03L). Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1 .....	32
Σχ. 20 - Γραμμική αναπαράσταση της $K(r)$ . Αριστερά το διάγραμμα προκύπτει για $T^*=0.3$ και δεξιά για $T^*=0.5$ . Η $r_{cut-off} = 45D$ αντιστοιχεί στο 20% του υπολογιστικού κελιού (0.2L). Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1 .....	33
Σχ. 21 - Γραμμική αναπαράσταση της $K(r)$ . Αριστερά το διάγραμμα προκύπτει για $T^*=0.7$ και δεξιά για $T^*=0.9$ . Η $r_{cut-off} = 45D$ αντιστοιχεί στο 20% του υπολογιστικού κελιού (0.2L). Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1 .....	33
Σχ. 22 - Διάγραμμα $M_D$ ως προς το άνω άκρο ολοκλήρωσης $b=b(r)$ για $T^*$ στο εύρος 0.3-1.0. Το $b=90D$ αντιστοιχεί στο 40% του υπολογιστικού κελιού (0.4L). Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1 .....	36
Σχ. 23 - Διάγραμμα $M_D$ ως προς $T^*$ για διαφορετικό αριθμό σωματιδίων, $N$ . Κλάσμα όγκου 0.1 .....	37
Σχ. 24 - Διάγραμμα $M_D$ ως προς $T^*$ για τρία διαφορετικά κλάσμα όγκου. Αριθμός σωματιδίων 6400.....	38
Σχ. 25 - Διασπορά $M_D$ ως προς $T^*$ σύμφωνα με 5 γεωμετρικές όμοιου σετ παραμέτρων. Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1 .....	39
Σχ. 26 - Αντιπροσωπευτικό κελί κατανομής ιών.....	42
Σχ. 27 - Συνολική εικόνα της δομής του OpenFOAM.....	43
Σχ. 28 - Ισοζύγιο στους στοιχειώδεις όγκους ελέγχου: Εισροή+Παραγωγή=Εκροή .....	45
Σχ. 29 - Προοδευτική πύκνωση του πλέγματος όσο προσεγγίζεται η επιφάνεια των σωματιδίων .....	48

Σχ. 30 - Πύκνωση πλέγματος σε κατανομή συσσωματωμάτων σε δύο διαφορετικές κλίμακες μεγέθυνσης .....	49
Σχ. 31 - Αναπαράσταση ροϊκού πεδίου γύρω από συσσωματώματα.....	57
Σχ. 32 - Προφίλ πίεσης .....	58
Σχ. 33 - (Αριστερά) Αναπαράσταση ροϊκού πεδίου για $V_f = 0.1$ και $T^* = 0.3$ . (Δεξιά) Παρουσιάζεται το προφίλ της ταχύτητας στην έξοδο του κελιού συναρτήσει του ύψους $y$ .....	59
Σχ. 34 - (Αριστερά) Αναπαράσταση ροϊκού πεδίου για $V_f = 0.1$ και $T^* = 0.5$ . (Δεξιά) Παρουσιάζεται το προφίλ της ταχύτητας στην έξοδο του κελιού συναρτήσει του ύψους $y$ .....	59
Σχ. 35 - (Αριστερά) Αναπαράσταση ροϊκού πεδίου για $V_f = 0.1$ και $T^* = 0.7$ . (Δεξιά) Παρουσιάζεται το προφίλ της ταχύτητας στην έξοδο του κελιού συναρτήσει του ύψους $y$ .....	60
Σχ. 36 - (Αριστερά) Αναπαράσταση ροϊκού πεδίου για $V_f = 0.1$ και $T^* = 1$ . (Δεξιά) Παρουσιάζεται το προφίλ της ταχύτητας στην έξοδο του κελιού συναρτήσει του ύψους $y$ .....	61
Σχ. 37 - Αναπαράσταση του ροϊκού πεδίου για διαφορετικές κατανομές, με $V_f = 0.1$ και $T^*$ 0.30, 0.34, 0.38 (από αριστερά προς τα δεξιά).....	61
Σχ. 38 - Σύγκριση ροϊκού πεδίου για $T^* = 0.7$ και διαφορετικό κλάσμα όγκου. Αριστερά $V_f = 0.05$ και δεξιά με $V_f = 0.2$ .....	62
Σχ. 39 - Σύγκριση ροϊκού πεδίου για $T^* = 0.3$ και διαφορετικό κλάσμα όγκου. (Αριστερά) $V_f$ $= 0.05$ και (δεξιά) $V_f = 0.2$ .....	63
Σχ. 40 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $T^*$ για $V_f = 0.025$ .....	64
Σχ. 41 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $T^*$ για $V_f = 0.05$ .....	64
Σχ. 42 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $T^*$ για $V_f = 0.075$ .....	64
Σχ. 43 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $T^*$ για $V_f = 0.1$ .....	64
Σχ. 44 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $T^*$ για $V_f = 0.125$ .....	65
Σχ. 45 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $T^*$ για $V_f = 0.15$ .....	65
Σχ. 46 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $T^*$ για $V_f = 0.175$ .....	65
Σχ. 47 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $T^*$ για $V_f = 0.2$ .....	65
Σχ. 48 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $T^*$ για $V_f = 0.25$ .....	66
Σχ. 49 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $T^*$ για $V_f = 0.3$ .....	66
Σχ. 50 - Αναπαράσταση του ροϊκού πεδίου για δύο γεωμετρίες όμοιου σετ παραμέτρων...	67

Σχ. 51 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $M_D$ για $V_f=0.025$ .....	68
Σχ. 52 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $M_D$ για $V_f=0.05$ .....	68
Σχ. 53 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $M_D$ για $V_f=0.075$ .....	69
Σχ. 54 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $M_D$ για $V_f=0.1$ .....	69
Σχ. 55 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $M_D$ για $V_f=0.125$ .....	69
Σχ. 56 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $M_D$ για $V_f=0.15$ .....	69
Σχ. 57 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $M_D$ για $V_f=0.175$ .....	69
Σχ. 58 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς $M_D$ για $V_f=0.2$ .....	69
Σχ. 59 - Διάγραμμα διαπερατότητας ως προς $M_D$ για το εύρος $V_f=[0.05, 0.2]$ .....	70
Σχ. 60 - Διάγραμμα $K$ ως προς $M_D$ για $V_f=0.025$ . Η κόκκινη γραμμή αναπαριστά την συνάρτηση παρεμβολής .....	71
Σχ. 61 - Διάγραμμα $K$ ως προς $M_D$ για $V_f=0.05$ . Η κόκκινη γραμμή αναπαριστά την συνάρτηση παρεμβολής .....	71
Σχ. 62 - Διάγραμμα $K$ ως προς $M_D$ για $V_f=0.075$ . Η κόκκινη γραμμή αναπαριστά την συνάρτηση παρεμβολής .....	71
Σχ. 63 - Διάγραμμα $K$ ως προς $M_D$ για $V_f=0.1$ . Η κόκκινη γραμμή αναπαριστά την συνάρτηση παρεμβολής .....	71
Σχ. 64 - Διάγραμμα $K$ ως προς $M_D$ για $V_f=0.125$ . Η κόκκινη γραμμή αναπαριστά την συνάρτηση παρεμβολής .....	72
Σχ. 65 - Διάγραμμα $K$ ως προς $M_D$ για $V_f=0.15$ . Η κόκκινη γραμμή αναπαριστά την συνάρτηση παρεμβολής .....	72
Σχ. 66 - Διάγραμμα $K$ ως προς $M_D$ για $V_f=0.175$ . Η κόκκινη γραμμή αναπαριστά την συνάρτηση παρεμβολής .....	72
Σχ. 67 - Διάγραμμα $K$ ως προς $M_D$ για $V_f=0.2$ . Η κόκκινη γραμμή αναπαριστά την συνάρτηση παρεμβολής .....	72
Σχ. 68 - Διαπερατότητα συναρτήσει του $M_D$ μέχρι την τιμή 1.05, για $V_f=0.025$ . Η μαύρη συνεχής γραμμή αναπαριστά την γραμμική παρεμβολή.....	73
Σχ. 69 - Διαπερατότητα συναρτήσει του $M_D$ μέχρι την τιμή 1.05, για $V_f=0.075$ . Η μαύρη συνεχής γραμμή αναπαριστά την γραμμική παρεμβολή.....	73
Σχ. 70 - Διαπερατότητα συναρτήσει του $M_D$ μέχρι την τιμή 1.05, για $V_f=0.125$ . Η μαύρη συνεχής γραμμή αναπαριστά την γραμμική παρεμβολή.....	73

Σχ. 71 - Διαπερατότητα συναρτήσεως του $M_D$ μέχρι την τιμή 1.05, για $V_f=0.175$ . Η μαύρη συνεχής γραμμή αναπαριστά την γραμμική παρεμβολή.....	73
Σχ. 72 - Διαπερατότητα συναρτήσεως του $M_D$ για 4 διαφορετικά κλάσματα όγκου.....	74
Σχ. 73 – Σενάριο (“script”) σε γλώσσα προγραμματισμού Python για την περάτωση των προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής .....	79
Σχ. 74 - Γεωμετρία $T^*=0.3$ , $V_f =0.025$ .....	79
Σχ. 75 - Γεωμετρία $T^*=0.5$ , $V_f =0.025$ .....	79
Σχ. 76 - Γεωμετρία $T^*=0.7$ , $V_f =0.025$ .....	80
Σχ. 77 - Γεωμετρία $T^*=1.0$ , $V_f =0.025$ .....	80
Σχ. 78 - Γεωμετρία $T^*=0.3$ , $V_f =0.05$ .....	80
Σχ. 79 - Γεωμετρία $T^*=0.5$ , $V_f =0.05$ .....	80
Σχ. 80 - Γεωμετρία $T^*=0.7$ , $V_f =0.05$ .....	80
Σχ. 81 - Γεωμετρία $T^*=1.0$ , $V_f =0.05$ .....	80
Σχ. 82 - Γεωμετρία $T^*=0.3$ , $V_f =0.075$ .....	81
Σχ. 83 - Γεωμετρία $T^*=0.5$ , $V_f =0.075$ .....	81
Σχ. 84 - Γεωμετρία $T^*=0.7$ , $V_f =0.075$ .....	81
Σχ. 85 - Γεωμετρία $T^*=1.0$ , $V_f =0.075$ .....	81
Σχ. 86 - Γεωμετρία $T^*=0.3$ , $V_f =0.1$ .....	81
Σχ. 87 - Γεωμετρία $T^*=0.5$ , $V_f =0.1$ .....	81
Σχ. 88 - Γεωμετρία $T^*=0.7$ , $V_f =0.1$ .....	82
Σχ. 89 - Γεωμετρία $T^*=1.0$ , $V_f =0.1$ .....	82
Σχ. 90 - Γεωμετρία $T^*=0.3$ , $V_f =0.125$ .....	82
Σχ. 91 - Γεωμετρία $T^*=0.5$ , $V_f =0.125$ .....	82
Σχ. 92 - Γεωμετρία $T^*=0.7$ , $V_f =0.125$ .....	82
Σχ. 93 - Γεωμετρία $T^*=1.0$ , $V_f =0.125$ .....	82
Σχ. 94 - Γεωμετρία $T^*=0.3$ , $V_f =0.15$ .....	83
Σχ. 95 - Γεωμετρία $T^*=0.5$ , $V_f =0.15$ .....	83
Σχ. 96 - Γεωμετρία $T^*=0.7$ , $V_f =0.15$ .....	83
Σχ. 97 - Γεωμετρία $T^*=1.0$ , $V_f =0.15$ .....	83
Σχ. 98 - Γεωμετρία $T^*=0.3$ , $V_f =0.175$ .....	83
Σχ. 99 - Γεωμετρία $T^*=0.5$ , $V_f =0.175$ .....	83
Σχ. 100 - Γεωμετρία $T^*=0.7$ , $V_f =0.175$ .....	84

Σχ. 101 - Γεωμετρία $T^*=1.0$ , $V_f=0.175$ .....	84
Σχ. 102 - Γεωμετρία $T^*=0.3$ , $V_f=0.2$ .....	84
Σχ. 103 - Γεωμετρία $T^*=0.5$ , $V_f=0.2$ .....	84
Σχ. 104 - Γεωμετρία $T^*=0.7$ , $V_f=0.2$ .....	84
Σχ. 105 - Γεωμετρία $T^*=1.0$ , $V_f=0.2$ .....	84
Σχ. 106 - Γεωμετρία $T^*=0.3$ , $V_f=0.225$ .....	85
Σχ. 107 - Γεωμετρία $T^*=0.5$ , $V_f=0.225$ .....	85
Σχ. 108 - Γεωμετρία $T^*=0.7$ , $V_f=0.225$ .....	85
Σχ. 109 - Γεωμετρία $T^*=1.0$ , $V_f=0.225$ .....	85
Σχ. 110 - Γεωμετρία $T^*=0.3$ , $V_f=0.25$ .....	85
Σχ. 111 - Γεωμετρία $T^*=0.5$ , $V_f=0.25$ .....	85
Σχ. 112 - Γεωμετρία $T^*=0.7$ , $V_f=0.25$ .....	86
Σχ. 113 - Γεωμετρία $T^*=1.0$ , $V_f=0.25$ .....	86
Σχ. 114 - Γεωμετρία $T^*=0.3$ , $V_f=0.275$ .....	86
Σχ. 115 - Γεωμετρία $T^*=0.5$ , $V_f=0.275$ .....	86
Σχ. 116 - Γεωμετρία $T^*=0.7$ , $V_f=0.275$ .....	86
Σχ. 117 - Γεωμετρία $T^*=1.0$ , $V_f=0.275$ .....	86
Σχ. 118 - Γεωμετρία $T^*=0.3$ , $V_f=0.3$ .....	87
Σχ. 119 - Γεωμετρία $T^*=0.5$ , $V_f=0.3$ .....	87
Σχ. 120 - Γεωμετρία $T^*=0.7$ , $V_f=0.3$ .....	87
Σχ. 121 - Γεωμετρία $T^*=1.0$ , $V_f=0.3$ .....	87
Σχ. 122 - Συνάρτηση για τον υπολογισμό της $g_2(r)$ .....	88
Σχ. 123 - Συνάρτηση για τον ορισμό των περιοδικών οριακών συνθηκών .....	89
Σχ. 124 - Συνάρτηση για τη δημιουργία ιστογράμματος .....	89
Σχ. 125 - (Αριστερά) Συγκριτικό διάγραμμα $g_2(r)$ σε κοινή γεωμετρία ( $N=6400$ , κλάσμα όγκου $0.1$ , $T^*=0.3$ ). (Δεξιά) ραβδόγραμμα σχετικού σφάλματος .....	90
Σχ. 126 - (Αριστερά) Συγκριτικό διάγραμμα $g_2(r)$ σε κοινή γεωμετρία ( $N=6400$ , κλάσμα όγκου $0.1$ , $T^*=1$ ). (Δεξιά) ραβδόγραμμα σχετικού σφάλματος .....	91
Σχ. 127 - Διάγραμμα $g_2(r)$ για $T^*=0.4$ , κλάσμα όγκου $0.1$ και $r_{\text{cut-off}}=22.5D=0.1L$ .....	91
Σχ. 128 - Διάγραμμα $g_2(r)$ για $T^*=0.6$ , κλάσμα όγκου $0.1$ και $r_{\text{cut-off}}=22.5D=0.1L$ .....	91
Σχ. 129 - Διάγραμμα $g_2(r)$ για $T^*=0.8$ , κλάσμα όγκου $0.1$ και $r_{\text{cut-off}}=11.25D=0.05L$ .....	92
Σχ. 130 - Διάγραμμα $g_2(r)$ για $T^*=0.9$ , κλάσμα όγκου $0.1$ και $r_{\text{cut-off}}=11.25D=0.05L$ .....	92



Σχ. 131 - Διάγραμμα $g_2(r)$ για $T^*=0.4$ , κλάσμα όγκου 0.2 και $r_{\text{cut-off}}=30D=0.2L$ .....	92
Σχ. 132 - Διάγραμμα $g_2(r)$ για $T^*=0.6$ , κλάσμα όγκου 0.2 και $r_{\text{cut-off}}=15D=0.1L$ .....	92
Σχ. 133 - Διάγραμμα $g_2(r)$ για $T^*=0.8$ , κλάσμα όγκου 0.2 και $r_{\text{cut-off}}=7.5D=0.05L$ .....	92
Σχ. 134 - Διάγραμμα $g_2(r)$ για $T^*=0.9$ , κλάσμα όγκου 0.2 και $r_{\text{cut-off}}=7.5D=0.05L$ .....	92
Σχ. 135 - Διάγραμμα $g_2(r)$ για $T^*=0.4$ , κλάσμα όγκου 0.3 και $r_{\text{cut-off}}=25D=0.2L$ .....	93
Σχ. 136 - Διάγραμμα $g_2(r)$ για $T^*=0.6$ , κλάσμα όγκου 0.3 και $r_{\text{cut-off}}=25D=0.2L$ .....	93
Σχ. 137 - Διάγραμμα $g_2(r)$ για $T^*=0.8$ , κλάσμα όγκου 0.3 και $r_{\text{cut-off}}=12.5D=0.1L$ .....	93
Σχ. 138 - Διάγραμμα $g_2(r)$ για $T^*=0.9$ , κλάσμα όγκου 0.3 και $r_{\text{cut-off}}=12.5D=0.2L$ .....	93
Σχ. 139 - Διάγραμμα $K(r)$ για κλάσμα όγκου 0.2 και $r_{\text{cut-off}}=15D=0.1L$ .....	94
Σχ. 140 - Διάγραμμα $K(r)$ για κλάσμα όγκου 0.2 και $r_{\text{cut-off}}=7.5D=0.05L$ .....	94
Σχ. 141 - Διάγραμμα $K(r)$ για κλάσμα όγκου 0.3 και $r_{\text{cut-off}}=12.5D=0.1L$ .....	94
Σχ. 142 - Διάγραμμα $K(r)$ για κλάσμα όγκου 0.3 και $r_{\text{cut-off}}=7.5D=0.06L$ .....	94
Σχ. 143 - Διάγραμμα $L(r)$ για κλάσμα όγκου 0.1 και $r_{\text{cut-off}}=45D=0.2L$ ( $T^*=0.4$ ) .....	95
Σχ. 144 - Διάγραμμα $L(r)$ για κλάσμα όγκου 0.1 και $r_{\text{cut-off}}=45D=0.2L$ ( $T^*=0.6$ ) .....	95
Σχ. 145 - Διάγραμμα $L(r)$ για κλάσμα όγκου 0.1 και $r_{\text{cut-off}}=22.5D=0.1L$ ( $T^*=0.8$ ) .....	95
Σχ. 146 - Διάγραμμα $L(r)$ για κλάσμα όγκου 0.1 και $r_{\text{cut-off}}=22.5D=0.1L$ ( $T^*=1.0$ ) .....	95
Σχ. 147 - Διάγραμμα $L(r)$ για κλάσμα όγκου 0.2 και $r_{\text{cut-off}}=30D=0.2L$ ( $T^*=0.4$ ) .....	95
Σχ. 148 - Διάγραμμα $L(r)$ για κλάσμα όγκου 0.2 και $r_{\text{cut-off}}=30D=0.2L$ ( $T^*=0.6$ ) .....	95
Σχ. 149 - Διάγραμμα $L(r)$ για κλάσμα όγκου 0.2 και $r_{\text{cut-off}}=15D=0.1L$ ( $T^*=0.8$ ) .....	96
Σχ. 150 - Διάγραμμα $L(r)$ για κλάσμα όγκου 0.2 και $r_{\text{cut-off}}=15D=0.1L$ ( $T^*=1.0$ ) .....	96
Σχ. 151 - Διάγραμμα $L(r)$ για κλάσμα όγκου 0.3 και $r_{\text{cut-off}}=25D=0.2L$ ( $T^*=0.4$ ) .....	96
Σχ. 152 - Διάγραμμα $L(r)$ για κλάσμα όγκου 0.3 και $r_{\text{cut-off}}=25D=0.2L$ ( $T^*=0.6$ ) .....	96
Σχ. 153 - Διάγραμμα $L(r)$ για κλάσμα όγκου 0.3 και $r_{\text{cut-off}}=12.5D=0.1L$ ( $T^*=0.8$ ) .....	96
Σχ. 154 - Διάγραμμα $L(r)$ για κλάσμα όγκου 0.2 και $r_{\text{cut-off}}=12.5D=0.1L$ ( $T^*=1.0$ ) .....	96
Σχ. 155 - Διάγραμμα $M_D$ ως προς $b=b(r)$ , για $V_f=0.1$ και $r_{\text{cut-off}}=90D=0.4L$ (περιοχή συσσωματωμάτων) .....	97
Σχ. 156 - Διάγραμμα $M_D$ ως προς $b=b(r)$ , για $V_f=0.1$ και $r_{\text{cut-off}}=90D=0.4L$ (περιοχή τυχαίας κατανομής) .....	97
Σχ. 157 - Διάγραμμα $M_D$ ως προς $b=b(r)$ , για $V_f=0.2$ και $r_{\text{cut-off}}=65D=0.4L$ (περιοχή συσσωματωμάτων) .....	97
Σχ. 158 - Διάγραμμα $M_D$ ως προς $b=b(r)$ , για $V_f=0.2$ και $r_{\text{cut-off}}=65D=0.4L$ (περιοχή τυχαίας κατανομής) .....	97

Σχ. 159 - Διάγραμμα $M_D$ ως προς $b=b(r)$ , για $V_f=0.3$ και $r_{cut-off}=50D=0.4L$ (περιοχή συσσωματωμάτων).....	98
Σχ. 160- Διάγραμμα $M_D$ ως προς $b=b(r)$ , για $V_f=0.3$ και $r_{cut-off}=50D=0.4L$ (περιοχή τυχαίας κατανομής).....	98
Σχ. 161 – Διάγραμμα $M_D$ ως προς $T^*$ για κλάσμα όγκου 0.025.....	98
Σχ. 162 - Διάγραμμα $M_D$ ως προς $T^*$ για κλάσμα όγκου 0.075 .....	98
Σχ. 163 - Διάγραμμα $M_D$ ως προς $T^*$ για κλάσμα όγκου 0.125 .....	99
Σχ. 164 - Διάγραμμα $M_D$ ως προς $T^*$ για κλάσμα όγκου 0.175 .....	99
Σχ. 165 - Διάγραμμα $M_D$ ως προς $T^*$ για κλάσμα όγκου 0.225 .....	99
Σχ. 166 - Διάγραμμα $M_D$ ως προς $T^*$ για κλάσμα όγκου 0.275 .....	99
Σχ. 167 – Γραφικό περιβάλλον (GUI) προγράμματος AutoPilot.....	100
Σχ. 168 – Αρχείο πίεσης, $p$ .....	101
Σχ. 169 - Αρχείο πίεσης, $U$ .....	102
Σχ. 170 - Αρχείο κινηματικού ιξώδους, $transportProperties$ .....	103
Σχ. 171 – Αρχείο μοντέλου τύρβης, $turbulenceProperties$ .....	103
Σχ. 172 – Αρχείο $controlDict$ .....	104
Σχ. 173 – Αρχείο $createPatchDict$ .....	106
Σχ. 174 – Αρχείο $fvSchemes$ .....	107
Σχ. 175 – Αρχείο $fvSolution$ .....	109
Σχ. 176 – Αρχείο $decomposeParDict$ .....	109
Σχ. 177 – Σταδιακή πύκνωση του πλέγματος (Από αριστερά προς τα δεξιά) .....	110
Σχ. 178 – Μεταβολή της αριθμητικής τιμής της διαπερατότητας λόγω της πύκνωσης του πλέγματος. Αύξηση του αριθμού των κελιών συνεπάγεται μείωση της απόστασης $h$ . Η τιμή 0 αναπαριστά τη λύση του Richardson.....	112
Σχ. 179 – Μεταβολή της αριθμητικής τιμής της διαπερατότητας λόγω της πύκνωσης του πλέγματος. ....	112
Σχ. 180 – Αποτελέσματα παρεμβολής Richardson για κλάσμα όγκου 0.2 και 0.3.....	113
Σχ. 181 – Αναπαράσταση αποτελεσμάτων διαπερατότητας για διαφορετικό $N$ . Για την παρεμβολή Richardson χρησιμοποιήθηκαν $N=400$ , $N=1600$ και $N=6400$ (από αριστερά προς τα δεξιά). Με τη διακεκομμένη γραμμή (dash-dot) αναπαρίσταται η λύση κατά Richardson.....	113
Σχ. 182 – Σμίκρυνση του Σχ. 181 στην περιοχή ασυμπτωτικής σύγκλισης .....	113

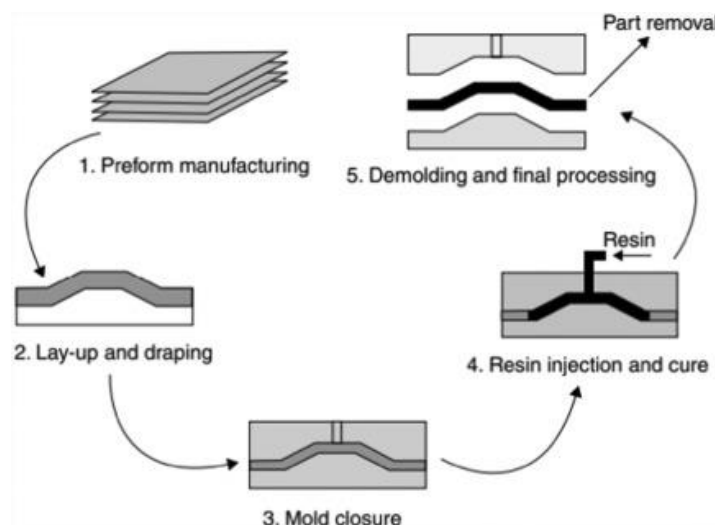
Σχ. 183 – Αποτελέσματα παρεμβολής Richardson σύμφωνα με τον αριθμό σωματιδίων N	114
Σχ. 184 – Ροϊκά πεδία για διαφορετικό αριθμό N, σε όμοιο $V_f$ και $T^*$ . Αριστερά N=100 και δεξιά N=400.....	114
Σχ. 185 - Ροϊκά πεδία για διαφορετικό αριθμό N, σε όμοιο $V_f$ και $T^*$ . Αριστερά N=1600 και δεξιά N=6400.....	114
Σχ. 186 – $T^*=0.3$ , $V_f=0.025$ .....	115
Σχ. 187 – $T^*=0.5$ , $V_f=0.025$ .....	115
Σχ. 188– $T^*=0.7$ , $V_f=0.025$ .....	115
Σχ. 189 – $T^*=0.3$ , $V_f=0.05$ .....	115
Σχ. 190 – $T^*=0.5$ , $V_f=0.05$ .....	115
Σχ. 191 – $T^*=0.7$ , $V_f=0.05$ .....	115
Σχ. 192 – $T^*=0.3$ , $V_f=0.075$ .....	115
Σχ. 193 – $T^*=0.5$ , $V_f=0.075$ .....	115
Σχ. 194 – $T^*=0.7$ , $V_f=0.075$ .....	115
Σχ. 195 – $T^*=0.3$ , $V_f=0.125$ .....	116
Σχ. 196 – $T^*=0.5$ , $V_f=0.125$ .....	116
Σχ. 197 – $T^*=0.7$ , $V_f=0.125$ .....	116
Σχ. 198 – $T^*=0.3$ , $V_f=0.15$ .....	116
Σχ. 199 – $T^*=0.5$ , $V_f=0.15$ .....	116
Σχ. 200 – $T^*=0.7$ , $V_f=0.15$ .....	116
Σχ. 201 – $T^*=0.3$ , $V_f=0.175$ .....	116
Σχ. 202 – $T^*=0.5$ , $V_f=0.175$ .....	116
Σχ. 203 – $T^*=0.7$ , $V_f=0.175$ .....	116
Σχ. 204 – $T^*=0.3$ , $V_f=0.2$ .....	117
Σχ. 205 – $T^*=0.5$ , $V_f=0.2$ .....	117
Σχ. 206 – $T^*=0.7$ , $V_f=0.2$ .....	117
Σχ. 207 – $T^*=0.3$ , $V_f=0.25$ .....	117
Σχ. 208 – $T^*=0.5$ , $V_f=0.25$ .....	117
Σχ. 209 – $T^*=0.7$ , $V_f=0.25$ .....	117
Σχ. 210 – $T^*=0.3$ , $V_f=0.3$ .....	117
Σχ. 211 – $T^*=0.5$ , $V_f=0.3$ .....	117
Σχ. 212 – $T^*=0.7$ , $V_f=0.3$ .....	117

## Κεφάλαιο 1. Εισαγωγή

---

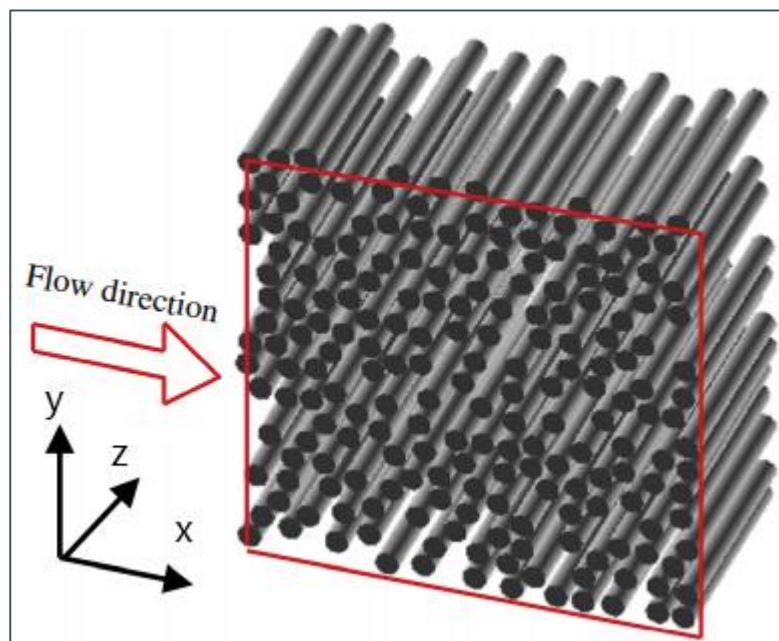
Η κατανόηση και εν συνεχεία η πρόβλεψη των ιδιοτήτων όταν μελετώνται φαινόμενα μεταφοράς σε ένα πορώδες μέσο φέρει μεγάλης σημασίας στην χημική, μηχανολογική και πετρελαϊκή βιομηχανία [1]. Τα πορώδη μέσα τα οποία αποτελούνται από μακριά κυλινδρικά σωματίδια είναι γνωστά ως ινώδη. Χαρακτηριστικά παραδείγματα αποτελούν τα σύνθετα υλικά, τα βιομηχανικά φίλτρα, οι βιολογικοί ιστοί κ.α..

Η ευκολία με την οποία διαπερνά ένα ρευστό μια κατανομή ενισχυτικών ινών ορίζει την διαπερατότητα του ινώδους μέσου που αποτελεί ιδιαίτερα σημαντικό παράγοντα στην κατασκευή σύνθετων υλικών. Όσο μεγαλύτερη είναι η διαπερατότητα τόσο πιο εύκολο είναι για το ρευστό να διαπεράσει τις εμποτισμένες ίνες. Η ιξώδης ροή ενός ρευστού εντός ινώδους μέσου συναντάται κατά κόρον στην κατασκευή σύνθετων υλικών σύμφωνα με τη διαδικασία της χύτευσης υγρού σε κλειστό καλούπι και κυρίως στην χύτευση με μεταφορά ρητίνης (resin transfer molding). Πρόκειται για μια ελκυστική μέθοδο παραγωγής υψηλής ποιότητας υλικών. Συνιστά μία διαδικασία μειωμένου κόστους και φιλική προς το περιβάλλον, μέσω της οποίας επιτυγχάνεται υψηλή διαστατική ακρίβεια, ακόμη και σε περίπλοκα γεωμετρικά σχήματα, σύνθετων υλικών με βελτιωμένες μηχανικές ιδιότητες [2]. Η διαπερατότητα επηρεάζει βασικές παραμέτρους της διαδικασίας όπως η πίεση και ο χρόνος πλήρωσης του καλουπιού. Επομένως, η γνώση της διαπερατότητας συντελεί στην βελτιστοποίηση της διεργασίας με τον κατάλληλο σχεδιασμό των εργαλείων που απαιτούνται και τον πιο αποδοτικό ποιοτικό έλεγχο [3].



**Σχ. 1 - Αναπαράσταση διεργασίας χύτευσης με μεταφορά ρητίνης**

Η διεύθυνση της ροής του ρευστού στην ανάλυση μας είναι κάθετη στον άξονα των κυλινδρικών ινών οι οποίες είναι παράλληλες μεταξύ τους και έχουν σταθερή ακτίνα. Για την πρόβλεψη της εγκάρσιας διαπερατότητας μελετάται η ροή σε δισδιάστατο επίπεδο, όπου οι ίνες προσομοιώνονται ως κυκλικοί δίσκοι γύρω από τους οποίους εξελίσσεται με πολύ αργό ρυθμό η ιξώδης ροή.



**Σχ. 2 - Κατεύθυνση ροής, κάθετη ως προς τον άξονα των ινών**

Συνηθίζεται η κατηγοριοποίηση των μονοκατευθυντικών ινωδών συστημάτων σε διατεταγμένα (ordered) και μη διατεταγμένα (disordered), ανάλογα με την κατανομή των ινών. Διατεταγμένα είναι τα συστήματα όπου οι ίνες οργανώνονται σε τετραγωνική, εξαγωνική ή κάθε άλλη κλιμακωτή διάταξη. Αντιθέτως, διαταραγμένα είναι τα συστήματα σε οποιαδήποτε άλλη διάταξη [4].

Τα διατεταγμένα συστήματα αναλύονται εύκολα αλλά απέχουν αρκετά από τα συστήματα ινών που συναντώνται στην πραγματικότητα. Έχει αποδειχθεί ότι η διαπερατότητα σε τέτοιες κανονικές δομές (π.χ. τετραγωνικές, εξαγωνικές) είναι συνάρτηση του πορώδους του μέσου. Ο Gebbart [2] παρουσίασε ένα μαθηματικό μοντέλο για την πρόβλεψη της εγκάρσιας διαπερατότητας σε τετραγωνικές και εξαγωνικές δομές. Ως εργαλείο ανάλυσης την θεωρητική προσέγγιση της λίπανσης (lubrication approximation) και

με την παραδοχή ότι η αντίσταση της ροής οφείλεται κυρίως στα στενά διάκενα μεταξύ των γειτονικών κυλίνδρων σε μικρά πορώδη, απέδειξε ότι η εγκάρσια διαπερατότητα εξαρτάται μόνο από το πορώδες της δομής. Αντίστοιχες συσχετίσεις των Tamayol & Bahrami [5], Drummond & Tahir [6], Berdichevsky & Cai [7] αποδεικνύονται ικανοποιητικά ακριβείς για ροή μέσω περιοδικά διατεταγμένων ινών.

Από την άλλη πλευρά, σε ινώδη μέσα, όπως αυτά που συναντώνται στις διεργασίες χύτευσης υγρού, οι κατανομές ινών δεν ακολουθούν κάποια συγκεκριμένη κανονική κατανομή. Ο βασικός τρόπος υπολογισμού της διαπερατότητας είναι με πειραματικές μετρήσεις. Ωστόσο, τα πειράματα είναι μια χρονοβόρα, επιρρεπής σε λάθη και με μεγάλο κόστος διαδικασία. Εξαρτάται από πολλούς παράγοντες όπως είναι η μέθοδος υπολογισμού, το μέσο και οι τεχνικές που χρησιμοποιούνται καθώς και η μέθοδος έγχυσης του υγρού η οποία μπορεί να είναι είτε ακτινική είτε μονοκατευθυντική. Συνεπώς, κρίνεται αναγκαία, πέρα από την προσπάθεια για πιο ακριβείς και γρήγορες πειραματικές μετρήσεις, η ανάπτυξη κατάλληλων υπολογιστικών εργαλείων για την πρόβλεψη της διαπερατότητας.

Ανατρέχοντας κανείς στην σχετική βιβλιογραφία [8], διαπιστώνει πως στις μετρήσεις για ρεαλιστικές κατανομές ινών έχει παρατηρηθεί μεγάλο εύρος στις τιμές της διαπερατότητας για υλικά σε ίδιο πορώδες, το οποίο δεν δικαιολογείται στο σφάλμα που εισάγεται από τα πειράματα. Οι Παπαθανασίου & Chen [9] χρησιμοποιώντας την μέθοδο BEM (boundary element method) έλυσαν υπολογιστικά το πρόβλημα εγκάρσιας ροής διαμέσου τυχαία κατανεμημένων ινών. Παρατήρησαν μεγάλη απόκλιση στις τιμές της διαπερατότητας, ανάλογη των αποκλίσεων που είχε μετρηθεί πειραματικά, για μικροδομές ίδιου πορώδους, οι οποίες παρουσίαζαν τοπικές ανομοιογένειες ως προς την κατανομή των ινών. Σημαντικές αποκλίσεις είχαν βρεθεί και σε προγενέστερη ανάλυση που είχε γίνει από τους Sangani & Yao [10], οι οποίοι χρησιμοποίησαν την μέθοδο πολυπολικής συνεγκατάστασης (multipole collocation method) για την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων Stokes που διέπουν το πρόβλημα ιζώδης ροής. Συμπεραίνεται, λοιπόν, πως ο τρόπος που οι ίνες διατάσσονται στον χώρο επηρεάζει σε μεγάλο βαθμό την τιμή της διαπερατότητας.

Σαρώσεις υπολογιστικής τομογραφίας, σε επίπεδο μικροκλίμακας, σύνθετων υλικών αναπαριστούν μια εικόνα ινών οι οποίες μπλέκονται μεταξύ τους (entanglement) [11]. Το φαινόμενο αυτό έχει σαν αποτέλεσμα των σχηματισμό συσσωματωμάτων, ομάδων γειτονικών ινών οι οποίες συγκεντρώνονται και παραμένουν μαζί κατά μήκος του όγκου του σύνθετου υλικού. Η κατανομή δεν είναι τυχαία και ομοιόμορφη αλλά παρουσιάζει έντονες

ανομοιογένειες, οι οποίες εκφράζονται από τον σχηματισμό τοπικών συγκεντρώσεων ινών σε ορισμένα σημεία του μέσου. Η σύζευξη θεωρητικών μοντέλων με τη ρεαλιστική, φαινομενολογική συμπεριφορά των σύνθετων υλικών απαιτεί μία λεπτομερή ανάλυση της μορφολογίας τους. Ωστόσο, στο σημείο αυτό προκύπτει το ερώτημα ως προς το ποια μεγέθη και ιδιότητες θα πρέπει να αναλυθούν-μετρηθούν και με ποια διαδικασία, σε συνεπαγωγή με το εύρος της ακρίβειας που χρειάζεται. Οι μελέτες που έχουν διεξαχθεί ανά τα χρόνια δεν συγκλίνουν απαραίτητα ως προς το πρώτο ερώτημα [12]. Κρίνεται, λοιπόν, αναγκαία η εύρεση ενός δείκτη ο οποίος θα μας πληροφορεί για το πόσο ανομοιόμορφη είναι η κατανομή των ινών στον όγκο του υλικού. Ως μέτρο σύγκρισης της χωρικής διασποράς των ινών λαμβάνεται η τυχαία κατανομή Poisson. Στην τυχαία κατανομή, όλα τα σημεία έχουν την ίδια πιθανότητα να βρεθούν σε κάποια συγκεκριμένη θέση στον χώρο, και η θέση τους αυτή δεν εξαρτάται από τα υπόλοιπα σημεία. Παρότι δεν μπορεί να σταθεί ρεαλιστικά σε ένα μοντέλο εξαιτίας των διαστάσεων των ινών, η κατανομή Poisson είναι ένα εξαιρετικό θεωρητικό εργαλείο, που θα χρησιμοποιηθεί και στην παρούσα ανάλυση για τον χαρακτηρισμό των κατανομών [13].

## Κεφάλαιο 2. Παραγωγή γεωμετριών με προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής

---

Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάζεται η διαδικασία παραγωγής γεωμετριών που θα αποτελέσουν την βάση της υπολογιστικής ανάλυσης που θα ακολουθήσει. Ως γεωμετρία αναφέρεται η κατανομή των ινών στο επίπεδο. Οι ίνες προσομοιώνονται ως σωματίδια κυκλικής διατομής, σταθερής ακτίνας που δεν επεκτείνονται στην τρίτη διάσταση. Στόχος μας είναι η δημιουργία χαρακτηριστικών, ρεαλιστικών κατανομών με προοδευτική ανάπτυξη συσσωματωμάτων. Με αυτό τον τρόπο, αφού αρχικά χαρακτηρίσουμε τις γεωμετρίες ως προς την χωρική συσχέτιση των ινών, θα μπορέσουμε να βγάλουμε χρήσιμα συμπεράσματα για την επίδραση των συσσωματωμάτων στην διαπερατότητα, μια μακροσκοπική ιδιότητα του μέσου που παρουσιάζει μεγάλο πρακτικό ενδιαφέρον.

Για την δημιουργία των γεωμετριών χρησιμοποιήθηκε το HOOMD-blue [14], ένα open-source πακέτο της Python για προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής. Η επιλογή του συγκεκριμένου λογισμικού έγινε λόγω των γρήγορων και αξιόπιστων προσομοιώσεων που δύναται να εκτελέσει καθώς και λόγω της ευελιξίας που προσφέρει στην τροποποίηση πληθώρας παραμέτρων.

Οι προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής αποτελούν ένα ιδιαίτερα χρήσιμο εργαλείο για την ανάλυση φυσικών φαινομένων σε ατομικό και μοριακό επίπεδο. Τα άτομα και τα μόρια αλληλοεπιδρούν μεταξύ τους για πεπερασμένο χρονικό διάστημα. Έτσι, αν είναι γνωστός ο τρόπος αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων, δύναται να προβλέψουμε την δυναμική εξέλιξη του συστήματος. Προσομοιώσεις τέτοιου τύπου βρίσκουν ευρεία εφαρμογή στο κομμάτι της επιστήμης υλικών, στην φυσικοχημεία, στην μελέτη βιολογικών συστημάτων κ.α., όπου οι διαστάσεις των σωματιδίων είναι της τάξης των μικρο-νανόμετρων ( $\mu\text{m}$ - $\text{nm}$ ). Ακολουθεί μια συνοπτική περιγραφή του αλγόριθμου που χρησιμοποιήθηκε για την παραγωγή των γεωμετριών όπου αναλύονται εκτενέστερα κάποια κομβικά σημεία της διαδικασίας.



## 2.1 Ορισμός παραμέτρων

### Γεωμετρία προσομοίωσης

Ως γεωμετρία ορίζεται ένα ινώδες μέσο τετραγωνικής διατομής. Η δομή αυτή αναπαρίσταται σε ένα υπολογιστικό κελί, ύψους  $H$  και μήκους  $L$ . Το περιεχόμενο του ορίζεται πλήρως από τον αριθμό των ινών,  $N$ , όπως επίσης και από το πορώδες ή το κλάσμα όγκου του  $V_f$ .

### Πορώδες και κλάσμα όγκου

Το πορώδες ή κλάσμα κενού εκφράζει την αναλογία κενού χώρου ως προς το συνολικό όγκο του υλικού. Συμβολίζεται ως  $\phi$  και μαθηματικά ορίζεται ως:

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

Όπου:

$V_{void}$  : όγκος κενού χώρου στο υλικό ( $m^3$ )

$V_{total}$  : συνολικός όγκος υλικού ( $m^3$ )

Ο συμπληρωματικός όρος του  $\phi$  είναι το κλάσμα όγκου. Αποτελεί μέτρο του όγκου που καταλαμβάνουν οι ίνες ως προς το συνολικό όγκο του υλικού. Συμβολίζεται ως  $V_f$  και ορίζεται ως:

$$V_f = \frac{V_s}{V_{total}} = 1 - \phi \quad (2.2)$$

Όπου:

$V_s$  : όγκος που καταλαμβάνουν οι ίνες ( $m^3$ )

### Αδιάστατη θερμοκρασία

Η προσέγγιση της δημιουργίας τέτοιων δομών μέσω προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής, ουσιαστικά λειτουργεί ως μία τεχνητή διεργασία μορφοποίησης του υλικού. Οι θερμικές συνθήκες στις οποίες υποβάλλεται η δομή καθορίζουν την τελική κατανομή των

ινών. Στην παρούσα διπλωματική χρησιμοποιείται μία αδιάστατη μορφή της θερμοκρασίας η οποία συμβολίζεται ως  $T^*$  και ορίζεται ως:

$$T^* = \frac{\kappa_B T}{\varepsilon} \quad (2.3)$$

Όπου:

$\kappa_B$ : η σταθερά Boltzmann, 0.00831446262 ( $\frac{kJoule}{mol\ Kelvin}$ )

$T$ : η πραγματική θερμοκρασία του συστήματος (Kelvin)

$\varepsilon$ : ενέργεια διασποράς του δυναμικού των Lennard-Jones ( $\frac{kJoule}{mol}$ )

## 2.2 Αρχικοποίηση γεωμετρίας

### 2.2.1 Ορισμός κελιού προσομοίωσης

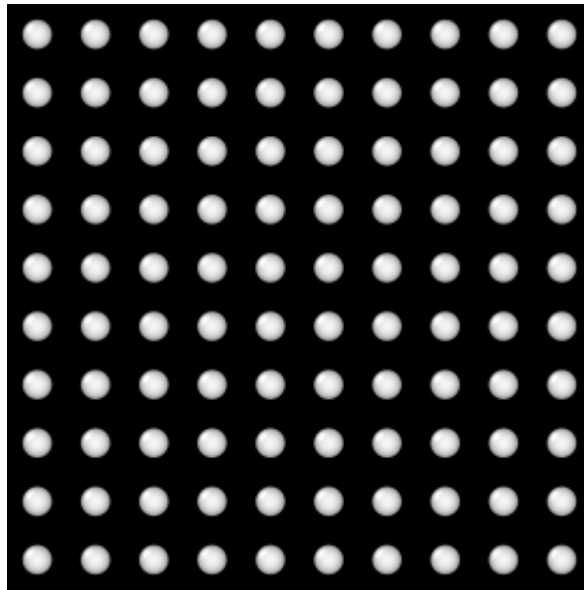
Πρωταρχικό βήμα συνιστά η οριοθέτηση του χώρου εσωτερικά του οποίου θα κατανεμηθούν τα σωματίδια. Στην παρούσα διπλωματική υιοθετείται η προσέγγιση δισδιάστατων μη περιστρεφόμενων τετραγωνικών κελιών προσομοίωσης. Προτού εισαχθούν τα σωματίδια στο υπολογιστικό κελί είναι απαραίτητο να καθοριστούν οι αρχικές θέσεις και ταχύτητες τους στο χώρο. Το πεδίο ταχυτήτων ορίζεται μηδέν. Όσον αφορά τις αρχικές θέσεις των σωματιδίων, συνήθως πρακτική συνιστά η επιλογή μίας εκ των πρότυπων διατάξεων όπως τετραγωνική ή εξαγωνική, στο επίπεδο, αλλά και απλή κυβική, fcc, bcc εάν μελετάται ένα τρισδιάστατο μοντέλο. Είναι προτιμητέα μια οργάνωση των σωματιδίων σε καθορισμένη διάταξη, και όχι τυχαία. Έχει αποδειχθεί ότι η αρχική διάταξη δεν επιδρά στην τελική μορφή του συστήματος εφόσον ολοκληρωθεί ένας αρκούντως μεγάλος αριθμός επαναλήψεων μοριακής δυναμικής, καθώς έχει επιτευχθεί μια κατάσταση ισορροπίας του συστήματος [15]. Γεωμετρίες με διαφορετική αρχική κατανομή σωματιδίων καταλήγουν σε στατιστικά παρόμοιες γεωμετρίες όπου η χωρική συσχέτιση των σωματιδίων είναι η ίδια. Η επιλογή τυχαίας κατανομής είναι πιο χρονοβόρα και συχνά συναντώνται δυσκολίες στη δημιουργία γεωμετριών με μεγάλο αριθμό πλήρωσης σωματιδίων, καθώς θέσεις απορρίπτονται διαρκώς λόγω της συνθήκης μη αλληλοεπικάλυψης των σωματιδίων.

Επιλέγεται η τετραγωνική διάταξη η οποία πραγματοποιείται δημιουργώντας αρχικά ένα στοιχειώδες τετράγωνο πλευράς  $a$ , όπου στο εσωτερικό του περικλείεται ένα σωματίδιο ακτίνας  $R$ . Η εισαγωγή της μεταβλητής  $a$  καθορίζει το κλάσμα όγκου σωματιδίων,  $V_f$ , ως:

$$V_f = \frac{\pi R^2}{a^2} \quad (2.4)$$

Η εικόνα αυτή επαναλαμβάνεται ως προς τους  $x$  και  $y$  άξονες έως ότου ο συνολικός χώρος έχει συμπληρωθεί με  $n^2$  τέτοια τετράγωνα. Παράλληλα υπολογίζεται το μήκος και το ύψος του κελιού  $L$  και  $H$  αντίστοιχα :

$$L = H = na \quad (2.5)$$

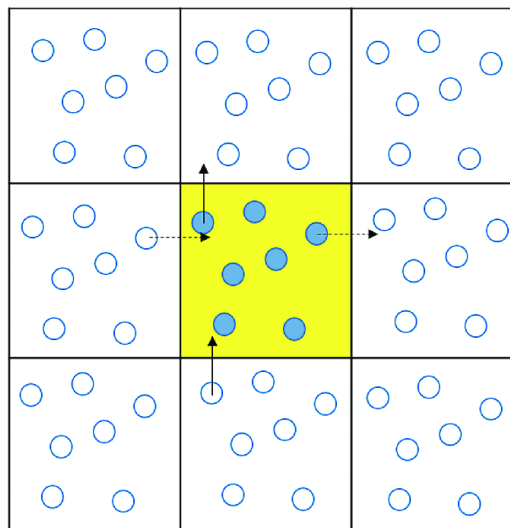


**Σχ. 3 - Αρχική τετραγωνική διάταξη**

### 2.2.2 Περιοδικές οριακές συνθήκες

Το υπολογιστικό κελί που διαμορφώνεται προτού ξεκινήσει η μοριακή προσομοίωση δεν περιλαμβάνει φυσικά όρια. Στην περίπτωση που κάποιο σωματίδιο βρεθεί να προσεγγίζει κάποια από τις πλευρές του, εάν η επίδραση των γειτονικών σωματιδίων του

είναι αρκούντως ικανή θα το θέσει εκτός της γεωμετρίας. Αυτό σημαίνει πως στο πέρας της προσομοίωσης οι αρχικές συνθήκες θα έχουν μεταβληθεί. Επιπλέον, ένα βασικό πρόβλημα που προκύπτει εφόσον οριστούν οι παράμετροι του υπολογιστικού χώρου είναι η εγκυρότητα του μοντέλου. Η αναπαράσταση ενός ρεαλιστικού συστήματος θα έπρεπε να περιλαμβάνει έναν άπειρο αριθμό σωματιδίων και κατ' επέκταση άπειρο χώρο. Οι περιοδικές οριακές συνθήκες αντιμετωπίζουν τα δύο παραπάνω προβλήματα ως εξής. Θεωρώντας ένα μη πεπερασμένο χώρο, ως αποτέλεσμα επαναλαμβανόμενων, όμοιων κελιών όπως αυτό που εξετάζεται, όταν κάτι εξέρχεται των ορίων του κελιού θα πρέπει να επανεμφανίζεται στην ακριβώς αντίθετη έδρα δίχως να παραλείπεται κάποια πληροφορία. Η συνθήκη περιοδικότητας των συνόρων ουσιαστικά εξασφαλίζει ότι υποθέτοντας αρχικά έναν άπειρο χώρο, αρκεί η μελέτη μίας μικρής υποδιαίρεσης του καθώς όλες οι πληροφορίες επαναλαμβάνονται και υπάρχουν στην περιοχή αυτή [16].



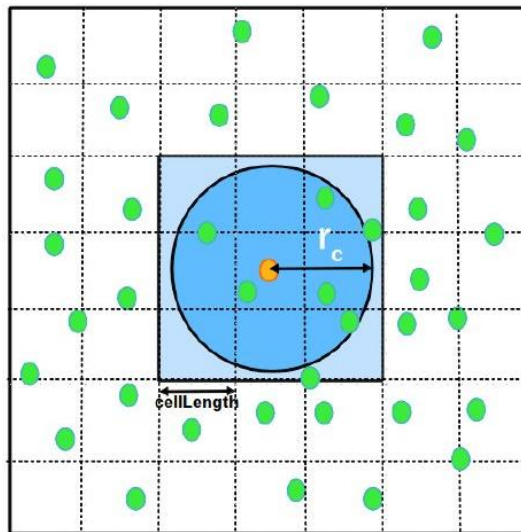
**Σχ. 4 - Αναπαράσταση της επίδρασης των περιοδικών οριακών συνθηκών στο κελί προσομοίωσης**

## **2.3 Υπολογισμός δυνάμεων αλληλεπίδρασης των σωματιδίων**

### **2.3.1 Ορισμός λίστας κελιών και γειτόνων**

Η κίνηση των σωματιδίων και η δυναμική εξέλιξη του συστήματος είναι απόρροια των δυνάμεων που αναπτύσσονται. Οι δυνάμεις αλληλεπίδρασης μειώνονται όσο η απόσταση

τους αυξάνεται, με αποτέλεσμα η κίνηση ενός σωματιδίου να μην επηρεάζεται από την ύπαρξη σωματιδίων σε αρκούντως μεγάλες αποστάσεις. Επομένως, η συμμετοχή των μακρινών σωματιδίων στον υπολογισμό της συνολικής δύναμης θεωρείται αμελητέα. Γι' αυτό το λόγο δημιουργούνται λίστες κελιών και γειτονικών σωματιδίων (cell lists and neighbours lists) με σκοπό να μειωθεί το υπολογιστικό κόστος [17]. Όπως φαίνεται στο Σχ. 5, ο χώρος διαιρείται σε κελιά σύμφωνα με μία τιμή  $r_{cut}$ .



**Σχ. 5 - Αναπαράσταση της δημιουργίας cells list.**

Η λίστα γειτόνων ενός δεδομένου σωματιδίου περιέχει τις συντεταγμένες όλων των σωματιδίων εντός του εύρους αλληλεπίδρασης,  $r_{cut}$ . Η καθαρή δύναμη που ενεργεί κατά ζεύγος μπορεί να υπολογιστεί με αμελητέο σφάλμα λαμβάνοντας υπόψιν μόνο τα σωματίδια που βρίσκονται στην λίστα γειτόνων. Η λίστα κελιών υπολογίζεται εκ νέου όποτε χρειάζεται (συνήθως κάθε 9 χρονικά βήματα) και χτίζεται η λίστα γειτόνων για κάθε σωματίδιο προκειμένου να συμπεριλαμβάνονται εκείνα που ήρθαν πιο κοντά [18]. Αντίστοιχα, απορρίπτονται όσα απομακρύνθηκαν περαιτέρω από την απόσταση που έχει ορισθεί.

Επόμενο βήμα είναι ο υπολογισμός των δυνάμεων. Τα δυναμικά ζεύγους ορίζουν την λειτουργική μορφή της δυναμικής ενέργειας και εκφράζουν το είδος των αλληλεπιδράσεων δύο σωματιδίων δεδομένης της απόστασης διαχωρισμού. Η επιλογή δυναμικού εξαρτάται από την φυσική του υπό μελέτη προβλήματος. Εισάγοντας τις επιθυμητές παραμέτρους υπολογίζεται η δύναμη αλληλεπίδρασης μεταξύ δύο γειτονικών σωματιδίων.

$$\vec{F}_C = \begin{cases} -\nabla U_{pair}(r), & r < r_{cut} \\ 0, & r \geq r_{cut} \end{cases} \quad (2.6)$$

Σε κάθε βήμα επανάληψης υπολογίζονται εκ νέου οι δυνάμεις ζεύγους μεταξύ κάθε διάδας γειτονικών σωματιδίων στο κελί προσομοίωσης.

Μερικά από τα πλέον διαδεδομένα δυναμικά ζεύγους είναι: δυναμικό Lennard Jones, δυναμικό Buckingham, δυναμικό Gaussian, δυναμικό Fourier, δυναμικό Ewald, δυναμικό διασκορπισμένων σωματιδίων (Dissipative particle dynamics). Στην παρούσα ανάλυση επιλέχθηκε το δυναμικό Lennard-Jones καθώς είναι από τα πιο ευρέως διαδεδομένα και μελετημένα δυναμικά και είναι σε θέση να ερμηνεύσει πολλούς τύπους αλληλεπιδράσεων.

### 2.3.2 Δυναμικό Lennard-Jones

Στην διαδικασία υπολογισμού των δυνάμεων αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων είναι απαραίτητη η επιλογή ενός δυναμικού ζεύγους το οποίο περιγράφει τις αλληλεπιδράσεις. Το δυναμικό Lennard-Jones (γνωστό και ως δυναμικό 12-6) προτάθηκε το 1924 από τον John Lennard-Jones [19]. Είναι ένα μαθηματικά απλό μοντέλο που περιγράφει την αλληλεπίδραση μεταξύ ενός ζεύγους ουδέτερων σωματιδίων, βασισμένο στην απόσταση διαχωρισμού των σωματιδίων και εκφράζεται ως:

$$V_{LJ}(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2.7)$$

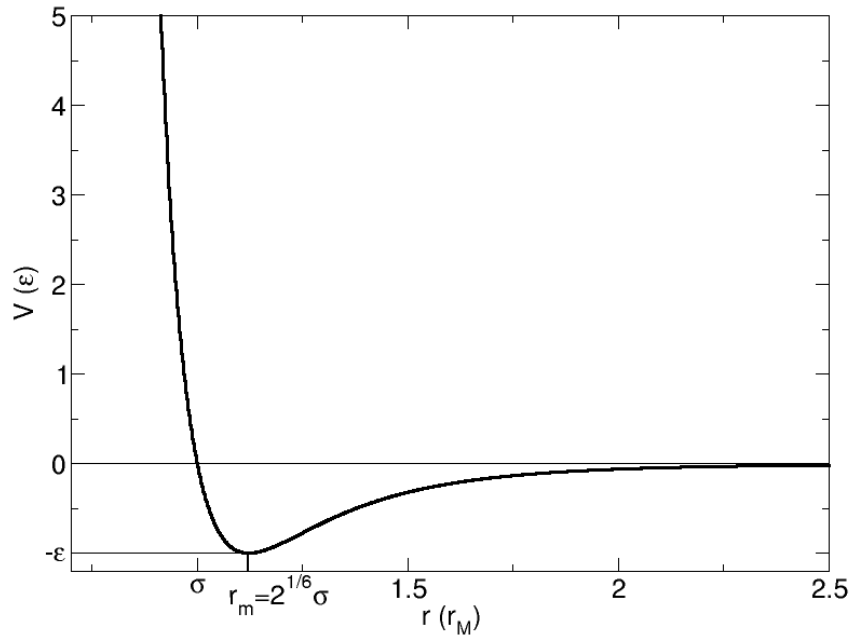
Όπου:

ε: Το βάθος του δυναμικού και ένα μέτρο του πόσο ισχυρά έλκονται τα σωματίδια. Συχνά αναφέρεται και ως ενέργεια διασποράς (dispersion energy).

σ: Η απόσταση στην οποία το δυναμικό ζεύγους ξεκινάει να παίρνει τιμές. Αποτελεί ένα μέτρο του πόσο κοντά μπορούν να φτάσουν τα σωματίδια και επομένως αναφέρεται ως ακτίνα Van der Waals.

$r$ : Η απόσταση διαχωρισμού μεταξύ δύο αλληλεπιδρώντων σωματιδίων, μετρούμενη από το κέντρο του ενός έως το κέντρο του άλλου.

Το δυναμικό Lennard-Jones συνυπολογίζει τον όρο άπωσης  $(\frac{1}{r})^{12}$  και τον όρο έλξης  $(\frac{1}{r})^6$  για δύο σωματίδια τα οποία απέχουν απόσταση  $r$  και μας δίνει την πληροφορία για το πως αυτά θα αλληλεπιδράσουν. Αμφότερες οι δυνάμεις έλξης και άπωσης μειώνονται όσο αυξάνεται η απόσταση διαχωρισμού, με το όρο άπωσης, όμως, να μειώνεται πολύ πιο γρήγορα. Αυτός είναι ο λόγος που η δύναμη άπωσης εμφανίζει πολύ μεγαλύτερες τιμές αλλά έχει περιορισμένο εύρος εφαρμογής σε πολύ μικρές αποστάσεις. Όπως φαίνεται και στο Σχ. 6, το δυναμικό παρουσιάζει ελάχιστο σε απόσταση  $r = r_m = 2^{(\frac{1}{6})}\sigma$ , όπου η δυναμική ενέργεια παίρνει τιμή  $V = -\epsilon$ . Το σημείο αυτό λέγεται και σημείο ισοροπίας καθώς η δύναμεις άπωσης και έλξης αντισταθμίζονται. Επίσης, παρατηρείται ότι για  $r \approx D$  η δυναμική ενέργεια τείνει στο άπειρο, κάτι που μπορεί να δημιουργήσει αστάθειες στην διαδικασία της μοριακής προσομοίωσης. Για να αποφευχθεί αυτό και για να εξαλειφθεί η πιθανότητα αλληλοεπικάλυψης σωματιδίων το  $\sigma$  παίρνει τιμή μεγαλύτερη της διαμέτρου των σωματιδίων. Σε αρκούντως μεγάλες αποστάσεις διαχωρισμού, παρατηρείται ότι το δυναμικό ζεύγους ισούται με μηδέν κάτι που υποδηλώνει ότι τα σωματίδια δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Για αυτό το λόγο, υπολογίζουμε το δυναμικό ανάμεσα σε σωματίδια τα οποία απέχουν λιγότερο από μια επιλεγμένη απόσταση  $r_{cut}$  ούτως ώστε να αποφευχθεί το υπολογιστικό κόστος από τον υπολογισμό των δυνάμεων μεταξύ σωματιδίων τα οποία αλληλεπιδρούν ελάχιστα.



**Σχ. 6 - Σχηματική αναπαράσταση του δυναμικού Lennard-Jones**

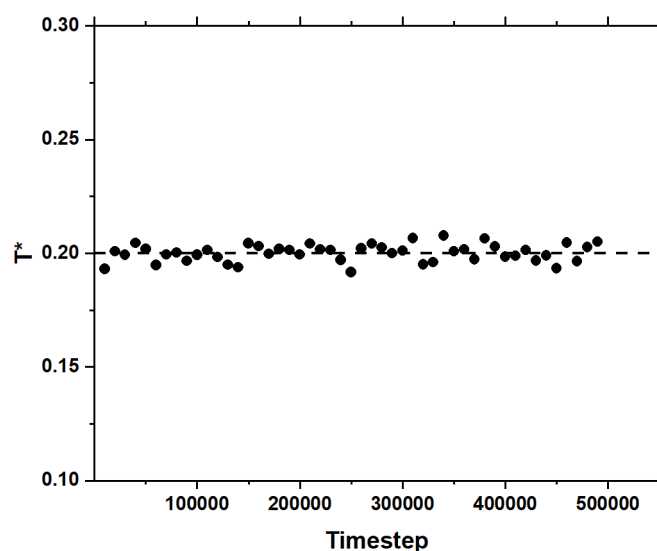
Όσον αφορά το φυσικό υπόβαθρο σχετικά με την αλληλεπίδραση των σωματιδίων, ο απωστικός όρος οφείλεται στην άπωση Pauli ενώ ο ελκτικός όρος στις μεγάλης εμβέλειας αλληλεπιδράσεις οι οποίες εξαλείφονται σε αρκούντως μεγάλες αποστάσεις. Όταν τα σωματίδια έρθουν πολύ κοντά μεταξύ τους, δηλαδή απέχουν απόσταση μικρότερη από την απόσταση ισοροπίας  $r_m$ , τα ηλεκτρόνια των δύο σωματιδίων τείνουν να καταλάβουν το ένα τα τροχιακά του άλλου. Η απώθηση εμφανίζεται καθώς κάθε σωματίδιο προσπαθεί να διατηρήσει το χώρο στα αντίστοιχα τροχιακά του. Από την άλλη πλευρά ο ελκτικός όρος ο οποίος υπερिशύει σε απόστασεις μεγαλύτερες της απόστασης ισοροπίας  $r_m$ , οφείλεται στις αλληλεπιδράσεις μεταξύ διπόλων (Van der Waals). Τα μοριακά δίπολα δημιουργούνται λόγω της άνισης κατανομής των ηλεκτρονίων μεταξύ των ατόμων. Τα άτομα που είναι πιο ηλεκτραρνητικά τραβούν τα ηλεκτρόνια πιο κοντά στον εαυτό τους. Η συσσώρευση πυκνότητας ηλεκτρονίων γύρω από ένα άτομο ή μια συγκεκριμένη περιοχή του μορίου δημιουργεί ένα μοριακό δίπολο στο οποίο η μια πλευρά έχει μερικώς αρνητικό φορτίο και η άλλη μερικώς αρνητικό. Έτσι το μερικώς αρνητικό τμήμα του ενός διπόλου έλκει το μερικώς θετικό τμήμα του άλλου [20], [21].



## 2.4 Επιλογή μεθόδου ολοκλήρωσης

Το HOOMD-blue μας δίνει την ευχέρεια να προσομοιώσουμε την διαδικασία ολοκλήρωσης των κινηματικών εξισώσεων με διάφορους τρόπους. Πιο συγκεκριμένα, ο χρήστης μπορεί να επιλέξει αν επιθυμεί να κρατήσει σταθερή την ενέργεια του συστήματος (μικροκανονικό σύνολο, προσομοίωση NVE), την θερμοκρασία του (κανονικό σύνολο, προσομοίωση NVT) ή την πίεση του (προσομοίωση NPT).

Στην προσπάθεια για καταγραφή της επιρροής της θερμοκρασίας στην δημιουργία γεωμετριών με συσσωματώματα και μη, επιλέγεται η εκτέλεση προσομοιώσεων σε ένα μεγάλο εύρος θερμοκρασιών όπου σε κάθε προσομοίωση η θερμοκρασία διατηρείται σταθερή. Για την διατήρηση της θερμοκρασίας προσφέρονται διαφορετικά είδη θερμοστατών, δηλαδή κάποιων επιπλέον δυνάμεων οι οποίες εισέρχονται στις κινηματικές εξισώσεις. Έτσι καταφεύγουμε στις εξής μεθόδους: NVT με χρήση θερμοστάτη τύπου Nose-Hoover και Langevin dynamics με χρήση στοχαστικού θερμοστάτη. Η χρήση των θερμοστατών είναι απαραίτητη γιατί αλλιώς η θερμοκρασία του συστήματος θα μεταβάλλεται από επανάληψη σε επανάληψη λόγω της διακύμανσης στην κίνηση των σωματιδίων. Είναι σημαντικό να τονιστεί εδώ ότι η θερμοκρασία δεν ισούται ακριβώς με την τιμή που έχει επιλεγεί αλλά τείνει σε αυτή την τιμή με μικρές διακυμάνσεις από επανάληψη σε επανάληψη οι οποίες όμως θεωρούνται αμελητέες.



**Σχ. 7 - Μέτρηση της αδιάστατης θερμοκρασίας για κάθε 10000 βήματα προσομοίωσης. Διακύμανση μεταξύ επιλεγμένης τιμής  $T^*=0.2$  και πραγματικής μέτρησης**

### 2.4.1 Θερμοστάτης Nose-Hoover

Ο θερμοστάτης Nose-Hoover [22] εισάγει μια πλασματική δυναμική μεταβλητή, της οποίας η φυσική σημασία είναι αυτή της τριβής ( $\zeta$ ), που επιβραδύνει ή επιταχύνει τα σωματίδια έτσι ώστε η θερμοκρασία να διατηρείται στην επιθυμητή τιμή.

$$m_i \frac{d^2(\vec{r}_i)}{dt^2} = F_{ci} - \zeta m_i \vec{v}_i \quad (2.8)$$

$$\frac{d\zeta(t)}{dt} = \frac{1}{Q} \left[ \sum_{i=1}^N m_i \frac{v_i^2}{2} - \frac{3N+1}{2} k_B T \right] \quad (1.9)$$

Όπου:

Q: χαλάρωση της δυναμικής τριβής

$\zeta(t)$ : τριβή

$k_B$ : σταθερά Boltzmann

T: θερμοκρασία προσομοίωσης

$m_i$ : μάζα του σωματιδίου  $i$  εκ των συνολικών N

$v_i$ : ταχύτητα του σωματιδίου  $i$  εκ των συνολικών N

$r_i$ : θέση του σωματιδίου  $i$  εκ των συνολικών N

$F_{ci}$ : συνολική δύναμη που επενεργεί στο σωματίδιο  $i$

Το Q εισάγεται από τον χρήστη μέσω την μεταβλητής tau, όπου ορίζεται ως:

$$tau = \sqrt{\frac{Q}{k_B T g}} \quad (2.10)$$

Όπου το g αντικατοπτρίζει το βαθμό ελευθερίας του συστήματος.

## 2.4.2 Θερμοστάτης Langevin

Μια άλλη επιλογή για την προσομοίωση του συστήματος ως κανονικό σύνολο (NVT) είναι να χρησιμοποιήσουμε ένα στοχαστικό θερμοστάτη ο οποίος είναι βασισμένος στην κίνηση Brown (Brownian dynamics ή Langevin dynamics). Η κίνηση Brown είναι μια σύνθετη κίνηση, ακανόνιστου τύπου που εκτελείται από σωματίδια βυθισμένα σε ένα ρευστό υπό την επίδραση των συγκρούσεων που υφίστανται με τα μόρια αυτού του ρευστού [23]. Οι πρώτες θεωρητικές εξηγήσεις της κίνησης Brown δόθηκαν ανεξάρτητα από τον A.Einstein το 1905 και τον M.Smoluchowski το 1906. Η αδράνεια δεν είχε συμπεριληφθεί στα συγκεκριμένα μοντέλα. Ο P.Langevin δημοσίευσε το 1908 μια πιο αναλυτική περιγραφή της κίνησης αυτής, μέσα στην οποία έχει ληφθεί υπόψιν η επίδραση της αδράνειας.

Δύο δυνάμεις οι οποίες αντιπροσωπεύουν την επίδραση του ρευστού στα σωματίδια λαμβάνουν χώρα : μία ιξώδης δύναμη τριβής η οποία είναι ανάλογη της ταχύτητας  $-\gamma\vec{v}_i$  ( $\gamma>0$ ) και μια κυμαινόμενη δύναμη  $F_R$  η οποία αντιπροσωπεύει τις αδιάκοπες συγκρούσεις των μορίων του ρευστού πάνω στα σωματίδια, η οποία είναι γνωστή ως δύναμη Langevin. Η τυχαία δύναμη Langevin επιλέγεται μέσω του θεωρήματος διακύμανσης-διασκορπισμού έτσι ώστε να είναι συνεπής με την επιλεγμένη αντίσταση και θερμοκρασία [18] και εκφράζεται ως:

$$m \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_{C_i} - \gamma \vec{v}_i + \vec{F}_{R_i} \quad (2.11)$$

$$F_{R_i} = R_i \sqrt{d} \sqrt{\frac{2k_B T \gamma}{dt}} \quad (2.12)$$

Όπου:

$\gamma$ : συντελεστής οπισθέλκουσας

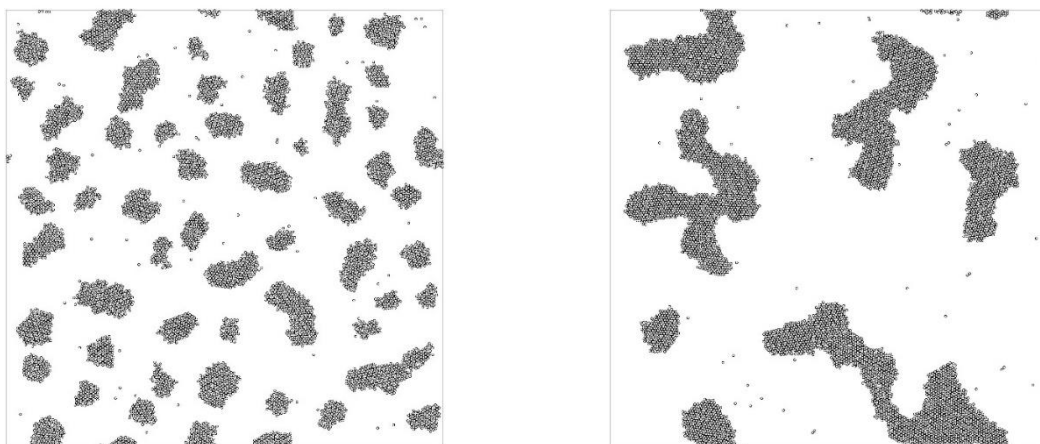
$d$ : διαστάσεις του συστήματος (στην συγκεκριμένη περίπτωση ισούται με 2)

$R_i$ : τυχαίος αριθμός ομοιόμορφα κατανομημένος με εύρος  $[-1,1]$

Θεωρούμε ότι η μέση τιμή της δύναμης Langevin ισούται με μηδέν,  $\langle F_R \rangle = 0$ . Η εξίσωση Langevin είναι ιστορικά το πρώτο παράδειγμα στοχαστικής διαφορικής εξίσωσης, δηλαδή μια διαφορική εξίσωση η οποία περιλαμβάνει έναν τυχαίο όρο  $F_R$ . Επομένως, για δεδομένο σετ αρχικών παραμέτρων η τελική λύση για την κατανομή των σωματιδίων στον χώρο μετά το πέρας της μοριακής προσομοίωσης θα διαφέρει. Η ποικιλία αυτή των γεωμετριών που προκύπτουν είναι κάτι απαραίτητο για να έχουν αξιοπιστία τα αποτελέσματα και τα συμπεράσματα που θα εξάγουμε ως προς την επίδραση των αρχικών παραμέτρων στην ποιοτική διαμόρφωση των γεωμετριών.

### 2.4.3 Επιλογή θερμοστάτη

Όπως φαίνεται και στο Σχ. 8 μέσω της μεθόδου NVT για χαμηλές θερμοκρασίες ( $T^*$  στο εύρος 0.3-0.45) δημιουργήθηκαν ανομοιόμορφες γεωμετρίες όπου τα συσσωματώματα ήταν αρκετά μεγάλα, καλύπτοντας χώρο πάνω από το 40% του κελιού. Τέτοιες γεωμετρίες δεν είναι επιθυμητές στην παρούσα ανάλυση καθώς δεν αποτελούν χαρακτηριστικές γεωμετρίες συσσωματωμάτων και δεν θα μας βοηθήσουν να εξάγουμε χρήσιμα συμπεράσματα για την επίδραση των συσσωματωμάτων στην τιμή της διαπερατότητας. Σε αντίθεση με την μέθοδο NVT, η χρήση των εξισώσεων Langevin προσέδιδε μια πιο ομοιόμορφη κατανομή των συσσωματωμάτων για χαμηλές θερμοκρασίες και γι' αυτό επιλέξαμε να εργαστούμε με αυτή τη μέθοδο.



**Σχ. 8 - Ενδεικτικές γεωμετρίες με τη μέθοδο δυναμικής Langevin (αριστερά) και με τη μέθοδο NVT θερμοστάτη Nose-Hover (δεξιά). Αριθμός σωματιδίων 6400, κλάσμα όγκου 0.125 και  $T^* 0.3$ .**

#### 2.4.4 Ολοκλήρωση Velocity-Verlet

Στο HOOMD-blue οι κινηματικές εξισώσεις του Newton ολοκληρώνονται σύμφωνα με τον αλγόριθμο Velocity-Verlet [24]. Για τον υπολογισμό των θέσεων και των ταχυτήτων εισάγουμε τα αναπτύγματα Taylor 2<sup>ης</sup> τάξης. Γνωρίζοντας την ταχύτητα και την θέση την χρονική στιγμή  $t$  ακολουθούμε τα εξής βήματα για τον υπολογισμό τους την χρονική στιγμή  $dt$ :

- Υπολογισμός ταχυτήτων στο μέσο διάστημα

$$\vec{v}\left(t + \frac{dt}{2}\right) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2}\vec{a}(t)dt \quad (2.13)$$

- Υπολογισμός θέσεων

$$\vec{r}(t + dt) = \vec{r}(t) + \vec{v}\left(t + \frac{dt}{2}\right)dt \quad (2.14)$$

- Υπολογισμός της δύναμης  $F_C$ , της συνολικής δύναμης  $F$  και της επιτάχυνσης που δέχεται το κάθε σωματίδιο.

$$U = \sum_{r=0}^{r_{cut}} V_{LJ}(r) \quad (2.15)$$

$$\vec{F}_C = -\nabla U \quad (2.16)$$

$$\vec{F} = \vec{F}_C - \gamma\vec{v} + \vec{F}_R \quad (2.17)$$

$$\vec{a}(t + dt) = \frac{\vec{F}}{m} \quad (2.18)$$

- Υπολογισμός ταχύτητας

$$\vec{v}(t + dt) = \vec{v}\left(t + \frac{dt}{2}\right) + \frac{1}{2}\vec{a}(t + dt)dt \quad (2.19)$$

Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται για κάθε σωματίδιο του συνόλου σε κάθε επανάληψη της προσομοίωσης.

## Κεφάλαιο 3. Στατιστική ανάλυση

---

### 3.1 Ακτινική συνάρτηση κατανομής

#### 3.1.1 Ορισμός

Ένας εκ των πρωταρχικών υπολογισμών για τη μελέτη της μικροδομής μίας γεωμετρίας, εφόσον έχει ολοκληρωθεί η μοριακή προσομοίωση της, είναι η ακτινική συνάρτηση κατανομής (radial distribution function ή pair correlation function), που συμβολικά ορίζεται ως  $g_2(r)$ . Πρόκειται για μία συνάρτηση η οποία συσχετίζει την πυκνότητα και πως εκείνη μεταβάλλεται με την απόσταση, όταν μελετάται ως προς κάποιο τυχαία ορισμένο σημείο αναφοράς. Περιγράφει την τοπική πυκνότητα όπως την αντιλαμβάνεται το εκάστοτε σωματίδιο, σε γειτονικές αποστάσεις-περιοχές, συγκριτικά με την ολική πυκνότητα του εκάστοτε χώρου. Κατά τη χωρική ανάλυση, στο δισδιάστατο επίπεδο, η πυκνότητα ορίζεται ως :

$$\rho = \frac{N}{A} \quad (3.1)$$

όπου:

N: αριθμός σωματιδίων στο επίπεδο

A : εξεταζόμενη επιφάνεια

Η αναμενόμενη τοπική πυκνότητα θα πρέπει να είναι  $\rho g_2(r)$  σε μία απόσταση  $r$  από το κέντρο αναφοράς, εάν το σύστημα θεωρείται ομογενές και ισότροπο. Ανήκει στην κατηγορία των στατιστικών δεικτών 2<sup>ης</sup> τάξης, καθώς το υπολογιζόμενο μέγεθος (στην περίπτωση μας η πυκνότητα) μετρείται λαμβάνοντας υπόψιν το πως κατανέμεται το κάθε σωματίδιο συγκριτικά με τα υπόλοιπα μέσω της απόστασης τους. Η ειδοποιός διαφορά με αντίστοιχους δείκτες 1<sup>ης</sup> τάξης έγκειται στο γεγονός ότι ουσιαστικά η πυκνότητα υπολογίζεται για έναν δεδομένο χώρο δίχως να συμπεριλαμβάνεται κάποιο επιπρόσθετο κριτήριο. Χαρακτηριστικά παραδείγματα είναι η τοπική και η ολική πυκνότητα όπως επίσης και η πυκνότητα πυρήνα (Kernel Density).

Η  $g_2(r)$  υιοθετείται από πληθώρα επιστημονικών πεδίων. Στη στατιστική μηχανική η γνώση της μεταβολής της πυκνότητας τοπικά, είτε αναφερόμαστε σε επίπεδο μορίων είτε σε ατόμων, φέρει πληροφορίες για κρίσιμες θερμοδυναμικές ιδιότητες του υλικού. Σε μακροσκοπική κλίμακα δύναται να προβλεφθούν ιδιότητες μέσω της χωροταξικής διάταξης της μικροδομής. Επιλεκτικά αναφέρονται η πίεση, η μέση εσωτερική ενέργεια και η συμπίεστικότητα του υλικού. Ωστόσο, καθώς αυτή η ανάλυση ξεφεύγει από τα πλαίσια της διπλωματικής αυτής, ο αναγνώστης ενθαρρύνεται να ανατρέξει στην αντίστοιχη βιβλιογραφία [25]. Από την άλλη πλευρά, το πεδίο της χωρικής ανάλυσης αξιοποιεί την συγκεκριμένη συνάρτηση με σκοπό να ερμηνεύσει μοτίβα κατανομών και να τα συγκρίνει με ήδη γνωστές κατανομές. Αυτή η προσέγγιση χρησιμοποιείται συχνά όταν εξετάζεται εάν κάποιο σετ δεδομένων παρουσιάζει χωρική εξάρτηση-συσχέτιση. Γεωμορφολογικά γεγονότα, επιδημιολογικά στοιχεία, η οργάνωση μορίων αλλά και ανάλυση νευρώνων αποτελούν αντικείμενο μελέτης της χωρικής ανάλυσης [26]. Αντιλαμβάνεται, λοιπόν, κανείς πως πρόκειται για ένα εξαιρετικό εργαλείο, το οποίο θα αποτελέσει και τη βάση των υπολογισμών που θα διεξαχθούν σε αυτό το κεφάλαιο. Τα συμπεράσματα αυτής της ενότητας προκύπτουν ως συνδυασμός των δύο αυτών επιστημονικών πεδίων. Αυτό συμβαίνει διότι ενώ αναφερόμαστε σε κατανομές σημείων στο χώρο, εντούτοις υπάρχει ένα φυσικό μοντέλο, στην συγκεκριμένη περίπτωση το δυναμικό Lennard-Jones, που υπαγορεύει τη μορφή της μικροδομής.

Στη βιβλιογραφία αναφέρονται αρκετοί μέθοδοι υπολογισμού της  $g_2(r)$ . Για δεδομένη συνάρτηση δυναμικού οι προσομοιώσεις με τη μέθοδο Monte Carlo και η επίλυση της εξίσωσης των Ornstein-Zernike αποτελούν τους πιο ενδεικτικούς τρόπους επίλυσης. Σε πειραματικό επίπεδο χρησιμοποιούνται οι μέθοδοι της περίθλασης ακτινών  $x$  και η άμεση οπτικοποίηση της δομής με τη χρήση μικροσκοπίου.

### 3.1.2 Αλγοριθμική επίλυση

Υπενθυμίζεται πως ως εξεταζόμενη γεωμετρία ορίζεται ένα διδιάστατο κελί, τετραγωνικής διατομής, στο οποίο έχουν προστεθεί ενισχυτικά μέσα υπό την μορφή ινών. Οι ίνες είναι ομοιόμορφα προσανατολισμένες, δηλαδή παράλληλες μεταξύ τους, κυκλικής



διατομής οι οποίες στο δισδιάστατο χώρο αναπαρίστανται ως κυκλικοί δίσκοι. Για την συνέχεια της ανάλυσης μας θεωρούμε πως οι όροι ίνες, σωματίδια και κυκλικοί δίσκοι είναι ταυτόσημοι. Επομένως τα σωματίδια ορίζονται πλήρως από τη γνώση δύο παραγόντων: α) το ζεύγος συντεταγμένων των γεωμετρικών κέντρων τους  $(x,y)$  στο επίπεδο και β) την διάμετρο τους  $D$ , όπου για όλους τους υπολογισμούς που ακολουθούν λαμβάνεται σταθερή και ίση με τη μονάδα, δίχως να λαμβάνεται υπόψιν κάποια συγκεκριμένη μονάδα μέτρησης μήκους. Οι παραπάνω πληροφορίες επιτρέπουν τον αλγοριθμικό υπολογισμό της  $g_2(r)$ .

Πρωταρχικό βήμα αποτελεί η μέτρηση των αποστάσεων όλων των σωματιδίων κατά ζεύγη, ως προς τα κέντρα συμμετρίας τους. Έπειτα, ο χώρος διακριτοποιείται σε επαναλαμβανόμενους δακτυλίους πεπερασμένου πάχους  $\Delta r$  με κέντρο πάντοτε κάποιο σημείο, ούτως ώστε να μετρηθεί η μεταβολή της πυκνότητα τοπικά. Επιλέγεται σε κάθε βήμα επανάληψης αυθαίρετα κάποιο σωματίδιο αναφοράς  $O$  από τα  $N$  διαθέσιμα που υπάρχουν στο κελί. Το κριτήριο ταξινόμησης της απόστασης των υπολοίπων  $N-1$  από το  $O$  είναι σε ποιο δακτύλιο ανήκουν, δηλαδή σε ποιο  $r+\Delta r$  εμπίπτει η αντίστοιχη απόσταση του εκάστοτε ζεύγους. Εφόσον έχουν επιλεχθεί όλα τα σωματίδια, τα αποτελέσματα αυτά ομαδοποιούνται και διαμορφώνεται ένα ιστόγραμμα όπου όλες οι σχετικές αποστάσεις πλέον είναι γνωστές και ορισμένες. Τα αποτελέσματα κανονικοποιούνται, σύμφωνα με τη θεωρία του ιδανικού αερίου, όπου για κάθε εξεταζόμενο χώρο μετρούνται πόσα σημεία αναμένεται να βρεθούν και πόσα εν τέλει υπολογίστηκαν. Η μαθηματική σχέση που επεξηγεί την ανωτέρω συλλογιστική πορεία έχει τη μορφή:

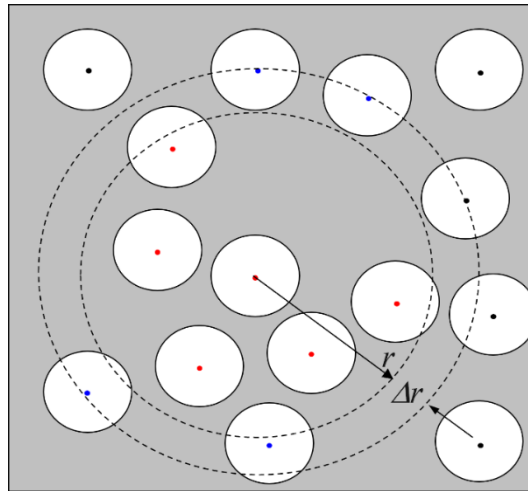
$$g_2(r) = \frac{n(r)}{\rho 2r \Delta r \pi} \quad (3.2)$$

όπου:

$n(r)$ : αριθμός των σημείων που βρίσκονται στον δακτύλιο μεταξύ των αποστάσεων  $r$  και  $r+\Delta r$

$\rho$ : αριθμός σημείων ανά επιφάνεια

Ο αλγόριθμος που χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό της  $g_2(r)$  στο υπολογιστικό περιβάλλον του MATLAB εμπεριέχεται στα Παραρτήματα (Παράρτημα Γ. Συναρτήσεις MATLAB). Επίσης για τον υπολογισμό της  $g_2(r)$  χρησιμοποιήθηκε και το λογισμικό μοριακής δυναμικής Onvito (Παράρτημα Δ. Ακρίβεια επίλυσης MATLAB) [27].



**Σχ. 9 - Σχηματική αναπαράσταση του υπολογισμού**

Στο σημείο αυτό θα πρέπει να τονιστούν κάποιες ιδιαιτερότητες κατά τον υπολογισμό της  $g_2(r)$ . Τα σωματίδια ανήκουν αυστηρά εντός του τετραγωνικού κελιού. Όταν προσεγγίζουν τα όρια του κελιού περιβάλλονται από γειτονικά σωματίδια όπως επίσης και από κενό χώρο. Η περιοδικότητα όπως ορίστηκε κατά τη μοριακή προσομοίωση εδώ δεν συμπεριλαμβάνεται σε κάποιο μέρος του υπολογισμού. Γνωρίζουμε πως σωματίδια σε αντίθετες έδρες είναι γειτονικά και αλληλεπιδρούν μεταξύ τους, ωστόσο αυτή η συνθήκη θα πρέπει να επαναδιατυπωθεί μαθηματικά. Σε κάθε βήμα επανάληψης το σωματίδιο αναφοράς ορίζεται και ως κέντρο συμμετρίας γύρω από το οποίο δημιουργείται εικονικά ένα αντίγραφο κελί της αρχικής γεωμετρίας. Οι συντεταγμένες επαναπροσδιορίζονται με βάση το κέντρο αναφοράς του προσωρινού κελιού. Η μέθοδος αυτή ονομάζεται *minimum image convection*.

Η μέγιστη απόσταση μεταξύ δύο σωματιδίων ορίζεται ρητά από τις διαστάσεις του τετραγώνου. Δεν νοείται να εξετάζεται κάποιος χώρος με μεγαλύτερες διαστάσεις από το κελί, καθώς θα εισάγεται κάποιο σφάλμα στον υπολογισμό λόγω της απουσίας σωματιδίων. Επιπλέον σφάλμα προκύπτει στην περίπτωση όπου ο χώρος που εξετάζεται είναι αρκούντως μεγάλος, ώστε λόγω της περιοδικότητας να προσμετράται πολλαπλές φορές κάποιο συγκεκριμένο σημείο εξαιτίας του περιοδικού του αντίγραφου. Ως μέγιστη εξεταζόμενη απόσταση λαμβάνεται το  $L/2$ . Συνεπώς εισάγεται a priori η μεταβλητή cut-off radius,  $r_{cut-off}$ , ούτως ώστε να καθορίζεται η μέγιστη απόσταση μέχρι την οποία θα διακριτοποιείται ακτινικά ο χώρος. Στα αποτελέσματα που ακολουθούν η  $r_{cut-off}$  παίρνει τιμές στο εύρος 5-40% της διάστασης του κελιού. Παρατηρήθηκε πως για μικρότερες τιμές

του 5%, οι πληροφορίες για τη κατανομή της μικροδομής ήταν ελλιπής. Αντίθετα για τιμές μεγαλύτερες του 40% δεν υπήρχε κάποια μεταβολή στα αποτελέσματα ενώ αυξανόταν το υπολογιστικό κόστος. Να σημειωθεί πως τα αποτελέσματα παρουσιάζονται για το εκάστοτε ποσοστό του χώρου όπου είναι ευδιάκριτα τα συμπεράσματα.

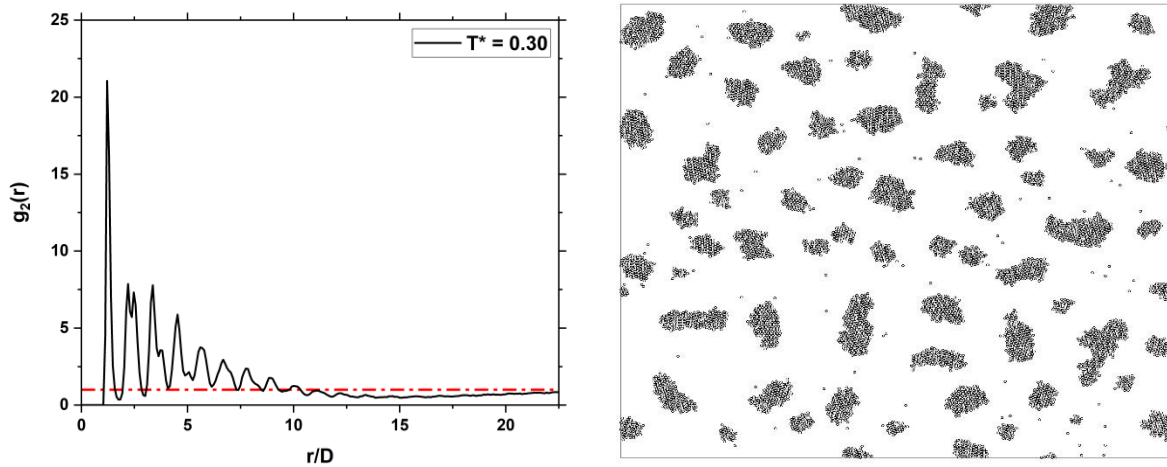
### 3.1.3 Ερμηνεία αποτελεσμάτων

Η  $g_2(r)$  εμφανίζει πάντοτε μια αρχική κορύφωση. Η κορύφωση αυτή αλλά και η απόσταση στην οποία υφίσταται αναπαριστά το κέλυφος του εγγύτερου γείτονα (first neighbour shell). Απορρίπτοντας την περίπτωση αλληλοεπικάλυψης των σωματιδίων η απόσταση της πρώτης κορυφής θα πρέπει να είναι μεγαλύτερη της διαμέτρου ( $r > D$ ). Κατά την παραγωγή των γεωμετριών μέσω του HOOMD-blue δεν υπήρξε κάποια άμεση συνθήκη που να καθορίζει την ελάχιστη απόσταση μεταξύ δύο σωματιδίων, το οποίο στην παρούσα διπλωματική ορίζεται ως  $d_{min}$ . Η επίδραση του δυναμικού Lennard-Jones αλλά και της  $T^*$  διαμόρφωσαν το  $d_{min}$ . Παρόλα αυτά για όλο το εύρος  $T^*$  που υιοθετείται, η πρώτη κορύφωση της συνάρτησης συναντάται στο  $r \approx D$  και πάντοτε για  $r > D$ .

Εύλογα αντιλαμβάνεται κανείς πως οι κορυφές λογίζονται ως περιοχές του χώρου υψηλής οργάνωσης των σωματιδίων. Η ένταση των κορυφώσεων αλλά και το πλήθος αυτών αποτελούν ένδειξη παρουσίας συσσωματωμάτων. Αντίστοιχα κοιλάδες του δείκτη  $g_2(r)$  μεταφράζονται ως περιοχές στις οποίες είτε δεν δύναται να υπάρξουν σωματίδια, ειδάλλως θα υπήρχε αλληλοεπικάλυψη, είτε απορρίπτονται αυτές οι θέσεις εξαιτίας του δυναμικού.

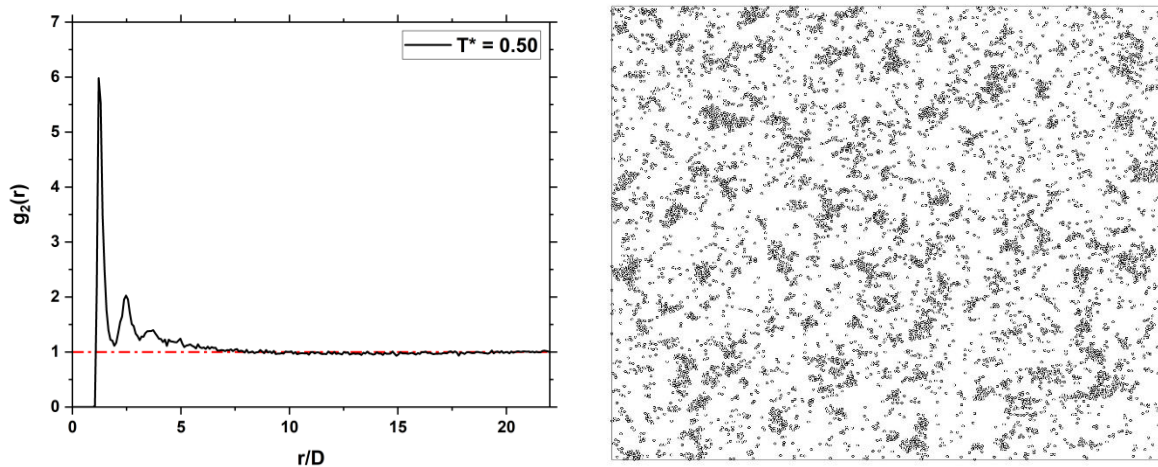
Προτού παρατεθούν διαγράμματα επιβάλλεται να σημειωθεί ότι η  $g_2(r)$  θα τείνει στην μονάδα όσο αυξάνεται η απόσταση  $r$ . Υπό τη σκοπιά της στατιστικής μηχανικής, για αρκούντως μεγάλες αποστάσεις η επίδραση του δυναμικού τείνει στο μηδέν με αποτέλεσμα η συνάρτηση να τείνει στη μονάδα. Στον αντίποδα, κατά την χωρική ανάλυση η επίδραση μεταξύ σωματιδίων σε μεγάλες αποστάσεις εξασθενεί. Το δείγμα που λαμβάνεται όσο αυξάνεται η απόσταση από το σημείο αναφοράς τείνει προς την αναμενόμενη τιμή, όπως εκείνη ορίζεται από την πυκνότητα  $\rho$ . Για τον λόγο αυτό εισάγεται η κατανομή Poisson στην ανάλυση. Υποθέτοντας πως τα σωματίδια καταλαμβάνουν τυχαίες θέσεις όπως διέπει μια

κατανομή Poisson, σύμφωνα με την εξίσωση (3.2) αλλά και την κανονικοποίηση των αποτελεσμάτων προκύπτει  $g_2(r)_{Poisson} = 1$ .



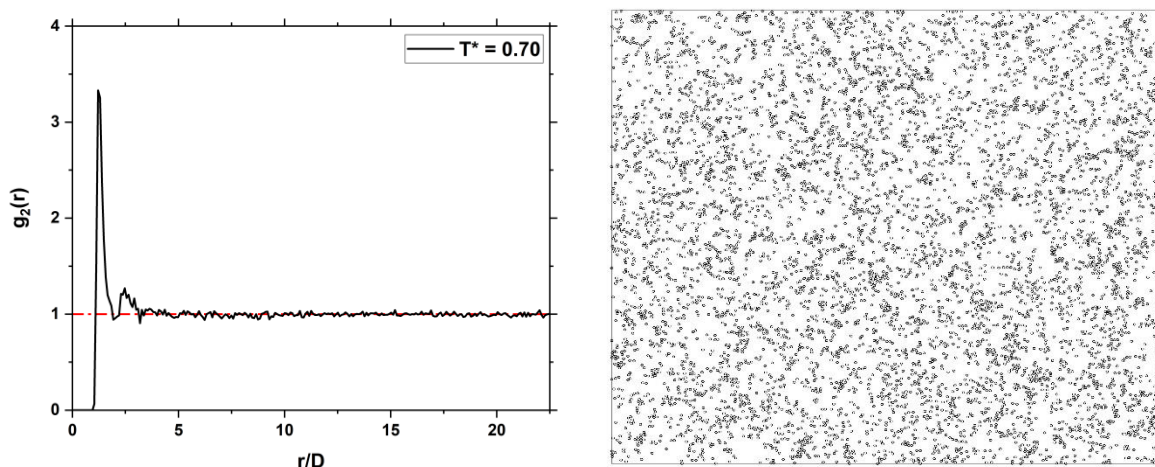
**Σχ. 10 - (Αριστερά) Το διάγραμμα της  $g_2(r)$  για  $T^*=0.3$ . Η διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά τη  $g_2(r)_{Poisson}$ . (Δεξιά) Η γεωμετρία για την οποία πραγματοποιείται ο υπολογισμός. Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1**

Γεωμετρίες που οπτικά εμφανίζουν συσσωματώματα σε χαμηλές τιμές  $T^*$ , όπως Σχ. 10, φανερώνουν ιδιαίτερα υψηλές τιμές στις κορυφές της  $g_2(r)$ . Παρατηρούνται μεγάλες κλίσεις μεταξύ διαδοχικών τιμών  $r$  ενώ η  $g_2(r)$  παραμένει άνω της μονάδας για αρκετούς γειτονικούς δακτυλίους. Συνεπώς φαντάζει δόκιμο να υποθέσουμε πως η εξής συμπεριφορά αντιστοιχεί σε μία κατανομή έντονης συσσωμάτωσης. Η αύξηση της παραμέτρου  $T^*$  επιφέρει ταυτόχρονη μείωση του μέτρου και του πλήθους των κορυφώσεων αυτών (βλ. Σχ. 11).



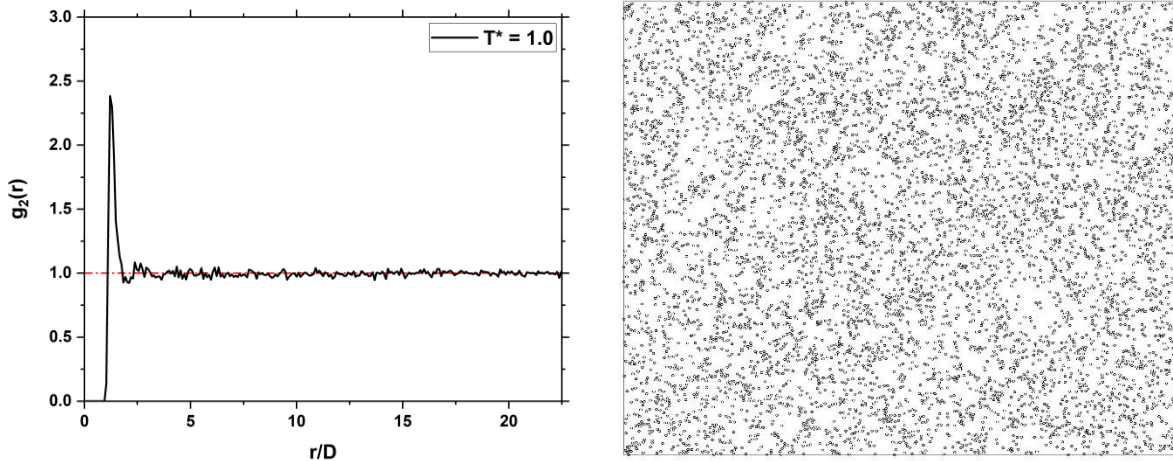
**Σχ. 11 - (Αριστερά) Το διάγραμμα της  $g_2(r)$  για  $T^*=0.5$ . Η διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά τη  $g_2(r)_{Poisson}$ . (Δεξιά) Η γεωμετρία για την οποία πραγματοποιείται ο υπολογισμός. Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1**

Σε αντιπαραβολή, από τα δύο παραπάνω διαγράμματα αντιλαμβάνεται κανείς πως παρότι για  $T^*=0.5$  οι αρχικές τιμές της  $g_2(r)$  παραμένουν υψηλές, σχετικά γρήγορα η συνάρτηση καταλήγει να ταυτίζεται με την  $g_2(r)_{Poisson}$ . Το γεγονός αυτό αποτελεί ένδειξη πως προοδευτικά η αύξηση της  $T^*$  συνεπάγεται μείωση του μεγέθους των συσσωματωμάτων. Τα σωματίδια που ξεφεύγουν από ένα μεγάλο συσσωμάτωμα κατανέμονται πλέον τυχαία στο χώρο. Για το λόγο αυτό και ενδιάμεσες  $T^*$  παρουσιάζουν μικρά συσσωματώματα αλλά και τυχαία κατανεμημένα σωματίδια.



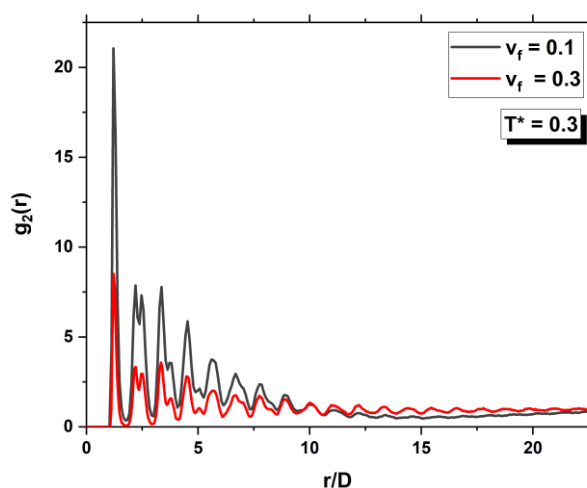
**Σχ. 12 - (Αριστερά) Το διάγραμμα της  $g_2(r)$  για  $T^*=0.7$ . Η διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά τη  $g_2(r)_{Poisson}$ . (Δεξιά) Η γεωμετρία για την οποία πραγματοποιείται ο υπολογισμός. Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1**

Αντιθέτως στα Σχ. 12 και Σχ. 13, φαίνεται πως ξεπερνώντας το πρώτο γειτονικό κέλυφος, η συνάρτηση ταλαντώνεται μεταξύ της μονάδας από μικρές κιάλας αποστάσεις. Η σύγκλιση προς την τιμή της  $g_2(r)_{Poisson}$  συνεπάγεται μία τυχαία διάταξη των σωματιδίων.



**Σχ. 13 - (Αριστερά) Το διάγραμμα της  $g_2(r)$  για  $T^*=1$ . Η διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά τη  $g_2(r)_{Poisson}$ . (Δεξιά) Η γεωμετρία για την οποία πραγματοποιείται ο υπολογισμός. Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1**

Αύξηση της παραμέτρου  $V_f$  συνεπάγεται μείωση του κενού χώρου. Ο ίδιος αριθμός σωματιδίων κατανέμεται σε μία πιο κλειστή δομή εφόσον μειώνεται το πορώδες. Αυτό έχει ως συνέπεια να αυξάνεται η πυκνότητα και κατ' επέκταση να μειώνονται οι αριθμητικές τιμές της  $g_2(r)$ . Το γεγονός ότι οι κλειστές δομές παρουσιάζουν συσσωματώματα μεγαλύτερου μεγέθους συνεπάγεται πως η  $g_2(r)$  θα παραμένει άνω της αντίστοιχης μικρότερου  $V_f$  για μεγαλύτερες αποστάσεις. Αντιθέτως, κατανομές σωματιδίων που λογίζονται ως τυχαίες δεν παρουσιάζουν ιδιαίτερα μεγάλες αποκλίσεις.



**Σχ. 14 - Διάγραμμα της  $g_2(r)$  για δύο διαφορετικά κλάσματα όγκου σε κοινή  $T^*$ . Αριθμός σωματιδίων 6400**

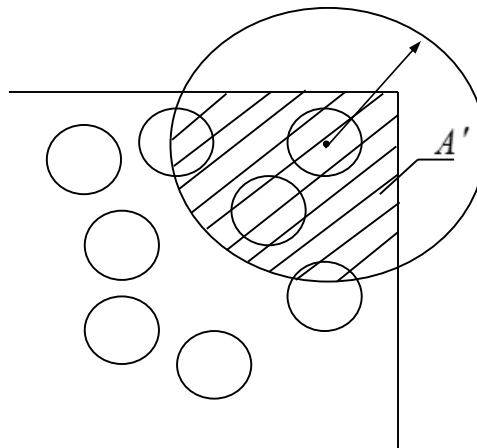
## 3.2 Συνάρτηση Ripley

### 3.2.1 Ορισμός

Ο δεύτερος εν σειρά δείκτης που χρησιμοποιείται είναι η συνάρτηση  $K(r)$  του Ripley [28]. Μαθηματικά ορίζεται ως:

$$K(r) = \frac{A}{N^2} \sum_{k=1}^N \frac{I_k(r)}{w_k(r)} \quad (3.3)$$

όπου για τη συνολική επιφάνεια  $A$  που μελετάται και τον συνολικό αριθμό σωματιδίων  $N$ , το  $I_k(r)$  συμβολίζει τον αριθμό των σωματιδίων εσωτερικά μίας απόστασης  $r$  από το εκάστοτε σωματίδιο αναφοράς  $k$ , ενώ το  $w_k(r)$  αναπαριστά ένα διορθωτικό παράγοντα για τα σωματίδια τα οποία προσεγγίζουν τα όρια του κελιού. Ο δείκτης  $K(r)$  υπολογίζει τον αριθμό των σωματιδίων που εντοπίζονται εσωτερικά ενός κύκλου ακτίνας  $r$ , με την προϋπόθεση ότι οι αποστάσεις λογίζονται κατά ζεύγη, ως προς την πυκνότητα. Είναι εμφανές και από Σχ. 15 πως τα όρια του κελιού επηρεάζουν τον υπολογισμό της  $K(r)$  καθώς λαμβάνονται υπόψιν κενοί χώροι.



Σχ. 15 - Η επίδραση των ακμών του κελιού στον υπολογισμό της  $K(r)$  και ο διορθωτικός παράγοντας  $w_k(r)=A'/\pi r^2$

Στην παρούσα ανάλυση οι διορθωτικοί παράγοντες παραλείπονται λόγω των περιοδικών οριακών συνθήκων, όπως ακριβώς ορίστηκαν κατά τον υπολογισμό της  $g_2(r)$ .

Εξ' ορισμού παρατηρείται άμεση μαθηματική σχέση μεταξύ των δύο συναρτήσεων. Η διαφοροποίησή τους έγκειται στο χώρο που εξετάζεται στην εκάστοτε περίπτωση. Η διακριτοποίηση στο πεδίο του  $r$  πραγματοποιείται σε κυκλικούς δίσκους για την συνάρτηση του Ripley, σε αντίθεση με τους δακτυλίους που παρουσιάστηκαν πρωτύτερα στην ανάλυση της  $g_2(r)$ . Στην βιβλιογραφία η  $g_2(r)$  αναφέρεται ως συνάρτηση πυκνότητας της  $K(r)$ , θεωρώντας ότι η συνάρτηση είναι συνεχής [9]. Αναμένεται, λοιπόν να υπάρχει κάποιος μαθηματικός τύπος που να συνδέει τους δύο δείκτες.

$$K(r) = \int_0^r 2\pi r g_2(r) dr \quad (3.4)$$

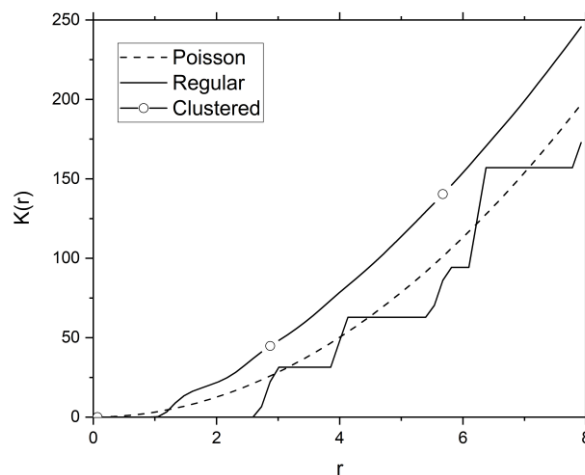
Συνεπώς μία εναλλακτική μέθοδος υπολογισμού της  $K(r)$  προκύπτει μέσω αριθμητικής ολοκλήρωσης της  $g_2(r)$ , η οποία και υιοθετείται. Η προσέγγιση αυτή αναμένεται να περιορίσει τις υψηλές διακυμάνσεις της  $g_2(r)$ , όπως παρατηρήθηκε στην ενότητα 3.1.3, κυρίως όταν η κατανομή χαρακτηρίζεται πλέον ως τυχαία δηλαδή όταν προσεγγίζει την τιμή 1. Η αριθμητική ολοκλήρωση πραγματοποιήθηκε στο περιβάλλον του MATLAB σύμφωνα με τον κανόνα του τραπεζίου για πολλαπλά ίσα διαστήματα.

### 3.2.2 Ταξινόμηση χωρικών κατανομών

Η  $K(r)$  δεν αποτελεί παρά μία τροποποιημένη αναπαράσταση των αποτελεσμάτων της ενότητας 3.1. Ωστόσο πλεονεκτεί της  $g_2(r)$  καθώς, παρότι αναμένεται να υπάρχει συνέπεια στα συμπεράσματα που εξήχθησαν, συνιστά ένα πιο ενδεικτικό μέτρο σύγκρισης των κατανομών με την Poisson. Για μία κατανομή Poisson έχει αποδειχθεί πως  $K_{poisson}(r) = \pi r^2$  [9]. Τυχαίες διατάξεις σωματιδίων αναπαρίστανται από την κατανομή Poisson και αναμένεται να συμπίπτει η υπολογιζόμενη  $K(r)$  με την  $K_{poisson}(r)$ . Σε δεδομένες αποστάσεις, τιμές ανώτερες του ορίου αυτού εκφράζουν το σχηματισμό συσσωματωμάτων

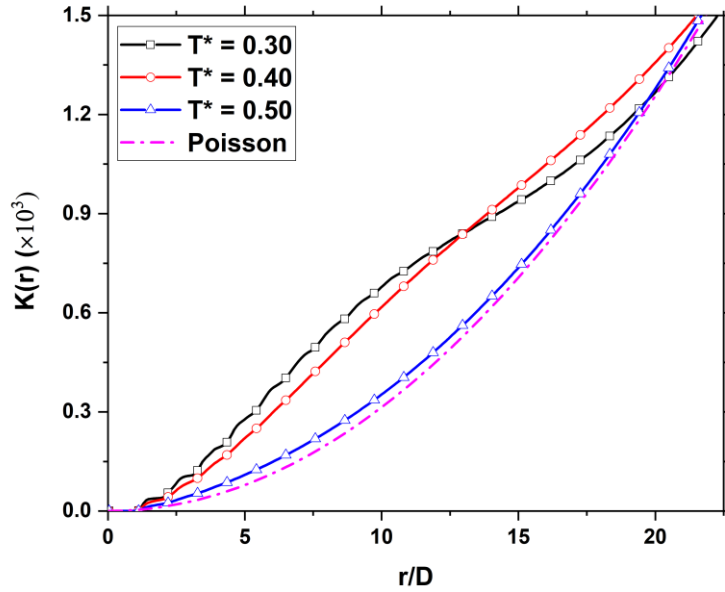


(clustered). Αντίστοιχα, χαμηλότερες τιμές υποδεικνύουν μικρότερο ποσοστό σωματιδίων από το αναμενόμενο, όπως ορίζεται από την πυκνότητα  $\rho$ , δηλαδή εμφανίζεται ένα φαινόμενο διασποράς (dispersion) ή αποτελεί ένδειξη κανονικής (regular) δομής, καθώς στις συγκεκριμένες αποστάσεις δεν αναμένεται εμφάνιση γειτονικών σωματιδίων. Οι τοπικές διαταραχές σε διαφορετικές κλίμακες μήκους αλλά και η μορφή της συνάρτησης, συγκριτικά πάντα με την  $\pi r^2$ , ταξινομούν την κατανομή σε clustered, regular και υπό πλήρη χωρική τυχαιότητα (Complete Spatial Randomness, CSR). Ακολουθεί ένα διευκρινιστικό διάγραμμα για το πως αναπαρίστανται οι τρεις πρότυπες κατανομές συγκριτικά με την κατανομή Poisson.



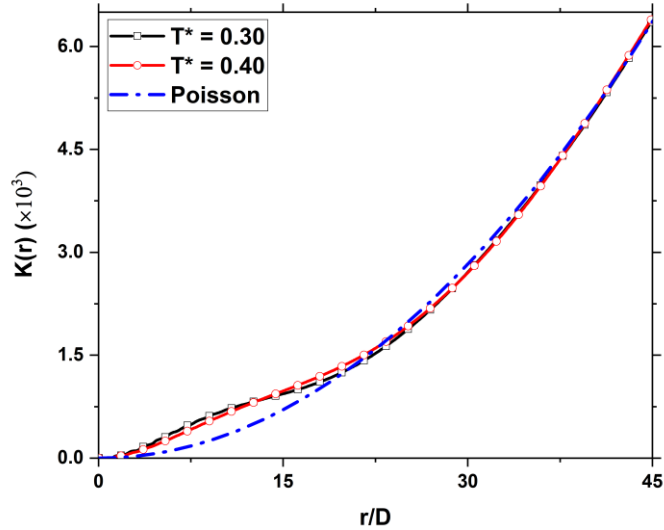
**Σχ. 16 - Αναπαράσταση της συνάρτησης του Ripley για τρεις πρότυπες κατανομές. Η τυχαία κατανομή απεικονίζεται από την  $K_{Poisson}$**

Σημαντικές παρατηρήσεις εξάγονται επιπρόσθετα και από την γραμμική αναπαράσταση της  $K(r)$ ,  $L(r)$  η οποία ορίζεται ως η τετραγωνική ρίζα της  $K(r)$  διαιρεμένη με τη σταθερά  $\pi$  ή σε μαθηματική μορφή  $L(r) = \sqrt{K(r)/\pi}$ . Προκύπτει πως για την κατανομή Poisson η  $L(r)$  αναπαρίσταται ως μία ευθεία γραμμή  $45^\circ$  που διέρχεται από την αρχή των αξόνων. Τέλος, ο βασικός λόγος αξιοποίησης της  $K(r)$  είναι ο δείκτης που προτείνεται σε αυτή τη διπλωματική εργασία για το χαρακτηρισμό των κατανομών, αλλά η ανάλυση αυτή είναι το αντικείμενο της επόμενης ενότητας.



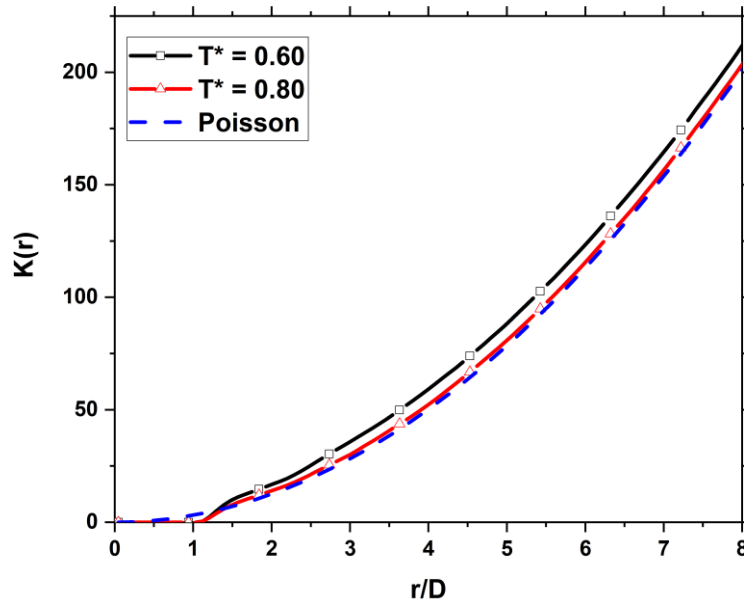
**Σχ. 17 - Διάγραμμα  $K(r)$ . Η διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά την  $K_{Poisson}$ . Η  $r_{cut-off} = 22.5D$  αντιστοιχεί στο 10% του υπολογιστικού κελιού (0.1L). Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1**

Όπως προαναφέρθηκε, το κριτήριο πλέον για την αναγνώριση της ύπαρξης συσσωματωμάτων σε μία γεωμετρία συνιστά η σύγκριση της υπολογιζόμενης  $K(r)$  με την  $\pi r^2$ . Στα δεδομένα που παρουσιάζονται στο Σχ. 17 εκτιμάται η ύπαρξη συσσωματωμάτων μέχρι και το 10% του κελιού για  $T^* < 0.5$ . Παράλληλα επιβεβαιώνονται τα συμπεράσματα της προηγούμενης ενότητας, όπου τονίστηκε η συμπεριφορά των γεωμετριών με χαμηλές  $T^*$ . Το ίδιο διάγραμμα σε μεγαλύτερη κλίμακα μας πληροφορεί πως εφόσον υφίσταται μια περιοχή έντονης ανάπτυξης συσσωματωμάτων ακολουθεί μια μικρή διασπορά των σωματιδίων. Εν συνεχεία η κατανομή χαρακτηρίζεται τυχαία καθώς προσεγγίζει την  $K(r)_{Poisson}$ .



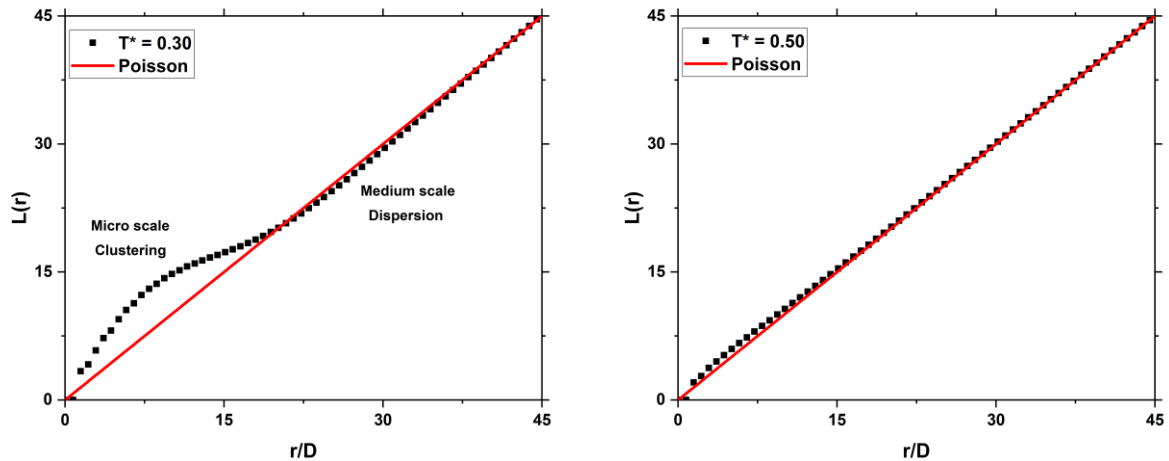
**Σχ. 18 - Διάγραμμα  $K(r)$ . Η διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά την  $K_{Poisson}$ . Η  $r_{cut-off} = 45D$  αντιστοιχεί στο 20% του υπολογιστικού κελιού (0.2L). Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1**

Η αύξηση της  $T^*$  συνεπάγεται μείωση του μεγέθους των συσσωματωμάτων και αύξηση του ποσοστού των σωματιδίων που λαμβάνουν τυχαίες θέσεις στο χώρο. Στο Σχ. 19 παρατηρείται πως θα πρέπει να εστιάσουμε πλέον σε μια αρκετά μικρή υποδιαίρεση του συνολικού κελιού ούτως ώστε να είναι ευδιάκριτη η διαφορά μεταξύ των καμπυλών.



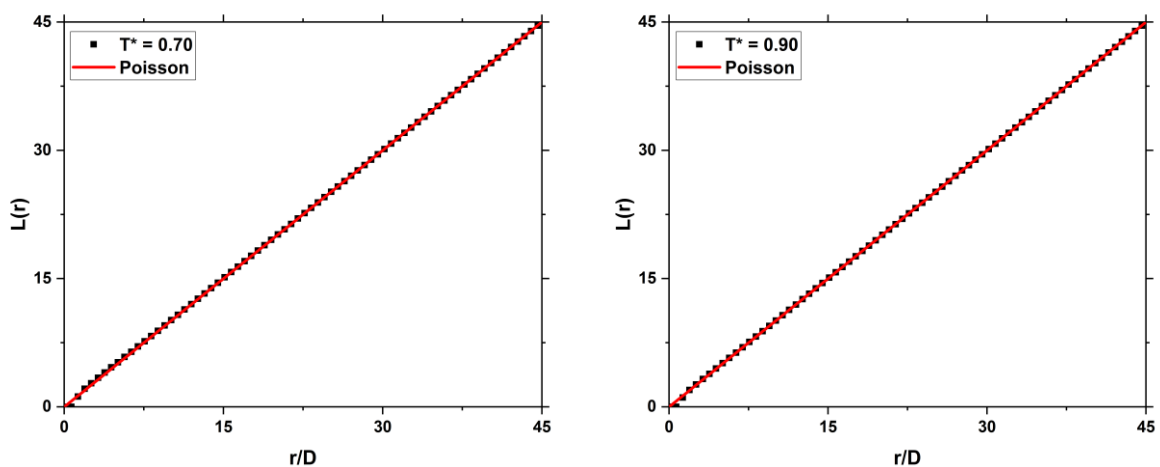
**Σχ. 19 - Διάγραμμα  $K(r)$ . Η διακεκομμένη γραμμή αναπαριστά την  $K_{Poisson}$ . Η  $r_{cut-off} = 8D$  αντιστοιχεί στο 3% του υπολογιστικού κελιού (0.03L). Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1**

Εάν θα έπρεπε να ταξινομήσουμε τις γεωμετρίες ως προς την κατανομή των σωματιδίων με βασικό κριτήριο την παράμετρο της θερμοκρασίας μία εκτίμηση είναι η ακόλουθη. Στο εύρος  $T^*=(0.3, 0.5)$  οι δομές παρουσιάζουν συσσωματώματα, τα οποία προοδευτικά μειώνονται σε μέγεθος (βλ. Σχ. 20).



**Σχ. 20 - Γραμμική αναπαράσταση της  $K(r)$ . Αριστερά το διάγραμμα προκύπτει για  $T^*=0.3$  και δεξιά για  $T^*=0.5$ . Η  $r_{cut-off} = 45D$  αντιστοιχεί στο 20% του υπολογιστικού κελιού ( $0.2L$ ). Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1**

Ακολουθεί ένα διάστημα  $T^*=(0.5, 0.7)$  όπου τόσο και ο αριθμός όσο και το μέγεθος των συσσωματωμάτων μειώνεται μέχρις ότου οι κατανομές πλέον να τείνουν προς μία τυχαία διάταξη.



**Σχ. 21 - Γραμμική αναπαράσταση της  $K(r)$ . Αριστερά το διάγραμμα προκύπτει για  $T^*=0.7$  και δεξιά για  $T^*=0.9$ . Η  $r_{cut-off} = 45D$  αντιστοιχεί στο 20% του υπολογιστικού κελιού ( $0.2L$ ). Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1**

Αξίζει να σημειωθεί πως οι διακυμάνσεις της  $g_2(r)$  αποσβένουν κατά την αριθμητική ολοκλήρωση ωστόσο δεν εξαλείφονται. Οι υπολογιζόμενες  $K(r)$  για κατανομές που χαρακτηρίζονται ως τυχαίες, δηλαδή στο εύρος  $T^*=[0.7, 1]$ , εξακολουθούν να φέρουν μικρές αποκλίσεις από την  $\pi r^2$ . Η διάκριση μεταξύ των τριών πρότυπων κατανομών που συζητούνται, όταν οι δείκτες  $g_2(r)$  και  $K(r)$  πλέον προσεγγίζουν έντονα τη συμπεριφορά της κατανομής Poisson, είναι ιδιαίτερα δύσκολη. Στο συγκεκριμένο εύρος  $T^*=[0.7, 1]$  οι στατιστικοί δείκτες τείνουν να εκτιμούν τιμές άλλοτε μικρότερες και άλλοτε μεγαλύτερες του κριτηρίου, είτε ως προς  $g_2(r)_{Poisson}$  είτε ως προς  $K_{Poisson}(r)$ . Συμπεραίνεται, λοιπόν, πως κατανομές οι οποίες ορίζονται ως πλήρως τυχαίες ενδέχεται να παρουσιάζουν σε συγκεκριμένα σημεία της δομής τους μια ενδιάμεση κατανομή μεταξύ τυχαίας και κανονικής διάταξης. Αυτό ενδεχομένως να οφείλεται στο γεγονός ότι κατά τη χωρική ανάλυση εξετάζονται μονοδιάστατα μεγέθη υπό τη μορφή σημείων (κέντρα σωματιδίων). Αντιθέτως, στη συγκεκριμένη ανάλυση μελετάται η κατανομή σωματιδίων υπό τη μορφή κυκλικών δίσκων οι οποίοι εξ ορισμού καταλαμβάνουν κάποια επιφάνεια στο συνολικό κελί της γεωμετρίας, εισάγοντας με αυτό τον τρόπο κάποιο μικρό σφάλμα. Επιπρόσθετο σφάλμα ενδέχεται να εισάγεται λόγω της αριθμητικής ολοκλήρωσης. Στην παρούσα διπλωματική ακολουθείται η παραδοχή πως οι συγκεκριμένες αποκλίσεις είναι αμελητέες.

### 3.3 Δείκτης $M_D$

#### 3.3.1 Κατασκευή δείκτη

Οι κατανομές, όπως φάνηκε στις προηγούμενες ενότητες, κυμαίνονται μεταξύ της περιοχής clustered και CSR. Η ανάγνωση διαγραμμάτων, παρότι εμπεριέχει αρκετή πληροφορία, δεν παύει να συνιστά μία ποιοτική προσέγγιση στην ανάλυση της μικροδομής. Παράλληλα οι δείκτες που παρουσιάστηκαν εξαρτώνται σε μεγάλο βαθμό από την περιοχή που εξετάζονται καθώς εμφανίζουν ιδιαίτερη ευαισθησία στις τοπικές διαταραχές. Για να θεωρηθεί ολοκληρωμένη η διερεύνηση της κατανομής των σωματιδίων προκύπτει η ανάγκη ενός ποσοτικού δείκτη. Το κεφάλαιο ολοκληρώνεται με την εισαγωγή του δείκτη  $M_D$ , ως

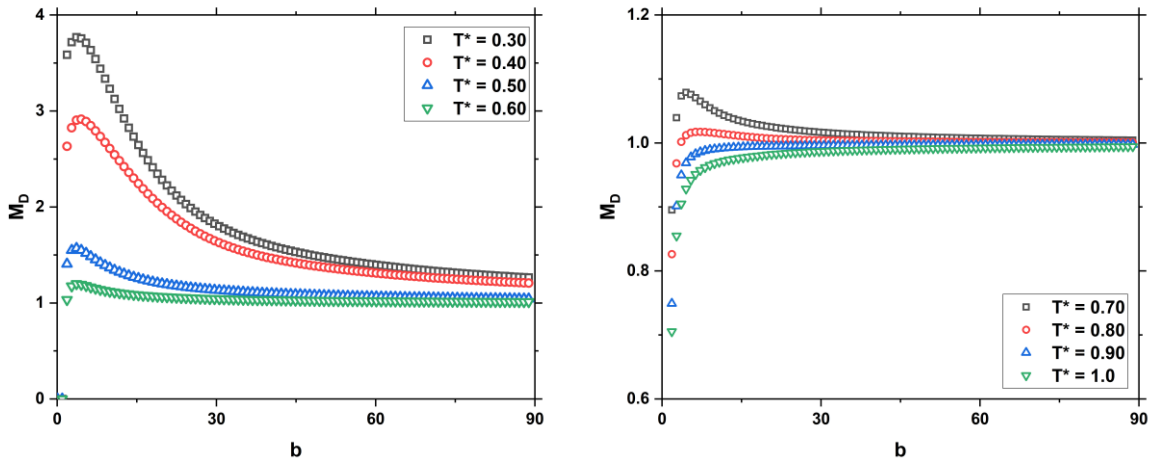
μέτρο απόκλισης της χωρικής κατανομής από την CSR με βάση τη συνάρτηση  $K$  του Ripley. Μαθηματικά ορίζεται ως:

$$M_D = \frac{1}{b-a} \int_a^b \frac{K(r)}{\pi r^2} dr \quad (3.5)$$

Αποτελεί ένα μέτρο σύγκρισης ή πιο ορθά απόκλισης της υπολογιζόμενης  $K(r)$  από την  $K_{\text{Poisson}}(r)$ , εντός ενός ολοκληρώματος ούτως ώστε να προσμετρώνται στον υπολογισμό εκτιμήσεις της κατανομής και για προηγούμενες αποστάσεις  $r$ , προσδίδοντας μνήμη στο δείκτη. Ο παράγοντας  $(b-a)$  κανονικοποιεί τον δείκτη στην τιμή 1 για την περίπτωση τυχαίας κατανομής. Οι πληροφορίες από τη γνώση ενός τέτοιου μεγέθους αναμένεται να εφάπτονται με τα συμπεράσματα που εξήχθησαν στις προηγούμενες ενότητες. Ωστόσο το πλεονέκτημα έγκειται στο γεγονός ότι πλέον μπορούμε να αναφερόμαστε σε ένα μονοσήμαντο μέγεθος, δηλαδή η πληροφορία εμπεριέχεται σε μία μοναδική τιμή του δείκτη  $M_D$  για την εκάστοτε γεωμετρία.

### 3.3.2 Επίδραση ορίων ολοκλήρωσης

Η ανάλυση συμπεριλαμβάνει την συμπεριφορά του δείκτη ως προς όλες τις παραμέτρους που χρησιμοποιήθηκαν στην παραγωγή γεωμετριών  $(N, \phi, T^*)$ . Αρχικά διερευνάται η εξάρτηση του δείκτη από τα όρια ολοκλήρωσης  $a, b$ . Το  $a$  θεωρείται ορθό να ισούται με τη διάμετρο του σωματιδίου,  $D$ , εφόσον η  $K(r)$  λαμβάνει μηδενικές τιμές για μικρότερες αποστάσεις υπό την υπόθεση της μη επικάλυψης των σωματιδίων. Γενικότερα το κάτω όριο του ολοκληρώματος παραμένει σταθερό. Τιμές ανώτερες της ελάχιστης δυνατής θα απέκλειαν από το  $M_D$  πληροφορίες για την κατανομή στα γειτονικά όρια, κάτι το οποίο είναι ανεπιθύμητο. Στην περίπτωση όπου το άνω όριο αντιμετωπίζεται ως συνάρτηση της απόστασης,  $b = b(r)$  ο δείκτης θα πρέπει να συγκλίνει σε κάποια τιμή για να θεωρηθεί αξιόπιστος.



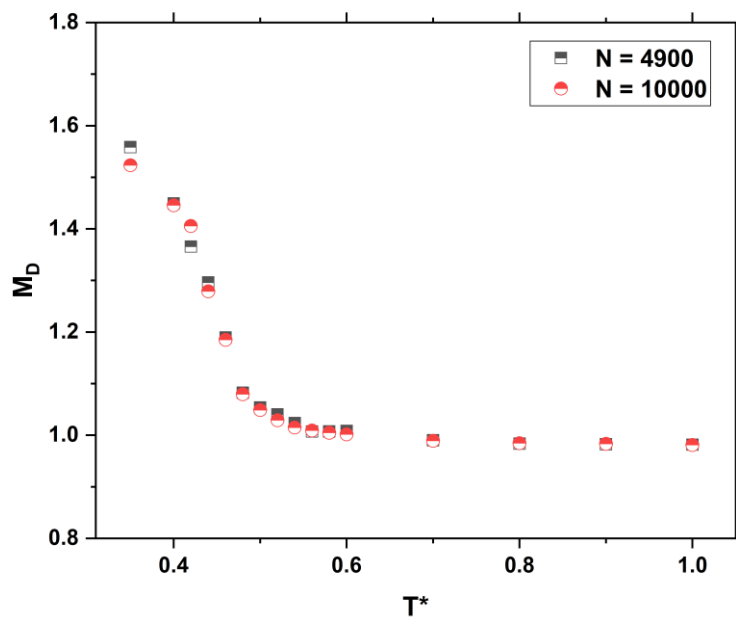
**Σχ. 22 - Διάγραμμα  $M_D$  ως προς το άνω άκρο ολοκλήρωσης  $b=b(r)$  για  $T^*$  στο εύρος 0.3-1.0. Το  $b=90D$  αντιστοιχεί στο 40% του υπολογιστικού κελιού (0.4l). Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1**

Σύμφωνα με το Σχ. 22, ο δείκτης  $M_D$  σταθεροποιείται όταν το άνω άκρο του ολοκληρώματος,  $b$ , λαμβάνει μια τιμή στο πεδίο του  $r$  που αντιπροσωπεύει το 30 με 40% του συνολικού κελιού. Εάν ο εξεταζόμενος χώρος είναι μικρότερος αυτού του ποσοστού ενδέχεται να μην αντικατοπτρίζει μια ρεαλιστική εικόνα της γεωμετρίας. Όπως προαναφέρθηκε στις ενότητες 3.1.3 και 3.2.2, οι clustered δομές δηλαδή γεωμετρίες με χαμηλές τιμές  $T^*$  χωρίζονται σε τρεις υποπεριοχές. Αρχικά σε πολύ μικρές αποστάσεις εμφανίζονται συσσωματώματα, ακολουθεί μια περιοχή διασποράς των σωματιδίων και εν τέλει η δομή προσεγγίζει μια τυχαία διάταξη. Αυτός είναι και ο λόγος για τον οποίον στο Σχ. 22 ο δείκτης, για μικρές τιμές του  $b$ , λαμβάνει τη μέγιστη τιμή του. Συνεπώς θα πρέπει να συμπεριληφθούν όλα τα παραπάνω φαινόμενα στον υπολογισμό του  $M_D$ , όσον αφορά την παράμετρο  $b$ .

Αντιθέτως στο Σχ. 22 (δεξιά) παρατηρούμε πως οι κατανομές που λογίζονται ως τυχαίες προσεγγίζουν ασυμπτωματικά τη μονάδα ακόμη και από χαμηλές τιμές του  $b$ . Η συμπεριφορά αυτή δικαιολογείται αν αναλογιστεί κανείς πως πρόκειται για γεωμετρίες, οι  $K(r)$  των οποίων ακολουθούν αριθμητικά την  $K_{poisson}(r)$  σχεδόν σε όλο τον εξεταζόμενο χώρο. Το γεγονός πως προσεγγίζουν αλλά ενδέχεται να μην λαμβάνουν την τιμή 1 έγκειται στις παρατηρήσεις που τονίστηκαν στο τέλος της ενότητας 3.2.2.

### 3.3.3 Επίδραση του αριθμού των σωματιδίων

Στο παρόν κεφάλαιο η στατιστική ανάλυση πραγματοποιήθηκε για γεωμετρίες με αριθμό σωματιδίων  $N = 6400$ . Τα κριτήρια επιλογής του συγκεκριμένου αριθμού είναι δύο. Πρώτον, η παράμετρος  $N$  πρέπει να μην επηρεάζει την αξιοπιστία των στατιστικών δεικτών. Στην περίπτωση που ο δείκτης εξαρτάται από τον αριθμό  $N$  δεν δύναται να γενικευτεί παρά μόνο στις εξής γεωμετρίες. Ταυτόχρονα όσο αυξάνεται ο αριθμός των σωματιδίων τόσο η γεωμετρία θεωρείται πιο ρεαλιστική. Αποδείχθηκε πως στο εύρος  $N=[4900, 10000]$  τα αποτελέσματα του δείκτη  $M_D$  συγκλίνουν ως προς μία δεδομένη τιμή, όπως φαίνεται και στο Σχ. 23. Ως δεύτερο κριτήριο συνιστούν τα αποτελέσματα ροής που προέκυψαν κατά την αριθμητική επίλυση, όπου και φάνηκε πως υφίσταται σύγκλιση στην τιμή 6400 (βλ. Παράρτημα Ι. Χωρική σύγκλιση πλέγματος).



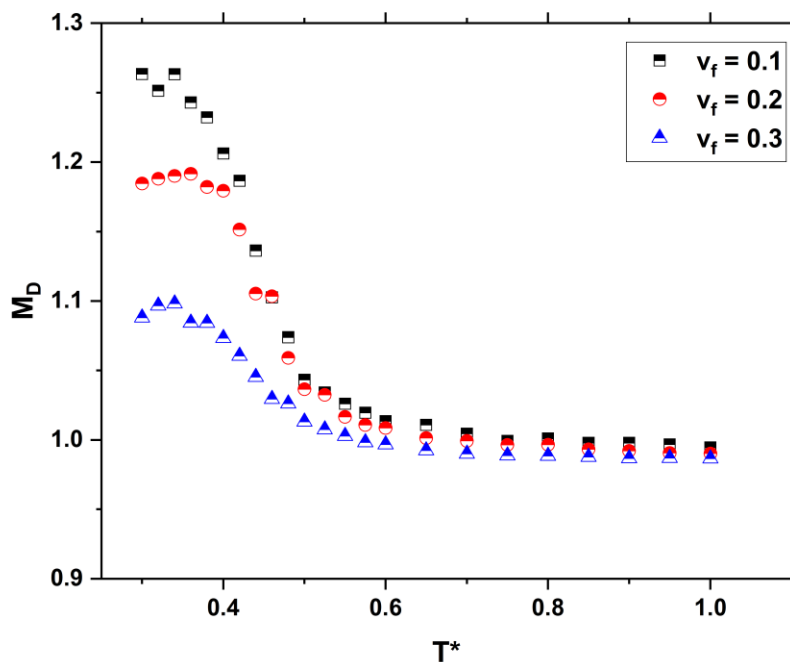
Σχ. 23 - Διάγραμμα  $M_D$  ως προς  $T^*$  για διαφορετικό αριθμό σωματιδίων,  $N$ . Κλάσμα όγκου 0.1

Διευκρινίζεται πως το Σχ. 23 αναπαριστά το δείκτη  $M_D$  για δύο δομές με διαφορετικό αριθμό σωματιδίων, όταν το άνω άκρο ολοκλήρωσης  $b$  λαμβάνει την ίδια αδιάστατη τιμή, ως πολλαπλάσιο της διαμέτρου. Ουσιαστικά αποδεικνύεται πως το  $M_D$  λαμβάνει κάποια μονοσήμαντη συμπεριφορά ως προς το  $T^*$  ανεξαρτήτως της παραμέτρου  $N$ , όταν η τελευταία βρίσκεται στο συγκεκριμένο εύρος (4900, 10000).



### 3.3.4 Επίδραση του κλάσματος όγκου

Επόμενο βήμα είναι ο έλεγχος της αξιοπιστίας του  $M_D$  συγκριτικά με το κλάσμα όγκου  $V_f$  και κατ' επέκταση το πορώδες της δομής. Στην ενότητα 3.1.3 επισημάνθηκε πως αύξηση του  $V_f$  συνεπάγεται σημαντική μείωση της  $g_2(r)$  για κατανομές συσσωματωμάτων, ενώ για τυχαίες κατανομές τα αποτελέσματα δεν παρουσιάζουν μεγάλες αποκλίσεις. Ομοίως, η ίδια συμπεριφορά παρατηρήθηκε και στον υπολογισμό της συνάρτησης  $K$  του Ripley. Ο έλεγχος που πραγματοποιήθηκε για την επίδραση του κλάσματος όγκου ουσιαστικά σχετίζεται με την συμπεριφορά του  $M_D$  σε γεωμετρικά όμοιες δομές με διαφορετική κατανομή σωματιδίων, δηλαδή διαφορετικό  $T^*$ . Αναμένεται λοιπόν ποσοτική διαφοροποίηση του δείκτη  $M_D$ . Ωστόσο από το Σχ. 24 προκύπτει το συμπέρασμα πως η ποιοτική συμπεριφορά του  $M_D$  συνολικά σε όλο το εύρος των  $T^*$  δεν διαταράσσεται από την μεταβολή του πορώδους.

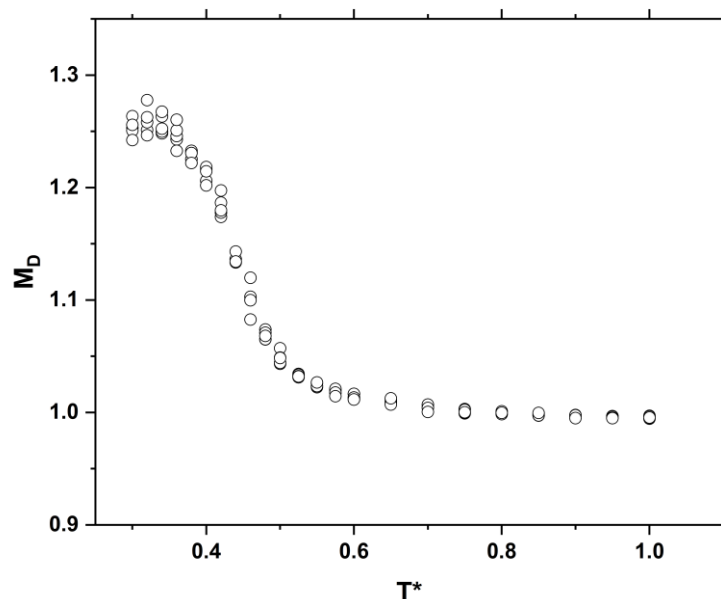


Σχ. 24 - Διάγραμμα  $M_D$  ως προς  $T^*$  για τρία διαφορετικά κλάσμα όγκου. Αριθμός σωματιδίων 6400

Στο Σχ. 24 παρατηρείται η αναμενόμενη ποσοτική απόκλιση στις δομές έντονης συσσωμάτωσης που συζητήθηκε ενώ τυχαίες κατανομές ( $T^* > 0.7$ ) συγκλίνουν ανεξαρτήτως της τιμής του  $V_f$ .

### 3.3.5 Απόκλιση σε γεωμετρίες με ίδιο σετ παραμέτρων

Η τυχαία δύναμη Langevin, όπως ορίστηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο, καθιστά εφικτή την εξέταση της μεταβλητότητας των αριθμητικών αποτελεσμάτων του δείκτη  $M_D$  για γεωμετρικά όμοιες δομές, δηλαδή όταν το σετ παραμέτρων ( $N, T^*$  και  $\phi$ ) είναι κοινό. Εφόσον γεωμετρίες με διαφορετική οπτική αναπαράσταση παρουσιάζουν πανομοιότυπη στατιστική συμπεριφορά, το  $M_D$  αποτελεί έναν εύρωστο δείκτη. Η τυχειότητα που εισάγεται κατά τη δημιουργία των γεωμετριών δεν επηρεάζει τον στατιστικό δείκτη τόσο ποιοτικά, δηλαδή τη μορφή της καμπύλης, όσο και ποσοτικά ( μικρή απόκλιση τιμών για κοινό  $T^*$ ).



Σχ. 25 - Διασπορά  $M_D$  ως προς  $T^*$  σύμφωνα με 5 γεωμετρίες όμοιου σετ παραμέτρων. Αριθμός σωματιδίων 6400 και κλάσμα όγκου 0.1

### 3.3.6 Συμπέρασμα

Η μονοτονική συμπεριφορά του  $M_D$  καταδεικνύει μια έντονη συσχέτιση μεταξύ των δύο πρότυπων κατανομών. Παρότι δεν διατυπώνεται υπό μία γενικευμένη μαθηματική σχέση, ο δείκτης αναγνωρίζει σε ικανοποιητικό βαθμό την ύπαρξη συσσωματωμάτων αλλά και την ένταση όπου αυτά δημιουργούνται πάντοτε με μέτρο σύγκρισης την τυχαία κατανομή. Δεδομένου του κλάσματος όγκου, η γνώση της τιμής του  $M_D$  φάνηκε πως προσφέρει μια αξιόπιστη πληροφόρηση για την μορφή της κατανομής των σωματιδίων. Εν συνεχεία η σύζευξη του δείκτη  $M_D$  με τα αποτελέσματα της διαπερατότητας από το πρόβλημα ροής που εξετάζεται θα μας επιτρέψει να αποβάλλουμε από την ανάλυση μας την παράμετρο  $T^*$ . Η κανονικοποιημένη θερμοκρασία κατέχει προς το παρών καθοριστικό ρόλο στην αναγνώριση των δομών, ωστόσο δεν φέρει κάποια φυσική σημασία (artificial parameter). Η χρήση, λοιπόν, του  $M_D$ , ως ένας δείκτης που μπορεί να μετρηθεί σχετικά εύκολα και η τιμή του εμπεριέχει την επίδραση όλων των παραμέτρων προσομοίωσης, αποτελεί ένα πολύ σημαντικό εργαλείο στον χαρακτηρισμό των γεωμετριών ως προς την ύπαρξη συσσωματωμάτων.

## Κεφάλαιο 4. Ορισμός υπολογιστικού προβλήματος

---

### 4.1 Μαθηματική διατύπωση

Η ροή κατά μήκος του πορώδους μέσου έχει τα παρακάτω χαρακτηριστικά:

- Ιξώδης
- Δυσδιάστατη
- Μακροσκοπικά μονοκατευθυντική, από αριστερά προς τα δεξιά στην  $x$  κατεύθυνση
- Έρπουσα ( $Re \ll 1$ )
- Ασυμπίεστη, η πυκνότητα παραμένει σταθερή
- Χρονικά μη μεταβαλλόμενη ( $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t} = 0$ )
- Απουσία βαρυτικών και άλλων εξωτερικών δυνάμεων

Συμπεριλαμβανομένων των παραπάνω συνθηκών οι εξισώσεις Navier-Stokes που διέπουν την κίνηση του ρευστού, αποτελούνται από την εξίσωση ορμής:

$$\nabla p = \nu(\nabla^2 U) \quad (4.1)$$

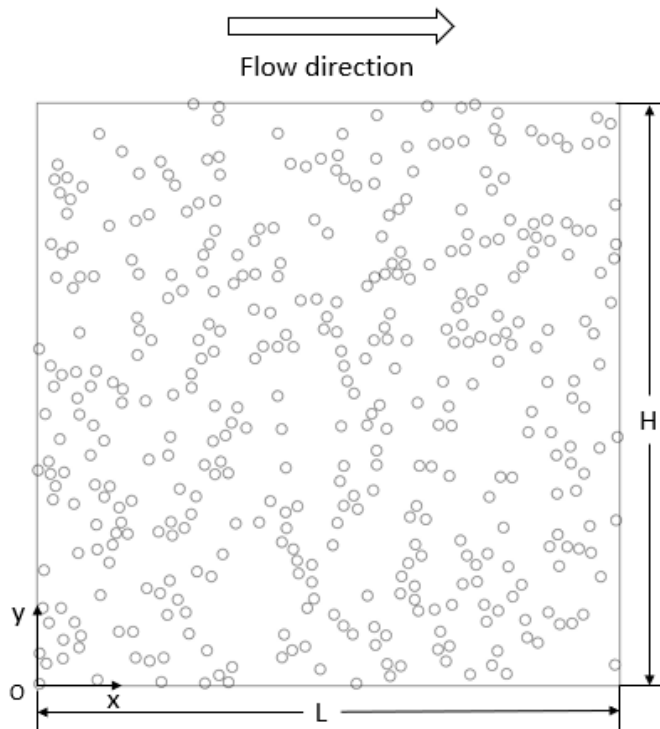
αλλά και την εξίσωση συνέχειας, η οποία υπό την παραδοχή της ασυμπίεστης ροής ορίζεται:

$$(\nabla \cdot U) = 0 \quad (4.2)$$

Όπου  $U$  το πεδίο της ταχύτητας,  $p$  η κινηματική πίεση (απόλυτη πίεση διαιρεμένη με την πυκνότητα,  $\frac{P}{\rho}$ ) και  $\nu$  το κινηματικό ιξώδες.

Η ωθούσα δύναμη της ροής προκύπτει από την ομοιόμορφα κατανεμημένη πτώση πίεσης από το αριστερό στο δεξιό όριο (τα όρια είναι κάθετα στην κατεύθυνση της ροής). Τα σωματίδια είναι ακίνητα και πάνω στην επιφάνεια τους ορίζεται συνθήκη μη ολίσθησης. Επίσης, εφαρμόζονται συμμετρικές συνθήκες στα όρια παράλληλα στην κατεύθυνση της ροής έτσι ώστε να εξασφαλίζεται ότι η ροή δεν θα τα διαπεράσει. Ως αποτέλεσμα των παραπάνω, η ροή εξελίσσεται ως μακροσκοπικά μονοκατευθυντική στο  $x$  άξονα. Οι

παράμετροι επιλέγονται με τέτοιο τρόπο έτσι ώστε η ροή να είναι πολύ αργή ( $Re \ll 1$ ). Η πτώση πίεσης παίρνει μικρή τιμή,  $\Delta p = 1$ , και το κινηματικό ιξώδες μια αρκούτως μεγάλη τιμή,  $\nu = 100$  η οποία διατηρείται σταθερή (Newtonian transport model). Το χαρακτηριστικό μήκος  $l$  ορίζεται ως το ύψος του κελιού.



**Σχ. 26 - Αντιπροσωπευτικό κελί κατανομής ινών.**

Αφού ολοκληρωθεί η επίλυση των εξισώσεων διατήρησης, παίρνουμε σαν αποτέλεσμα τον ρυθμό ροής (flow rate,  $Q$ ) στην έξοδο του κελιού ( $x=L$ ).

$$Q = \int_0^H u_x(y)|_{x=L} dy \quad (4.3)$$

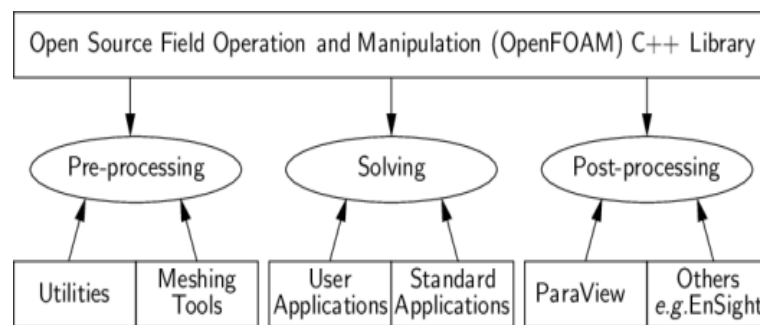
Το γεγονός ότι η ροή είναι έρπουσα και μακροσκοπικά μονοκατευθυντική μας επιτρέπει να εφαρμόσουμε τον νόμο του Darcy. Η υδραυλική διαπερατότητα,  $k$ , υπολογίζεται ως:

$$k = KD^2 = \frac{Q\nu L}{\Delta p H} \quad (4.4)$$

Όπου ως  $K$  ορίζεται η αδιάστατη μορφή της διαπερατότητας.

## 4.2 OpenFOAM

Η υπολογιστική επίλυση του προβλήματος ροής πραγματοποιήθηκε με τη χρήση του λογισμικού OpenFOAM (Open-source Field Operation And Manipulation). Πρόκειται για μια εργαλειοθήκη, γραμμένη σε γλώσσα προγραμματισμού C++, για την ανάπτυξη εξειδικευμένων επιλυτών (solvers) για προβλήματα υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (Computational Fluid Dynamics) και βοηθητικών προγραμμάτων (utilities) για την επεξεργασία δεδομένων πριν (pre-processing) και μετά (post processing) την επίλυση [29].



Σχ. 27 - Συνολική εικόνα της δομής του OpenFOAM

Κάποιες ενδεικτικές εφαρμογές του OpenFOAM είναι οι εξής :

- Μοντελοποίηση τυρβώδους ροής με τις μεθόδους RAS (Reynolds-Averaged Simulation), LES (Large- Eddy Simulation) και DES ( Detached- Eddy Simulation)
- Μοντελοποίηση θερμοφυσικών φαινομένων
- Πολυφασικές ροές
- Φαινόμενα μεταφοράς- ρεολογία
- Περιστρεφόμενες ροές με πολλαπλά πλαίσια αναφοράς (MRF)
- Περιστρεφόμενες ροές με αυθαίρετη διεπαφή πλέγματος (AMI)
- Συμπιεστές και θερμικές ροές
- Συζευγμένη μεταφορά θερμότητας
- Πορώδη μέσα
- Κινητική χημικής αντίδρασης

### 4.2.1 Μέθοδος πεπερασμένων όγκων

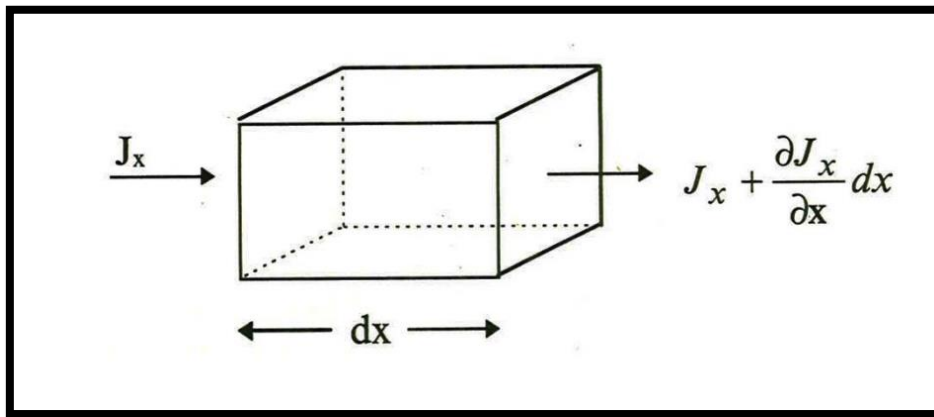
Η διαδικασία της διακριτοποίησης περιλαμβάνει την αντικατάσταση των μερικών διαφορικών εξισώσεων με ένα σύνολο αλγεβρικών εξισώσεων οι οποίες μπορούν να επιλυθούν υπολογιστικά. Υπάρχουν πολλές μέθοδοι διακριτοποίησης με κυριότερες:

- Μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων
- Μέθοδος οριακών στοιχείων
- Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών
- Μέθοδος πεπερασμένων όγκων

Η αποτελεσματικότητα της κάθε μεθόδου εξαρτάται από τα εκάστοτε χαρακτηριστικά του φυσικού φαινομένου που προσομοιώνεται [30]. Ενδεικτικά, αναφέρονται το μέγεθος του χώρου, το μέγεθος της επιθυμητής ακρίβειας καθώς και η πολυπλοκότητα των εξισώσεων. Σε κάθε μία από αυτές τις μεθόδους το συνεχές πεδίο ροής αντικαθίσταται με μια σειρά διακριτών τιμών σε καθορισμένα σημεία.

Το OpenFOAM, για την διακριτοποίηση των εξισώσεων, κάνει χρήση της μεθόδου πεπερασμένων όγκων η οποία υιοθετεί την ιδέα των όγκων ελέγχου που συναντώνται στην ανάλυση φυσικών συστημάτων. Το πεδίο ροής διασπάται σε μικροσκοπικούς όγκους ελέγχου που συνδεόνται μεταξύ τους και περικλύονται ο κάθε ένας από μια επιφάνεια μέσω της οποίας αναπτύσσεται η ροή. Σε κάθε μικροσκοπικό όγκο ελέγχου εφαρμόζονται οι εξισώσεις διατήρησης μάζας, ορμής και ενέργειας ικανοποιώντας το ισοζύγιο λόγω εισροής και εκροής στην οριοθετημένη επιφάνεια καθώς και από πρόσθετες πηγές εντός του όγκου. Δημιουργείται, λοιπόν, ένα σύστημα εξισώσεων οι οποίες εκφράζονται σε στοιχειώδη ογκομετρική περιοχή. Η μέθοδος πεπερασμένων όγκων, ανάγει τα κατ' όγκο ολοκληρώματα που απαρτίζουν αυτές τις εξισώσεις σε επιφανειακά ολοκληρώματα μέσω του θεωρήματος Gauss [31]. Θεωρούμε ένα "χωρίο" (μέρος του χώρου)  $V$  που περιβάλλεται από την επιφάνεια  $S$ . Έστω  $\mathbf{n}$  το μοναδιαίο διάνυσμα κάθετο στην  $S$  και προς τα έξω του  $V$ . Για κάθε αρκούντως ομαλό τανυστικό πεδίο οποιασδήποτε τάξεως  $\mathbf{F}(\mathbf{x})$  ισχύει η σχέση:

$$\iiint_V (\nabla \cdot \mathbf{F}) dV = \iint_S (\mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \cdot d\mathbf{S} \quad (4.5)$$



Σχ. 28 - Ισοζύγιο στους στοιχειώδεις όγκους ελέγχου: Εισροή+Παραγωγή=Εκροή

### 4.3 Δημιουργία πλέγματος

Μια προσομοίωση αρχικοποιείται ορίζοντας ένα πεδίο επίλυσης που περιλαμβάνει μια περιοχή του χώρου ενός συγκεκριμένου γεωμετρικού σχήματος. Το πεδίο επίλυσης αποτελείται από ένα σύνολο μικροσκοπικών στοιχείων, που ονομάζονται κελιά, στο κέντρο των οποίων αποθηκεύεται η τιμή των μεταβλητών. Σε δισδιάστατα προβλήματα, όπως αυτά που μελετώνται, τα κελιά ορίζονται σε δύο διαστάσεις, συνήθως υπό τη μορφή τριγώνων και τετραγώνων. Όμως, επειδή το πρόβλημα διακριτοποιείται με την μέθοδο των πεπερασμένων όγκων το πλέγμα θα πρέπει να αναχθεί στις τρεις διαστάσεις (π.χ. κελιά σε σχήματα πρισμάτων και εξάεδρων) και εν συνεχεία με κατάλληλες ρυθμίσεις στο λογισμικό επίλυσης να αγνοηθεί η τρίτη διάσταση.

#### 4.3.1 Gmsh

Για την δημιουργία του πλέγματος προσομοίωσης ανατρέξαμε στο ελεύθερης πρόσβασης λογισμικό Gmsh [32]. Αποτελεί μια γεννήτρια τρισδιάστατου πλέγματος πεπερασμένων στοιχείων (π.χ. μικροσκοπικών όγκων ελέγχου) που παρέχει επιπρόσθετα την δυνατότητα σχεδιασμού και επεξεργασίας αποτελεσμάτων μετά την αριθμητική



προσομοίωση. Αποτελεί ένα γρήγορο εργαλείο, φιλικό προς τον χρήστη που προσφέρει προχωρημένες επιλογές οπτικοποίησης του πλέγματος.

Είναι φτιαγμένο γύρω από τέσσερις άξονες: σχεδιασμός γεωμετρίας, δημιουργία πλέγματος (pre-processing), επίλυση εξισώσεων (solver) και επεξεργασία αποτελεσμάτων (post-processing). Στην παρούσα ανάλυση γίνεται χρήση του Gmsh αποκλειστικά και μόνο για την παραγωγή πλέγματος, αγνοώντας τις επιπλέον διαθέσιμες λειτουργίες. Ο χρήστης έχει την επιλογή να δώσει τις οδηγίες για την λειτουργία του Gmsh είτε διαδραστικά χρησιμοποιώντας το γραφικό περιβάλλον χρήστη (GUI), είτε με αρχεία κειμένου γραμμένα σε μια από τις γλώσσες προγραμματισμού που υποστηρίζονται από το Gmsh (Python, C, C++) [33]. Το Gmsh παρέχει πληθώρα αλγορίθμων για την αυτόματη δημιουργία πλέγματος. Στη συγκεκριμένη περίπτωση χρησιμοποιήθηκε ο αλγόριθμος “Frontal-Delaunay for Quads”, μια παραλλαγή του αλγορίθμου “Frontal-Delaunay”. Για περισσότερες πληροφορίες για τον συγκεκριμένο αλγόριθμο, μπορεί κάποιος να ανατρέξει στην σχετική βιβλιογραφία [34].

#### 4.3.2 Δομή και ιδιότητες ενός έγκυρου πλέγματος

Τα πλέγματα στα σύγχρονα λογισμικά υπολογιστικής ρευστοδυναμικής υποδιαιρούνται σε κελιά οποιουδήποτε ακανόνιστου πολυεδρικού σχήματος. Ένα κελί μπορεί να αποτελείται από απεριόριστο αριθμό όψεων (faces), των επιφανειών δηλαδή που περικλείουν τα κελιά και κάθε όψη από απεριόριστο αριθμό ακμών (edges).

Τα κελιά είναι συνεχόμενα, δηλαδή οι όψεις τους είναι κοινές με τα αντίστοιχα γειτονικά τους, εκτός αν αποτελούν το όριο του πεδίου λύσης. Δεν επιτρέπεται ένα κελί να καταλαμβάνει μέρος της εσωτερικής επιφάνειας (ή του όγκου) ενός γειτονικού του (conformal mesh). Δεν υπάρχει κάποιος περιορισμός στην ευθυγράμμιση των κελιών με τους άξονες συντεταγμένων. Στο Gmsh προκειμένου να διασφαλιστεί η συνοχή του πλέγματος ακολουθούνται τα παρακάτω βήματα:

1. Ορίζονται οι κόμβοι που αποτελούν τη βάση του πλέγματος.
2. Δημιουργούνται οι καμπύλες ενώνοντας με ευθύγραμμα τμήματα τους κόμβους.
3. Το πλέγμα των καμπυλών χρησιμοποιείται για την δημιουργία των επιφανειών.
4. Οι καμπύλες συνδυάζονται με τέτοιο τρόπο ώστε να δημιουργηθούν οι πεπερασμένοι όγκοι.

Προκειμένου να γίνει η ανάλυση στους στοιχειώδεις όγκους ελέγχου θα πρέπει να γίνει παρεμβολή των τιμών από τα κέντρα των κελιών (όγκων) στα κέντρα των επιφανειών τους (όψεις). Κάθε όψη μέσα στο πλέγμα είναι κοινή σε δύο κελιά τα οποία είναι γνωστά ως κελί ιδιοκτήτης και κελί γείτονας. Εξαιρέση αποτελούν οι όψεις των κελιών στο όριο του πεδίου επίλυσης, όπου η όψη του κελιού συνδέεται μόνο με το κελί ιδιοκτήτη, εφόσον δεν υπάρχουν επιπλέον κελιά πέρα του συνόρου για να θεωρηθούν αυτά γειτονικά.

Οι όψεις των κελιών που περιγράφουν το όριο του πεδίου λύσης χωρίζονται σε ομάδες, κάθε μία με ένα μοναδικό όνομα. Κάθε ονομαζόμενη ομάδα οριακών όψεων, γνωστή ως ενημέρωση κώδικα (patch), προσδιορίζει μια συγκεκριμένη περιοχή των συνόρων. Σκοπός αυτού είναι να γίνεται δυνατή η εφαρμογή των επιθυμητών οριακών συνθηκών στην περιοχή αυτή κατά την εκτέλεση της προσομοίωσης. Στην περίπτωση μας, οριακές περιοχές αποτελούν τα εμποτισμένα σωματίδια, υπό την μορφή κυκλικών δίσκων διαμέτρου  $D$ , τα οποία δεν δύναται να διαπεράσει το ρευστό, καθώς και τα όρια του κελιού προσομοίωσης. Συμπερασματικά ένα πλέγμα ορίζεται πλήρως από τα ακόλουθα:

- Μια λίστα που περιέχει όλες τις κορυφές των πολυεδρικών κελιών που ορίζουν όλες τις όψεις.
- Μια λίστα από όψεις οι οποίες καθορίζονται από μια ακολουθία δεικτών κορυφών, διαφορετική για κάθε όψη.
- Μια λίστα από δείκτες κελιών ιδιοκτητών και γειτόνων που σχετίζονται με τις όψεις και συντελούν στην παρεμβολή των τιμών στις επιφάνειες.
- Ομαδοποιημένες όψεις κελιών σε κάθε οριακή περιοχή (patches).

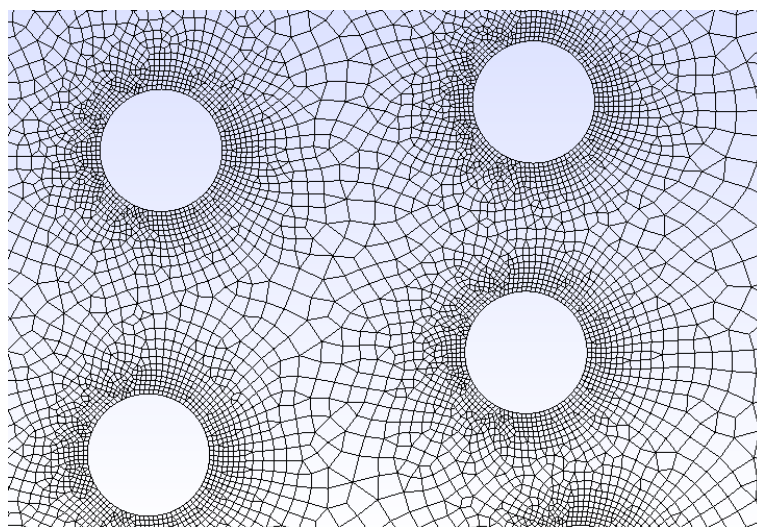
### 4.3.3 Πυκνότητα πλέγματος

Η δημιουργία πλέγματος καθορίζει σε μεγάλο βαθμό την ακρίβεια και την αξιοπιστία των αποτελεσμάτων. Η διακριτοποίηση των εξισώσεων εισάγει κάποιο σφάλμα (σφάλμα αποκοπής) επειδή στο ανάπτυγμα Taylor που χρησιμοποιείται για να εκφράσει μια παράγωγο αποκόπτονται οι όροι υψηλότερης τάξης. Το σφάλμα αυτό είναι ανάλογο του μεγέθους των μικροσκοπικών όγκων. Επομένως, όσο μικρότερους όγκους χρησιμοποιούμε στην ανάλυση μας, άρα και πυκνότερο πλέγμα, τόσο πιο ακριβής είναι η αριθμητική λύση.

Αξίζει να σημειωθεί ότι πέρα από το σφάλμα που οφείλεται στην μετατροπή του συνεχούς πεδίου λύσης σε διακριτό, εισάγεται και ένα σφάλμα λόγω της στρογγυλοποίησης που οφείλεται στην δυνατότητα του υπολογιστή ως προς τον αριθμό των ψηφίων που μπορεί να διατηρήσει στην μνήμη. Το σφάλμα στρογγυλοποίησης θεωρείται αμελητέο.

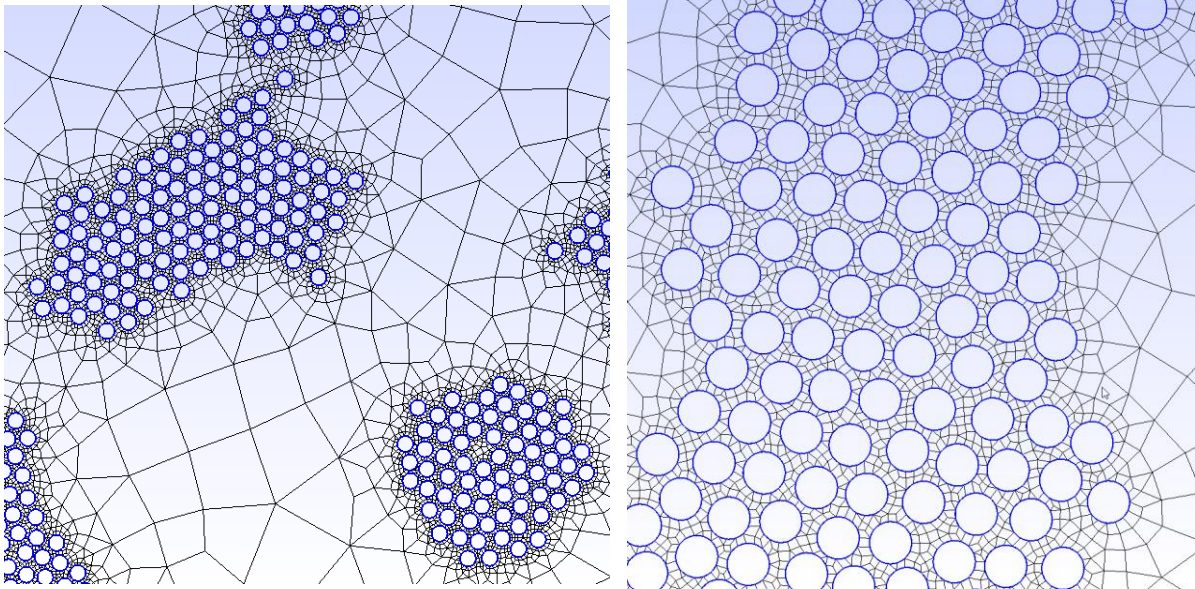
Τίθεται σαφές ότι όσο πιο πυκνό πλέγμα έχουμε τόσο περισσότερο προσεγγίζουμε την αναλυτική λύση. Ωστόσο, το υπολογιστικό κόστος αυξάνεται σε μεγάλο βαθμό όταν χρησιμοποιούμε ιδιαιτέρως πυκνά πλέγματα καθιστώντας πολλές φορές χρονικά ασύμφορη την υπολογιστική διαδικασία. Συνεπώς, η επιλογή πλέγματος εξαρτάται από την φύση του προβλήματος, τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του πεδίου επίλυσης, καθώς και από τον χρόνο και τον υπολογιστικό εξοπλισμό που διαθέτουμε. Σε επόμενο εδάφιο γίνεται εκτενέστερη μελέτη για την επιλογή του κατάλληλου πλέγματος.

Περιοχές του χώρου όπου οι τιμές της πίεσης και της ταχύτητας υφίστανται μεγάλες μεταβολές απαιτούν πιο πυκνό πλέγμα. Τέτοιες ευαίσθητες περιοχές είναι αυτές γύρω από τα σωματίδια, τα οποία συμπεριφέρονται σαν εμπόδια στην εξέλιξη της ροής. Οι ταχύτητες ορίζονται μηδενικές περιμετρικά των σωματιδίων, κάτι που έχει σαν αποτέλεσμα μεγάλες διακυμάνσεις της ταχύτητας στις κοντινές περιοχές. Για να επιτευχθεί ικανοποιητική ακρίβεια στην προσέγγιση του συνεχούς πεδίου ταχύτητας, απαιτούνται πολλές διακριτές τιμές της ταχύτητας σε μικρό χώρο.



**Σχ. 29 - Προοδευτική πύκνωση του πλέγματος όσο προσεγγίζεται η επιφάνεια των σωματιδίων**

Γι αυτό το λόγο ορίζεται ένα εύρος περιοχής όπου το πλέγμα είναι προοδευτικά πυκνότερο όσο πλησιάζουμε τα σωματίδια, όπως φαίνεται και στο Σχ. 29. Σημαντικό είναι η πύκνωση αυτή να γίνεται σταδιακά, έτσι ώστε να μην διαταράσσεται η ομοιομορφία του πλέγματος. Κατά τη δημιουργία του πλέγματος δηλώνεται ρητά ο τρόπος που γίνεται η πύκνωση.



**Σχ. 30 - Πύκνωση πλέγματος σε κατανομή συσσωματωμάτων σε δύο διαφορετικές κλίμακες μεγέθυνσης**

Το πλέγμα αποτελείται από πρίσματα και εξάεδρα κελιά. Παρατηρήθηκε, στο συγκεκριμένο πρόβλημα ροής, πως ο συνδυασμός των δύο αυτών τύπων κελιού έδινε πιο ικανοποιητικά αποτελέσματα. Η πλειονότητα των κελιών είναι εξάεδρα με τα πρίσματα να τοποθετούνται συμπληρωματικά σε περιοχές του πλέγματος για πιο αποδοτική και ομαλή χωροθέτηση των κελιών.

Άλλος ένας παράγοντας που συνεισφέρει στην ταχύτερη σύγκλιση και μεγαλύτερη ακρίβεια της αριθμητικής λύσης είναι η ομοιομορφία των κελιών. Παρόλο το υπολογιστικό κόστος που συνεπάγεται, η εξομάλυνση των κελιών με την κατάλληλη προσαρμογή των ακμών τους είναι απαραίτητη.

## 4.4 Υπολογιστική επίλυση

### 4.4.1 Διαδικασία διακριτοποίησης

Η διακριτοποίηση γίνεται σε κάθε μια εξίσωση ξεχωριστά, για κάθε μεταβλητή, αντί να φτιαχτεί ένας πίνακας που θα εμπεριέχει όλες τις εξισώσεις. Όταν η μεταβλητή είναι διανυσματικό μέγεθος, τότε η διακριτοποίηση γίνεται για κάθε συνιστώσα ξεχωριστά (π.χ.  $u_x$ ,  $u_y$ ,  $u_z$ ). Η τελική μορφή της διακριτοποιημένης εξίσωσης υπό πίνακοειδή μορφή είναι:

$$[A][x] = [b] \quad (4.6)$$

Ο πίνακας  $A$  είναι τετραγωνικός με διαστάσεις  $n \times n$ , όπου  $n$  ο αριθμός των κελιών. Περιέχει ένα σύνολο από συντελεστές  $a_{i,j}$  όπου η σειρά  $i$  αντιστοιχεί στην γραμμική εξίσωση για το κελί με δείκτη  $i$ . Κάθε σειρά του πίνακα είναι μη μηδενική μόνο για το συγκεκριμένο όγκο ελέγχου (διαγώνιο  $a_{i,i}$ ) και για τους γειτονικούς του. Όλοι οι υπόλοιποι συντελεστές είναι μηδενικοί, καθιστώντας τον πίνακα αραιό. Για τον λόγο αυτό, το σύστημα εξισώσεων λύνεται συνήθως με επαναληπτικές μεθόδους. Σε κάθε βήμα επανάληψης επιλύονται οι εξισώσεις για κάθε μεταβλητή, με το δεξί μέλος να ενσωματώνει τις τρέχοντες τιμές των υπόλοιπων μεταβλητών.

Οι συντελεστές του πίνακα  $[A]$  προκύπτουν από την διαδικασία παρεμβολής των τιμών των κέντρων των γειτονικών κελιών στο κέντρο της κοινής τους όψης, κάτι που είναι απαραίτητο για την διακριτοποίηση των εξισώσεων. Ο κάθε όρος στις εξισώσεις Navier-Stokes (όρος συναγωγής, όρος διάχυσης, όρος βάρθρωσης) διακριτοποιείται με διαφορετική μέθοδο παρεμβολής. Το σχήμα παρεμβολής που θα χρησιμοποιηθεί για τον κάθε όρο στο εκάστοτε πρόβλημα εξαρτάται από το φυσικό πρόβλημα, την μεταβλητότητα των μεγεθών καθώς και την επιθυμητή ακρίβεια παρεμβολής. Στην παρούσα εργασία δεν κρίνεται σκόπιμη περαιτέρω εμβάθυνση στις μεθόδους παρεμβολής. Οι ενδιαφερόμενοι αναγνώστες ενθαρρύνονται να ανατρέξουν στην αντίστοιχη βιβλιογραφία όπου περιγράφεται εκτενέστερα η διαδικασία διακριτοποίησης [35].

#### 4.4.2 Επαναληπτική μέθοδος GAMG

Για την επίλυση των παραπάνω γραμμικοποιημένων εξισώσεων χρησιμοποιείται η επαναληπτική μέθοδος GAMG (Geometric agglomerated Algebraic MultiGrid, μέθοδος γεωμετρικού-αλγεβρικού πολλαπλού πλέγματος). Χαρακτηριστικό της συγκεκριμένης μεθόδου συνιστά η επίλυση των εξισώσεων σε αρχικά αραιό πλέγμα. Στην συνέχεια το πλέγμα πυκνώνεται και χρησιμοποιείται η προυπάρχουσα λύση ως μια αρχική εκτίμηση για την απόκτηση μιας πιο ακριβούς λύσης. Η μέθοδος GAMG είναι ταχύτερη από τις τυπικές μεθόδους όταν η αύξηση της ταχύτητας επίλυσης για τα πιο αραιά πλέγματα υπερτερεί του πρόσθετου κόστους που εμπεριέχει η προοδευτική βελτίωση του πλέγματος και η οργάνωση των δεδομένων του πεδίου. Ως προαπαιτούμενο εισάγεται από τον χρήστη το μέγεθος του πλέγματος στο πιο χονδροειδές επίπεδο καθώς και η ταχύτητα πύκνωσης του πλεγματος. Η διαδικασία επίλυσης σταματάει όταν τουλάχιστον μία από τις δύο παρακάτω συνθήκες ικανοποιείται:

- Το υπόλοιπο μεταξύ του αριστερού και δεξιού μέλους της γραμμικοποιημένης εξίσωσης είναι μικρότερο από μια συγκεκριμένη τιμή (tolerance).
- Το πηλίκο του τρέχοντος υπολοίπου προς το αρχικό είναι μικρότερο από μια συγκεκριμένη τιμή (reitol).

#### 4.4.3 SimpleFOAM

Η επίλυση του προβλήματος ροής πραγματοποιήθηκε αξιοποιώντας τον επιλύτη SimpleFoam. Ο SimpleFoam χρησιμοποιεί τον αλγόριθμο SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) για την επίλυση της εξίσωσης συνέχειας και την εξίσωσης ορμής (βλ. εξισώσεις (4.1) και (4.2)). Για την αριθμητική επίλυση απαιτείται η εισαγωγή, στον SimpleFOAM, οριακών συνθηκών, όπως ακριβώς ορίστηκαν στην ενότητα 4.1 ούτως ώστε να υπολογιστούν οι τιμές στις όψεις των συνοριακών κελιών (patches) σύμφωνα με την φυσική που διέπει τη ροή.

Η πίεση και το πεδίο της ταχύτητας αρχικοποιούνται παίρνοντας ομοιόμορφη τιμή μηδέν, προτού ξεκινήσουν οι επαναλήψεις προσομοίωσης. Παρακάτω ακολουθούν οι οριακές συνθήκες για κάθε όριο της γεωμετρίας:

- Κάθετα στην ροή ( $x=0$  και  $x=L$ ) :
  - Πίεση: Παίρνει ομοιόμορφη καθορισμένη τιμή στο κάθε όριο (fixedValue). Για  $x=0$  ισούται με 1, ενώ για  $x=L$  ισούται με 0.
  - Ταχύτητα: Η κλίση της ισούται με μηδέν (zeroGradient). Αυτό σημαίνει ότι η ταχύτητα στα συνοριακά κελία υπολογίζεται με την παρεμβολή των τιμών των γειτονικών τους.
- Παράλληλα στην ροή ( $y=0$  και  $y=H$ ) :

Πίεση, ταχύτητα: Χρησιμοποιώντας μια παρεμβολή αυθαίρετης διεπαφής πλέγματος, επιτυγχάνεται η επικοινωνία μεταξύ της βάσης και της κορυφής του υπολογιστικού κελιού (CyclicAMI).
- Τρίτη διάσταση  $z$  :

Πίεση, ταχύτητα: Απαλείφεται η διάσταση του χώρου  $z$  καθώς η ροή είναι δυσδιάστατη (empty).
- Περιφέρεια σωματιδίων :
  - Πίεση: Η κλίση της πίεσης ισούται με μηδέν (zeroGradient). Αυτό συνεπάγεται ότι η τιμή της πίεσης θα υπολογιστεί με παρεμβολή των τιμών των γειτονικών σωματιδίων.
  - Ταχύτητα: Ορίζεται μηδενικό πεδίο ταχύτητας (noSlip).

Είναι δύσκολο να επιλύσουμε αριθμητικά τις δύο αυτές εξισώσεις ((4.1), (4.2)) παρόλο που ο αριθμός των άγνωστων μεταβλητών ισούται με τον αριθμό των εξισώσεων. Κι αυτό γιατί έχουμε εξισώσεις με μεταβλητές την ταχύτητα αλλά δεν έχουμε εξίσωση για την πίεση. Ο αλγόριθμος SIMPLE παράγει μια εξίσωση για την πίεση από την εξίσωση ορμής. Εν συνεχεία, διορθώνει το πεδίο της ταχύτητας έτσι ώστε να ικανοποιεί την εξίσωση της συνέχειας. Τα βήματα που εκτελεί ο αλγόριθμος είναι τα εξής:

**Βήμα 1:** Προώθηση του συστήματος στην επόμενη επανάληψη  $t = t^{n+1}$ .

**Βήμα 2:** Αρχικοποίηση των  $u^{n+1}, p^{n+1}$  κάνοντας χρήση των τελευταίων διαθέσιμων τιμών για  $u, p$ .

**Βήμα 3:** Κατασκευή των εξισώσεων ορμής

Η διακριτοποίηση της εξίσωσης ορμής οδηγεί σε ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων πινακοποιημένης μορφής:

$$M[u] = -\nabla p \quad (4.7)$$

Στην παραπάνω εξίσωση το πεδίο της ταχύτητας καθώς και η πίεση είναι άγνωστες ποσότητες. Ο πίνακας  $M$  διασπάται σε έναν διαγώνιο πίνακα  $A$  και σε έναν μη διαγώνιο  $H$ :

$$M[u] = Au - H \quad (4.8)$$

Η αποσύνθεση αυτή γίνεται γιατί ο διαγώνιος πίνακας  $A$  είναι πιο εύκολα αντιστρέψιμος, κάτι που θα μας φανεί χρήσιμο μεταγενέστερα στον υπολογισμό της ταχύτητας.

**Βήμα 4:** Υποχαλάρωση του πίνακα ορμής

Η υποχαλάρωση αποτελεί μια τεχνική που χρησιμοποιείται για την βελτίωση της σταθερότητας ενός υπολογισμού, ιδιαίτερα στην επίλυση μη χρονικά μεταβαλλόμενων προβλημάτων (steady state problems). Η υποχαλάρωση λειτουργεί περιορίζοντας την αλλαγή μιας μεταβλητής από την μία επανάληψη στην επόμενη χρησιμοποιώντας ένα συντελεστή  $\alpha$  (relaxation factor) που κυμαίνεται από μηδέν έως ένα. Όσο μειώνεται ο συντελεστής και απομακρύνεται από την μονάδα τότε η υποχαλάρωση αυξάνεται. Όταν παίρνει την οριακή τιμή μηδέν έχει σαν αποτέλεσμα η λύση να μην αλλάζει με τις διαδοχικές επαναλήψεις. Επομένως, ο συντελεστής υποχαλάρωσης πρέπει να επιλέγεται έτσι ώστε να είναι αρκετά μικρός για να διασφαλίζεται η σταθερότητα του αλγορίθμου αλλά και αρκετά μεγάλος έτσι ώστε να προχωράει σχετικά γρήγορα η επαναληπτική διαδικασία.

**Βήμα 5:** Επίλυση των εξισώσεων ορμής για την απόκτηση μιας πρόβλεψης για την ταχύτητα.

Συνδυάζοντας τις εξισώσεις (4.1), (4.2) προκύπτει η παρακάτω σχέση:



$$Au - H = -\nabla p \quad (4.9)$$

Συνεπώς η ταχύτητα θα ισούται με:

$$u = \frac{H}{A} - \frac{1}{A} \nabla p \quad (4.10)$$

**Βήμα 6:** Κατασκευή εξίσωσης για την πίεση

Παρεμβάλουμε την τιμή από τα κέντρα των κελιών στο κέντρο των όψεων κάνοντας χρήση του θεωρήματος Gauss. Επομένως η ροή θα ισούται:

$$\varphi = u_f \cdot S_f = \left(\frac{H}{A}\right)_f \cdot S_f - \left(\frac{1}{A}\right)_f S_f \nabla_f p \quad (4.11)$$

Εν συνεχεία λύνουμε την εξίσωση συνέχειας (4.2) και παίρνουμε την εξίσωση για την πίεση:

$$\nabla \cdot \left[ \left(\frac{1}{A}\right)_f \nabla p \right] = \nabla \left(\frac{H}{A}\right)_f \quad (4.12)$$

Όπου  $S_f$  η συνολική επιφάνεια (όψη) με κατεύθυνση προς τα έξω. Ο δείκτης  $f$  υποδηλώνει ότι οι συγκεκριμένες ποσότητες είναι υπολογισμένες στο κέντρο των όψεων.

**Βήμα 7:** Επίλυση την εξίσωσης της πίεσης και απόκτηση τιμής για την  $p^{n+1}$ .

**Βήμα 8:** Διόρθωση της τιμής της ροής  $\varphi^{n+1}$

**Βήμα 9:** Υποχαλάρωση της  $p^{n+1}$

**Βήμα 10:** Διόρθωση της ταχύτητας  $u^{n+1}$

**Βήμα 11:** Αν δεν συγκλίνει η μέθοδος τότε επιστρέφουμε στο βήμα 2.

## Κεφάλαιο 5. Αποτελέσματα προσομοιώσεων ροής

---

### 5.1 Παράμετροι υπολογιστικής επίλυσης

Η προσέγγιση της υπολογιστικής επίλυσης του προβλήματος ροής επιτρέπει την μελέτη ενός μεγάλου εύρους διαφορετικών γεωμετριών συγκριτικά με πειραματικές μεθόδους ανάλυσης. Οι προσομοιώσεις πολλαπλών σωματιδίων για την πρόβλεψη ιδιοτήτων χρονολογούνται από τις αρχές της δεκαετίας του 90 ([36], [37], [38]) και χρησιμοποιούνται ευρέως για την πρόβλεψη της διαπερατότητας ινώδων διατάξεων ([4], [39], [40]). Η ίδια συλλογιστική πορεία δύναται να ακολουθηθεί και για υλικά που φέρουν ετερογενή δομή, ως αποτέλεσμα των κατεργασιών διαμόρφωσης [41]. Σκοπός αυτού του κεφαλαίου είναι να αποφανθούμε για τη συμπεριφορά της διαπερατότητας, ως μακροσκοπική ιδιότητα, συναρτήσει της μικροδομής. Πρώιμα μαθηματικά μοντέλα πρόβλεψης της διαπερατότητας για ένα ινώδες μέσο, λάμβαναν υπόψιν κατά κύριο λόγο το πορώδες της δομής. Λόγω της απόκλισης που παρατηρήθηκε στις προσεγγίσεις αυτές, θεωρήθηκε ότι η μικροδομή επηρεάζει κι αυτή τη διαπερατότητα. Συνεπώς το κλάσμα όγκου και η παράμετρος  $T^*$  συνιστούν τους βασικούς άξονες της ανάλυσης μας.

Στην ενότητα 3.3.3 έγινε αναφορά στην επίδραση της παραμέτρου  $N$ , του αριθμού των σωματιδίων, και κατ'επέκταση του μεγέθους του μοναδιαίου κελιού. Υπενθυμίζεται πως κατά την μοριακή προσομοίωση δημιουργείται ένα κελί, ύψους  $H$  και μήκους  $L$ , όπου  $H = L$  δηλαδή αναφερόμαστε σε τετραγωνική διατομή. Το μέγεθος του κελιού, για σταθερό πορώδες, είναι ανάλογο του πλήθους των σωματιδίων (βλ. εξίσωση 2.5). Ο χώρος που εξετάζεται υπό την έννοια του μοναδιαίου κελιού φέρει μεγάλης σημασίας και στο πρόβλημα ροής, για το λόγο αυτό και θα πρέπει να επαναπροσδιοριστεί. Σύμφωνα με τις περιοδικές οριακές συνθήκες, η γεωμετρία αναπαριστά μια υποδιαίρεση του άπειρου χώρου. Όσο λοιπόν το δείγμα που λαμβάνεται είναι μεγαλύτερο, τόσο η ανάλυση της μικροδομής δύναται να θεωρηθεί πιο αξιόπιστη καθώς το δείγμα είναι πιο αντιπροσωπευτικό. Ιδανικά, ένα απείρου μήκους και πλάτους κουτί θα προσέδιδε αποτελέσματα προσεγγιστικά ως προς την αναλυτική λύση του προβλήματος ροής αλλά και της διαπερατότητας. Όμοια, το ροικό πεδίο καθίσταται όλο και πιο ομοιόμορφο, όσο το υπολογιστικό κελί συμπεριλαμβάνει

μεγαλύτερο μέρος του μη πεπερασμένου χώρου. Η εξέταση ενός μικρού χώρου ενδεχομένως να αναδεικνύει τις ιδιομορφίες του χώρου αυτού και όχι την συνολική εικόνα. Η περαιτέρω αύξηση του χώρου από κάποιο κρίσιμο μέγεθος και έπειτα εκτιμάται ότι δεν θα διαφοροποιεί ιδιαίτερα την εικόνα που λαμβάνουμε για το ροικό πεδίο. Το σημείο αυτό σύγκλισης είναι και ο στόχος μας ώστε να ανεξαρτητοποιηθεί η ανάλυση από την μεταβλητή  $N$ .

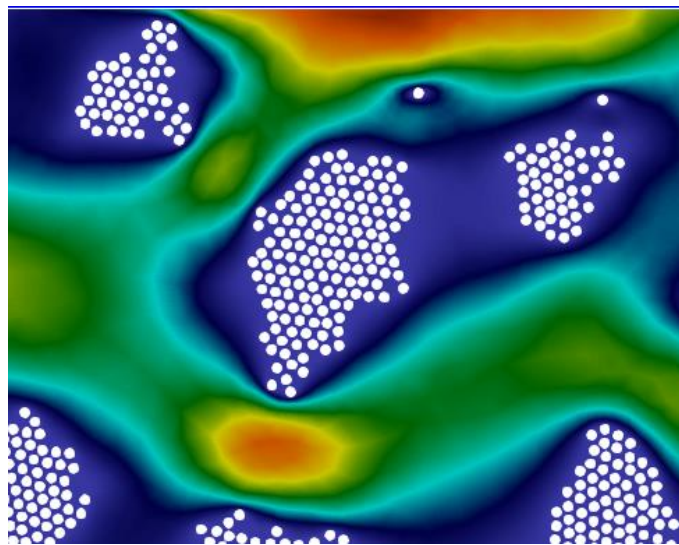
Συγχρόνως, το μέγεθος των σωματιδίων αναλογικά με τις διαστάσεις του κελιού διαφέρει για γεωμετρίες με κοινό κλάσμα όγκου και διαφορετικό αριθμό  $N$ . Εφόσον τα σωματίδια αντιτίθενται της ροής, ως εμπόδια στην ανάπτυξή της, το μέγεθος τους θα επηρεάσει το ροικό πεδίο. Μικρός αριθμός σωματιδίων μεταφράζεται ως μεγάλα εμπόδια που καθορίζουν εξ ολοκλήρου την πορεία του ρευστού. Το γεγονός αυτό εισάγει ασυμμετρίες στο ροικό πεδίο. Η κατανομή των σωματιδίων και όχι το μέγεθος αυτών αφορά το αντικείμενο της συγκεκριμένης μελέτης. Η παραμετρική ανάλυση για τον καθορισμό του αριθμού των σωματιδίων όπως επίσης και για την πύκνωση του πλέγματος, η οποία επιδρά στην ακρίβεια της υπολογιστικής λύσης, πραγματοποιήθηκε σύμφωνα με τη μέθοδο παρεμβολής Richardson [42], [43] (βλ. Παράρτημα Ι. Χωρική σύγκλιση πλέγματος). Αποδείχθηκε πως για  $N = 6400$  λαμβάνονται αποτελέσματα στην περιοχή ασυμπτωτικής σύγκλισης (1% σφάλμα) των τιμών της διαπερατότητας, σύμφωνα με την λύση κατά Richardson για θεωρητικά άπειρο αριθμό σωματιδίων. Οι παράμετροι  $V_f$ ,  $T^*$  και ο αριθμός των επαναλήψεων κατά τη μοριακή προσομοίωση επιλέχθηκαν σύμφωνα με την οπτική αναπαράσταση των γεωμετριών. Η δυσκολία ανάλυσης μικροδομών έγκειται στην περίπτωση της κατανομής συσσωματωμάτων. Αναλογιζόμενοι το πρόβλημα ροής, απορρίπτονται γεωμετρίες όπου τα σωματίδια καταλήγουν να διατάσσονται είτε ως ένα μεγάλο συσσωμάτωμα, είτε ως συσσωματώματα υπό τη μορφή στρωμάτων με διαστάσεις συγκρίσιμες με αυτές του μοναδιαίου κελιού. Διατηρώντας αυτό το κριτήριο οι προσομοιώσεις ροής πραγματοποιήθηκαν για  $V_f = [0.025, 0.3]$ ,  $T^* = [0.3, 1]$ . Ο αριθμός των επαναλήψεων κατά τη μοριακή προσομοίωση ορίστηκε 500.000 για τις γεωμετρίες με μικρά κλασματα όγκου ( $0.025 < V_f < 0.2$ ), ενώ 250.000 για εκείνες με μεγαλύτερα κλασματα όγκου ( $0.225 < V_f < 0.3$ ).

Για κάθε σετ παραμέτρων (case)  $N$ ,  $V_f$  και  $T^*$  έγιναν 5 διαφορετικές προσομοιώσεις προκειμένου να παρατηρηθεί η μεταβλητότητα των αποτελεσμάτων, σύμφωνα με την τυχαιότητα που εισάγεται λόγω των μοριακών προσομοιώσεων κατά τη δημιουργία των

γεωμετριών. Θα πρέπει να τονιστεί πως για το εξής εύρος των παραμέτρων, όπως ορίστηκαν παραπάνω, πραγματοποιήθηκε συγχρόνως και η στατιστική ανάλυση στο Κεφάλαιο 3.

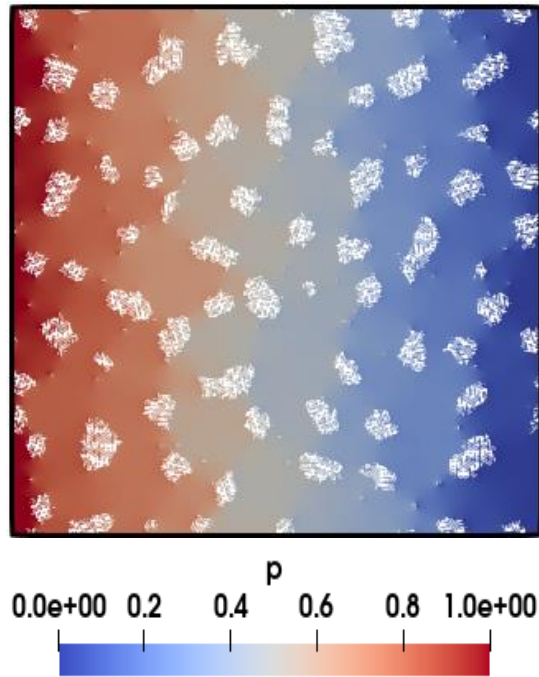
## 5.2 Ροϊκά πεδία

Σύμφωνα με την οπτικοποίηση των αποτελεσμάτων της υπολογιστικής επίλυσης, μέσω του λογισμικού Paraview [44], εξάγεται το συμπέρασμα πως η ροή εξαρτάται έντονα από την κατανομή των σωματιδίων στο εσωτερικό της δομής. Τα σωματίδια ορίζονται ως τα μοναδικά εμπόδια που παρεμβάλλονται στην ανάπτυξη της. Η συνθήκη μη ολίσθησης στην επιφάνεια τους εξαναγκάζει τη ροή να επιβραδυνθεί όσο προσεγγίζει κάποιο εμπόδιο. Οι επιφάνειες των σωματιδίων πρακτικά λειτουργούν ως σημεία ανακοπής. Συνεπώς, η ροή ακολουθεί διόδους, γύρω από τα εμπόδια, ούτως ώστε να αναπτυχθεί περαιτέρω.



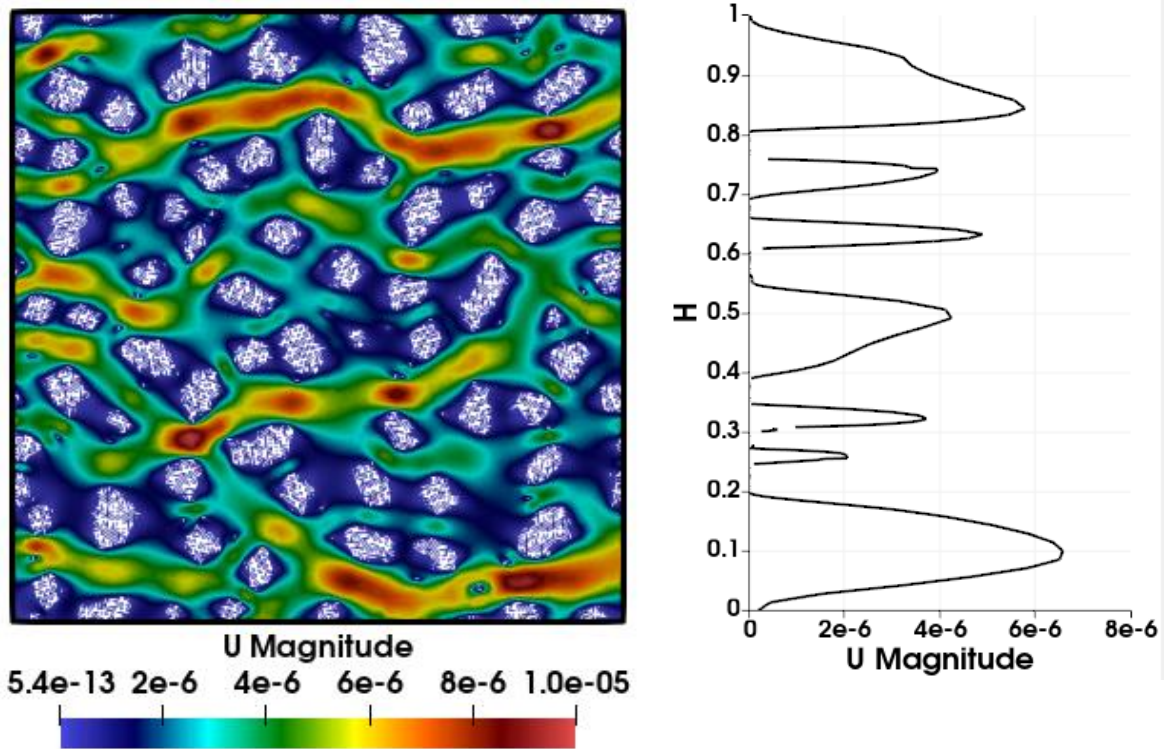
**Σχ. 31 - Αναπαράσταση ροϊκού πεδίου γύρω από συσσωματώματα**

Περιοχές της δομής όπου δεν υπάρχουν σωματίδια, είτε μεμονωμένα είτε υπό μορφή συσσωματωμάτων, η ροή ακολουθεί μία εξελικτική πορεία, ως αποτέλεσμα της ομοιόμορφης διαφοράς πίεσης ανάμεσα στα δύο κάθετα όρια του μοναδιαίου κελιού ( $x=0$ ,  $x=L$ ), όπως φαίνεται και στο Σχ. 32.

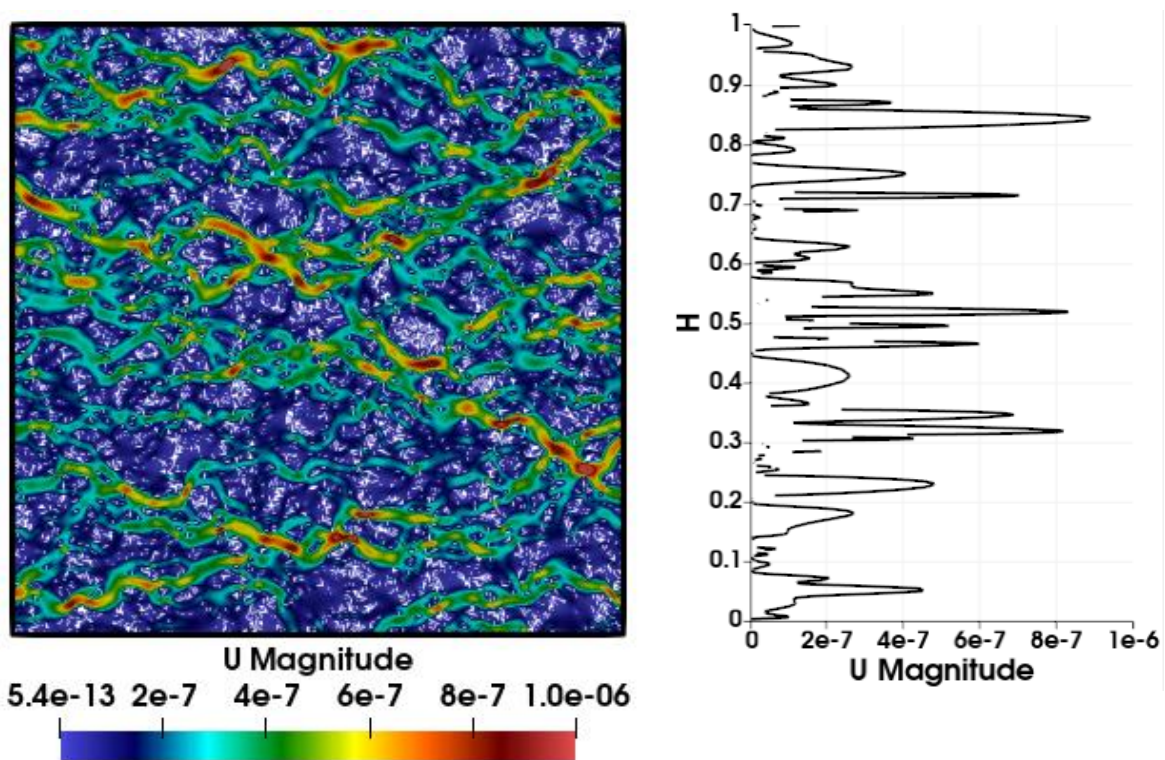


**Σχ. 32 - Προφίλ πίεσης**

Η ύπαρξη συσσωματωμάτων στη μικροδομή έχει ως αποτέλεσμα τον σχηματισμό ενός πεδίου ροής με υψηλές μεταβολές από περιοχή σε περιοχή. Τα σωματίδια ομαδοποιούνται, δημιουργώντας μεγάλα σε μέγεθος εμπόδια. Τα συσσωματώματα, όμως, συγκριτικά με τον συνολικό αριθμό των σωματιδίων, είναι σημαντικά λιγότερα σε πλήθος. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα μεγάλες διαταραχές στο ροικό πεδίο. Σε περιοχές που ο υπολλειπόμενος κενός χώρος, για κάποιο δεδομένο πορώδες, είναι ικανοποιητικός η ροή μπορεί να αναπτυχθεί δίχως κάποια παρεμβολή εμποδίου. Αντιθέτως, περιοχές όπου εμφανίζονται συσσωματώματα δεν είναι διαπερατές αφού αποκόπτουν την κινηματική εξέλιξη του ρευστού με αποτέλεσμα να εμφανίζονται φαινόμενα στασιμότητας της ροής. Όπως διαπιστώνεται και από τα Σχ. 33 και Σχ. 34, η κατανομή της ταχύτητας, όταν εξέρχεται από το κελί, μεταβάλλεται έντονα συναρτήσει του ύψους  $y$ , όπου  $y=[0, H]$ . Η διαφοροποίηση αυτή οφείλεται στην ύπαρξη συσσωματωμάτων. Το διάγραμμα της ταχύτητας μας πληροφορεί πως η ροή εξέρχεται μόνο από τις περιοχές που δεν συναντά κάποιο συσσωμάτωμα.

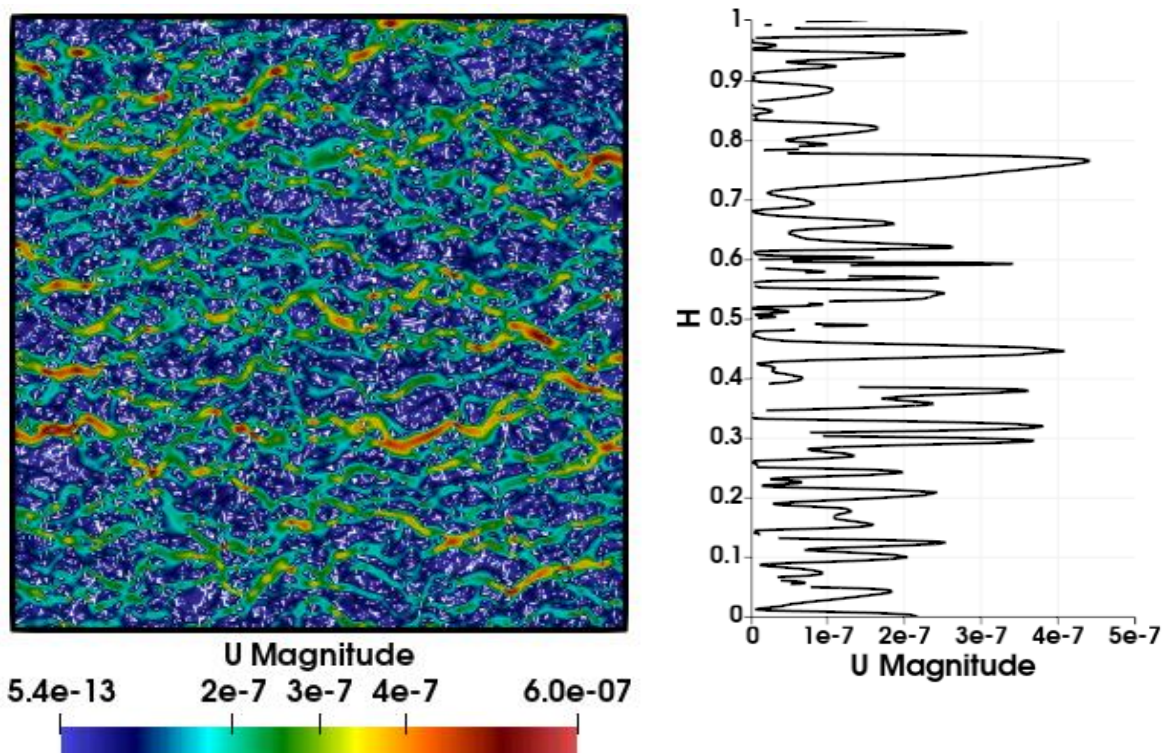


Σχ. 33 - (Αριστερά) Αναπαράσταση ροικού πεδίου για  $V_f=0.1$  και  $T^*=0.3$ . (Δεξιά) Παρουσιάζεται το προφίλ της ταχύτητας στην έξοδο του κελιού συναρτήσει του ύψους  $y$



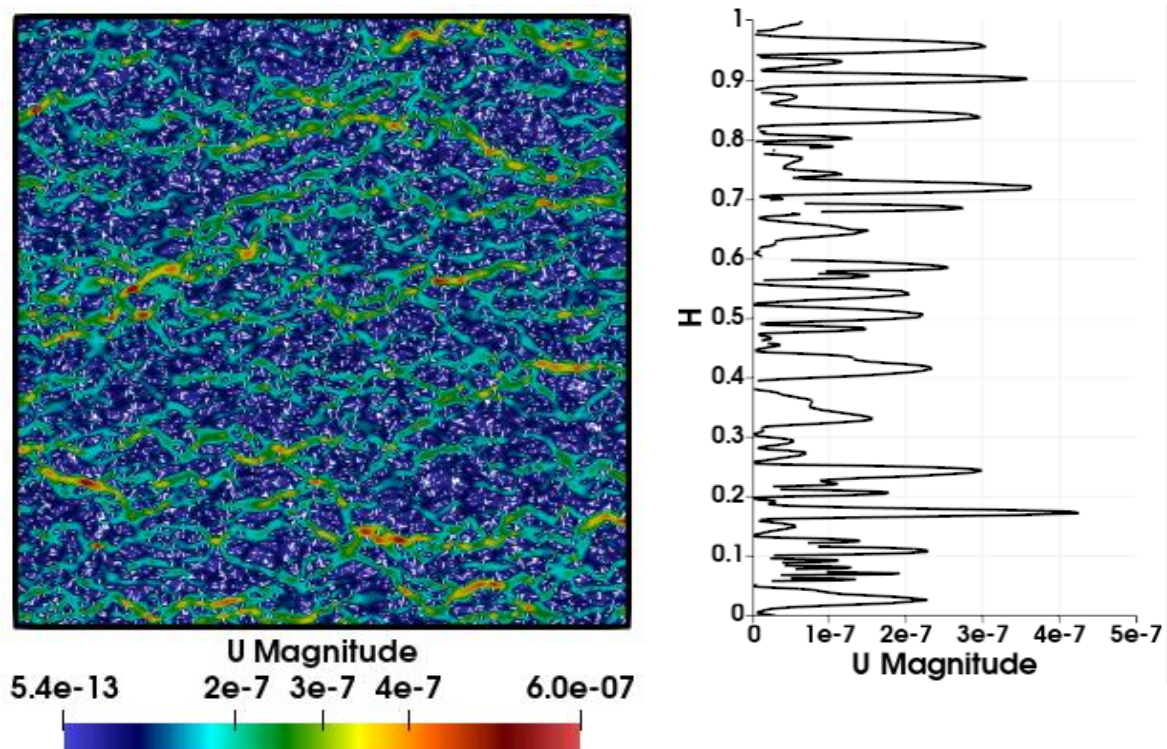
Σχ. 34 - (Αριστερά) Αναπαράσταση ροικού πεδίου για  $V_f=0.1$  και  $T^*=0.5$ . (Δεξιά) Παρουσιάζεται το προφίλ της ταχύτητας στην έξοδο του κελιού συναρτήσει του ύψους  $y$

Όσο η κατανομή των σωματιδίων προοδευτικά τείνει προς την τυχαία διάταξη το πεδίο ροής αποκτά μία πιο ομοιόμορφη συμπεριφορά. Η ειδοποιός διαφορά, συγκριτικά με κατανομές συσσωματωμάτων, έγκειται στο γεγονός πως τα σωματίδια διατάσσονται τυχαία στον χώρο με αποτέλεσμα να μην δημιουργούνται μεγάλες σε έκταση κενές περιοχές όπου η ροή διαδίδεται με μεγαλύτερη ευκολία. Η ροή συναντά πολλαπλά εμπόδια με αποτέλεσμα η ταχύτητα να λαμβάνει χαμηλότερες τιμές. Η ωθούσα δύναμη δεν είναι αρκούντως μεγάλη ώστε να σπρώξει το ρευστό στην συγκεκριμένη περίπτωση. Αντίστοιχα το μέγεθος των εμποδίων είναι επαρκές για να επιβραδύνει τη ροή αλλά όχι να την μεταβάλλει σημαντικά ως προς την κατεύθυνση της. Για το λόγο αυτό, διαμορφώνονται ολοένα και περισσότεροι δίοδοι από που η ροή μπορεί να διαφύγει. Όπως φαίνεται και από τα Σχ. 35, Σχ. 36 η ροή στην έξοδο της διατομής είναι αποτέλεσμα της συνεχούς αντίστασης που προβάλλεται από τα σωματίδια κατά μήκος του υπολογιστικού κελιού.



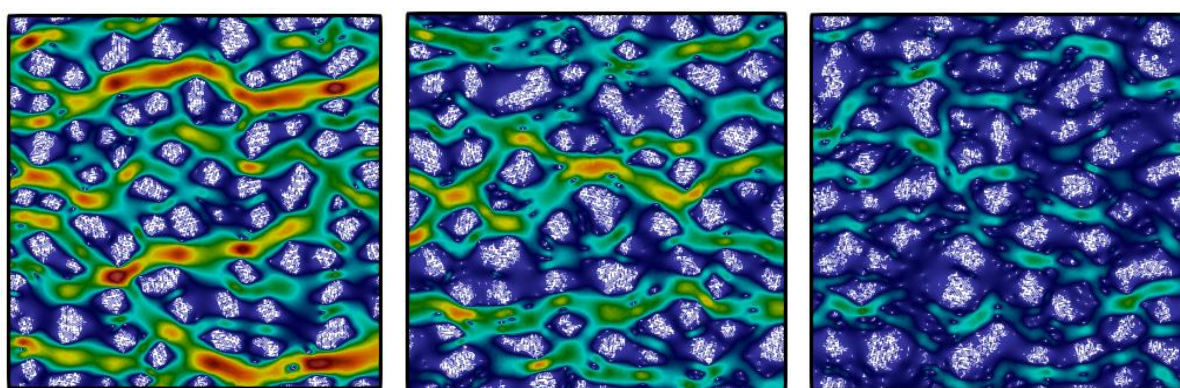
Σχ. 35 - (Αριστερά) Αναπαράσταση ροικού πεδίου για  $V_f = 0.1$  και  $T^* = 0.7$ . (Δεξιά) Παρουσιάζεται το προφίλ της ταχύτητας στην έξοδο του κελιού συναρτήσει του ύψους  $y$

Το εύρος των ταχυτήτων στα διαγράμματα προσφέρει μία αντιπροσωπευτική επεξήγηση του πεδίου ροής. Δομές συσσωματωμάτων παρουσιάζουν υψηλότερες ταχύτητες συγκριτικά με τις αντίστοιχες τυχαίες κατανομές.



Σχ. 36 - (Αριστερά) Αναπαράσταση ροϊκού πεδίου για  $V_f=0.1$  και  $T^*=1$ . (Δεξιά) Παρουσιάζεται το προφίλ της ταχύτητας στην έξοδο του κελιού συναρτήσει του ύψους  $y$

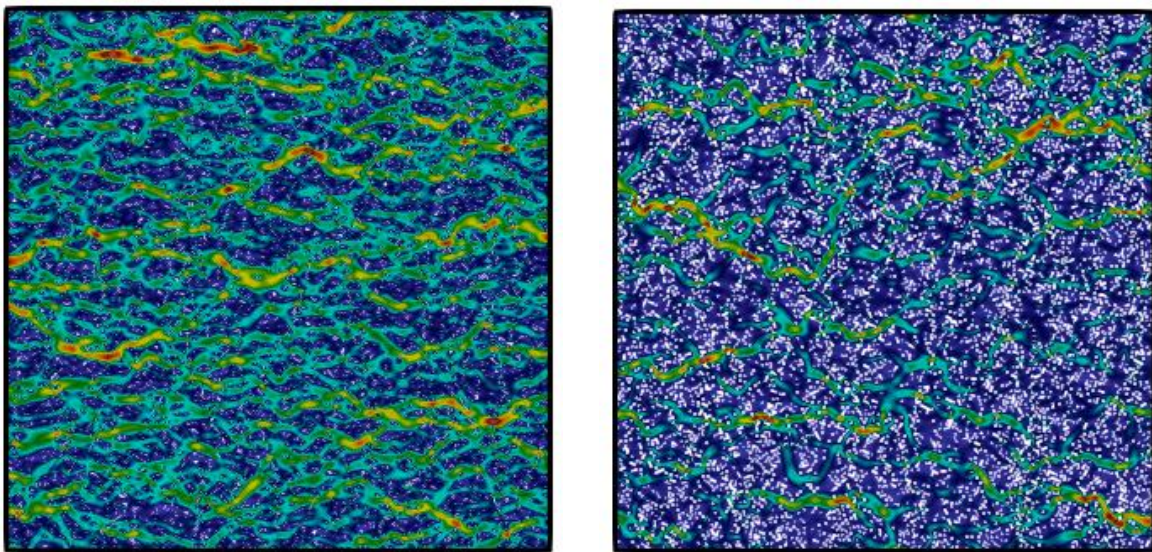
Στις παρακάτω εικόνες αναπαρίσταται το ροϊκό πεδίο για τρεις διαφορετικές κατανομές, όταν το μέγεθος της ταχύτητας ορίζεται στο ίδιο εύρος τιμών. Γίνεται εύκολα αντιληπτό πως όσο αυξάνεται η παράμετρος  $T^*$  τόσο μειώνεται το μέγεθος της ταχύτητας που αναπτύσσεται κατά μήκος της δομής. Η μικροδομή φαινομενικά δεν παρουσιάζει μεγάλες αποκλίσεις ωστόσο η ταχύτητα διαφοροποιείται σημαντικά.



Σχ. 37 - Αναπαράσταση του ροϊκού πεδίου για διαφορετικές κατανομές, με  $V_f=0.1$  και  $T^* 0.30, 0.34, 0.38$  (από αριστερά προς τα δεξιά)

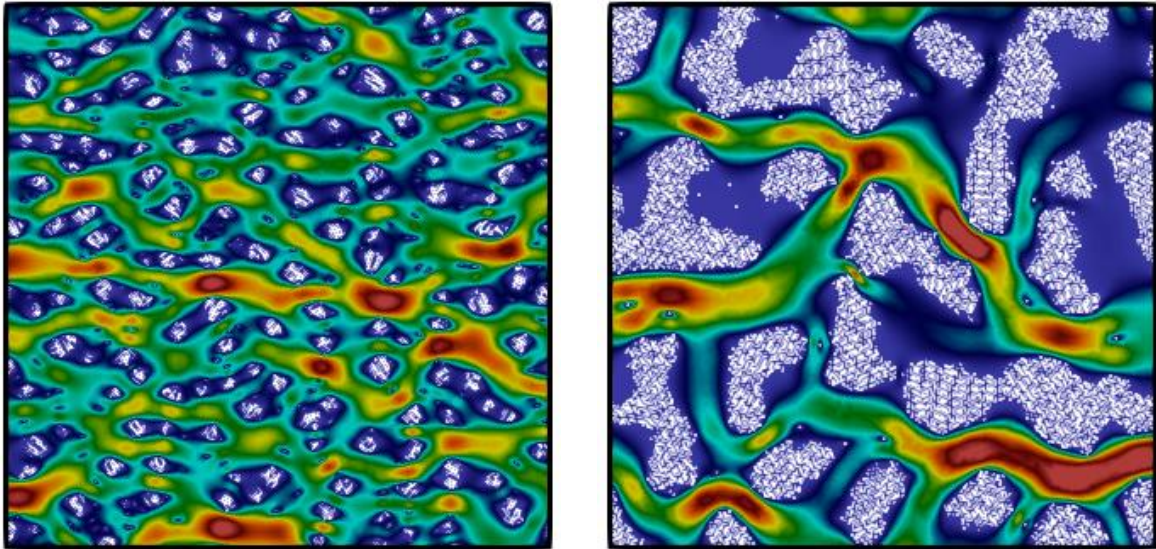


Η αύξηση της παραμέτρου  $V_f$  εντίνει την επίδραση των σωματιδίων στην απόσβεση της ροής. Τα σωματίδια είτε ως συσσωματώματα είτε μεμονωμένα στην περίπτωση των τυχαίων κατανομών διατάσσονται σε ολοένα και πιο κοντινές θέσεις. Ο κενός χώρος στον οποίο δύναται να αναπτυχθεί η ροή μειώνεται. Οι υψηλές μεταβολές του ροϊκού πεδίου, που συζητήθηκαν παραπάνω, πλέον είναι πιο ισχυρές και παρατηρούνται όταν αντιπαραβάλλονται γεωμετρίες διαφορετικού  $V_f$  για κοινή  $T^*$ . Η ροή προσεγγίζει τις δύο οριακές περιπτώσεις όπου εξελίσσεται εάν υπάρξει επαρκής χώρος ειδάλλως το ρευστό λαμβάνει πρακτικά μηδενική ταχύτητα, απαλείφοντας ενδιάμεσες καταστάσεις.



**Σχ. 38 - Σύγκριση ροϊκού πεδίου για  $T^*=0.7$  και διαφορετικό κλάσμα όγκου. Αριστερά  $V_f=0.05$  και δεξιά με  $V_f=0.2$**

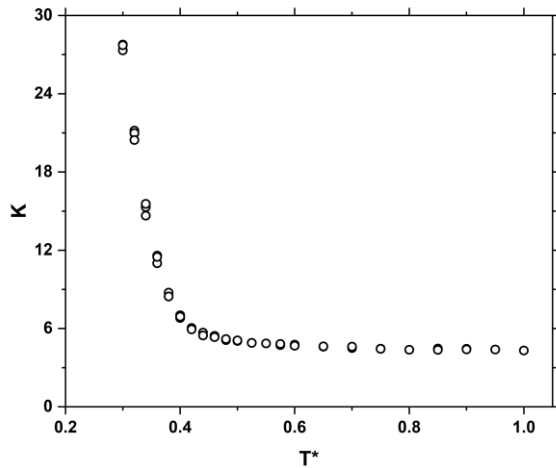
Αξίζει να σημειωθεί πως η αύξηση του κλάσματος όγκου οδηγεί σε σταδιακή ένωση πολλών συσσωματωμάτων, μεγάλου μεγέθους και τυχαίου προσανατολισμού. Η συγκεκριμένη διαμόρφωση της μικροδομής υπαγορεύει την πορεία που θα ακολουθήσει η ροή. Εάν η απόσταση μεταξύ τέτοιων συσσωματωμάτων είναι μεγάλη ενδέχεται η ροή να εμφανίσει σημεία και περιοχές όπου η μέγιστη ταχύτητα της είναι μεγαλύτερη συγκριτικά με μία γεωμετρία μικρότερου  $V_f$  και ίδιου  $T^*$ . Το συγκεκριμένο συμπέρασμα προκύπτει από την ίδια συλλογιστική πορεία που ακολουθήθηκε όταν συγκρίνονταν μικροδομές κοινού κλάσματος όγκου αλλά διαφορετικής κατανομής.



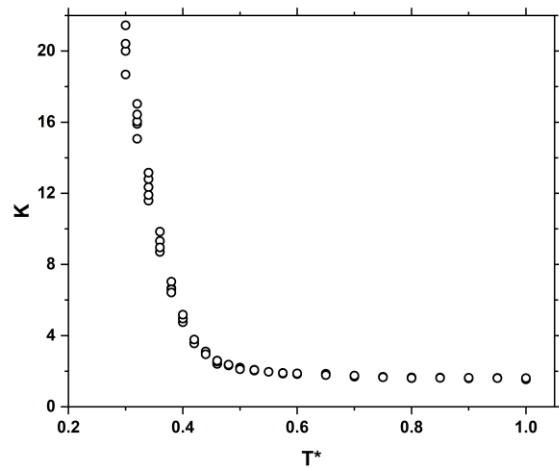
Σχ. 39 - Σύγκριση ροϊκού πεδίου για  $T^*=0.3$  και διαφορετικό κλάσμα όγκου. (Αριστερά)  $V_f=0.05$  και (δεξιά)  $V_f=0.2$

### 5.3 Διαπερατότητα συναρτήσει της παραμέτρου $T^*$

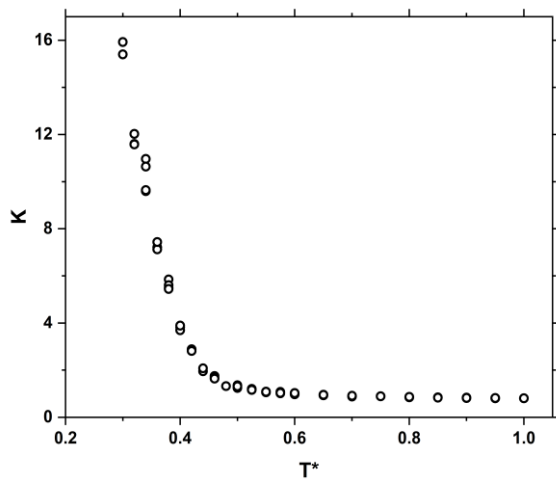
Προτού επιλυθεί το πρόβλημα ροής, το OpenFOAM μετατρέπει την αρχική γεωμετρία σε ένα μοναδιαίο κελί, διαστάσεων  $1 \times 1 \times 1$ . Η τρίτη διάσταση, είναι αναγκαία για την διακριτοποίηση του χώρου σε πεπερασμένους όγκους, ωστόσο αγνοείται όταν εισάγονται οι οριακές συνθήκες. Τα αποτελέσματα επαναδιατυπώνονται ως προς την αρχική γεωμετρία, διαστάσεων  $H \times L$ , για καλύτερη αναπαράσταση. Εφαρμόζοντας, λοιπόν, τον νόμο του Darcy, λαμβάνουμε το ρυθμό ροής στην έξοδο  $Q$  (εξ. (4.3)) και κατ επέκταση τη διαπερατότητα (εξ. (4.4)). Η ανάλυση του ροϊκού πεδίου, στην προηγούμενη ενότητα, μας προιδεάζει πως η διαπερατότητα θα ποικίλλει ως τιμή για διαφορετικές κατανομές στο ίδιο κλάσμα όγκου. Διατηρώντας την ίδια συλλογιστική πορεία με την ενότητα 3.3.3, μελετάται η συμπεριφορά της διαπερατότητας συναρτήσει της αδιάστατης μεταβλητής  $T^*$  για γεωμετρίες κοινού  $V_f$ .



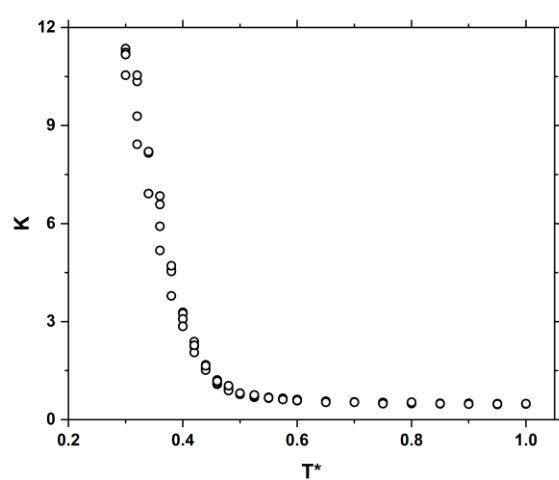
**Σχ. 40 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $T^*$  για  $V_f=0.025$**



**Σχ. 41 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $T^*$  για  $V_f=0.05$**



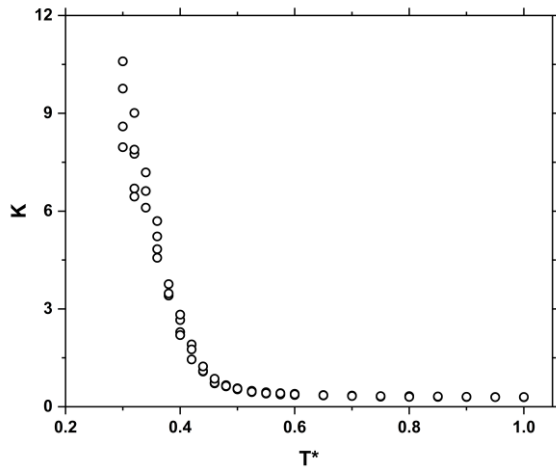
**Σχ. 42 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $T^*$  για  $V_f=0.075$**



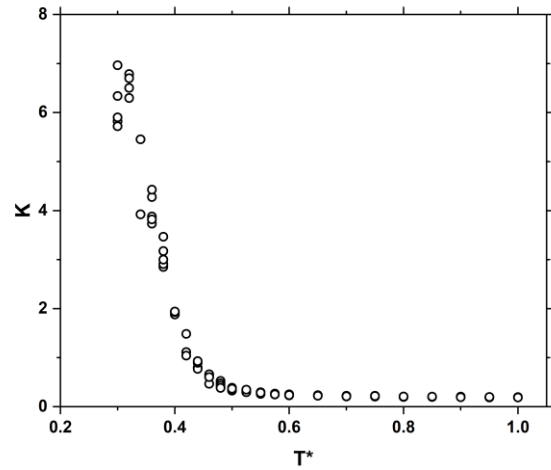
**Σχ. 43 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $T^*$  για  $V_f=0.1$**

Όπως ενδεχομένως να έγινε αντιληπτό και από την αναπαράσταση των πεδίων ροής, κατανομές συσσωματωμάτων δημιουργούν ευνοϊκές συνθήκες για την ανάπτυξη της ροής. Συνεπώς, επιτρέπουν μεγαλύτερο ποσοστό της ροής να διαφύγει και κατ' επέκταση η μετρούμενη διαπερατότητα είναι μεγαλύτερη. Όσο η οργάνωση των σωματιδίων προσεγγίζει την τυχαία κατανομή, για δεδομένο κλάσμα όγκου, η διαπερατότητα μειώνεται. Ταυτόχρονα μειώνεται και ο ρυθμός με τον οποίο μεταβάλλεται η αριθμητική τιμή της διαπερατότητας όσο αυξάνεται η παράμετρος  $T^*$ . Στα διαγράμματα που παρατίθενται παρατηρείται πως η διαπερατότητα, σε γεωμετρίες ίδιου κλάσματος όγκου, για μία κατανομή με έντονη

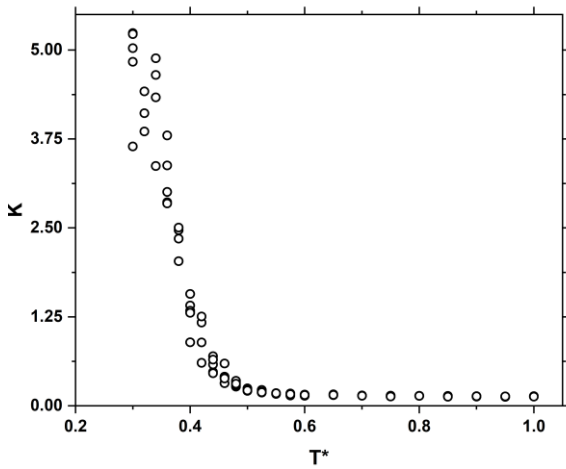
ανάπτυξη συσσωματωμάτων ( $T^*=0.3$ ) ενδέχεται να διαφέρει ακόμη και ως τάξη μεγέθους συγκριτικά με κάποια δομή τυχαίας διάταξης ( $T^*>0.7$ ).



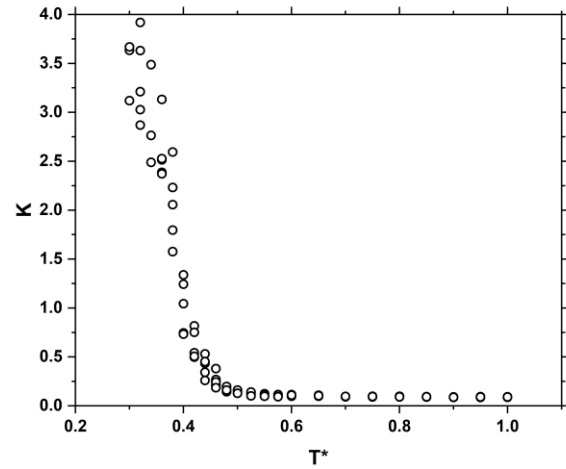
**Σχ. 44 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $T^*$  για  $V_f=0.125$**



**Σχ. 45 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $T^*$  για  $V_f=0.15$**



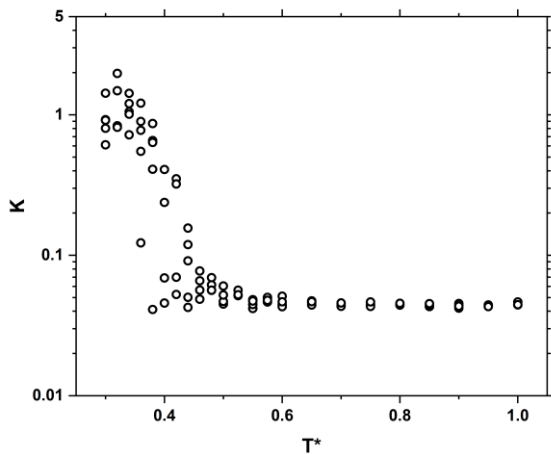
**Σχ. 46 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $T^*$  για  $V_f=0.175$**



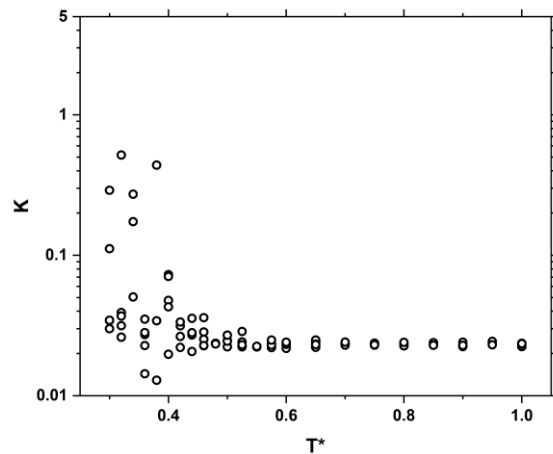
**Σχ. 47 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $T^*$  για  $V_f=0.2$**

Από τα παραπάνω διαγράμματα διεξάγονται δύο σημαντικά συμπεράσματα. Πρώτον, παρατηρείται μία έντονη μονοτονική συμπεριφορά της διαπερατότητας ως προς την  $T^*$ . Η μονοτονία αυτή διατηρείται για ένα μεγάλο εύρος  $V_f$  υποδεικνύοντας την άμεση συσχέτιση της  $K$  με την κατανομή της μικροδομής. Το δεύτερο συμπέρασμα σχετίζεται με την αξιοπιστία των αποτελεσμάτων. Για κάθε τιμή της  $T^*$  επιλύονται 5 ανεξάρτητες γεωμετρίες. Εφόσον γεωμετρίες με διαφορετική οπτική αναπαράσταση παρουσιάζουν μικρή απόκλιση στην τιμή

της διαπερατότητας, τα αποτελέσματα θεωρούνται έγκυρα. Όπως έχει τονιστεί ως κρίσιμη περιοχή λογίζεται το εύρος  $T^*=[0.3, 0.5]$ , όπου η ύπαρξη συσσωματωμάτων εισάγει μία αβεβαιότητα κατά τον υπολογισμό. Αποδείχθηκε πως η διασπορά των αποτελεσμάτων μέχρι την οριακή τιμή  $V_f = 0.2$  είναι μικρή. Για μεγαλύτερες τιμές τους κλάσματος όγκου οι μετρήσεις της διαπερατότητας παρουσιάζουν μεγάλη μεταβλητότητα στο συγκεκριμένο εύρος της  $T^*$ . Αυτό οφείλεται στο γεγονός πως σχηματίζονται λίγα συσσωματώματα πολύ μεγάλου μεγέθους. Ο προσανατολισμός τους καθορίζει απόλυτα τον τρόπο με τον οποίο θα αναπτυχθεί η ροή και κατ'επέκταση το μέγεθος της διαπερατότητας που προσμετράται. Οι γεωμετρίες, λοιπόν, με κλάσμα όγκου μεγαλύτερο του 0.2 δεν εξυπηρετούν την παρούσα ανάλυση.

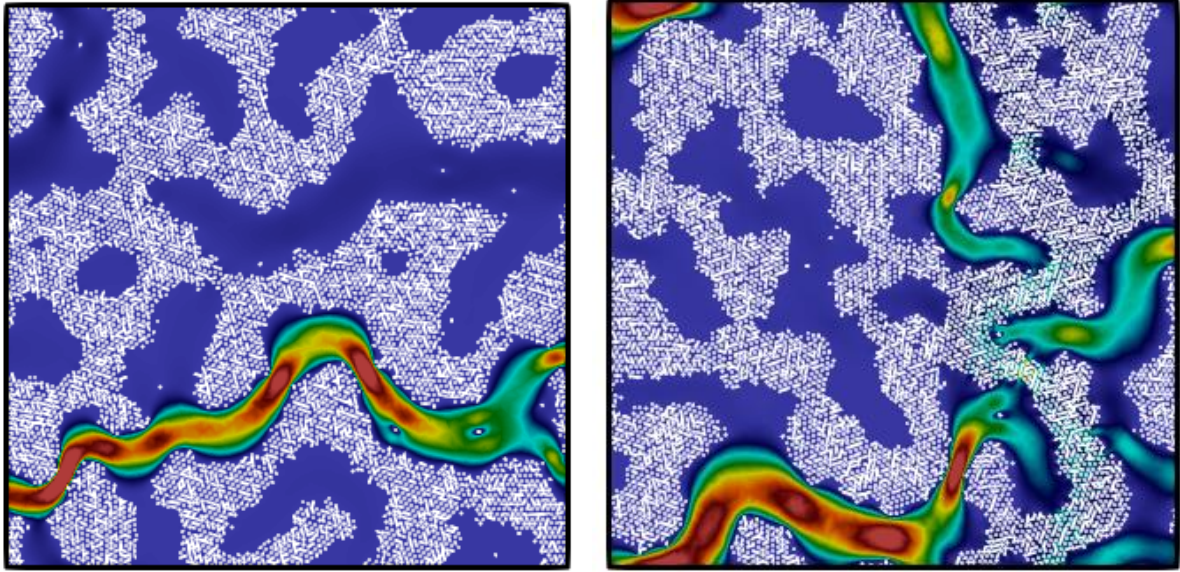


**Σχ. 48 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $T^*$  για  $V_f=0.25$**



**Σχ. 49 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $T^*$  για  $V_f=0.3$**

Η αναπαράσταση του ροικού πεδίου επεξηγεί πλήρως την υψηλή αυτή μεταβλητότητα των τιμών. Τα συσσωματώματα καταλήγουν να ενώνονται μεταξύ τους με αποτέλεσμα η εξέλιξη της ροής να εναποτίθεται στην ύπαρξη κενών χώρων, απουσίας σωματιδίων. Κάθε γεωμετρία εμφανίζει ένα εξαιρετικά ανομοιόμορφο ροικό πεδίο με αποτέλεσμα να αποκλίνουν σημαντικά οι τιμές της  $K$ .



Σχ. 50 - Αναπαράσταση του ροϊκού πεδίου για δύο γεωμετρίες όμοιου σετ παραμέτρων

#### 5.4 Διαπερατότητα συναρτήσει του δείκτη $M_D$

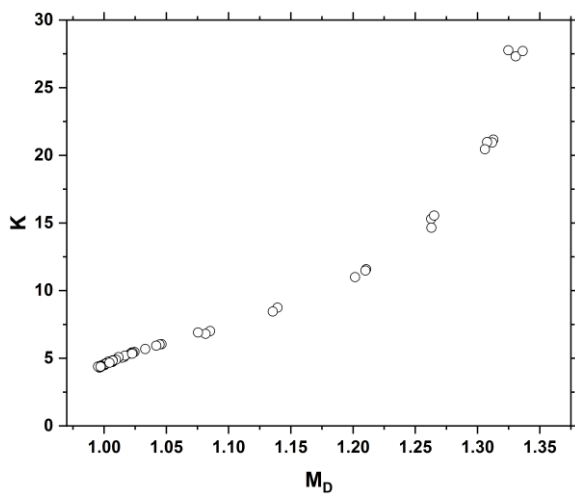
Σύμφωνα με τα αποτελέσματα που παρουσιάστηκαν στην προηγούμενη ενότητα, προκύπτει το συμπέρασμα ότι η διαπερατότητα συνδέεται άμεσα με το βαθμό σχηματισμού συσσωματωμάτων, μέσω της αδιάστατης θερμοκρασίας. Η  $T^*$  ερμηνεύεται ως ένα μέτρο της θερμικής κίνησης στην οποία υποβλήθηκαν τα σωματίδια κατά τις προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής με στόχο της δημιουργία μεγάλου εύρους διαφορετικών τύπων μικροδομής. Πιο συγκεκριμένα, για μικρές τιμές ( $T^* < 0.5$ ), μετά από έναν αρκούντως μεγάλο αριθμό επαναλήψεων προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής, καταλήγαμε σε γεωμετρίες όπου ήταν έντονος ο σχηματισμός συσσωματωμάτων. Όσο αυξανόταν η αδιάστατη θερμοκρασία, τόσο μειώνονταν τέτοια φαινόμενα με αποτέλεσμα για  $T^* > 0.7$  να παίρνουμε σαν αποτέλεσμα ομοιόμορφες κατανομές οι οποίες προσέγγιζαν την τυχαία κατανομή Poisson. Ως εκ τούτου, η αδιάστατη θερμοκρασία αποτέλεσε ένα σημαντικό εργαλείο για την δημιουργία των γεωμετριών. Παρόλα αυτά, δεν μπορεί να θεωρηθεί ως ένας δείκτης περιγραφής της χωρικής συσχέτισης των ινών, καθώς δεν αναπαριστά κάποιο φυσικό μέγεθος ούτως ώστε να γίνει αυτή η συσχέτιση.

Η κατασκευή του δείκτη  $M_D$  και η μονοτονική συμπεριφορά του με την  $T^*$  καθιστά λειτουργική της αξιοποίησή του. Συνιστά ένα αδιάστατο μέγεθος το οποίο μας πληροφορεί μονοσήμαντα, όπως αποδείχθηκε στο Κεφάλαιο 3, για την εικόνα της μικροδομής και την

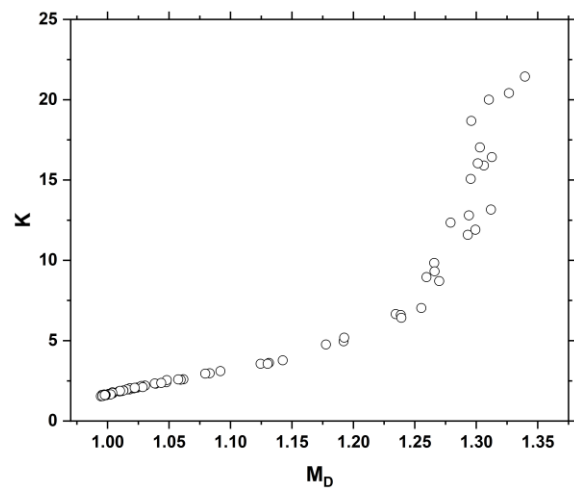
ύπαρξη τοπικών συγκεντρώσεων σωματιδίων στο εσωτερικό της, υπό τη μορφή συσσωματωμάτων. Επομένως τελικός στόχος της παρούσας μελέτης είναι η αντικατάσταση του τεχνητού μεγέθους  $T^*$  με τον δείκτη  $M_D$ , και η συσχέτιση του τελευταίου με τη διαπερατότητα ενός ινώδους μέσου.

Ως απόρροια της άμεσης μονοτονικής συσχέτισης του  $M_D$  με το  $T^*$  προκύπτει ότι η αύξηση του δείκτη συνοδεύεται από τον βαθμιαίο σχηματισμό συσσωματωμάτων στην κατανομή των ινών. Για  $M_D=1$  οι γεωμετρικές προσεγγίζουν την κατανομή Poisson, ως ένδειξη της τυχαίας διάταξής τους. Για  $M_D=1.05$  αρχίζουμε να παρατηρούμε τοπικές συγκεντρώσεις ινών στην επιφάνεια του υλικού. Η προοδευτική αύξηση του δείκτη, πάνω από αυτή την τιμή, συνεπάγεται ολοένα και πιο έντονο σχηματισμό συσσωματωμάτων.

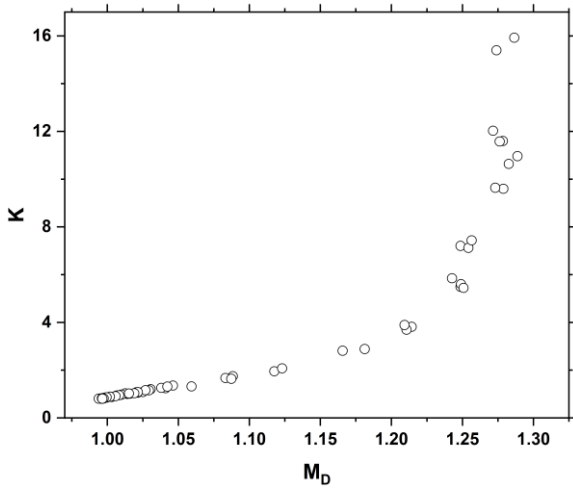
Ακολουθούν διαγράμματα συσχέτισης του  $M_D$  με τη διαπερατότητα. Η μονοτονική συμπεριφορά καθώς και οι μικρές αποκλίσεις των τιμών εξακολουθούν να υφίστανται και ως προς την συγκεκριμένη αναπαράσταση των αποτελεσμάτων. Επιβεβαιώνεται, λοιπόν, η άμεση εξάρτηση μεταξύ της διαπερατότητας και της μικροδομής.



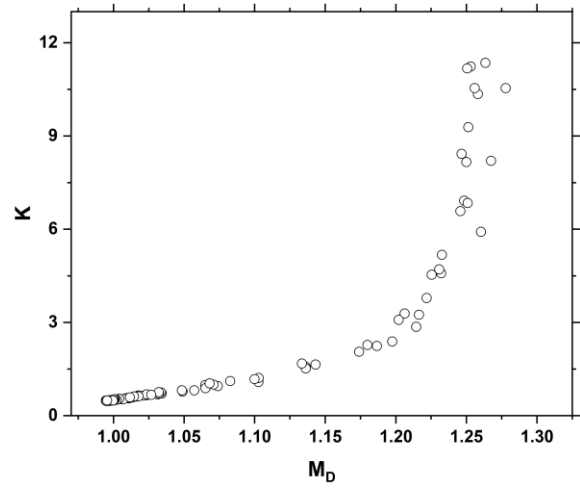
**Σχ. 51 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $M_D$  για  $V_f=0.025$**



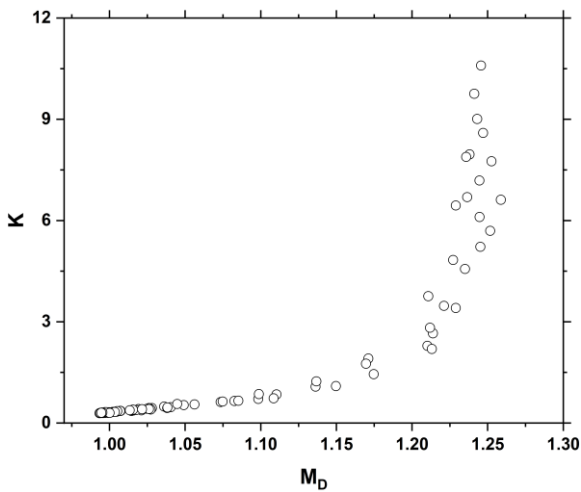
**Σχ. 52 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $M_D$  για  $V_f=0.05$**



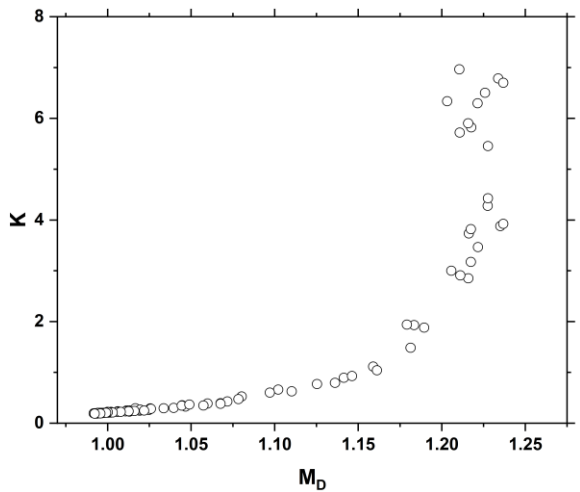
Σχ. 53 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $M_D$  για  $V_f=0.075$



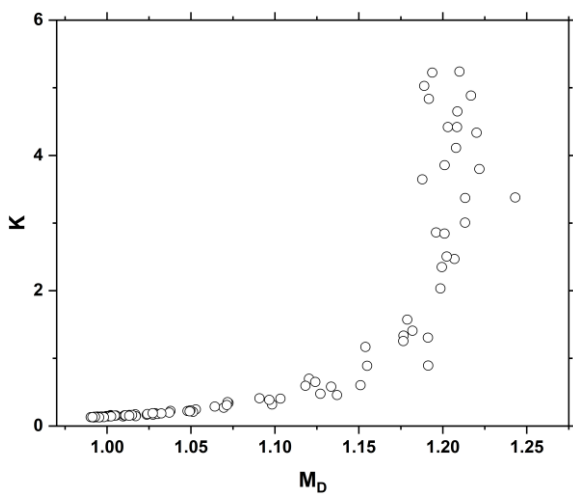
Σχ. 54 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $M_D$  για  $V_f=0.1$



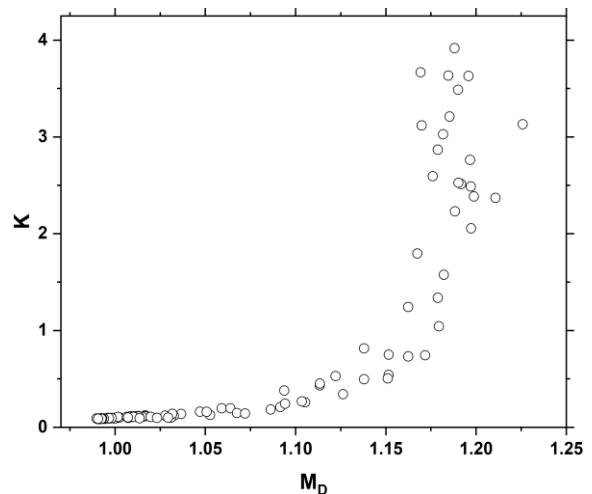
Σχ. 55 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $M_D$  για  $V_f=0.125$



Σχ. 56 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $M_D$  για  $V_f=0.15$



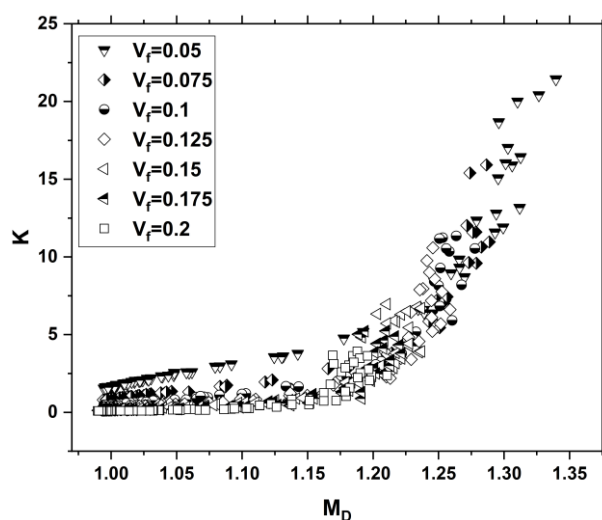
Σχ. 57 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $M_D$  για  $V_f=0.175$



Σχ. 58 - Διάγραμμα της διαπερατότητας ως προς  $M_D$  για  $V_f=0.2$



Από τα παραπάνω διαγράμματα γίνεται αντιληπτό ότι για δεδομένο κλάσμα όγκου δύναται να εκτιμηθεί το μέγεθος της διαπερατότητας από το  $M_D$  ( $K=f(M_D, V_f)$ ). Παράλληλα η αναπαράσταση όλων των αποτελεσμάτων υπό ένα γενικό διάγραμμα (Σχ. 59) υποδεικνύει πως η ποιοτική συμπεριφορά της διαπερατότητας συναρτήσει του δείκτη  $M_D$  μπορεί να θεωρηθεί κοινή στο εύρος  $V_f=[0.025, 0.2]$ . Συνεπώς, μία μαθηματική σχέση μεταξύ των δύο αυτών ιδιοτήτων θα είναι κοινή για κάθε κλάσμα όγκου που εμπίπτει στο εύρος που ορίστηκε. Το συμπέρασμα αυτό οδηγεί στην αναζήτηση μίας συνάρτησης παρεμβολής η οποία θα προσεγγίζει την συμπεριφορά των αποτελεσμάτων που παρουσιάστηκαν παραπάνω.



**Σχ. 59 - Διάγραμμα διαπερατότητας ως προς  $M_D$  για το εύρος  $V_f=[0.05, 0.2]$ .**

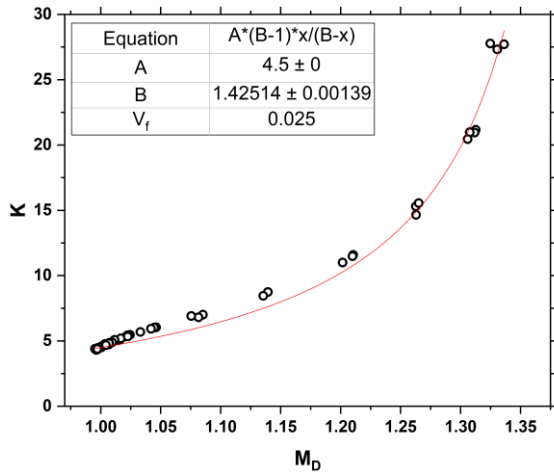
Από τις διάφορες μορφές πρότυπων συναρτήσεων που εφαρμόστηκαν για την παρεμβολή των αποτελεσμάτων καλύτερη συμπεριφορά παρουσίασε η συνάρτηση της μορφής:

$$K = \frac{AM_D}{(B - M_D)} \quad (5.1)$$

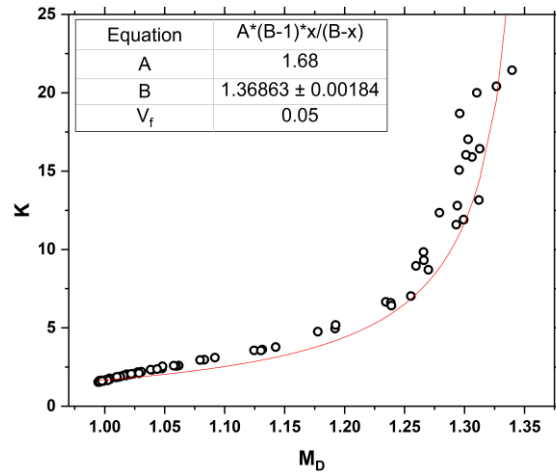
Για  $M_D = 1$  η διαπερατότητα εκφράζει την τιμή που υπολογίζεται για μία τυχαία κατανομή,  $K_{Random}$ . Επομένως η σχέση ανάγεται στην μορφή:

$$K = \frac{K_{Random}(B - 1)M_D}{(B - M_D)} \quad (5.2)$$

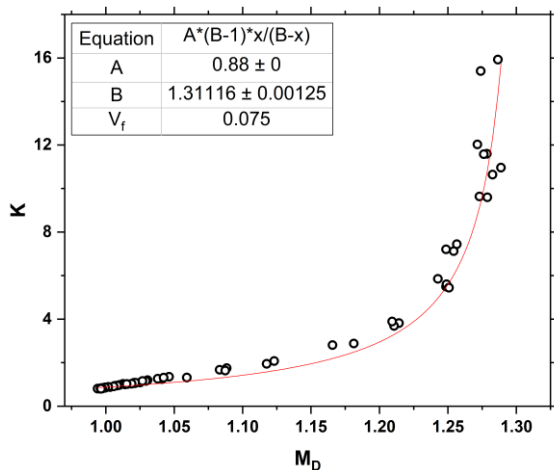
Η μετατροπή της συνάρτησης στη μορφή (5.2) αποβάλλει την ανάγκη πρόβλεψης της παραμέτρου A, όπου  $A = K_{Random} = F(V_f)$ , το οποίο έχει υπολογιστεί, και κατά αυτόν τον τρόπο προκύπτει ο υπολογισμός αποκλειστικά της παραμέτρου B.



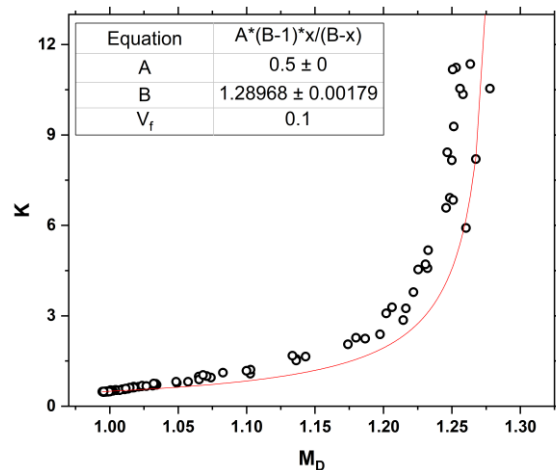
Σχ. 60 - Διάγραμμα K ως προς  $M_D$  για  $V_f=0.025$ . Η κόκκινη γραμμή αναπαριστά την συνάρτηση παρεμβολής



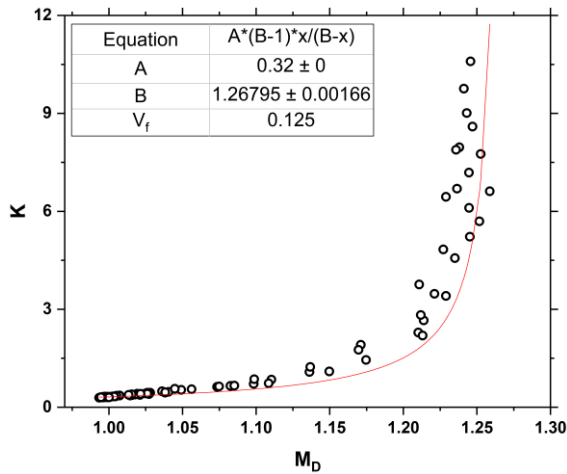
Σχ. 61 - Διάγραμμα K ως προς  $M_D$  για  $V_f=0.05$ . Η κόκκινη γραμμή αναπαριστά την συνάρτηση παρεμβολής



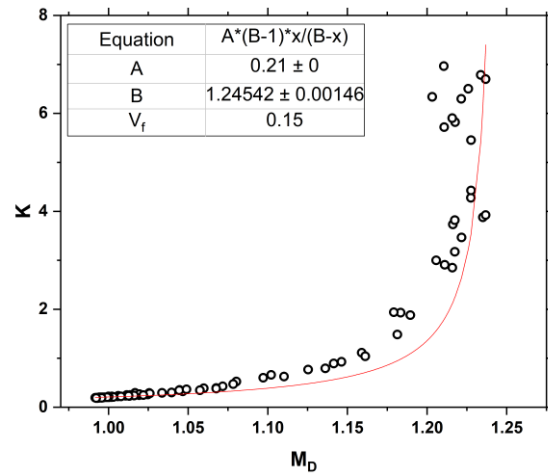
Σχ. 62 - Διάγραμμα K ως προς  $M_D$  για  $V_f=0.075$ . Η κόκκινη γραμμή αναπαριστά την συνάρτηση παρεμβολής



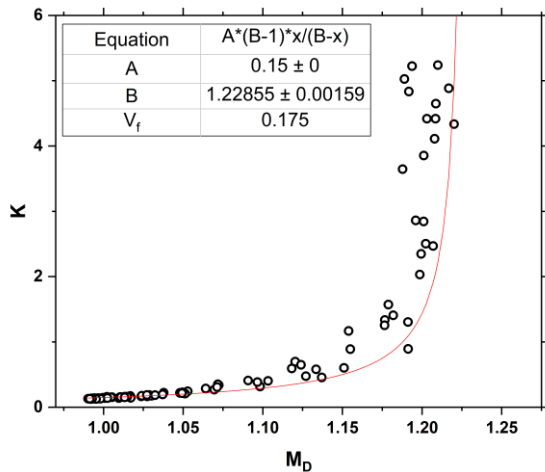
Σχ. 63 - Διάγραμμα K ως προς  $M_D$  για  $V_f=0.1$ . Η κόκκινη γραμμή αναπαριστά την συνάρτηση παρεμβολής



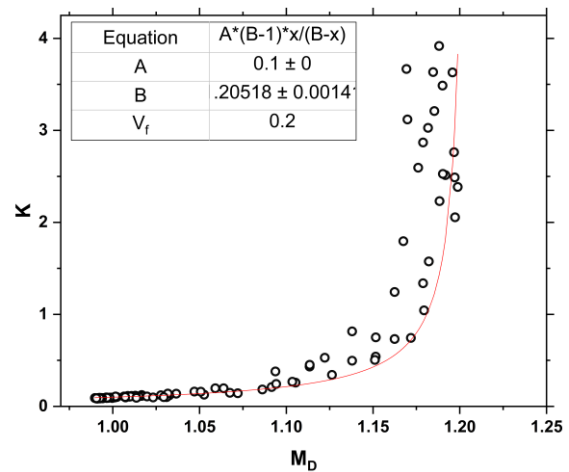
Σχ. 64 - Διάγραμμα K ως προς  $M_D$  για  $V_f=0.125$ . Η κόκκινη γραμμή αναπαριστά την συνάρτηση παρεμβολής



Σχ. 65 - Διάγραμμα K ως προς  $M_D$  για  $V_f=0.15$ . Η κόκκινη γραμμή αναπαριστά την συνάρτηση παρεμβολής



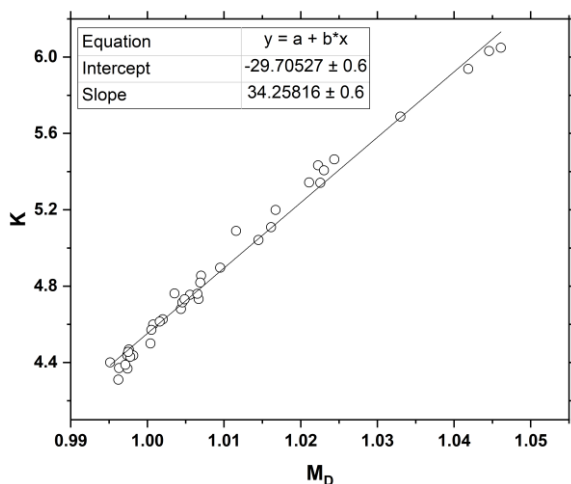
Σχ. 66 - Διάγραμμα K ως προς  $M_D$  για  $V_f=0.175$ . Η κόκκινη γραμμή αναπαριστά την συνάρτηση παρεμβολής



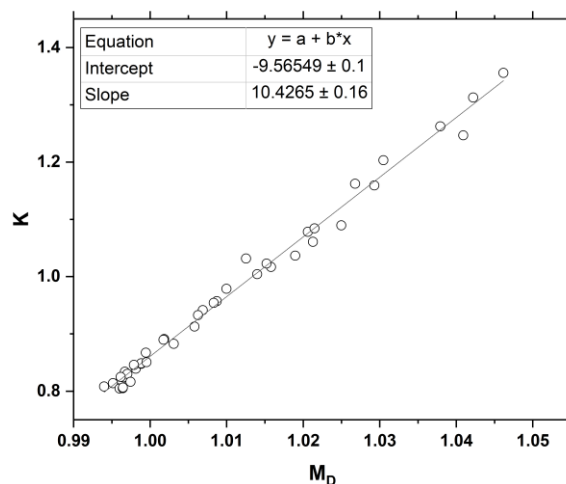
Σχ. 67 - Διάγραμμα K ως προς  $M_D$  για  $V_f=0.2$ . Η κόκκινη γραμμή αναπαριστά την συνάρτηση παρεμβολής

Η συνάρτηση περιγράφει ποιοτικά την συμπεριφορά της διαπερατότητας σύμφωνα με τον δείκτη  $M_D$ . Αξίζει να σημειωθεί πως η συνάρτηση παρεμβολής υποδεικνύει πως, όσο το  $M_D$  προοδευτικά θα αυξάνεται και κατ' επέκταση ο βαθμός συσσωμάτωσης της μικροδομής θα γίνεται πιο έντονος, η διαπερατότητα θα λαμβάνει μία εκθετική αύξηση.

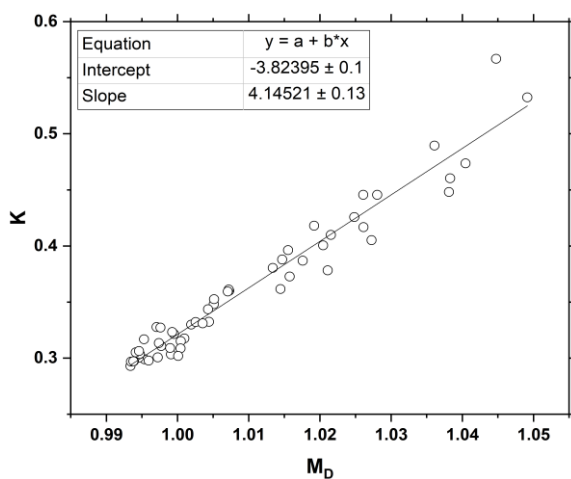
Στην συνέχεια, γίνεται προσπάθεια για πιο ακριβή πρόβλεψη της διαπερατότητας για κατανομές που δεν εμφανίζουν μεγάλα συσσωματώματα, δηλαδή για  $M_D$  μέχρι 1.05. Εάν εστιάσουμε στην περιοχή αυτή του Σχ. 59 εντοπίζεται μία γραμμική συμπεριφορά των αποτελεσμάτων.



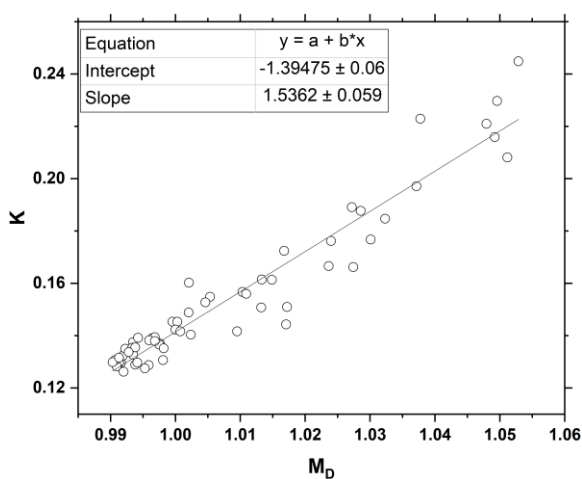
**Σχ. 68 - Διαπερατότητα συναρτήσει του  $M_D$  μέχρι την τιμή 1.05, για  $V_f=0.025$ . Η μαύρη συνεχής γραμμή αναπαριστά την γραμμική παρεμβολή**



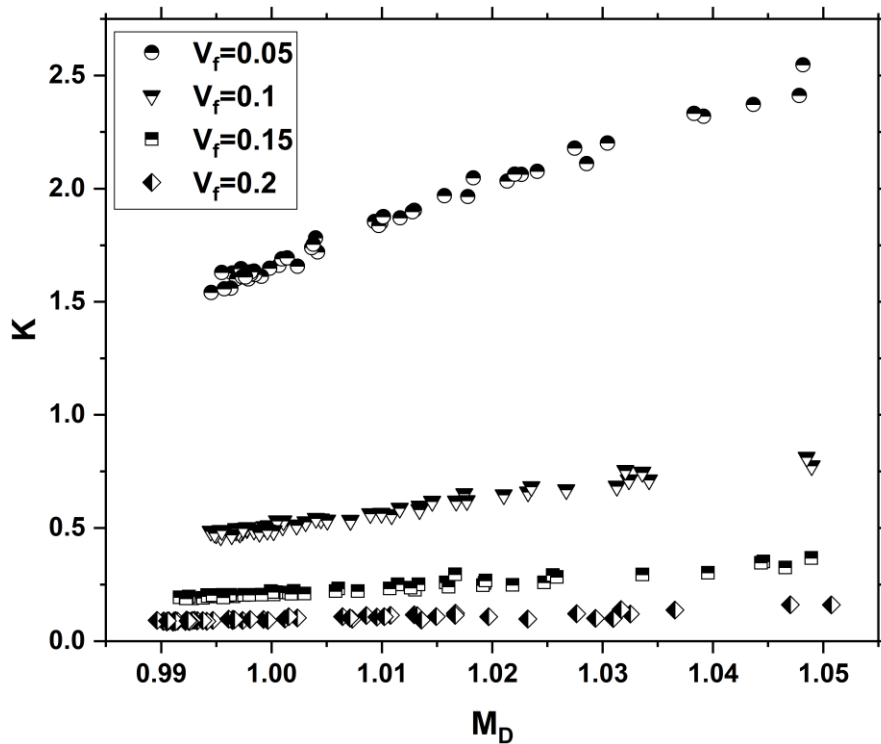
**Σχ. 69 - Διαπερατότητα συναρτήσει του  $M_D$  μέχρι την τιμή 1.05, για  $V_f=0.075$ . Η μαύρη συνεχής γραμμή αναπαριστά την γραμμική παρεμβολή**



**Σχ. 70 - Διαπερατότητα συναρτήσει του  $M_D$  μέχρι την τιμή 1.05, για  $V_f=0.125$ . Η μαύρη συνεχής γραμμή αναπαριστά την γραμμική παρεμβολή**



**Σχ. 71 - Διαπερατότητα συναρτήσει του  $M_D$  μέχρι την τιμή 1.05, για  $V_f=0.175$ . Η μαύρη συνεχής γραμμή αναπαριστά την γραμμική παρεμβολή**



**Σχ. 72 - Διαπερατότητα συναρτήσει του  $M_D$  για 4 διαφορετικά κλάσματα όγκου**

Από το συγκριτικό διάγραμμα για διάφορα κλάσματα όγκου προκύπτει ότι η διαπερατότητα για ίδιο  $M_D$  είναι μεγαλύτερη όσο το κλάσμα όγκου μειώνεται. Επίσης από την κλίση των συναρτήσεων (Σχ. 68 έως και Σχ. 71) συμπεραίνεται ότι η τιμή της διαπερατότητας αυξάνεται πιο γρήγορα όσο μειώνεται το κλάσμα όγκου των σωματιδίων στην γεωμετρία.

Παρατηρείται ότι οι γραμμικές παρεμβολές σε κατανομές ινών που προσεγγίζουν τις τυχαίες κατανομές (μικρό  $M_D$ ) προσδίδουν ακριβείς προβλέψεις για την διαπερατότητα για μικρά κλάσματα όγκου. Παρόλα αυτά, όσο αυξάνεται το κλάσμα όγκου η διασπορά των τιμών από την γραμμική παρεμβολή μεγαλώνει.

## Κεφάλαιο 6. Προτάσεις για μελλοντική έρευνα

---

Στην παρούσα διπλωματική εργασία εισήχθη ο στατιστικός δείκτης  $M_D$ , ο οποίος μας πληροφορεί επαρκώς για την εικόνα της μικροδομής ως προς τον σχηματισμό συσσωματωμάτων (clusters) στο εσωτερικό του ινώδες μέσου. Παράλληλα μελετήθηκε η επίδραση του δείκτη στην τιμή της διαπερατότητας κι έτσι καταγράψαμε την σχέση της με την μικροδομή του ινώδες μέσου. Παρακάτω εντοπίζονται πτυχές του αντικειμένου που χρήζουν περαιτέρω μελέτη:

- Σύζευξη των γεωμετριών που δημιουργήθηκαν, χρησιμοποιώντας ως εργαλείο τις προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής, με πραγματικές κατανομές που λαμβάνονται με μεθόδους όπως η μικροσκοπική τομογραφία. Επίσης, ενθαρρύνεται σημαντικά η εύρεση επιπλέον μεθόδων για την παραγωγή ρεαλιστικών κατανομών ινών που θα εμφανίζουν συσσωματώματα, ακόμα και για πιο υψηλά κλάσματα όγκου.
- Επαλήθευση εγκυρότητας του δείκτη  $M_D$  με την αξιολόγηση του σε μεγάλο εύρος διαφορετικών γεωμετριών καθώς και η προσπάθεια ανεξαρτητοποίησής του από το κλάσμα όγκου. Η διερεύνηση της απόκλισης του δείκτη από τη μονάδα, στις περιπτώσεις που λαμβάνει τιμές μικρότερες αυτής, αποτελεί ένα επιπλέον θέμα ανάλυσης. Σημαντική καθίσταται και η αναζήτηση περαιτέρω στατιστικών δεικτών που θα περιγράψουν με εξίσου καλή ακρίβεια την χωρική συσχέτιση των ινών.
- Αξιολόγηση των υπολογιστικών αποτελεσμάτων, αντιπαραβάλλοντάς τα με διαθέσιμες πειραματικές μετρήσεις και αποτελέσματα αναλυτικών μοντέλων που έχουν προταθεί.
- Περαιτέρω μελέτη της επάρκειας του μεγέθους του μοναδιαίου κελιού με την περάτωση υπολογιστικών προσομοιώσεων για κατανομές με μεγαλύτερο αριθμό σωματιδίων, κάτι που καθιστά εφικτό η ραγδαία ανάπτυξη της δυναμικότητας των υπολογιστικών συστημάτων.

## Βιβλιογραφία

---

- [1] Yazdchi, K., Srivastava, S., & Luding, S. (2012). Micro–macro relations for flow through random arrays of cylinders. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 43(11), 2007-2020.
- [2] Gebart, B. R. (1992). Permeability of unidirectional reinforcements for RTM. *Journal of composite materials*, 26(8), 1100-1133.
- [3] Papathanasiou, T. D., & Chen, X. (2009). The effect of certain morphological features on the permeability of clustered fibrous media. *Polymers and Polymer Composites*, 17(1), 1-12.
- [4] Chen, X., & Papathanasiou, T. D. (2008). The transverse permeability of disordered fiber arrays: a statistical correlation in terms of the mean nearest interfiber spacing. *Transport in Porous Media*, 71(2), 233-251.
- [5] Tamayol, A., & Bahrami, M. (2011). Transverse permeability of fibrous porous media. *Physical Review E*, 83(4), 046314.
- [6] Drummond, J. E., & Tahir, M. (1984). Laminar viscous flow through regular arrays of parallel solid cylinders. *International Journal of Multiphase Flow*, 10(5), 515-540.
- [7] Berdichevsky, A. L., & Cai, Z. (1993). Preform permeability predictions by self-consistent method and finite element simulation. *Polymer Composites*, 14(2), 132-143.
- [8] Karaki, M., Hallal, A., Younes, R., Trochu, F., Lafon, P., Hayek, A., ... & Fayad, A. (2017). A comparative analytical, numerical and experimental analysis of the microscopic permeability of fiber bundles in composite materials. *Int. J. Compos. Mater*, 7(3), 82-102.
- [9] Chen, X., & Papathanasiou, T. D. (2006). On the variability of the Kozeny constant for saturated flow, 37(6), 836-846.
- [10] Sangani, A. S., & Yao, C. (1988). Transport processes in random arrays of cylinders. II. Viscous flow. *The Physics of fluids*, 31(9), 2435-2444.
- [11] Schey, M. J., Beke, T., Appel, L., Zabler, S., Shah, S., Hu, J., ... & Stapleton, S. (2021). Identification and Quantification of 3D Fiber Clusters in Fiber-Reinforced Composite Materials. *JOM*, 73(7), 2129-2142.
- [12] Yurgartis, S. W. (1995). Techniques for the quantification of composite mesostructure. *Composites science and technology*, 53(2), 145-154.
- [13] Pyrz, R. (1994). Quantitative description of the microstructure of composites. Part I: Morphology of unidirectional composite systems. *Composites science and technology*, 50(2), 197-208.
- [14] J. A. Anderson, J. Glaser, and S. C. Glotzer. HOOMD-blue: A Python package for high-performance molecular dynamics and hard particle Monte Carlo simulations. *Computational Materials Science* 173: 109363, Feb 2020.
- [15] Frenkel, D., & Smit, B. (2001). Understanding molecular simulation: from algorithms to applications (Vol. 1). Elsevier.
- [16] Wikipedia contributors. (2022, February 7). Periodic boundary conditions. In *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. Retrieved 17:52, June 30, 2022, from [https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Periodic\\_boundary\\_conditions&oldid=1070398820](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Periodic_boundary_conditions&oldid=1070398820)

- [17] Wikipedia contributors. (2021, August 23). Cell lists. In *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. Retrieved 19:18, May 22, 2022, from [https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Cell\\_lists&oldid=1040295560](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Cell_lists&oldid=1040295560).
- [18] Phillips, C. L., Anderson, J. A., & Glotzer, S. C. (2011). Pseudo-random number generation for Brownian Dynamics and Dissipative Particle Dynamics simulations on GPU devices. *Journal of Computational Physics*, 230(19), 7191-7201.
- [19] Wikipedia contributors. (2022, April 21). Lennard-Jones potential. In *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. Retrieved 19:25, May 22, 2022, from [https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Lennard-Jones\\_potential&oldid=1083950831](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Lennard-Jones_potential&oldid=1083950831).
- [20] Royer, D. J. (1968). *Bonding theory*. McGraw-Hill.
- [21] Chang, R. (2005). *Physical chemistry for the biosciences*. University Science Books.
- [22] Rühle, V. (2007). Berendsen and nose-hoover thermostats. *Am. J. Phys*, 1-4.
- [23] Wikipedia contributors. (2022, June 10). Brownian motion. In *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. Retrieved 17:42, June 30, 2022, from [https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Brownian\\_motion&oldid=1092454887](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Brownian_motion&oldid=1092454887).
- [24] Wikipedia contributors. (2022, April 23). Verlet integration. In *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. Retrieved 15:21, June 23, 2022, from [https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Verlet\\_integration&oldid=1084258151](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Verlet_integration&oldid=1084258151).
- [25] Wikipedia contributors. (2022, June 20). Radial distribution function. In *Wikipedia, The Free Encyclopedia*. Retrieved 11:28, June 23, 2022, from [https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Radial\\_distribution\\_function&oldid=1094082496](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Radial_distribution_function&oldid=1094082496).
- [26] Smith, M. O., Ball, J., Holloway, B. B., Erdelyi, F., Szabo, G., Stone, E., ... & Lawrence, J. J. (2015). Measuring aggregation of events about a mass using spatial point pattern methods. *Spatial statistics*, 13, 76-89.
- [27] Stukowski, A. (2009). Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool. *Modelling and simulation in materials science and engineering*, 18(1), 015012.
- [28] Ripley, B. D. (2005). *Spatial statistics*. John Wiley & Sons.
- [29] OpenFOAM v9 User Guide.
- [30] Munson, Young & Okiishi, *Fundamentals of fluid mechanics*, 2014.
- [31] Αράβας, Ν., ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ, τόμος πρώτος, Εισαγωγή στη Μηχανική των παραμορφώσιμων και τη Γραμμική Ελαστικότητα, Εκδόσεις Τζιόλα, 2014.
- [32] Geuzaine, C., & Remacle, J. F. (2008). Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities.
- [33] Gmsh Reference Manual.
- [34] J.-F. Remacle, F. Henrotte, T. Carrier-Baudouin, E. Bchet, E. Marchandise, C. Geuzaine and T. Mouton, A frontal Delaunay quad mesh generator using the Linf norm, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 94(5), pp. 494-512, 2013.
- [35] C.J Greenshield & H.G Weller Notes on Computational Fluid Dynamics: General Principles, 2014.
- [36] Papathanasiou, T. D., Ingber, M. S., Mondy, L. A., & Graham, A. L. (1994). The effective elastic modulus of fiber-reinforced composites. *Journal of composite materials*, 28(4), 288-304.
- [37] Ingber, M. S., & Papathanasiou, T. D. (1997). A parallel-supercomputing investigation of the stiffness of aligned, short-fiber-reinforced composites using the Boundary Element



- Method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 40(18), 3477-3491.
- [38] Papathanasiou, T. D., Ingber, M. S., & Guell, D. C. (1995). Stiffness enhancement in aligned, short-fibre composites: a computational and experimental investigation. *Composites science and technology*, 54(1), 1-9.
- [39] Papathanasiou, T. D., Gravel, E. M., Barwick, S. C., & Dendy, E. D. (2002). Non-Isotropic structured fibrous media: The permeability of arrays of fiber bundles of elliptical cross section. *Polymer composites*, 23(4), 520-529.
- [40] Papathanasiou, T. D. (1996). A structure-oriented micromechanical model for viscous flow through square arrays of fibre clusters. *Composites Science and Technology*, 56(9), 1055-1069.
- [41] Ogadhoh, S. O., & Papathanasiou, T. D. (1996). Particle rearrangement during processing of glass-reinforced polystyrene by injection moulding. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 27(1), 57-63.
- [42] Roache, P. J. (1998). Verification and validation in computational science and engineering (Vol. 895, p. 895). Albuquerque, NM: Hermosa.
- [43] Shishkin, G. I., & Shishkina, L. P. (2006, December). The Richardson extrapolation technique for quasilinear parabolic singularly perturbed convection-diffusion equations. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 55, No. 1, p. 019). IOP Publishing.
- [44] Ahrens, James, Geveci, Berk, Law, Charles, *ParaView: An End-User Tool for Large Data Visualization*, Visualization Handbook, Elsevier, 2005, ISBN-13: 978-0123875822.

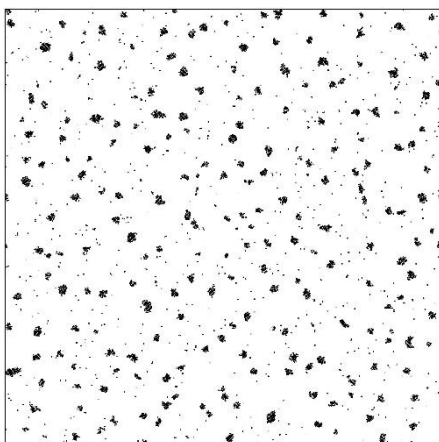
## ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ

### Παράρτημα Α. Αρχείο εντολών HOOMD-blue (lj.py)

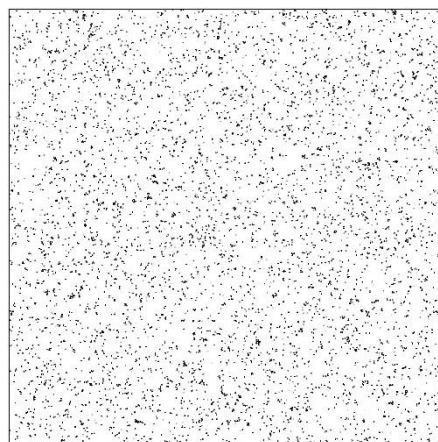
```
1 import hoomd
2 import hoomd.md
3 import numpy
4 import math
5
6 hoomd.context.initialize("");
7 hoomd.option.set_autotuner_params(enable=True, period=50000)
8
9 hoomd.data.boxdim(Lx=1.0, Ly=1.0, Lz=1.0, xy=0.0, xz=0.0, yz=0.0, dimensions=2, L=None, volume=None)
10
11 system =hoomd.init.create_lattice(unitcell=hoomd.lattice.sq(a=alpha_phi), n=N_par);
12 nl = hoomd.md.nlist.cell();
13
14 lj = hoomd.md.pair.lj(r_cut=3.0, nlist=nl);
15 lj.pair_coeff.set('A', 'A', epsilon=1.0, sigma=1.1);
16
17 hoomd.md.integrate.mode_standard(dt=0.005);
18
19 all = hoomd.group.all();
20 hoomd.md.integrate.langevin(group=all, kT=md_T, seed=Rnd_Seed)
21 #hoomd.md.integrate.nvt(group=all, kT=md_T, tau=0.5);
22
23 hoomd.analyze.log(filename="log_fname", quantities=['potential_energy', 'temperature'], period=0.5e6, overwrite=True);
24
25 hoomd.dump.gsd("tr.gsd", period=(0.5e6)-1, group=all, overwrite=True);
26 hoomd.run(RunTimee6);
27 #hoomd.write.GSD.write(mode='wb', filename='random.gsd')
28 with open('tr.txt', 'w') as f:
29     for item in system.particles:
30         x=str(item.position[0])
31         y=str(item.position[1])
32         f.write("%s, %s\n" % (x,y))
```

Σχ. 73 – Σενάριο (“script”) σε γλώσσα προγραμματισμού Python για την περάτωση των προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής

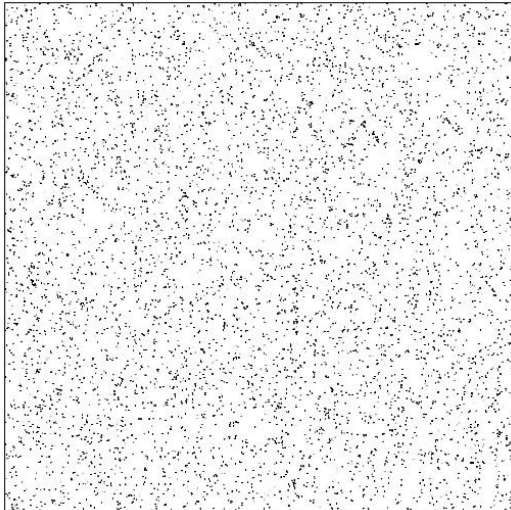
### Παράρτημα Β. Αναπαράσταση Γεωμετριών



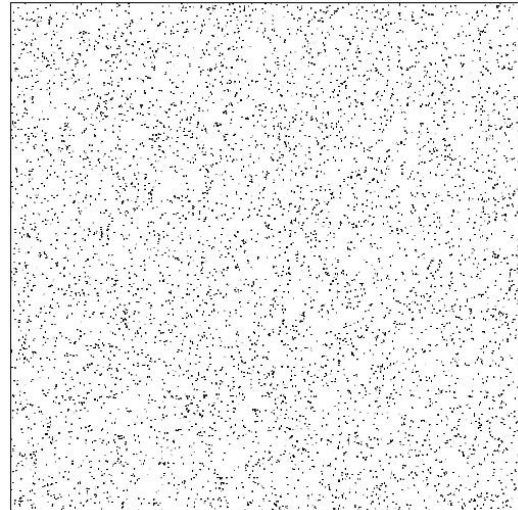
Σχ. 74 - Γεωμετρία  $T^*=0.3$ ,  $V_f=0.025$



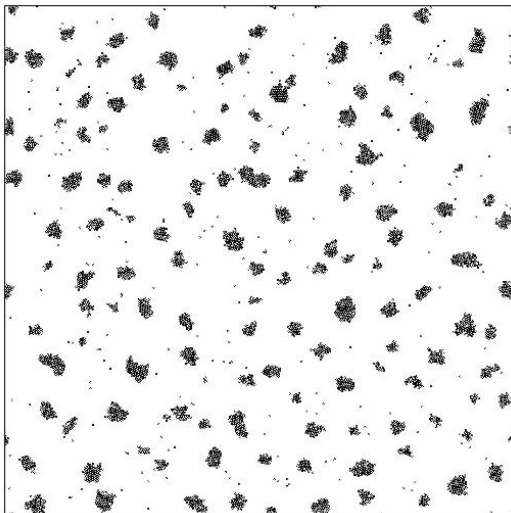
Σχ. 75 - Γεωμετρία  $T^*=0.5$ ,  $V_f=0.025$



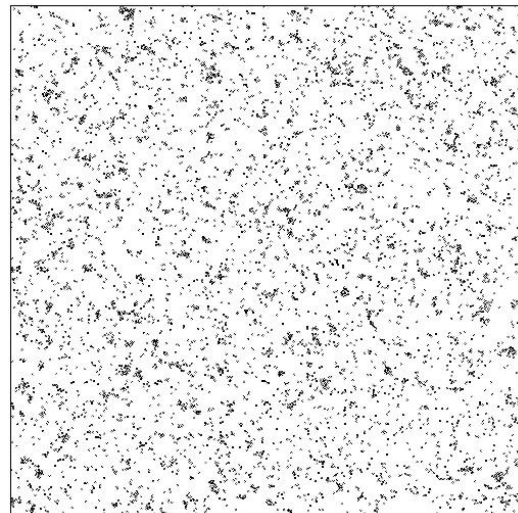
**Σχ. 76 - Γεωμετρία  $T^*=0.7$ ,  $V_f=0.025$**



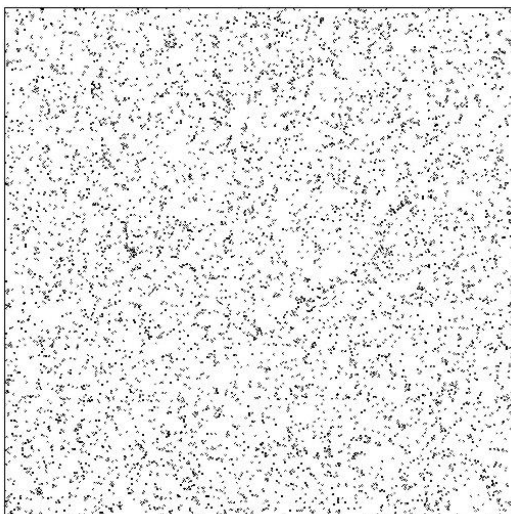
**Σχ. 77 - Γεωμετρία  $T^*=1.0$ ,  $V_f=0.025$**



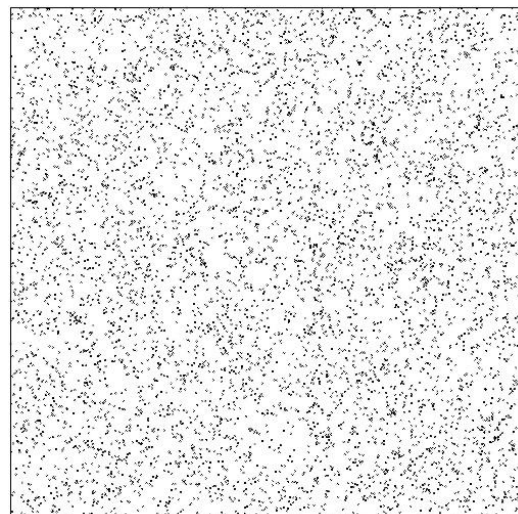
**Σχ. 78 - Γεωμετρία  $T^*=0.3$ ,  $V_f=0.05$**



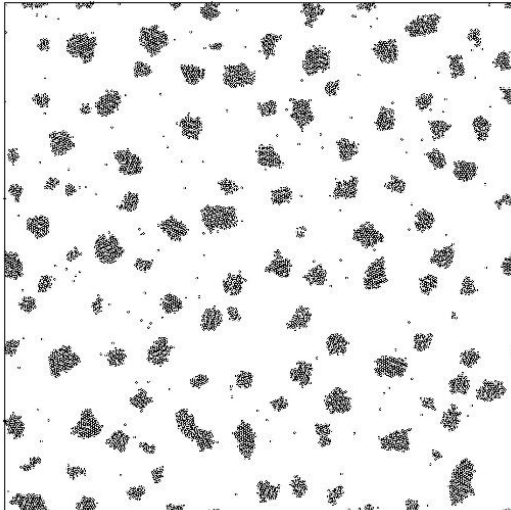
**Σχ. 79 - Γεωμετρία  $T^*=0.5$ ,  $V_f=0.05$**



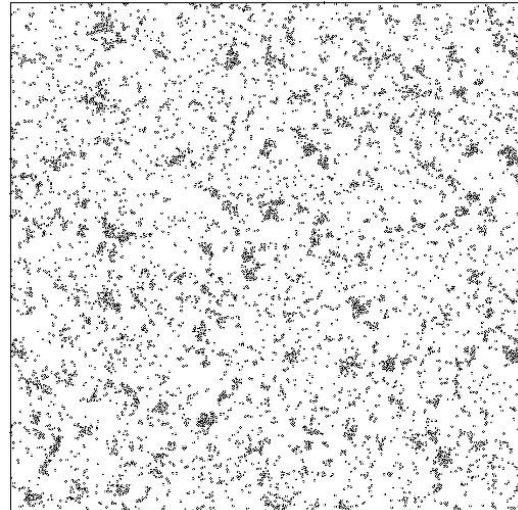
**Σχ. 80 - Γεωμετρία  $T^*=0.7$ ,  $V_f=0.05$**



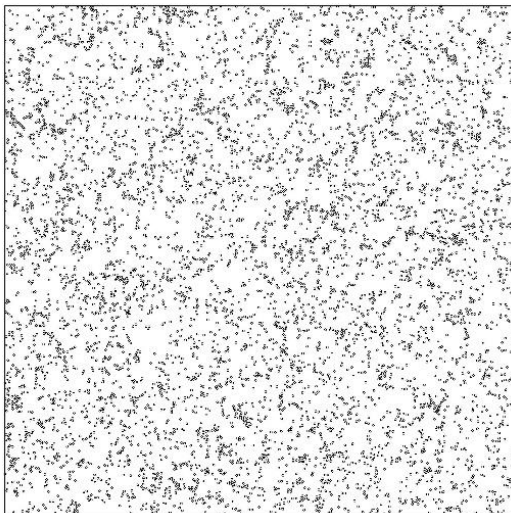
**Σχ. 81 - Γεωμετρία  $T^*=1.0$ ,  $V_f=0.05$**



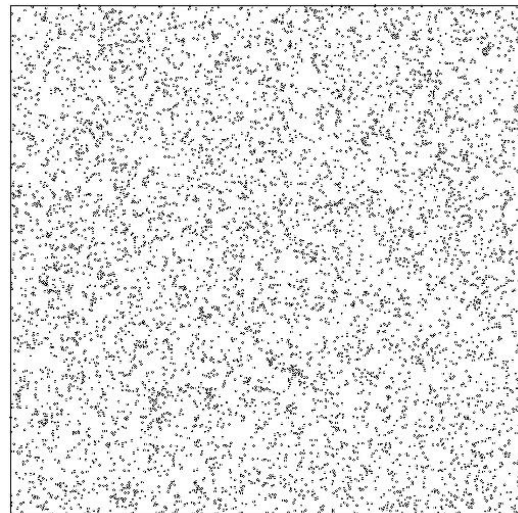
**Σχ. 82 - Γεωμετρία  $T^*=0.3$ ,  $V_f=0.075$**



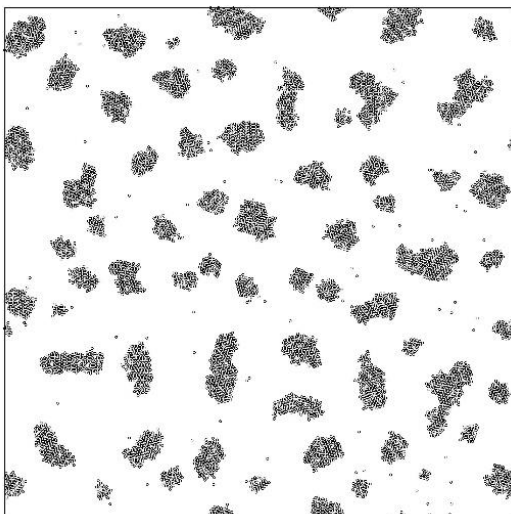
**Σχ. 83 - Γεωμετρία  $T^*=0.5$ ,  $V_f=0.075$**



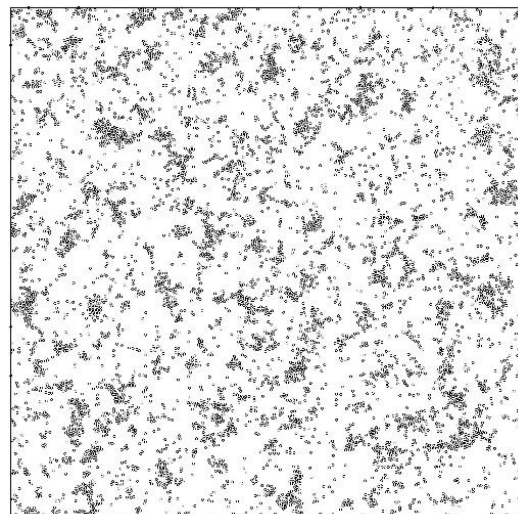
**Σχ. 84 - Γεωμετρία  $T^*=0.7$ ,  $V_f=0.075$**



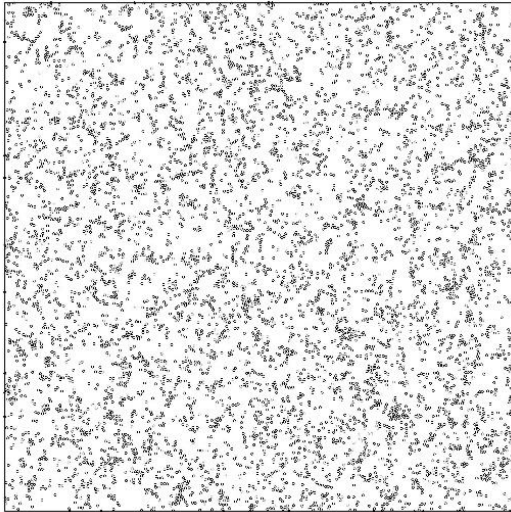
**Σχ. 85 - Γεωμετρία  $T^*=1.0$ ,  $V_f=0.075$**



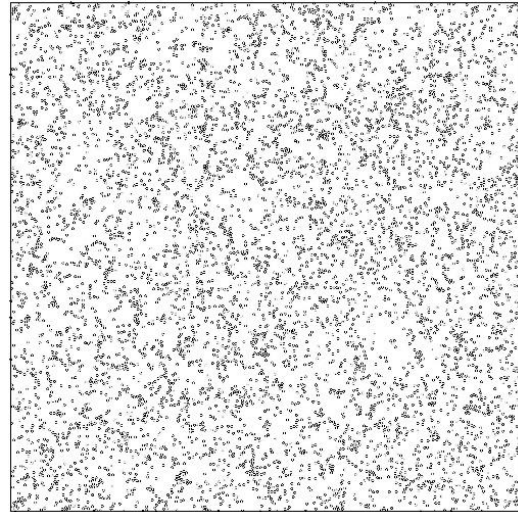
**Σχ. 86 - Γεωμετρία  $T^*=0.3$ ,  $V_f=0.1$**



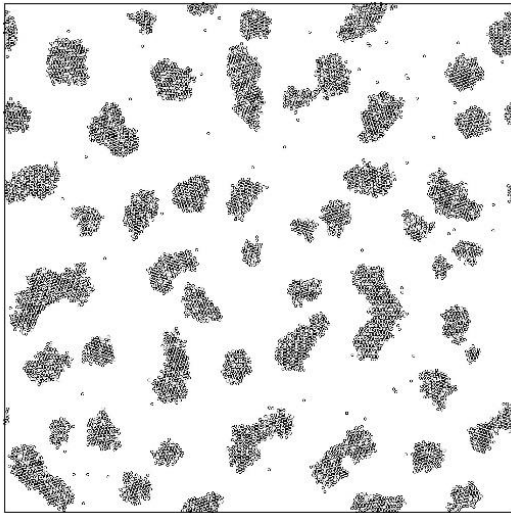
**Σχ. 87 - Γεωμετρία  $T^*=0.5$ ,  $V_f=0.1$**



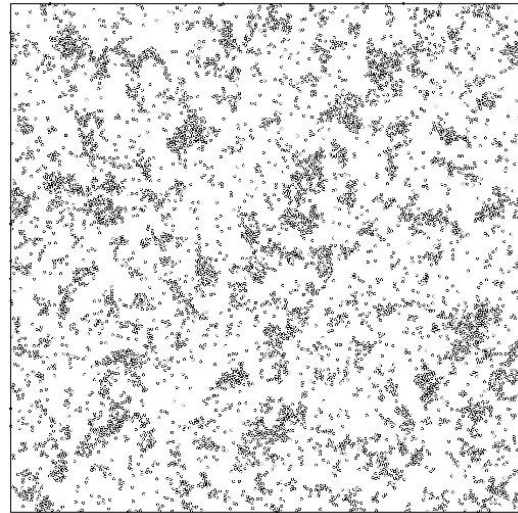
**Σχ. 88 - Γεωμετρία  $T^*=0.7$ ,  $V_f=0.1$**



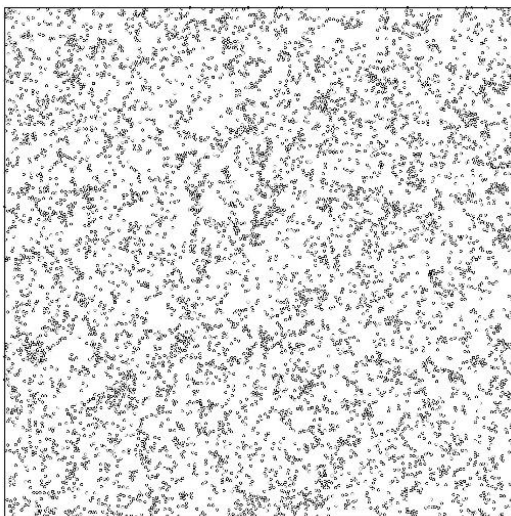
**Σχ. 89 - Γεωμετρία  $T^*=1.0$ ,  $V_f=0.1$**



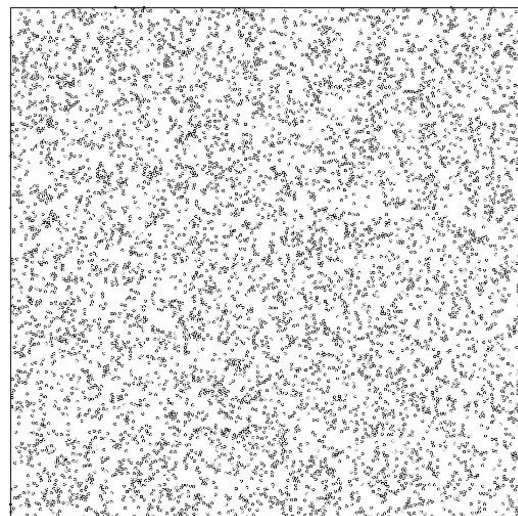
**Σχ. 90 - Γεωμετρία  $T^*=0.3$ ,  $V_f=0.125$**



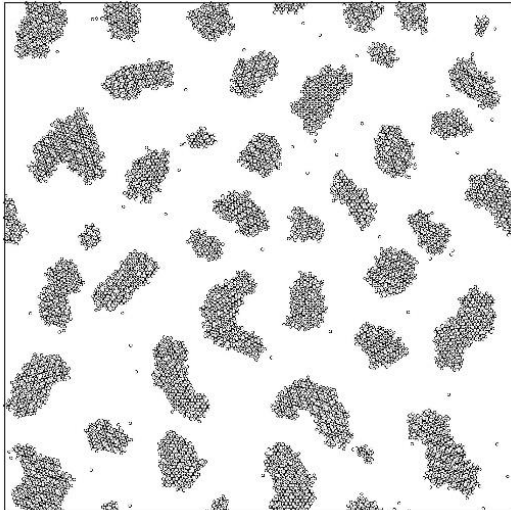
**Σχ. 91 - Γεωμετρία  $T^*=0.5$ ,  $V_f=0.125$**



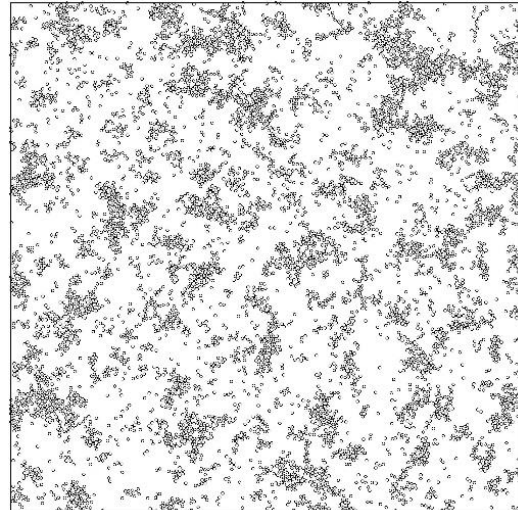
**Σχ. 92 - Γεωμετρία  $T^*=0.7$ ,  $V_f=0.125$**



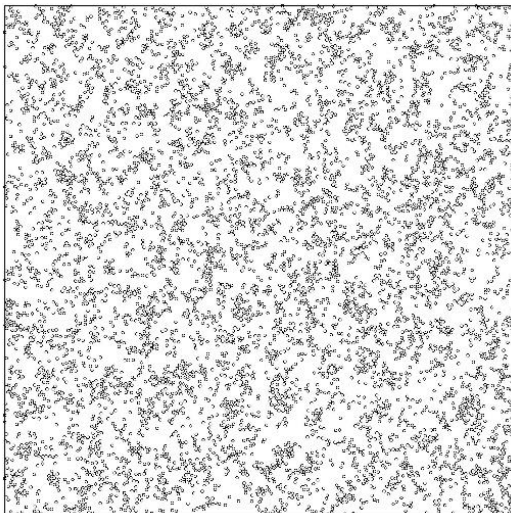
**Σχ. 93 - Γεωμετρία  $T^*=1.0$ ,  $V_f=0.125$**



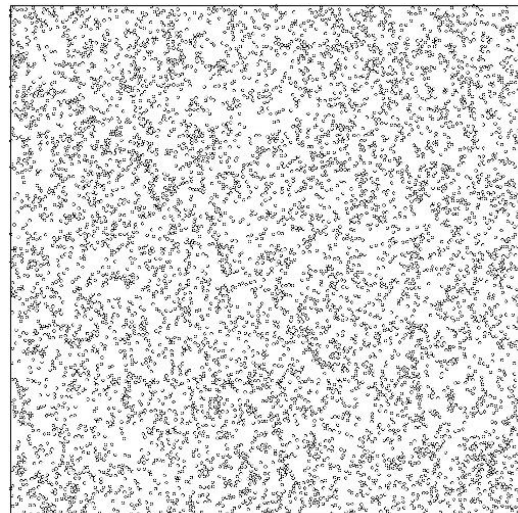
**Σχ. 94 - Γεωμετρία  $T^*=0.3$ ,  $V_f=0.15$**



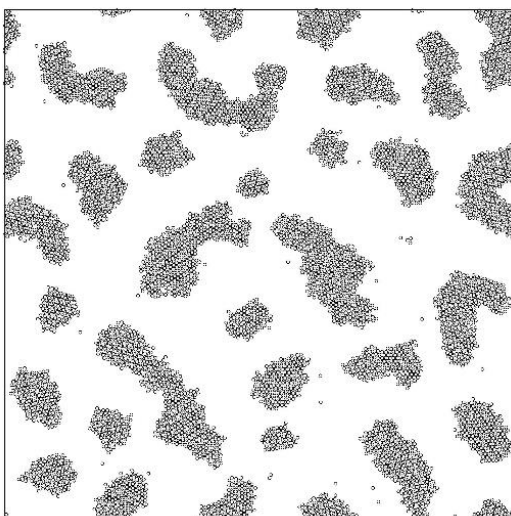
**Σχ. 95 - Γεωμετρία  $T^*=0.5$ ,  $V_f=0.15$**



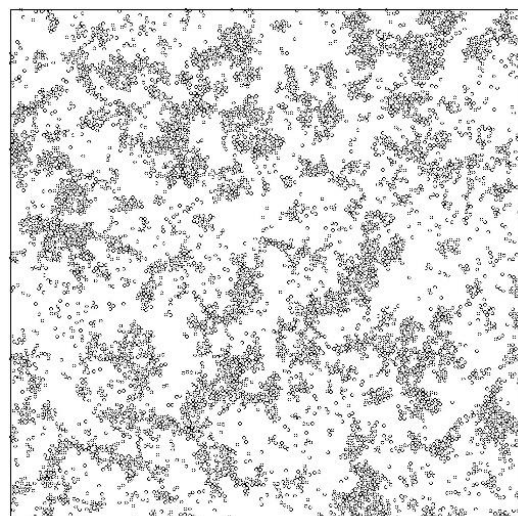
**Σχ. 96 - Γεωμετρία  $T^*=0.7$ ,  $V_f=0.15$**



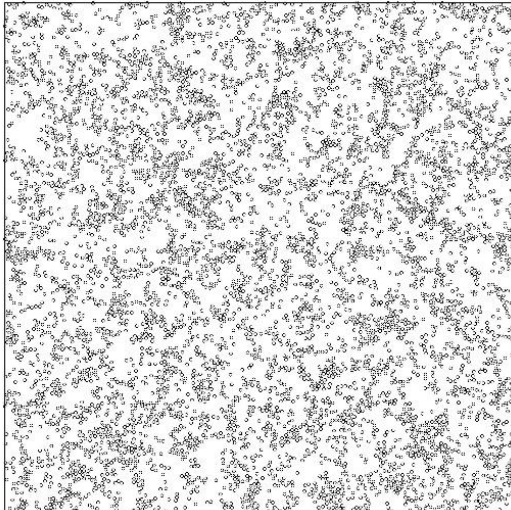
**Σχ. 97 - Γεωμετρία  $T^*=1.0$ ,  $V_f=0.15$**



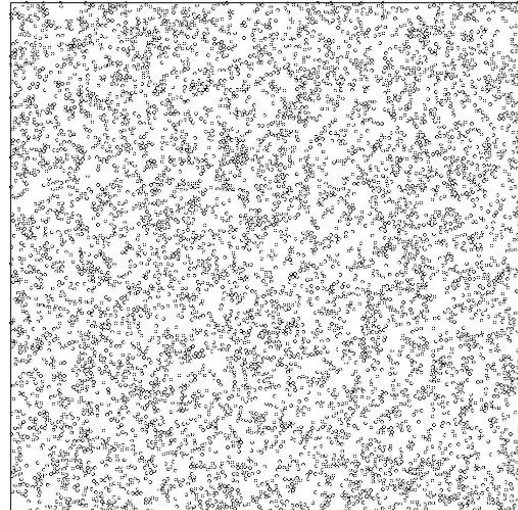
**Σχ. 98 - Γεωμετρία  $T^*=0.3$ ,  $V_f=0.175$**



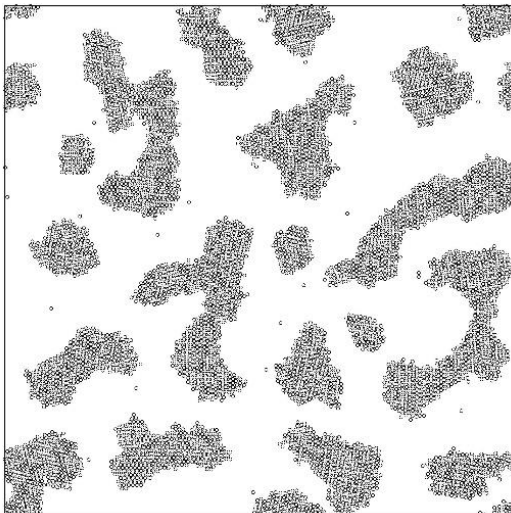
**Σχ. 99 - Γεωμετρία  $T^*=0.5$ ,  $V_f=0.175$**



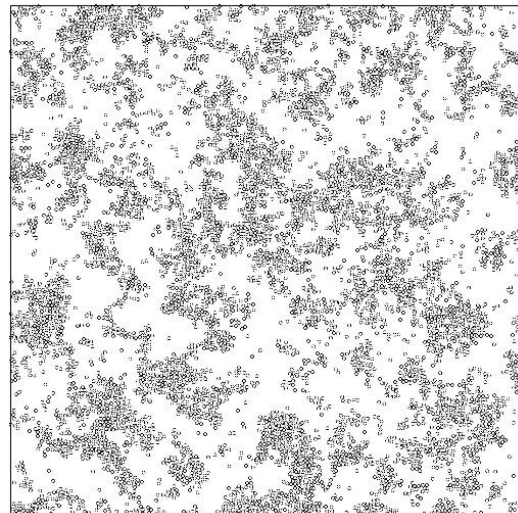
**Σχ. 100 - Γεωμετρία  $T^*=0.7$ ,  $V_f=0.175$**



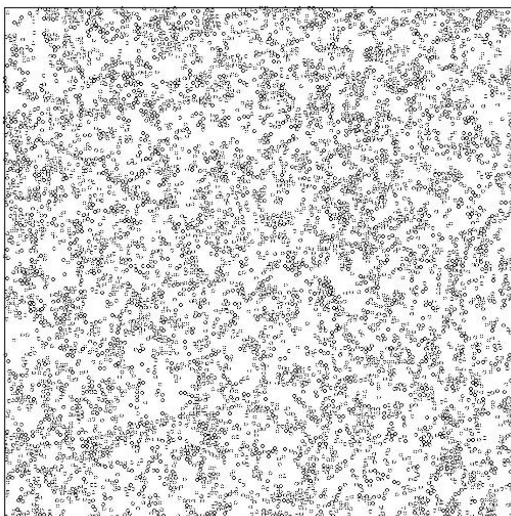
**Σχ. 101 - Γεωμετρία  $T^*=1.0$ ,  $V_f=0.175$**



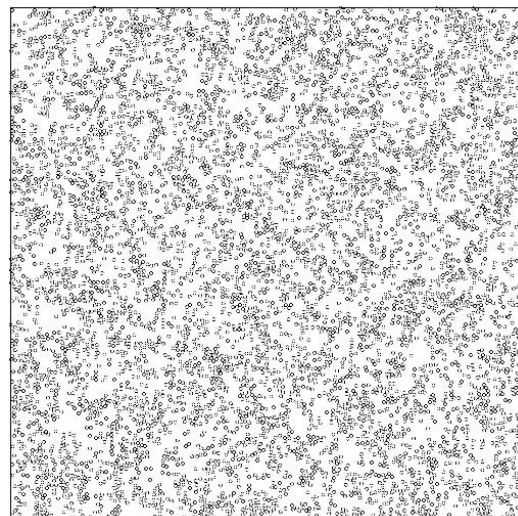
**Σχ. 102 - Γεωμετρία  $T^*=0.3$ ,  $V_f=0.2$**



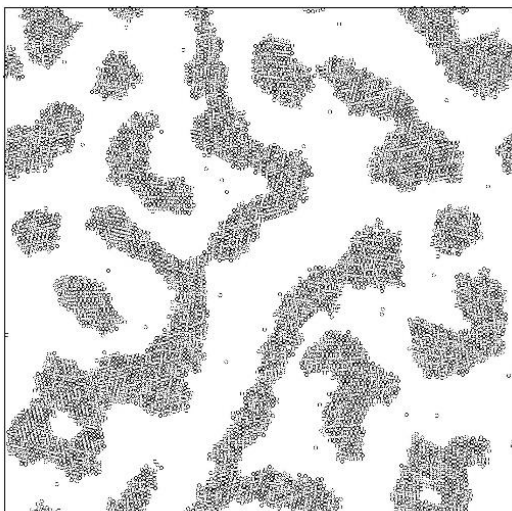
**Σχ. 103 - Γεωμετρία  $T^*=0.5$ ,  $V_f=0.2$**



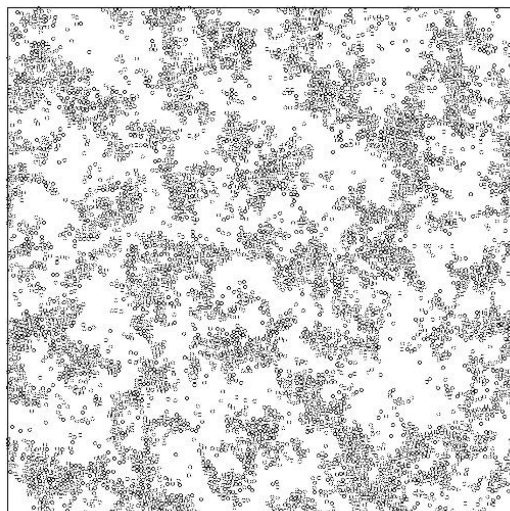
**Σχ. 104 - Γεωμετρία  $T^*=0.7$ ,  $V_f=0.2$**



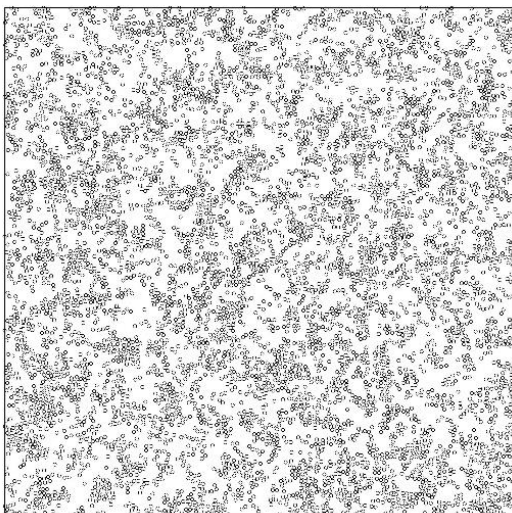
**Σχ. 105 - Γεωμετρία  $T^*=1.0$ ,  $V_f=0.2$**



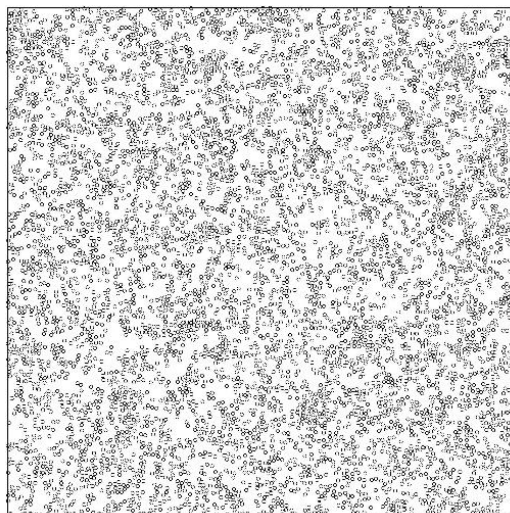
**Σχ. 106 - Γεωμετρία  $T^*=0.3$ ,  $V_f=0.225$**



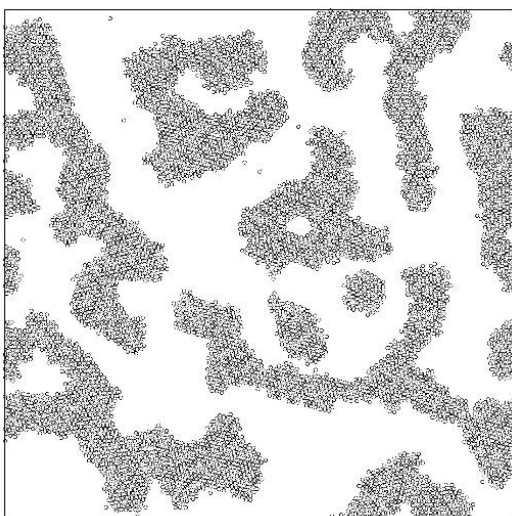
**Σχ. 107 - Γεωμετρία  $T^*=0.5$ ,  $V_f=0.225$**



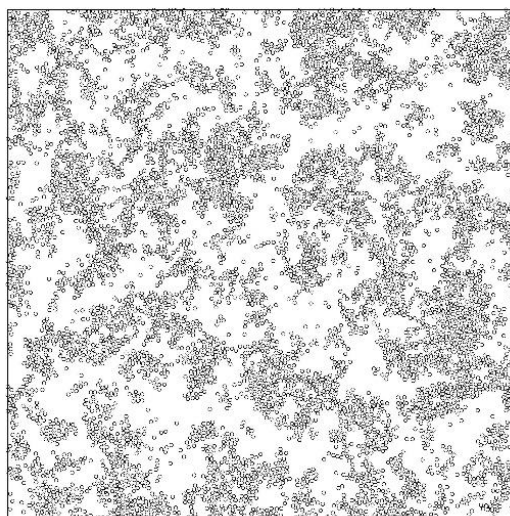
**Σχ. 108 - Γεωμετρία  $T^*=0.7$ ,  $V_f=0.225$**



**Σχ. 109 - Γεωμετρία  $T^*=1.0$ ,  $V_f=0.225$**

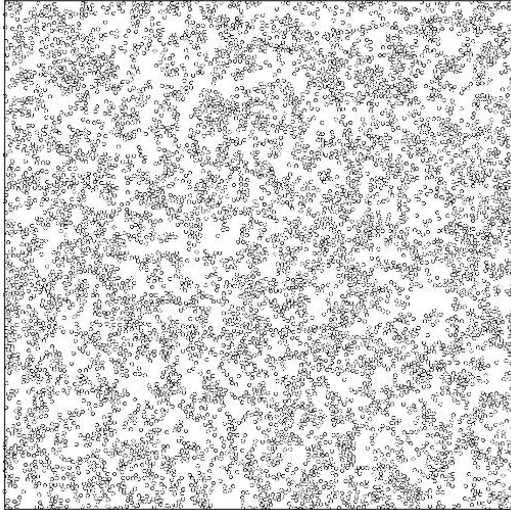


**Σχ. 110 - Γεωμετρία  $T^*=0.3$ ,  $V_f=0.25$**

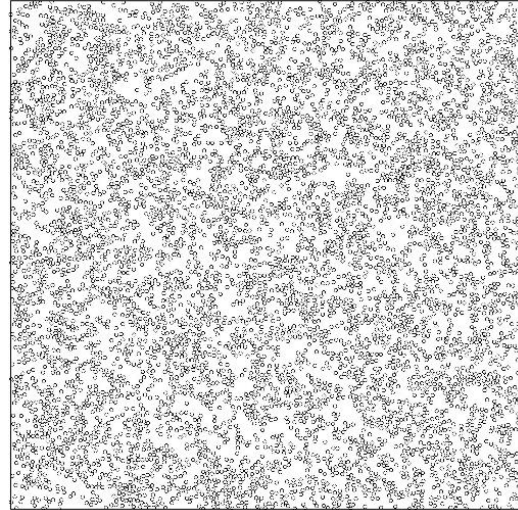


**Σχ. 111 - Γεωμετρία  $T^*=0.5$ ,  $V_f=0.25$**

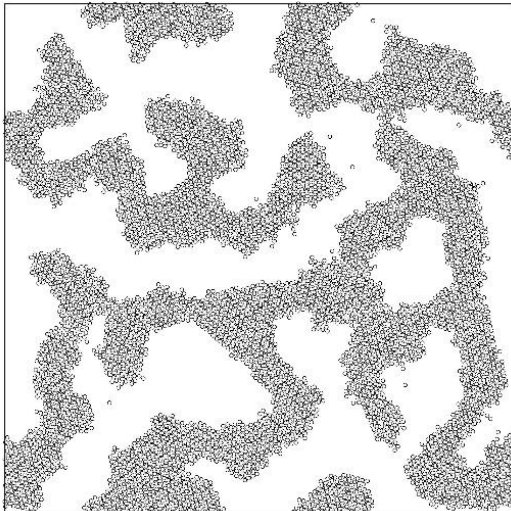




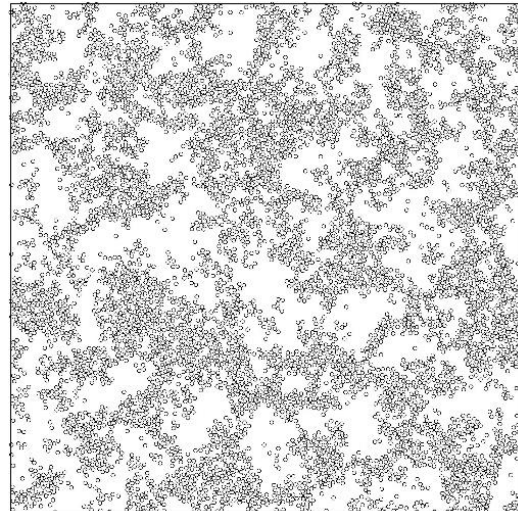
**Σχ. 112 - Γεωμετρία  $T^*=0.7$ ,  $V_f=0.25$**



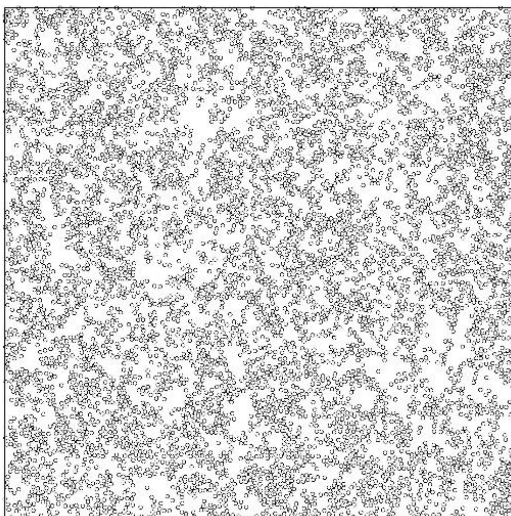
**Σχ. 113 - Γεωμετρία  $T^*=1.0$ ,  $V_f=0.25$**



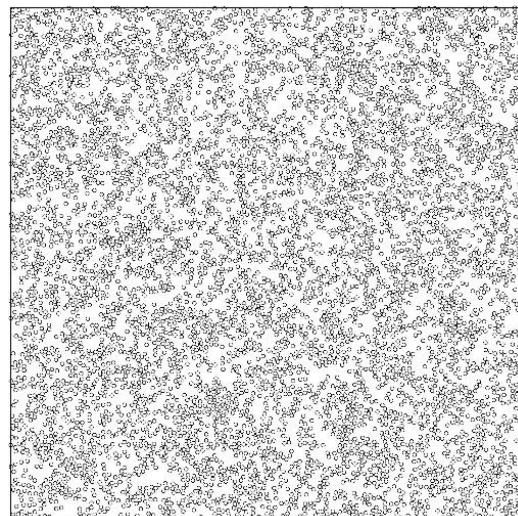
**Σχ. 114 - Γεωμετρία  $T^*=0.3$ ,  $V_f=0.275$**



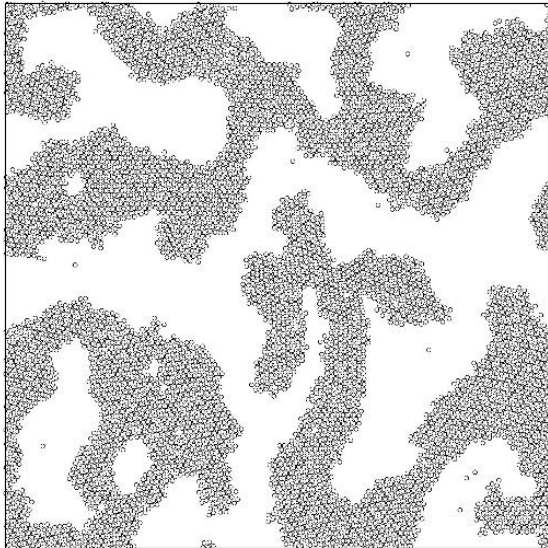
**Σχ. 115 - Γεωμετρία  $T^*=0.5$ ,  $V_f=0.275$**



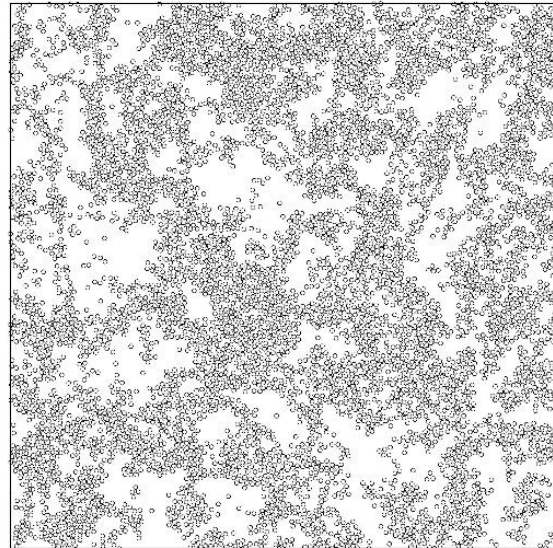
**Σχ. 116 - Γεωμετρία  $T^*=0.7$ ,  $V_f=0.275$**



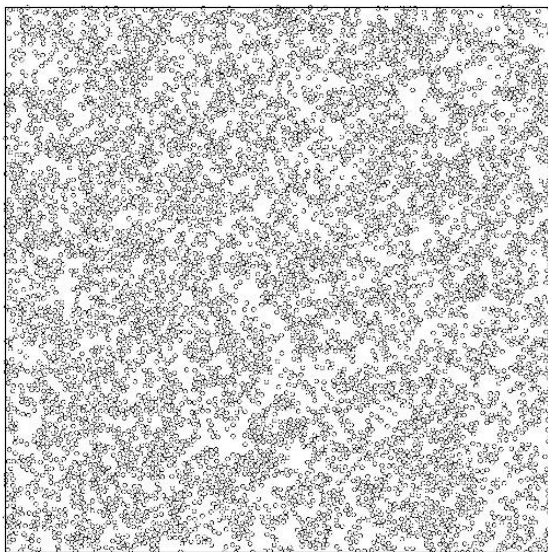
**Σχ. 117 - Γεωμετρία  $T^*=1.0$ ,  $V_f=0.275$**



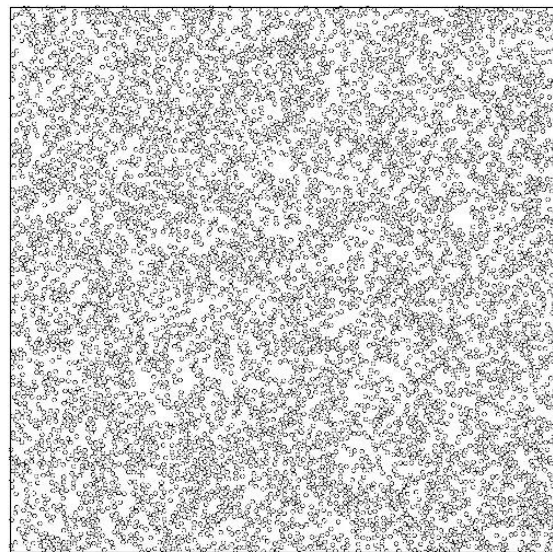
**Σχ. 118 - Γεωμετρία  $T^*=0.3$ ,  $V_f=0.3$**



**Σχ. 119 - Γεωμετρία  $T^*=0.5$ ,  $V_f=0.3$**



**Σχ. 120 - Γεωμετρία  $T^*=0.7$ ,  $V_f=0.3$**



**Σχ. 121 - Γεωμετρία  $T^*=1.0$ ,  $V_f=0.3$**

## **Παράρτημα Γ.      Συναρτήσεις MATLAB**

Για την αλγοριθμική επίλυση της χωρικής κατανομής και τον προσδιορισμό της  $g_2(r)$  χρησιμοποιήθηκαν τρεις συναρτήσεις και ένα επιπρόσθετο αρχείο. Στο επιπρόσθετο αυτό αρχείο είναι αποθηκευμένες οι συντεταγμένες των σημείων υπό τη μορφή πίνακα

διαστάσεων  $2 \times N$ , όπως έχουν παραχθεί στο πέρας της προσομοίωσης μοριακής δυναμικής, αλλά και τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του κελιού, δηλαδή το ύψος και το μήκος του. Εφόσον έχουν δηλωθεί τα συγκεκριμένα δεδομένα επικαλούνται οι τρεις συναρτήσεις, οι οποίες αναπαρίστανται παρακάτω.

```

1 function gR = radialDistribution2D(gR, coords, L, H, NumOfBins)
2 % Ο υπολογισμός απαιτεί κάποιες μεταβλητές εισόδου
3 % Ως gR ορίζεται μία άδεια μεταβλητή στην μορφή struct
4 % Ως coords ορίζεται ένας πίνακας 2xN που περιέχει τις x, y συντεταγμένες.
5 % L, H το μήκος και ύψος του κελιού αντίστοιχα
6 % NumOfBins αριθμός κάδων για το ιστόγραμμα
7
8     gR.count = 0;
9     gR.range = [0 0.4*L];
10    gR.increment = 0.4*L/NumOfBins;
11    gR.outFreq = 1000;
12    gR.saveFileName = 'radialDist.dat';
13    % Διάσταση πίνακα σύμφωνα με τον αριθμό των σωματιδίων
14    nPart = size(coords,2);
15    % Υπολογισμός της κατανομής των αποστάσεων
16    for partA = 1:(nPart-1)
17        for partB = (partA+1):nPart
18            dr = coords(:,partA) - coords(:,partB);
19            % Εισαγωγή της συνάρτησης distPBC2D
20            dr = distPBC2D(dr, Lx, Ly);
21            r = sqrt(sum(dot(dr, dr)));
22            % Έλεγχος εάν η συγκεκριμένη απόσταση ανήκει στο εύρος που εξετάζεται
23            if (r < 0.3*L)
24                % Εφόσον ανήκει τοποθετείται στο ιστόγραμμα σύμφωνα με την συνάρτηση histogr
25                gR = histogr(gR, r);
26            end
27        end
28    end
29
30    % Κάθε κάδος του ιστογράμματος θα πρέπει να κανονικοποιηθεί
31    nBins = size(gR.values,2);
32    rho = nPart/(Lx*Ly); % Ολική πυκνότητα σωματιδίων στο υπολογιστικό κελί
33    for bin = 1:nBins
34        % rVal is the number of cells in some layer of area
35        % da(r)=2 pi * r * dr, a distance r from the central cell
36        % Ως rVal ορίζονται οι τιμές στο πεδίο r
37        rVal = gR.values(bin);
38        % Ως next_rVal ορίζεται η διαδοχική απόσταση στον εκάστοτε δακτύλιο
39        next_rVal = gR.increment + rVal;
40        % Υπολογισμός επιφάνειας δακτυλίου
41        AreaBin = pi*next_rVal^2 - pi*rVal^2;
42        % Calculate the number of particles expected in this bin in
43        % the ideal case
44        % Υπολογισμός αναμενόμενης τιμής σωματιδίων σύμφωνα με την θεωρία του ιδανικού αερίου
45        nIdeal = AreaBin*rho;
46        % Κανονικοποίηση της g(r)
47        gR.histo(bin) = gR.histo(bin) / nIdeal;
48    end
49    % Κανονικοποίηση της g(r) σύμφωνα με τον υπολογισμό κατά ζεύγη
50    gR.histo = 2*gR.histo/(nPart-1);
51 end

```

Σχ. 122 - Συνάρτηση για τον υπολογισμό της  $g_2(r)$

Η συνάρτηση “distPBC2D” επικαλείται κατά τον υπολογισμό των σχετικών αποστάσεων των σημείων ώστε να εφαρμοστούν οι περιοδικές οριακές συνθήκες.

```

1 function vec = distPBC2D(vec,L,H)
2 % Ως vec ορίζεται το διάνυσμα της απόστασης 2 σωματιδίων
3 % Στο διάνυσμα vec εφαρμόζουμε τις περιοδικές οριακές συνθήκες
4 half_L = L/2.0;
5 half_H = H/2.0;
6 % Η απόσταση μεταξύ 2 σωματιδίων θα πρέπει να ανήκει στο διάστημα -half_L -> half_L και -half_H -> half_H
7 % Συνθήκη περιοδικότητας ως προς την x-διεύθυνση
8 if vec(1) > half_L
9     vec(1) = vec(1) - L;
10 elseif vec(1) < -half_L
11     vec(1) = vec(1) + L;
12 end
13 % Συνθήκη περιοδικότητας ως προς την y-διεύθυνση
14 if vec(2) > half_H
15     vec(2) = vec(2) - H;
16 elseif vec(2) < -half_H
17     vec(2) = vec(2) + H;
18 end
19 end

```

**Σχ. 123 - Συνάρτηση για τον ορισμό των περιοδικών οριακών συνθηκών**

Η συνάρτηση “*histogr*” χρησιμοποιείται για την δημιουργία ενός ιστογράμματος σύμφωνα με τις επιλογές του χρήστη, παρακάμπτοντας τις προκαθορισμένες επιλογές του MATLAB.

```

1 function h = histogr(h,data)
2 % Η μεταβλητή h είναι τύπου struct και εμπεριέχει τις απαραίτητες πληροφορίες για την δημιουργία του ιστογράμματος
3 % Αρχικοποίηση ιστογράμματος
4 if (h.count == 0)
5     % Ο αριθμός των κάδων υπολογίζεται μέσω του εύρους και του βήματος που ορίστηκαν
6     nBins = ceil((h.range(2)-h.range(1))/h.increment);
7     % Adjust the histogram's range
8     % Επαναπροσδιορισμός του εύρους του ιστογράμματος σύμφωνα με τον αριθμό των κάδων
9     h.range(2) = h.range(1) + nBins * h.increment;
10    % Οι τιμές του ιστογράμματος ορίζονται αρχικά μηδέν
11    h.histo = zeros(1,nBins);
12    % Κάθε τιμή θα πρέπει να βρίσκεται στο κέντρο του αντίστοιχου κάδου
13    h.values = 1:nBins;
14    h.values = h.range(1) + h.increment*(h.values-0.5);
15 end
16 % Συνθήκη ταξινόμησης της απόστασης στον σωστό κάδο
17 if (data > h.range(1) && data <= h.range(2)) % Έλεγχος εάν η τιμή ανήκει στο εύρος που έχει οριστεί
18     % Δείκτης του κάδου
19     binIndex = ceil((data-h.range(1))/h.increment);
20     % Για κάθε τιμή που εισάγεται προστίθεται +1 στον κάδο
21     h.histo(binIndex) = h.histo(binIndex)+1;
22     % Ομοίως και στη μεταβλητή count
23     h.count = h.count+1;
24 else
25     % Μήνυμα σφάλματος
26     disp(CHAR('histogram- Value out of range:',num2str(data)));
27     return
28 end
29 % Αποθήκευση του ιστογράμματος στη μεταβλητή h υπο τη μορφή struct
30 if (mod(h.count,h.outFreq) == 0)
31     save(h.saveFileName,'-struct','h');
32 end
33 end

```

**Σχ. 124 - Συνάρτηση για τη δημιουργία ιστογράμματος**

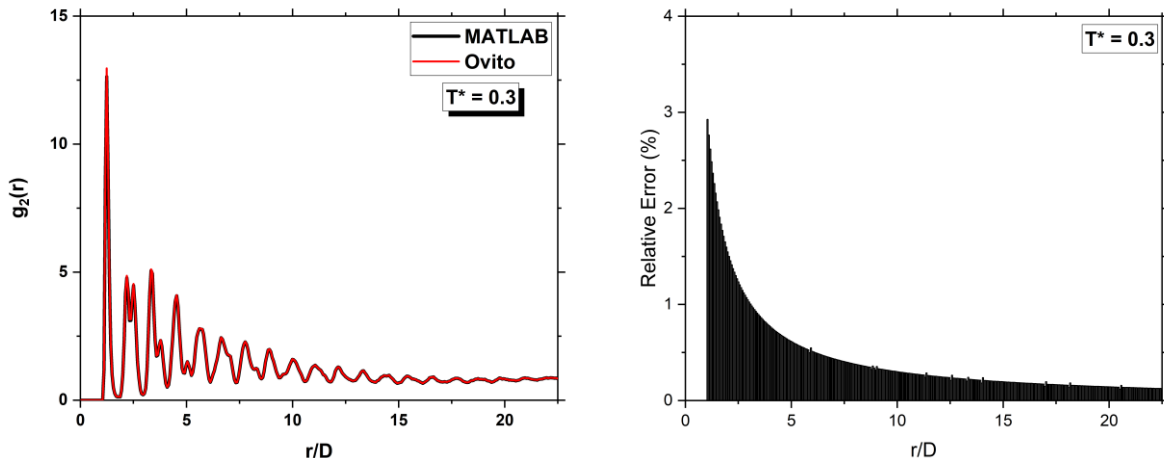
## Παράρτημα Δ. Ακρίβεια επίλυσης MATLAB

Η οπτική αναπαράσταση των γεωμετρικών πραγματοποιήθηκε με τη χρήση του λογισμικού Onito. Πρόκειται για ένα open-source λογισμό οπτικοποίησης και ανάλυσης δεδομένων μοριακής δυναμικής. Παράλληλα προσφέρεται και η δυνατότητα υπολογισμού της  $g_2(r)$ . Με τον τρόπο αυτό εξετάστηκε η ακρίβεια του αλγορίθμου επίλυσης στο MATLAB

αντιπαραβάλλοντας αποτελέσματα. Το σημείο αυτό τονίζεται καθώς το Ovito αναλύει μεμονωμένα αρχεία. Αντιθέτως στο MATLAB επιλύθηκαν αυτοματοποιημένα πολλαπλές γεωμετρίες. Στην περίπτωση που τα αποτελέσματα θεωρούνταν ανακριβή θα αυξανόταν σημαντικά το υπολογιστικό κόστος και θα περιοριζόταν ο συνολικός αριθμός γεωμετριών που εξετάστηκαν. Ο συγκεκριμένος έλεγχος πραγματοποιήθηκε για γεωμετρίες τόσο υπό την παρουσία συσσωματωμάτων όσο και υπό τυχαία διάταξη των σωματιδίων, δηλαδή σε όλο το εύρος της  $T^*$ . Λαμβάνοντας ως απόλυτη την τιμή του Ovito και ως προσεγγιστική την λύση του MATLAB ορίζουμε ως ποσοστιαίο σχετικό σφάλμα:

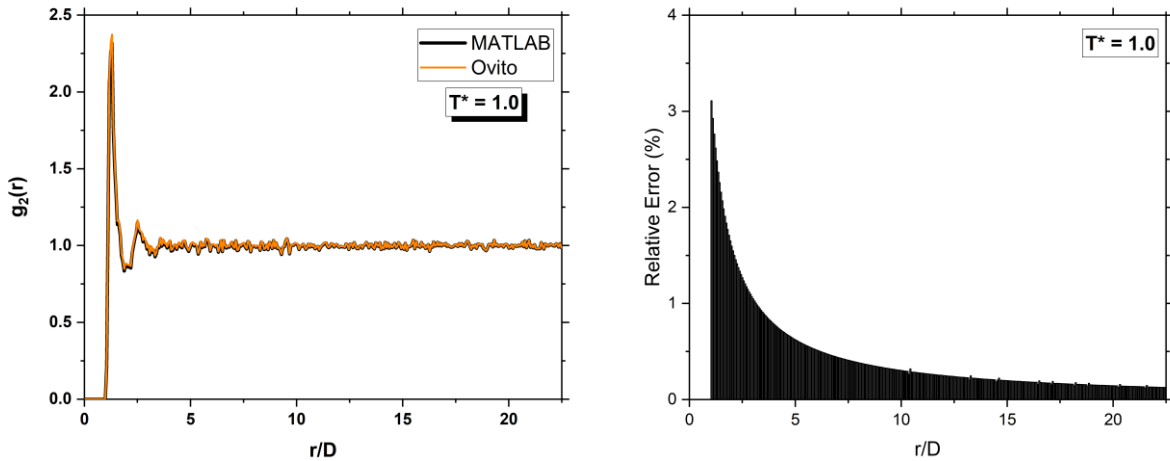
$$Relative\ error = \left| \frac{g_2(r)_{OVITO} - g_2(r)_{MATLAB}}{g_2(r)_{OVITO}} \right| \times 100\%$$

Παρατηρήθηκε πως το σχετικό σφάλμα μεγιστοποιείται στην ανώτατη τιμή της  $g_2(r)$ , με το σφάλμα ωστόσο να υπολογίζεται περίπου στο 3% το οποίο θεωρείται αμελητέο. Οι δύο προσεγγίσεις ταυτίζονται σε μεγάλο βαθμό όπως φαίνεται και στα παρακάτω σχήματα.



**Σχ. 125 - (Αριστερά) Συγκριτικό διάγραμμα  $g_2(r)$  σε κοινή γεωμετρία ( $N=6400$ , κλάσμα όγκου  $0.1$ ,  $T^*=0.3$ ). (Δεξιά) ραβδόγραμμα σχετικού σφάλματος**

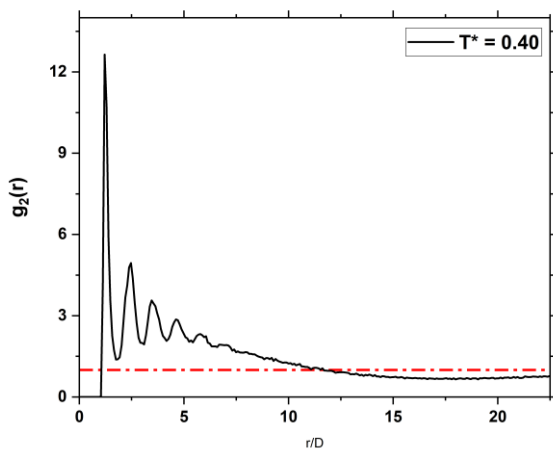
Όπως φαίνεται και στα ραβδογράμματα το σχετικό σφάλμα προσεγγίζει ασυμπτωματικά το μηδέν αρκετά γρήγορα.



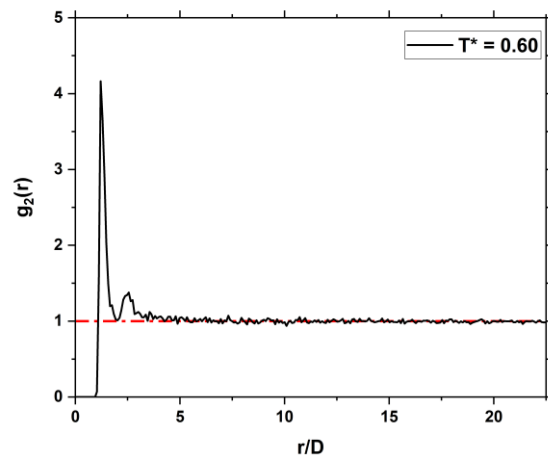
**Σχ. 126 - (Αριστερά) Συγκριτικό διάγραμμα  $g_2(r)$  σε κοινή γεωμετρία ( $N=6400$ , κλάσμα όγκου  $0.1, T^*=1$ ). (Δεξιά) ραβδόγραμμα σχετικού σφάλματος**

Αξίζει να σημειωθεί πως η ακρίβεια των αποτελεσμάτων επηρεάζεται από την διακριτοποίηση του πεδίου  $r$  στο αντίστοιχο  $r_{cut-off}$  που επιλέγεται. Ως γενικός κανόνας προτείνεται ο αριθμός των κάδων (bins) του ιστογράμματος της  $g_2(r)$  να είναι αυξάνεται κατά 200 για κάθε αύξηση της cut-off radius όταν αυτή αντιστοιχεί στο 10% του μεγέθους του υπολογιστικού κελιού. Στην παρούσα διπλωματική οι υπολογισμοί πραγματοποιήθηκαν για έναν αριθμό της τάξεως των 1000 κάδων για να επιτευχθεί μεγαλύτερη ακρίβεια.

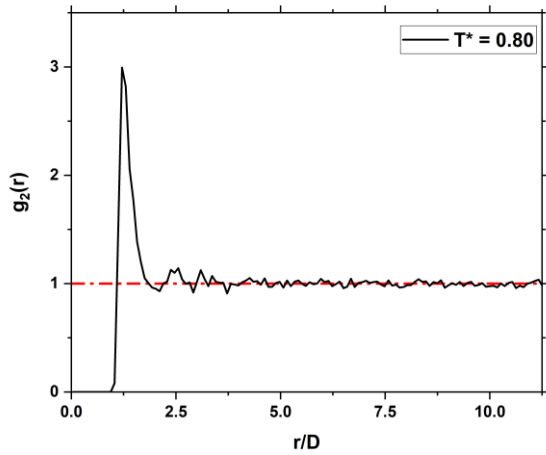
## Παράρτημα Ε. Διαγράμματα $g_2(r)$



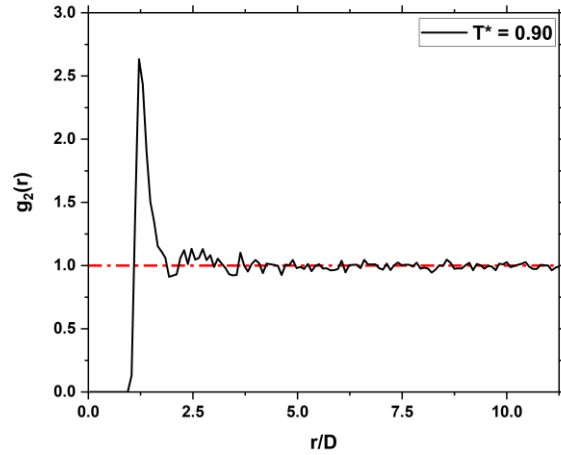
**Σχ. 127 - Διάγραμμα  $g_2(r)$  για  $T^*=0.4$ , κλάσμα όγκου  $0.1$  και  $r_{cut-off}=22.5D=0.1L$**



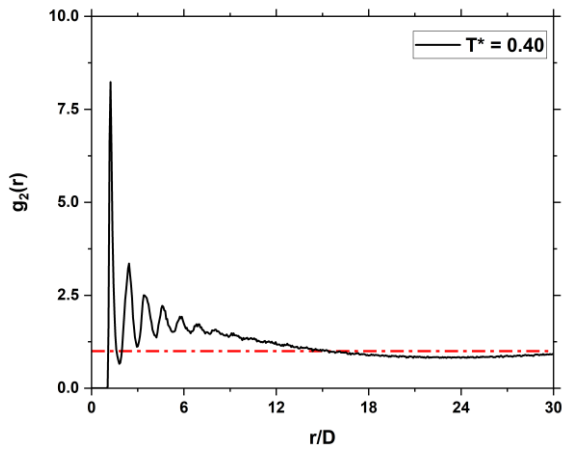
**Σχ. 128 - Διάγραμμα  $g_2(r)$  για  $T^*=0.6$ , κλάσμα όγκου  $0.1$  και  $r_{cut-off}=22.5D=0.1L$**



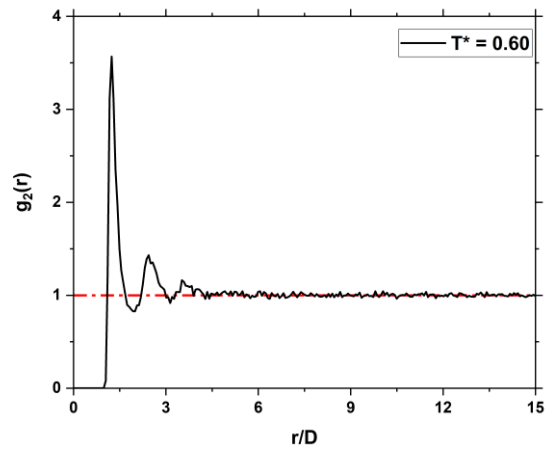
**Σχ. 129 - Διάγραμμα  $g_2(r)$  για  $T^*=0.8$ , κλάσμα όγκου 0.1 και  $r_{cut-off}=11.25D=0.05L$**



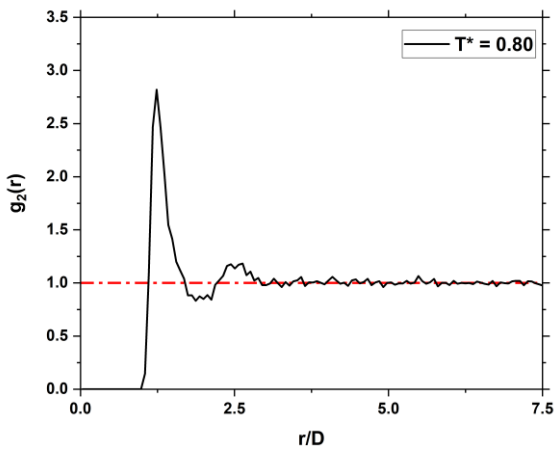
**Σχ. 130 - Διάγραμμα  $g_2(r)$  για  $T^*=0.9$ , κλάσμα όγκου 0.1 και  $r_{cut-off}=11.25D=0.05L$**



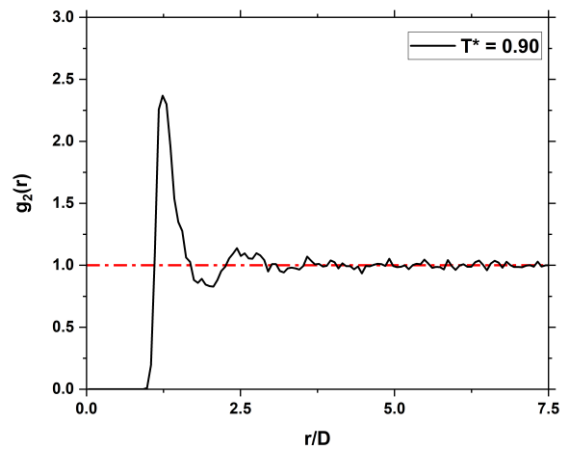
**Σχ. 131 - Διάγραμμα  $g_2(r)$  για  $T^*=0.4$ , κλάσμα όγκου 0.2 και  $r_{cut-off}=30D=0.2L$**



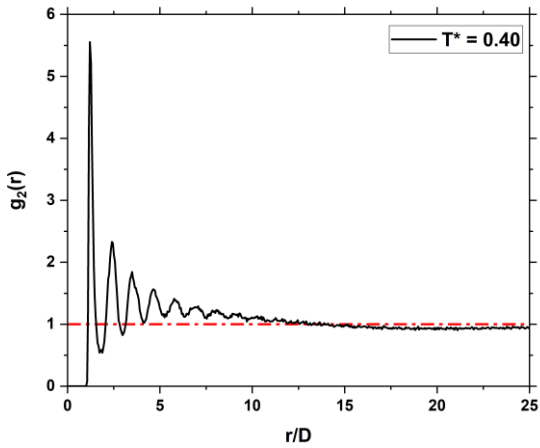
**Σχ. 132 - Διάγραμμα  $g_2(r)$  για  $T^*=0.6$ , κλάσμα όγκου 0.2 και  $r_{cut-off}=15D=0.1L$**



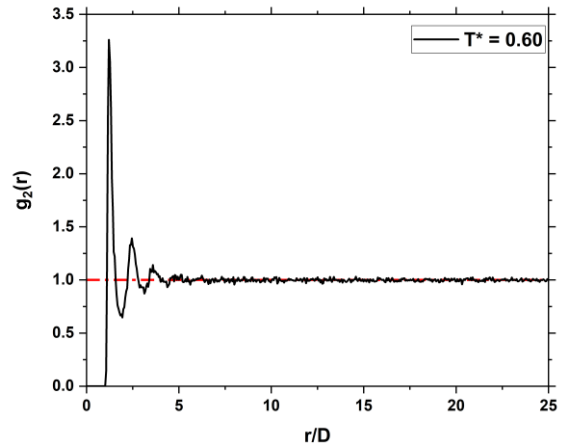
**Σχ. 133 - Διάγραμμα  $g_2(r)$  για  $T^*=0.8$ , κλάσμα όγκου 0.2 και  $r_{cut-off}=7.5D=0.05L$**



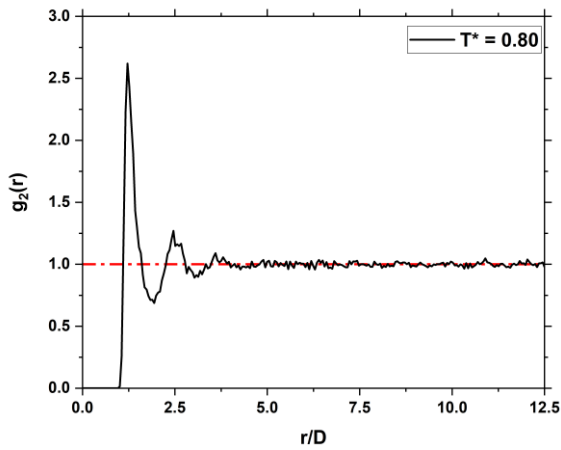
**Σχ. 134 - Διάγραμμα  $g_2(r)$  για  $T^*=0.9$ , κλάσμα όγκου 0.2 και  $r_{cut-off}=7.5D=0.05L$**



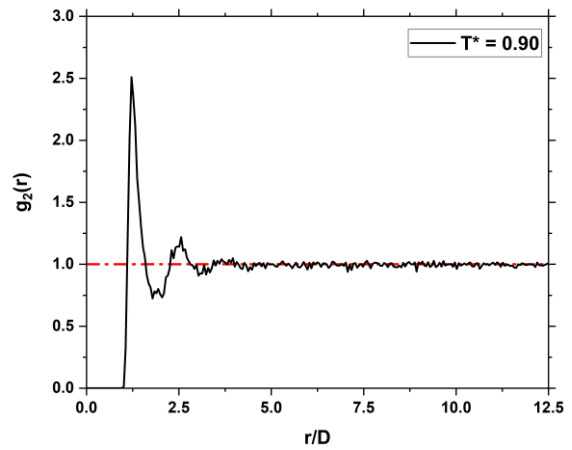
**Σχ. 135 - Διάγραμμα  $g_2(r)$  για  $T^*=0.4$ , κλάσμα όγκου 0.3 και  $r_{cut-off}=25D=0.2L$**



**Σχ. 136 - Διάγραμμα  $g_2(r)$  για  $T^*=0.6$ , κλάσμα όγκου 0.3 και  $r_{cut-off}=25D=0.2L$**



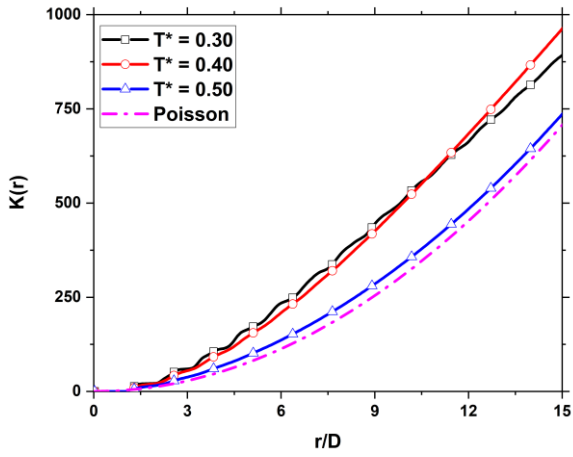
**Σχ. 137 - Διάγραμμα  $g_2(r)$  για  $T^*=0.8$ , κλάσμα όγκου 0.3 και  $r_{cut-off}=12.5D=0.1L$**



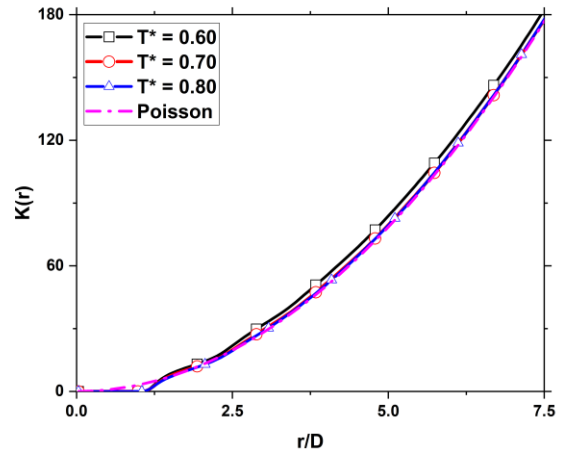
**Σχ. 138 - Διάγραμμα  $g_2(r)$  για  $T^*=0.9$ , κλάσμα όγκου 0.3 και  $r_{cut-off}=12.5D=0.2L$**

## Παράρτημα ΣΤ. Διαγράμματα $K(r)$ και $L(r)$

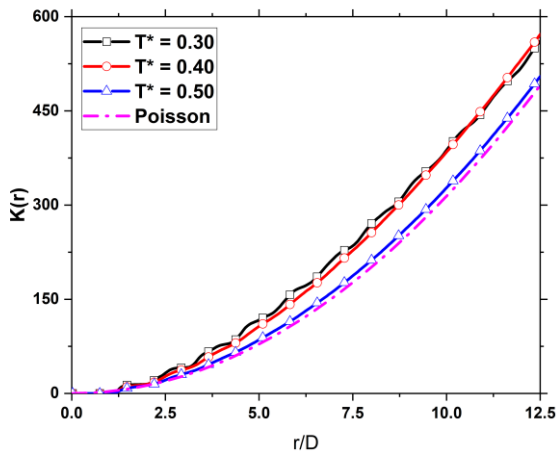




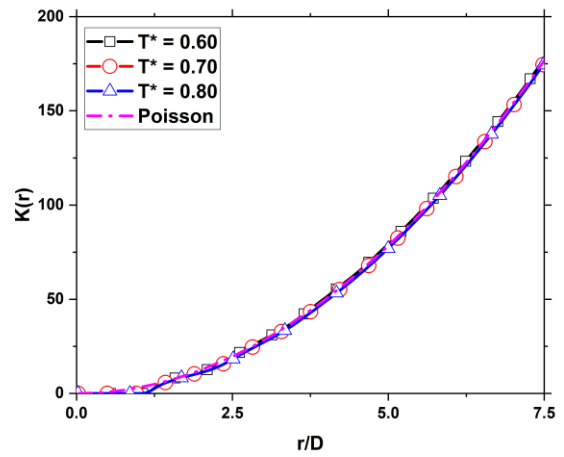
Σχ. 139 - Διάγραμμα  $K(r)$  για κλάσμα όγκου 0.2 και  $r_{cut-off}=15D=0.1L$



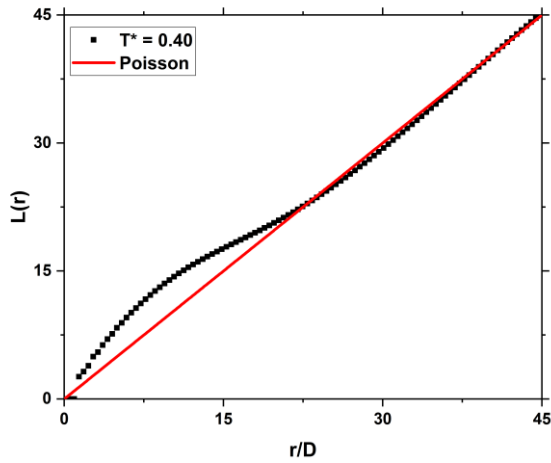
Σχ. 140 - Διάγραμμα  $K(r)$  για κλάσμα όγκου 0.2 και  $r_{cut-off}=7.5D=0.05L$



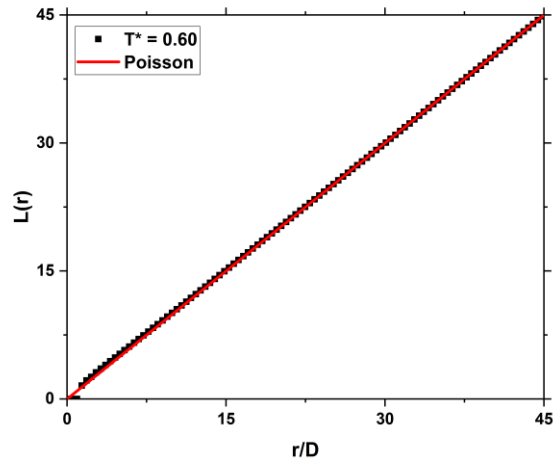
Σχ. 141 - Διάγραμμα  $K(r)$  για κλάσμα όγκου 0.3 και  $r_{cut-off}=12.5D=0.1L$



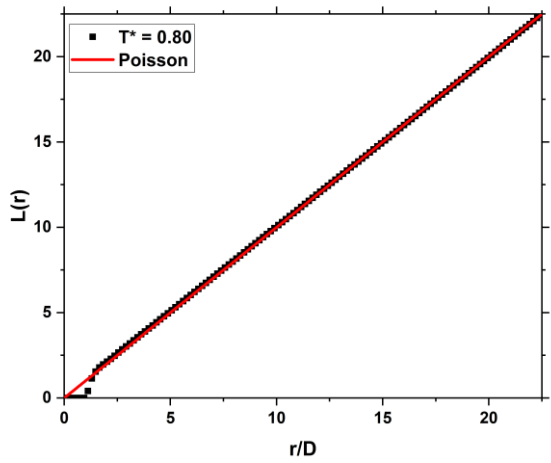
Σχ. 142 - Διάγραμμα  $K(r)$  για κλάσμα όγκου 0.3 και  $r_{cut-off}=7.5D=0.06L$



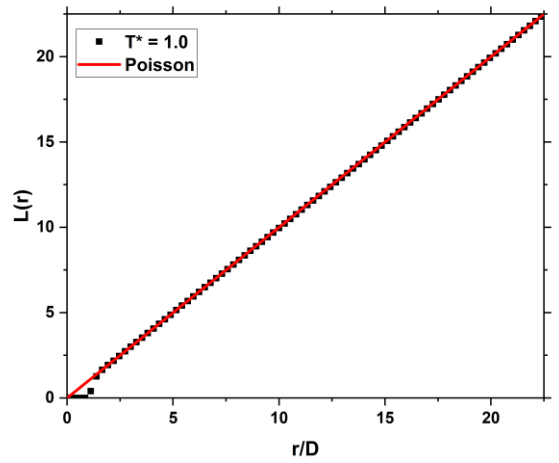
Σχ. 143 - Διάγραμμα  $L(r)$  για κλάσμα όγκου 0.1 και  $r_{cut-off}=45D=0.2L$  ( $T^*=0.4$ )



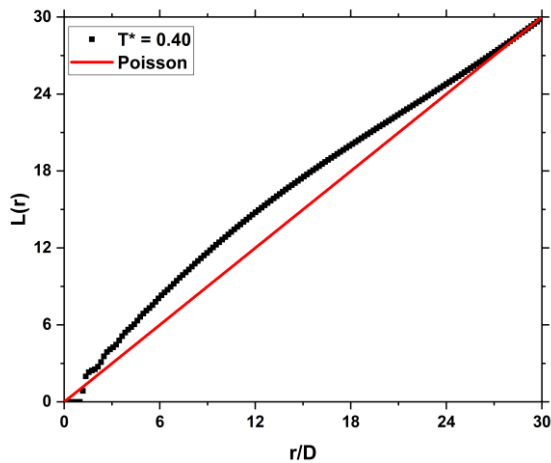
Σχ. 144 - Διάγραμμα  $L(r)$  για κλάσμα όγκου 0.1 και  $r_{cut-off}=45D=0.2L$  ( $T^*=0.6$ )



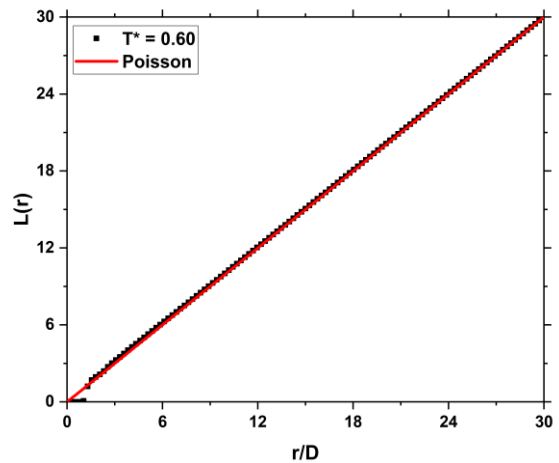
Σχ. 145 - Διάγραμμα  $L(r)$  για κλάσμα όγκου 0.1 και  $r_{cut-off}=22.5D=0.1L$  ( $T^*=0.8$ )



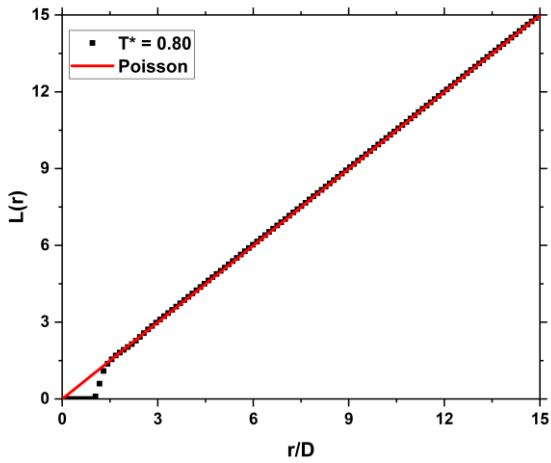
Σχ. 146 - Διάγραμμα  $L(r)$  για κλάσμα όγκου 0.1 και  $r_{cut-off}=22.5D=0.1L$  ( $T^*=1.0$ )



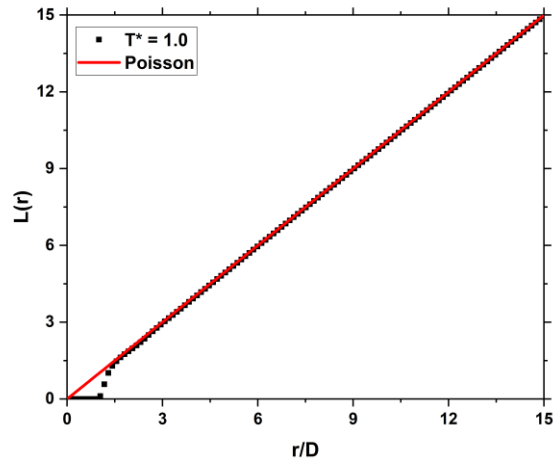
Σχ. 147 - Διάγραμμα  $L(r)$  για κλάσμα όγκου 0.2 και  $r_{cut-off}=30D=0.2L$  ( $T^*=0.4$ )



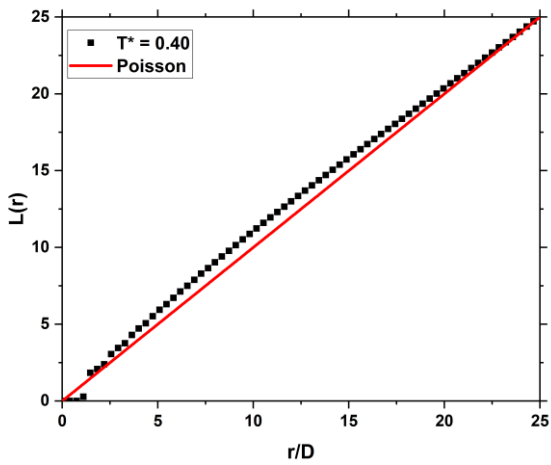
Σχ. 148 - Διάγραμμα  $L(r)$  για κλάσμα όγκου 0.2 και  $r_{cut-off}=30D=0.2L$  ( $T^*=0.6$ )



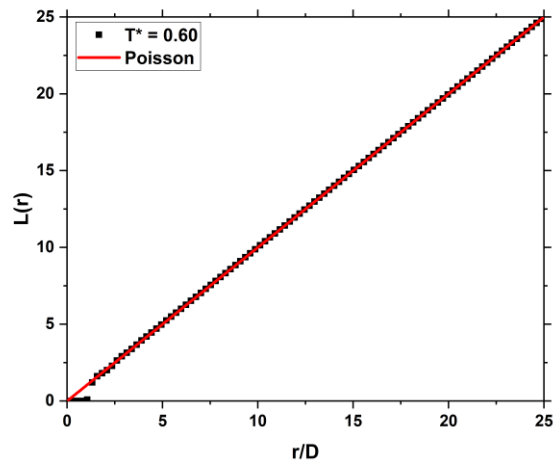
Σχ. 149 - Διάγραμμα  $L(r)$  για κλάσμα όγκου 0.2 και  $r_{cut-off}=15D=0.1L$  ( $T^*=0.8$ )



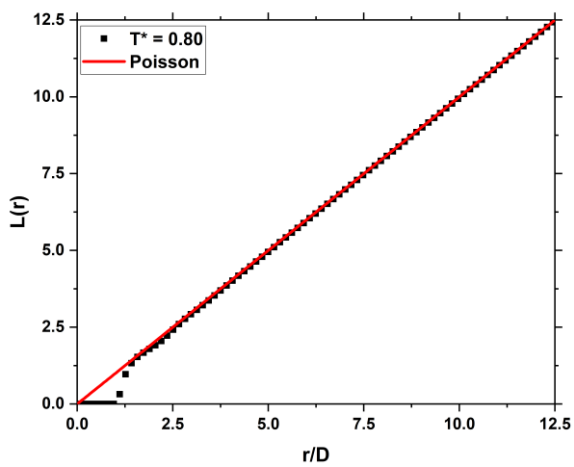
Σχ. 150 - Διάγραμμα  $L(r)$  για κλάσμα όγκου 0.2 και  $r_{cut-off}=15D=0.1L$  ( $T^*=1.0$ )



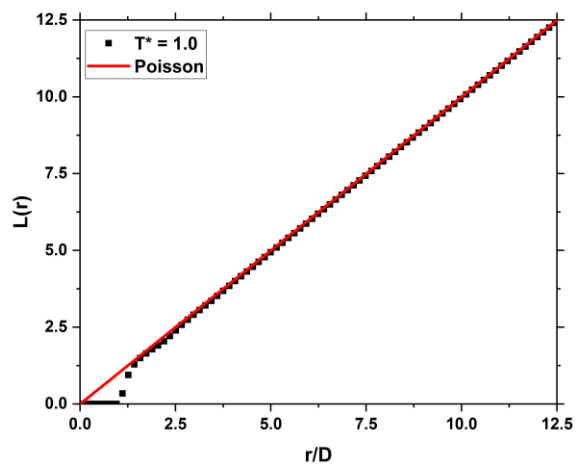
Σχ. 151 - Διάγραμμα  $L(r)$  για κλάσμα όγκου 0.3 και  $r_{cut-off}=25D=0.2L$  ( $T^*=0.4$ )



Σχ. 152 - Διάγραμμα  $L(r)$  για κλάσμα όγκου 0.3 και  $r_{cut-off}=25D=0.2L$  ( $T^*=0.6$ )

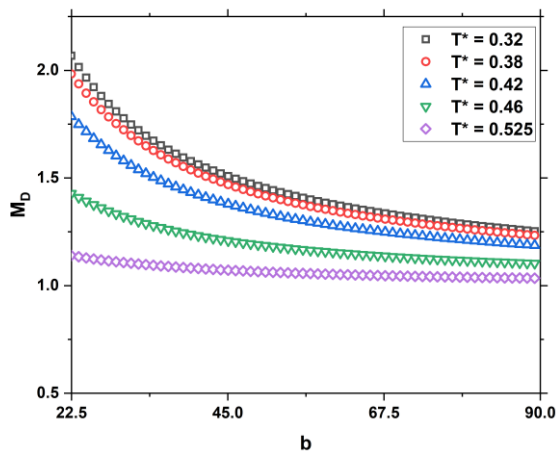


Σχ. 153 - Διάγραμμα  $L(r)$  για κλάσμα όγκου 0.3 και  $r_{cut-off}=12.5D=0.1L$  ( $T^*=0.8$ )

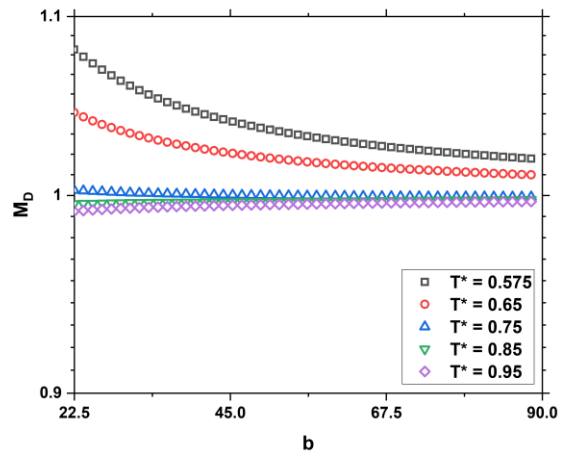


Σχ. 154 - Διάγραμμα  $L(r)$  για κλάσμα όγκου 0.2 και  $r_{cut-off}=12.5D=0.1L$  ( $T^*=1.0$ )

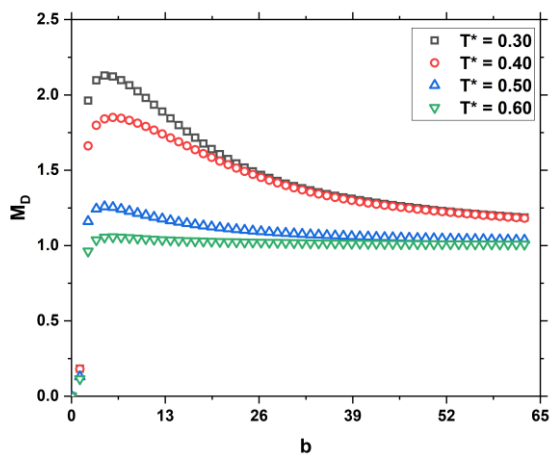
## Παράρτημα Ζ. Διαγράμματα $M_D$



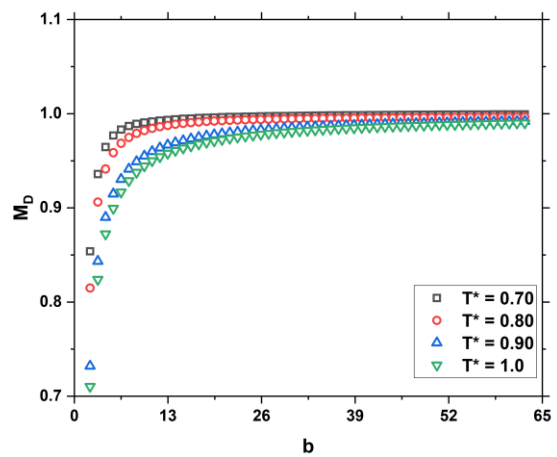
Σχ. 155 - Διάγραμμα  $M_D$  ως προς  $b=b(r)$ , για  $V_f=0.1$  και  $r_{cut-off}=90D=0.4L$  (περιοχή συσσωματωμάτων)



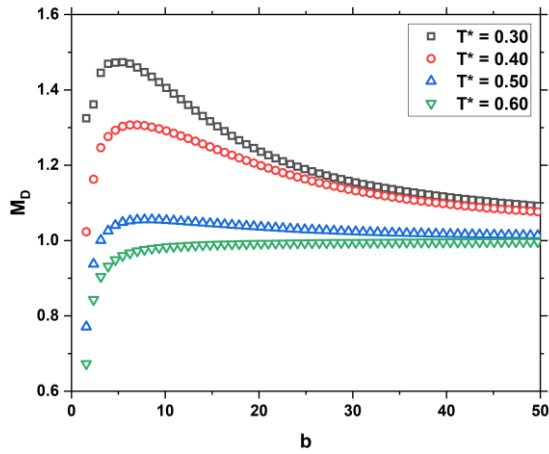
Σχ. 156 - Διάγραμμα  $M_D$  ως προς  $b=b(r)$ , για  $V_f=0.1$  και  $r_{cut-off}=90D=0.4L$  (περιοχή τυχαίας κατανομής)



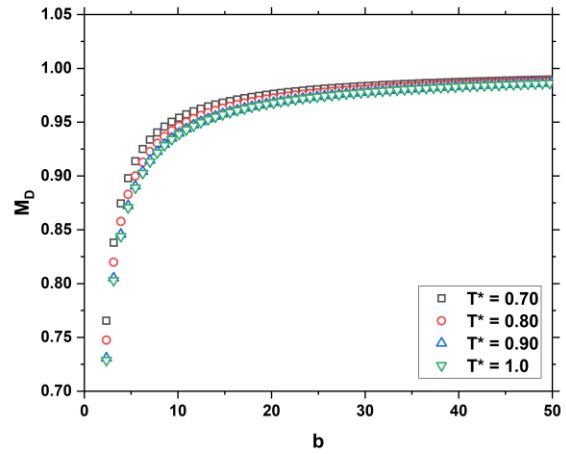
Σχ. 157 - Διάγραμμα  $M_D$  ως προς  $b=b(r)$ , για  $V_f=0.2$  και  $r_{cut-off}=65D=0.4L$  (περιοχή συσσωματωμάτων)



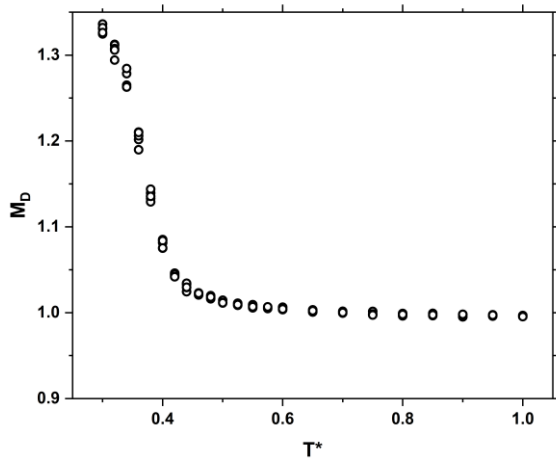
Σχ. 158 - Διάγραμμα  $M_D$  ως προς  $b=b(r)$ , για  $V_f=0.2$  και  $r_{cut-off}=65D=0.4L$  (περιοχή τυχαίας κατανομής)



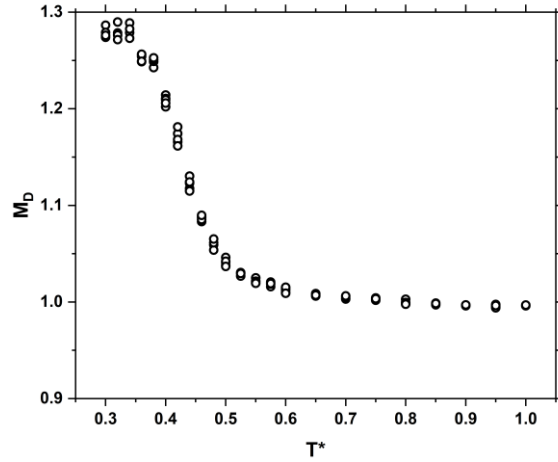
Σχ. 159 - Διάγραμμα  $M_D$  ως προς  $b=b(r)$ , για  $V_f=0.3$  και  $r_{cut-off}=50D=0.4L$  (περιοχή συσσωματωμάτων)



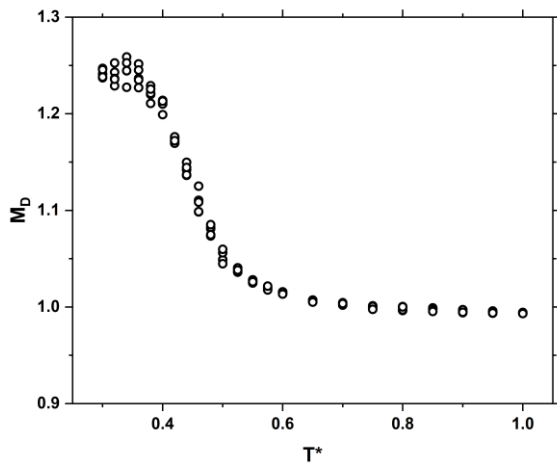
Σχ. 160- Διάγραμμα  $M_D$  ως προς  $b=b(r)$ , για  $V_f=0.3$  και  $r_{cut-off}=50D=0.4L$  (περιοχή τυχαίας κατανομής)



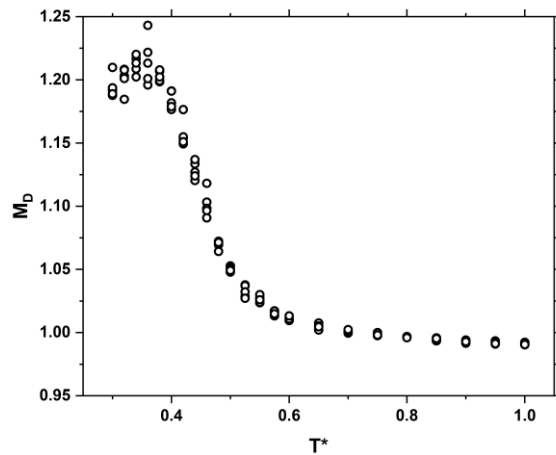
Σχ. 161 – Διάγραμμα  $M_D$  ως προς  $T^*$  για κλάσμα όγκου 0.025



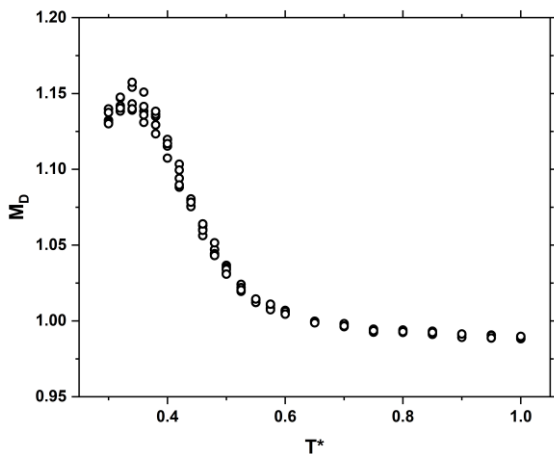
Σχ. 162 - Διάγραμμα  $M_D$  ως προς  $T^*$  για κλάσμα όγκου 0.075



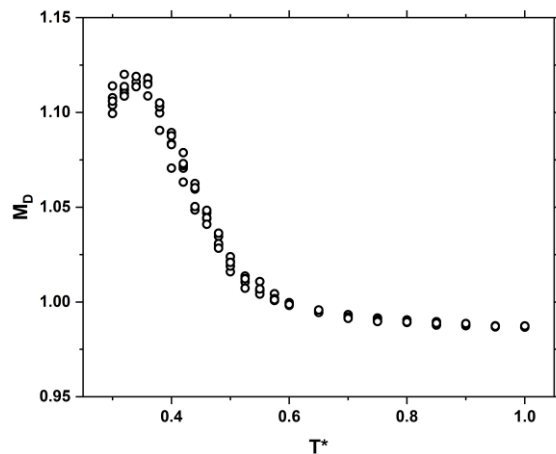
**Σχ. 163 - Διάγραμμα  $M_D$  ως προς  $T^*$  για κλάσμα όγκου 0.125**



**Σχ. 164 - Διάγραμμα  $M_D$  ως προς  $T^*$  για κλάσμα όγκου 0.175**



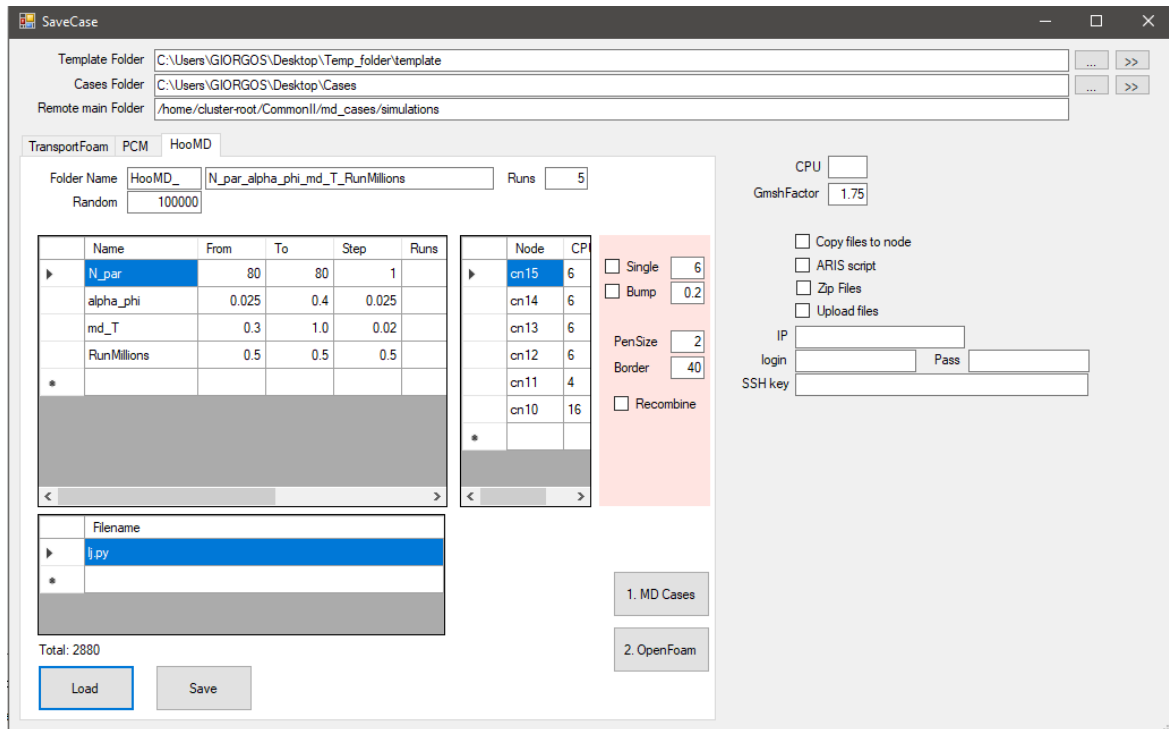
**Σχ. 165 - Διάγραμμα  $M_D$  ως προς  $T^*$  για κλάσμα όγκου 0.225**



**Σχ. 166 - Διάγραμμα  $M_D$  ως προς  $T^*$  για κλάσμα όγκου 0.275**

## Παράρτημα Η. AutoPilot

Η δημιουργία όλων των απαραίτητων φακέλων και αρχείων πραγματοποιήθηκε με τη χρήση του προγράμματος AutoPilot, του καθηγητή Α. Τσιαντή. Επιπρόσθετα, μέσω του προγράμματος πραγματοποιήθηκε η οπτική αναπαράσταση όλων των γεωμετριών.



**Σχ. 167 – Γραφικό περιβάλλον (GUI) προγράμματος AutoPilot**

Εντός του προγράμματος ορίζονται οι παράμετροι τόσο για την προσομοίωση μοριακής δυναμικής όσο και για την υπολογιστική επίλυση στο λογισμικό OpenFOAM. Για κάθε γεωμετρία (“case”) δημιουργήθηκε ένας ξεχωριστός φάκελος ο οποίος εμπεριέχει:

- 1) lj.py “script” για την προσομοίωση στο HOOMD-blue (Παράρτημα Α)
- 2) Αρχείο m.geo για τη παραγωγή του πλέγματος στο πρόγραμμα GMSH
- 3) Φάκελοι και αρχεία που απαιτούνται για την επίλυση στο λογισμικό OpenFOAM
- 4) Εκτελέσιμα αρχεία

## **Παράρτημα Θ. Φάκελοι OpenFOAM**

Ο φάκελος 0 εμπεριέχει τα αρχεία για τις οριακές συνθήκες για το πρόβλημα ροής. Πιο συγκεκριμένα ορίζονται οι συνθήκες για την πίεση και τη ταχύτητα.

```

1  /*-----*- C++ -*-----*/
2  | ===== |
3  | \\ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
4  | \\ / O p e r a t i o n | Version: 4.0 |
5  | \\ / A n d | Web: www.OpenFOAM.org |
6  | \\ / M a n i p u l a t i o n |
7  /*-----*/
8  FoamFile
9  {
10     version      2.0;
11     format        ascii;
12     class         volScalarField;
13     object        p;
14 }
15 // *****
16
17 dimensions      [0 2 -2 0 0 0 0];
18
19 internalField   uniform 0;
20
21
22 boundaryField
23 {
24     internal
25     {
26         type zeroGradient;
27     }
28
29     right
30     {
31         type fixedValue;
32         value uniform 0;
33     }
34     left
35     {
36         type fixedValue;
37         value uniform 1;
38         //type zeroGradient;
39     }
40     top
41     {
42         type cyclicAMI;
43     }
44     bottom
45     {
46         type cyclicAMI;
47     }
48
49     back
50     {
51         type empty;
52     }
53     front
54     {
55         type empty;
56     }
57
58
59 }
60
61 // *****
62

```

Σχ. 168 – Αρχείο πίεσης, p



```

1  /*-----*- C++ -*-----*/
2  | ===== |
3  | \ \ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
4  | \ \ / O p e r a t i o n | Version: 4.0 |
5  | \ \ / A n d | Web: www.OpenFOAM.org |
6  | \ \ / M a n i p u l a t i o n | |
7  /*-----*- C++ -*-----*/
8  FoamFile
9  {
10     version      2.0;
11     format        ascii;
12     class         volVectorField;
13     object        U;
14 }
15 // ***** //
16
17 dimensions      [0 1 -1 0 0 0 0];
18
19 internalField    uniform (0 0 0);
20
21 boundaryField
22 {
23     internal
24     {
25         type noSlip;
26     }
27     left
28     {
29         type zeroGradient;
30         //type fixedValue;
31         //value uniform (0.1 0 0);
32     }
33     right
34     {
35         type zeroGradient;
36     }
37     top
38     {
39         type cyclicAMI;
40     }
41     bottom
42     {
43         type cyclicAMI;
44     }
45     back
46     {
47         type empty;
48     }
49     front
50     {
51         type empty;
52     }
53 }
54 }
55
56 // ***** //

```

**Σχ. 169 - Αρχείο πίεσης, U**

Στο φάκελο “constant” ορίζονται οι θερμοφυσικές ιδιότητες της ροής (κινηματικό ιξώδες,  $\nu$ ) και το μοντέλο τύρβης (στρωτή ροή, χαμηλού αριθμού Reynolds).

```

1  /*-----*- C++ -*-----*\
2  | ===== |
3  | \ \ / / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
4  | \ \ / / O p e r a t i o n | Version: 4.0 |
5  | \ \ / / A n d | Web: www.OpenFOAM.org |
6  | \ \ / / M a n i p u l a t i o n |
7  /*-----*\
8  FoamFile
9  {
10     version      2.0;
11     format        ascii;
12     class         dictionary;
13     location      "constant";
14     object        transportProperties;
15 }
16 // ***** //
17
18 transportModel  Newtonian;
19
20 nu              [0 2 -1 0 0 0 0] 100;
21
22 // ***** //
23

```

**Σχ. 170 - Αρχείο κινηματικού ιξώδους, transportProperties**

```

1  /*-----*- C++ -*-----*\
2  | ===== |
3  | \ \ / / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
4  | \ \ / / O p e r a t i o n | Version: 4.0 |
5  | \ \ / / A n d | Web: www.OpenFOAM.org |
6  | \ \ / / M a n i p u l a t i o n |
7  /*-----*\
8  FoamFile
9  {
10     version      2.0;
11     format        ascii;
12     class         dictionary;
13     location      "constant";
14     object        turbulenceProperties;
15 }
16 // ***** //
17
18 simulationType  laminar;
19
20 RAS
21 {
22
23     RASModel      realizableKE;
24
25     turbulence     off;
26
27     printCoeffs   on;
28 }
29
30
31 // ***** //
32

```

**Σχ. 171 – Αρχείο μοντέλου τύρβης, turbulenceProperties**

Στον φάκελο “system” ορίζονται τα απαραίτητα αρχεία για την ρύθμιση των παραμέτρων που σχετίζονται με την διαδικασία επίλυσης.

```

1  /*-----*- C++ -*-----*\
2  | ===== |
3  |  \ \ /  F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
4  |  \ \ /  O p e r a t i o n | Version: 2.4.0 |
5  |  \ \ /  A n d | Web: www.OpenFOAM.org |
6  |  \ \ /  M a n i p u l a t i o n | |
7  /*-----*\
8  FoamFile
9  {
10     version      2.0;
11     format        ascii;
12     class         dictionary;
13     location      "system";
14     object        controlDict;
15 }
16 // ***** //
17
18 application      simpleFoam;
19
20 startFrom        startTime;
21
22 startTime        0;
23
24 stopAt           endTime;
25
26 endTime          5000;
27
28 deltaT           1;
29
30 writeControl     timeStep;
31
32 writeInterval    100;
33
34 purgeWrite       2;
35
36 writeFormat      binary;
37
38 writePrecision   16;
39
40 writeCompression uncompressed;
41
42 timeFormat       general;
43
44 timePrecision    6;
45
46
47 // ***** //

```

**Σχ. 172 – Αρχείο controlDict**

```

1  /*----- C++ -----*/
2  |=====|
3  |  \ \ /  F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
4  |  \ \ /  O p e r a t i o n | Version: 2.1.x |
5  |  \ \ /  A n d           | Web: www.OpenFOAM.org |
6  |  \ \ /  M a n i p u l a t i o n |
7  |-----|
8  |                                     | Created By AutoPilot |
9  |                                     | By Andrew Tsiantis for PhD Thesis. Volos 2017 |
10 /*-----*/
11 FoamFile
12 {
13     version      2.0;
14     format       ascii;
15     class        dictionary;
16     object       createPatchDict;
17 }
18 // ***** //
19
20
21 pointSync false;
22
23 // Patches to create.
24 patches
25 (
26     {
27         // Name of new patch
28         name left;
29         patchInfo
30         {
31             type patch;
32         }
33         constructFrom patches;
34         patches (left_of2);
35     }
36     {
37         // Name of new patch
38         name right;
39         patchInfo
40         {
41             type patch;
42         }
43         constructFrom patches;
44         patches (right_of2);
45     }
46     {
47         // Name of new patch
48         name back;
49         patchInfo
50         {
51             type empty;
52         }
53         constructFrom patches;
54         patches (back_of2);
55     }
56 )

```

```

57 {
58     // Name of new patch
59     name front;
60     patchInfo
61     {
62         type empty;
63     }
64 }
65 constructFrom patches;
66 patches (front_of2);
67 }
68 {
69     // Name of new patch
70     name top;
71     patchInfo
72     {
73         type cyclicAMI;
74         neighbourPatch bottom;
75         transform translational;
76         separationVector (0 1 0);
77         matchTolerance 0.0001;
78     }
79     constructFrom patches;
80     patches (top_of2);
81 }
82 {
83     // Name of new patch
84     name bottom;
85     patchInfo
86     {
87         type cyclicAMI;
88         neighbourPatch top;
89         transform translational;
90         separationVector (0 -1 0);
91         matchTolerance 0.0001;
92     }
93     constructFrom patches;
94     patches (bottom_of2);
95 }
96 {
97     // Name of new patch
98     name internal;
99     patchInfo
100    {
101        type zeroGradient;
102    }
103    constructFrom patches;
104    patches (int_of2);
105 }
106 );

```

**Σχ. 173 – Αρχείο createPatchDict**

```

1  /*-----*- C++ -*-----*\
2  | ===== |
3  | \ \ / /   F i e l d           | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
4  | \ \ / /   O p e r a t i o n   | Version: 4.0 |
5  | \ \ / /   A n d                 | Web:      www.OpenFOAM.org |
6  | \ \ / /   M a n i p u l a t i o n |         |
7  \*-----*\
8  FoamFile
9  {
10     version      2.0;
11     format        ascii;
12     class         dictionary;
13     location      "system";
14     object        fvSchemes;
15 }
16 // ***** //
17
18 ddtSchemes
19 {
20     default        steadyState;
21 }
22
23 gradSchemes
24 {
25     default        Gauss linear;
26     grad(U)        cellLimited Gauss linear 1;
27 }
28
29 divSchemes
30 {
31     default        none;
32     div(phi,U)     bounded Gauss linearUpwindV grad(U);
33     div(phi,k)     bounded Gauss limitedLinear 1;
34     div(phi,epsilon) bounded Gauss limitedLinear 1;
35     div(phi,omega) bounded Gauss limitedLinear 1;
36     div(phi,v2)    bounded Gauss limitedLinear 1;
37     div(phi,N)     bounded Gauss limitedLinear 1;
38     div((nuEff*dev2(T(grad(U)))) Gauss linear;
39 }
40
41 laplacianSchemes
42 {
43     default        Gauss linear corrected;
44 }
45
46 interpolationSchemes
47 {
48     default        linear;
49 }
50
51 snGradSchemes
52 {
53     default        corrected;
54 }
55
56 //wallDist
57 //{
58 //    method meshWave;
59 //}
60
61 fluxRequired
62 {
63     default no;
64     p;
65 }
66
67
68 // ***** //

```

Σχ. 174 – Αρχείο fvSchemes

```

1  /*----- C++ -----*/
2  | ===== |
3  |  \ \ /  F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
4  |  \ \ /  O p e r a t i o n | Version: 4.0 |
5  |  \ \ /  A n d      | Web: www.OpenFOAM.org |
6  |  \ \ /  M a n i p u l a t i o n | |
7  /*-----*/
8  FoamFile
9  {
10     version      2.0;
11     format        ascii;
12     class         dictionary;
13     location      "system";
14     object        fvSolution;
15 }
16 // ***** //
17
18 solvers
19 {
20
21     p
22     {
23         solver GAMG;
24         preconditioner FDIC;
25         mergeLevels 1;
26         smoother GaussSeidel;
27         agglomerator faceAreaPair;
28         nCellsInCoarsestLevel 400;
29         tolerance 1e-7;
30         relTol 1e-4;
31     }
32
33     U
34     {
35         solver GAMG;
36         preconditioner FDIC;
37         mergeLevels 1;
38         smoother GaussSeidel;
39         agglomerator faceAreaPair;
40         nCellsInCoarsestLevel 400;
41         tolerance 1e-07;
42         relTol 1e-4;
43     }
44 }
45

```

```

46 PISO
47 {
48     nCorrectors      0
49     nNonOrthogonalCorrectors 0;
50     pRefCell        0;
51     pRefValue       0;
52 }
53
54 SIMPLE {
55     nNonOrthogonalCorrectors 2;
56     consistent      yes;
57     pRefCell        0;
58     pRefValue       0;
59     residualControl
60     {
61         p            1e-5;
62         U            1e-5;
63     }
64 }
65
66
67 relaxationFactors
68 {
69     fields
70     {
71         p            0.6;
72     }
73
74     equations
75     {
76         U            0.95; // 0.9 is more stable but 0.95 more convergent
77 //         p            0.8; // 0.9 is more stable but 0.95 more convergent
78     }
79 }
80
81
82 // ***** //
83

```

**Σχ. 175 – Αρχείο fvSolution**

```

1  /*-----*- C++ -*-----*/
2  | ===== |
3  | \\ / Field | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox |
4  | \\ / Operation | Version: 2.4.0 |
5  | \\ / And | Web: www.OpenFOAM.org |
6  | \\ / Manipulation |
7  /*-----*/
8  FoamFile
9  {
10     version      2.0;
11     format       ascii;
12     class        dictionary;
13     location     "system";
14     object       decomposeParDict;
15 }
16 // ***** //
17
18 numberOfSubdomains pCpu;
19
20 method          scCpu;
21
22
23
24
25 // ***** //

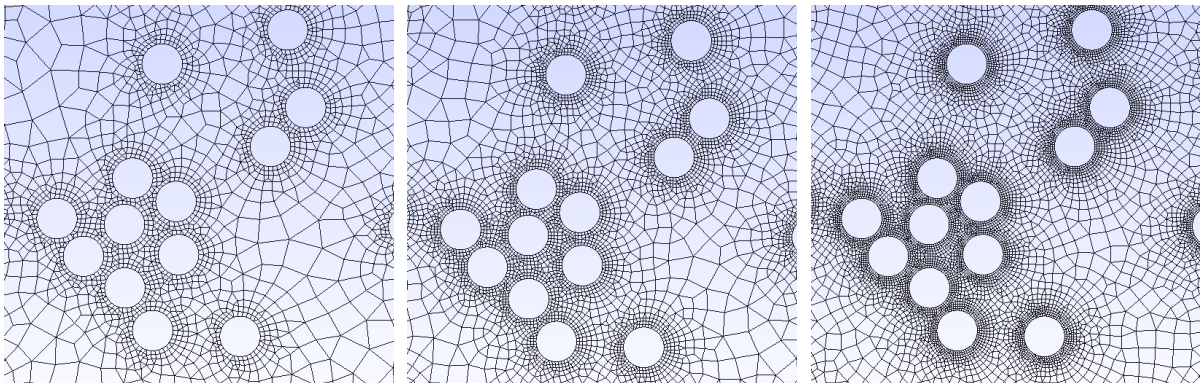
```

**Σχ. 176 – Αρχείο decomposeParDict**



## Παράρτημα Ι. Χωρική σύγκλιση πλέγματος

Κατά την αριθμητική επίλυση σε μία προσομοίωση εισάγεται ένα σφάλμα λόγω της διακριτοποίησης. Η αναγνώριση της τάξης μεγέθους αυτού του σφάλματος αντανακλά στην ακρίβεια της λύσης. Ουσιαστικά, μελετώντας την χωρική σύγκλιση του πλέγματος, δημιουργούνται συνεχώς πιο λεπτομερή πλέγματα μέχρις ότου το σφάλμα διακριτοποίησης να προσεγγίζει ασυμπτωματικά το μηδέν. Με τον τρόπο αυτό απαλείφεται η εξάρτηση του πλέγματος από τη λύση. Ωστόσο για να εξάγουμε κάποιο αξιόπιστο συμπέρασμα θα έπρεπε να πραγματοποιηθεί ένας μεγάλος αριθμός προσομοιώσεων το οποίο συνεπάγεται υψηλό υπολογιστικό κόστος. Για το λόγο αυτό υιοθετείται η μέθοδος παρεμβολής του Richardson. Μελετώντας αραιά πλέγματα που προσδευτικά γίνονται όλο και πιο πυκνά δύναται να προβλέψουμε την τιμή που θα πρόκυπτε από ένα θεωρητικά άπειρα πυκνό πλέγμα, δηλαδή όταν οι αποστάσεις των κελιών προσεγγίζουν το μηδέν.



**Σχ. 177 – Σταδιακή πύκνωση του πλέγματος (Από αριστερά προς τα δεξιά)**

Εάν ορίσουμε ως  $f_{h=0}$  την οριακή τιμή ενός πλέγματος μηδενικής απόστασης, αυτή δύναται να υπολογιστεί από δύο η περισσότερα πλέγματα, το ένα πιο πυκνό από το άλλο. Το  $h$  αντιπροσωπεύει μια κανονικοποιημένη κλίμακα απόστασης του πλέγματος και εμφανίζεται ως δείκτης στις τιμές της συνάρτησης  $f$  για να μην υπάρχει σύγχυση μεταξύ της σειράς από αραιό σε πυκνό πλέγμα. Αρχικά υπολογίζεται η τάξη της σύγκλισης,  $p$ , η οποία διατυπώνεται για τρία πλέγματα ως:

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

όπου  $r$  ορίζεται η αναλογία πλεγμάτων και ισούται με  $r = h_2/h_1$ , ενώ  $f_3, f_2$  και  $f_1$  είναι οι τιμές που προέκυψαν από την προσομοίωση για τη συνάρτηση που θέλουμε να μελετήσουμε.

Σύμφωνα με τη βιβλιογραφία προτείνεται η αναλογία των πλεγμάτων γενικότερα να είναι ίση με 2. Η μέθοδος του Richardson επιτρέπει την εκτίμηση της  $f_{h=0}$  μέσω των παραμέτρων που ορίστηκαν παραπάνω,

$$f_{h=0} \cong f_1 + \frac{f_1 - f_2}{r^p - 1}$$

Για να θεωρηθεί αξιόπιστη η τιμή  $f_{h=0}$  εισάγονται οι δείκτες σύγκλισης πλέγματος (Grid Convergence Index, GCI). Οι GCI υποδεικνύουν την ποσοστιαία απόσταση της υπολογισμένης τιμής και της ασυμπτωτικής τιμής. Μικρές τιμές των GCI υποδηλώνουν πως η τιμή προσεγγίζει την ασυμπτωτική περιοχή σύγκλισης. Για το πυκνό πλέγμα ορίζεται:

$$GCI_{fine,1-2} = \frac{F_s |e|}{r^p - 1}$$

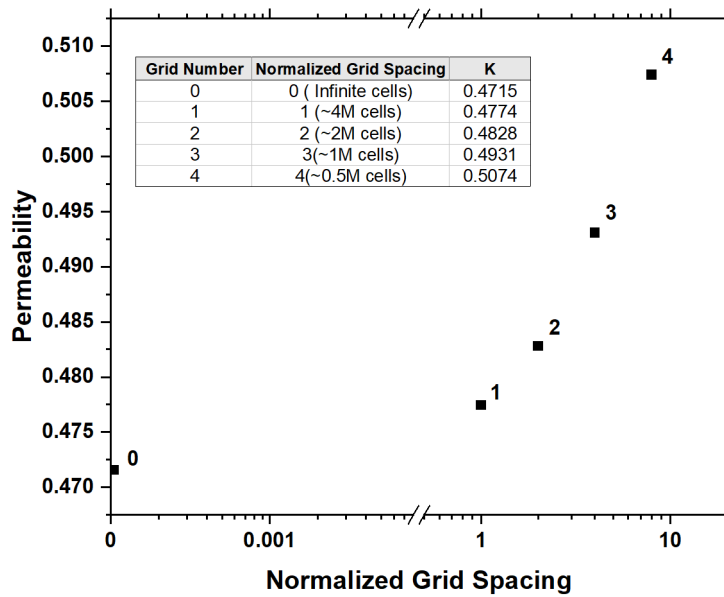
με το  $F_s$  να αποτελεί έναν συντελεστή ασφαλείας και λογίζεται ως 3 όταν χρησιμοποιούνται δυο πλέγματα ενώ για τρία πλέγματα παίρνει την τιμή 1.25. Ως  $F_s$  λογίζεται το σχετικό ποσοστιαίο σφάλμα. Αντίστοιχα ο GCI για το αραιό πλέγμα δίνεται από τον τύπο:

$$GCI_{coarser,2-3} = \frac{r^p F_s |e|}{r^p - 1} = r^p GCI_{fine,1-2}$$

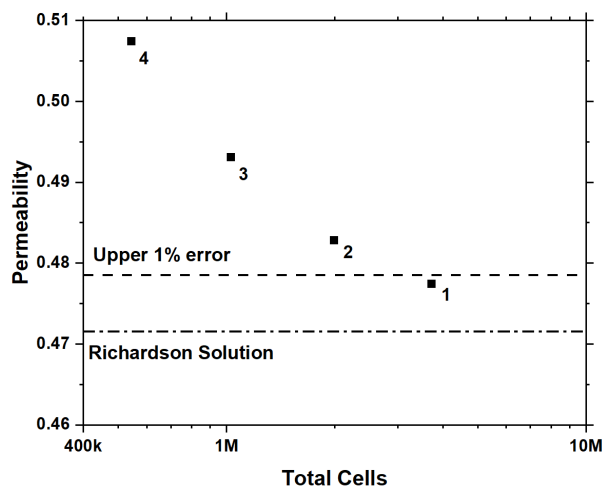
Όταν η αναλογία των δύο παραπάνω δεικτών GCI τείνει στην τιμή 1, η εκτίμηση  $f_{h=0}$  μπορεί να θεωρηθεί αξιόπιστη καθώς εμπίπτει στην περιοχή ασυμπτωτικής σύγκλισης.

Ακολουθούν οι υπολογισμοί για την εξέταση της χωρικής σύγκλισης σύμφωνα με τη μέθοδο του Richardson όπως αναλύθηκε παραπάνω σε ένα σετ δεδομένων όμοιο με εκείνα που έχουν παρουσιαστεί ήδη. Πιο συγκεκριμένα πρόκειται για μία γεωμετρία με  $N=6400$ ,

$V_f = [0.1, 0.3]$  και  $T^* = 1.0$ , η οποία επιλύθηκε για τρία πλέγματα αναλογίας  $r = 2$ . Η τάξη σύγκλισης βρέθηκε από την  $p = \frac{\ln\left(\frac{f_3 - f_2}{f_2 - f_1}\right)}{\ln(r)} = 0.9354$ , ενώ η τιμή  $f_{h=0} = 0.4715$ . Εφόσον έγινε χρήση τριών πλεγμάτων ο συντελεστής ασφαλείας  $F_s$  ισούται με 1.25 και ως εκ τούτου οι GCI υπολογίστηκαν  $GCI_{coarser,2-3} = 2.91\%$  και  $GCI_{fine,1-2} = 1.54\%$  αντίστοιχα. Η αναλογία των δεικτών βρέθηκε  $0.1541/2^{0.1541} 0.029143 = 0.9889 \cong 1$ , οπότε μπορούμε να υποθέσουμε ότι βρισκόμαστε στην περιοχή ασυμπτωτικής σύγκλισης.



Σχ. 178 – Μεταβολή της αριθμητικής τιμής της διαπερατότητας λόγω της πυκνωσης του πλέγματος. Αύξηση του αριθμού των κελιών συνεπάγεται μείωση της απόστασης  $h$ . Η τιμή 0 αναπαριστά τη λύση του Richardson

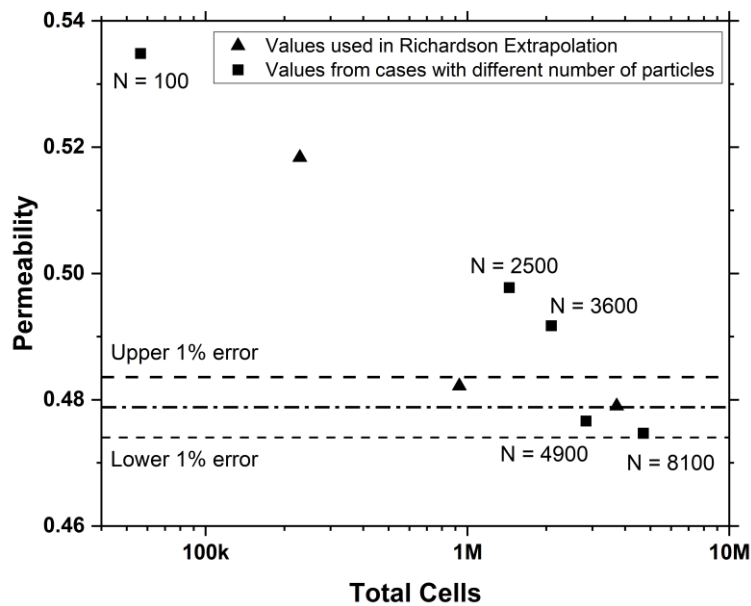


Σχ. 179 – Μεταβολή της αριθμητικής τιμής της διαπερατότητας λόγω της πυκνωσης του πλέγματος.

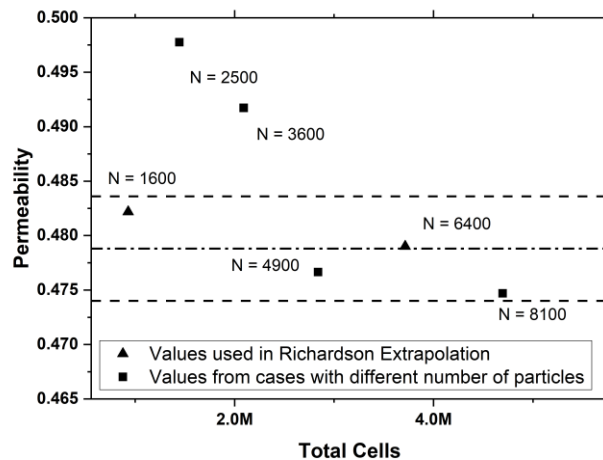
$V_f$	$f_{h=3}$	$f_{h=2}$	$f_{h=1}$	$f_{h=0}$	$n$	$r$	$F_s$	$e_{12}$	$e_{23}$	$GCI_{12}$	$GCI_{23}$	$GCI$ Ratio
0.2	0.0973	0.0937	0.0917	0.0892	0.8409	2	1.25	0.0219	0.0384	0.0607	0.0346	0.9786
0.3	0.0993	0.0956	0.0935	0.0909	0.8379	2	1.25	0.022	0.0385	0.0612	0.035	0.9784

**Σχ. 180 – Αποτελέσματα παρεμβολής Richardson για κλάσμα όγκου 0.2 και 0.3**

Η ίδια διαδικασία ακολουθήθηκε και για την επίδραση του αριθμού των σωματιδίων στην τιμή της διαπερατότητας. Θέτοντας  $h = 1/N$  μελετήθηκε η σύγκλιση των αριθμητικών τιμών υπό την υπόθεση ενός άπειρου αριθμού σωματιδίων.



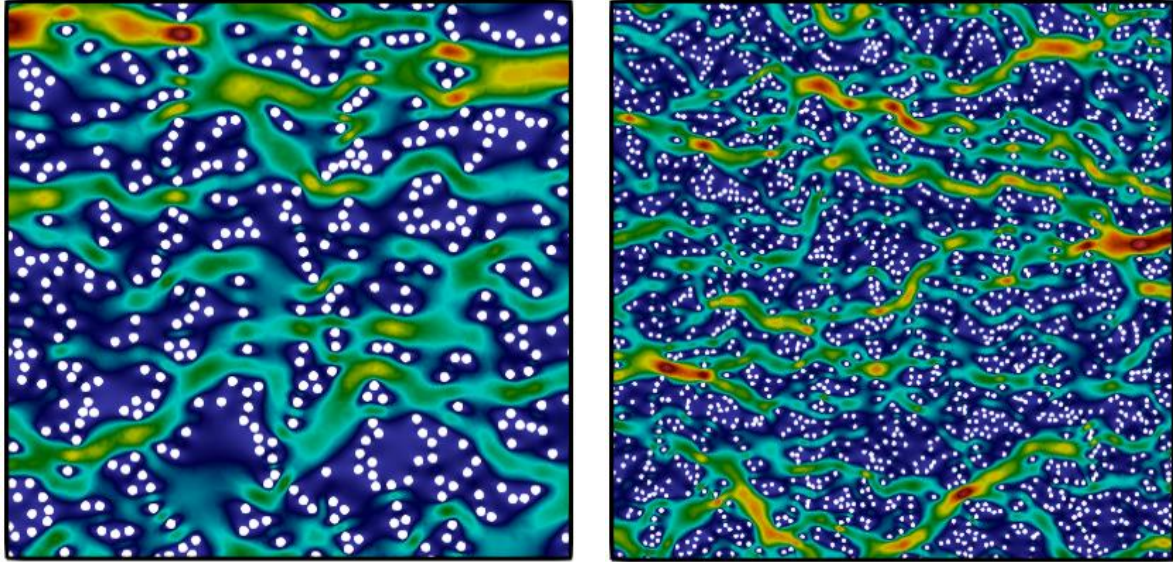
**Σχ. 181 – Αναπαράσταση αποτελεσμάτων διαπερατότητας για διαφορετικό N. Για την παρεμβολή Richardson χρησιμοποιήθηκαν N=400, N=1600 και N=6400 (από αριστερά προς τα δεξιά). Με τη διακεκομμένη γραμμή (dash-dot) αναπαρίσται η λύση κατά Richardson**



**Σχ. 182 – Σμίκρυνση του Σχ. 181 στην περιοχή ασυμπτωτικής σύγκλισης**

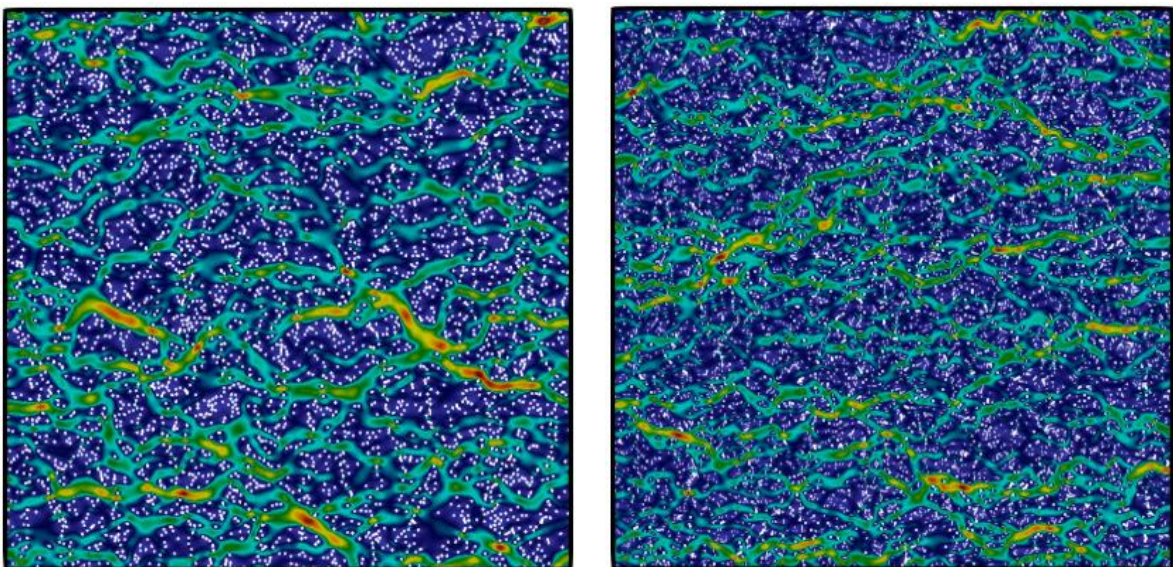
$f_{h=1/400}$	$f_{h=1/1600}$	$f_{h=1/6400}$	$f_{h=0(N \rightarrow \infty)}$	$n$	$r$	$F_s$	$e_{12}$	$e_{23}$	$GCI_{12}$	$GCI_{23}$	$GCI \text{ Ratio}$
0.5184	0.4822	0.479	0.4788	1.7576	4	1.25	0.0066	0.075	0.00079	0.00899	0.9934

Σχ. 183 – Αποτελέσματα παρεμβολής Richardson σύμφωνα με τον αριθμό σωματιδίων  $N$



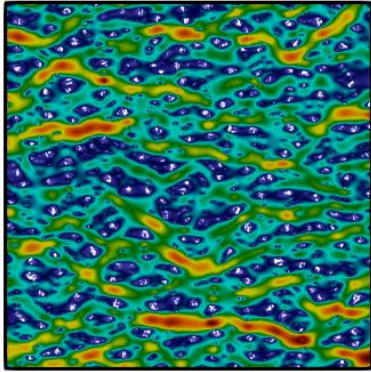
Σχ. 184 – Ροϊκά πεδία για διαφορετικό αριθμό  $N$ , σε όμοιο  $V_f$  και  $T^*$ . Αριστερά  $N=100$  και δεξιά  $N=400$

Η αποτύπωση του ροϊκού πεδίου επιβεβαιώνει την σύγκλιση των τιμών της διαπερατότητας. Παρατηρείται πως για γεωμετρίες με μικρό αριθμό  $N$  η ροή εξελίσσεται με μεγαλύτερη ταχύτητα καθώς υπάρχουν λιγότερα εμπόδια. Όσο ο αριθμός των σωματιδίων αυξάνεται το μοναδιαίο κελί γίνεται πιο αντιπροσωπευτικό της κατανομής.

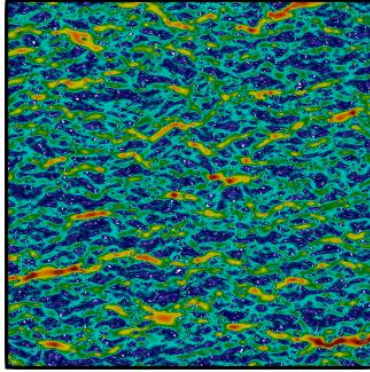


Σχ. 185 - Ροϊκά πεδία για διαφορετικό αριθμό  $N$ , σε όμοιο  $V_f$  και  $T^*$ . Αριστερά  $N=1600$  και δεξιά  $N=6400$

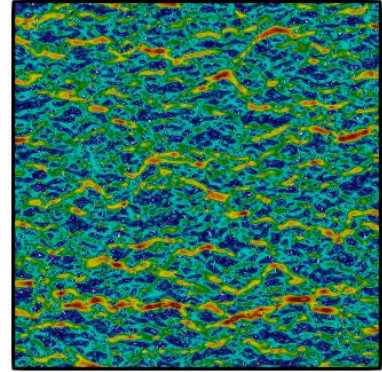
## Παράρτημα ΙΑ. Ροϊκά πεδία



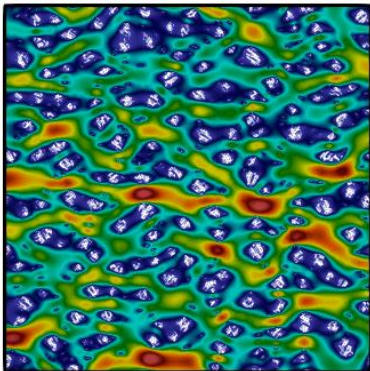
Σχ. 186 –  $T^*=0.3$ ,  $V_f=0.025$



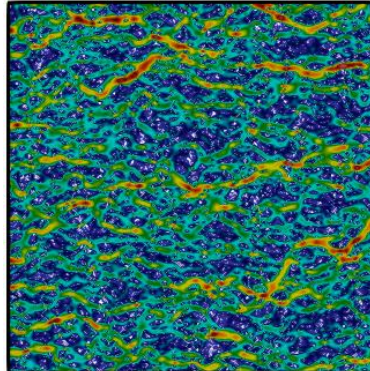
Σχ. 187 –  $T^*=0.5$ ,  $V_f=0.025$



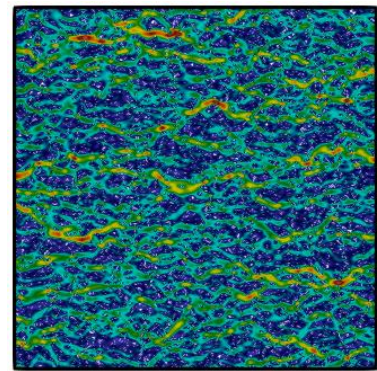
Σχ. 188 –  $T^*=0.7$ ,  $V_f=0.025$



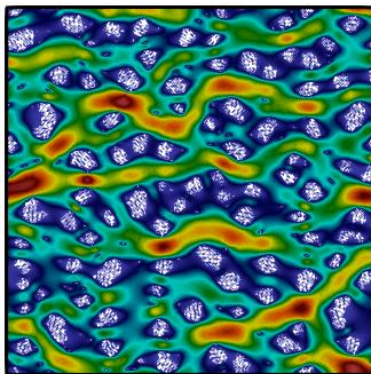
Σχ. 189 –  $T^*=0.3$ ,  $V_f=0.05$



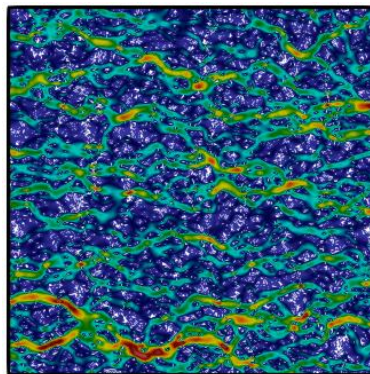
Σχ. 190 –  $T^*=0.5$ ,  $V_f=0.05$



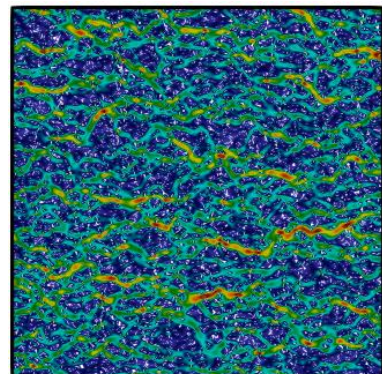
Σχ. 191 –  $T^*=0.7$ ,  $V_f=0.05$



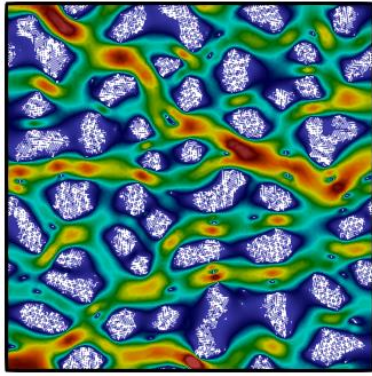
Σχ. 192 –  $T^*=0.3$ ,  $V_f=0.075$



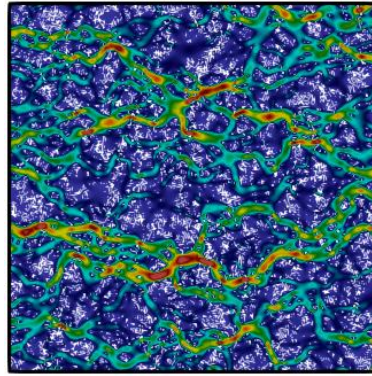
Σχ. 193 –  $T^*=0.5$ ,  $V_f=0.075$



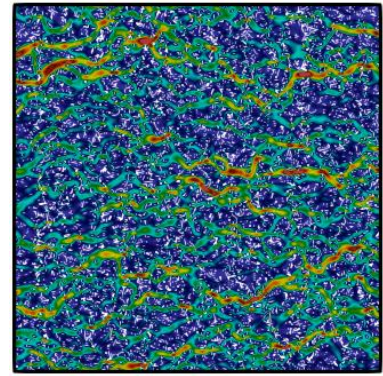
Σχ. 194 –  $T^*=0.7$ ,  $V_f=0.075$



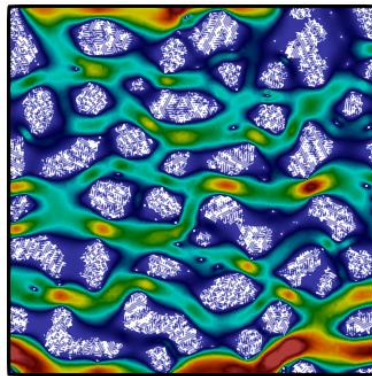
$\Sigma\chi. 195 - T^*=0.3, V_f=0.125$



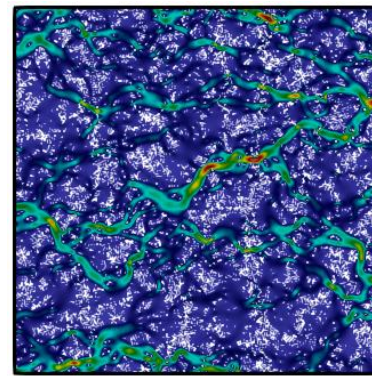
$\Sigma\chi. 196 - T^*=0.5, V_f=0.125$



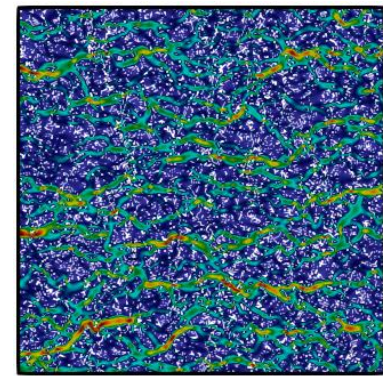
$\Sigma\chi. 197 - T^*=0.7, V_f=0.125$



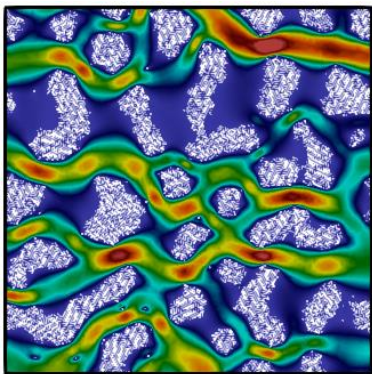
$\Sigma\chi. 198 - T^*=0.3, V_f=0.15$



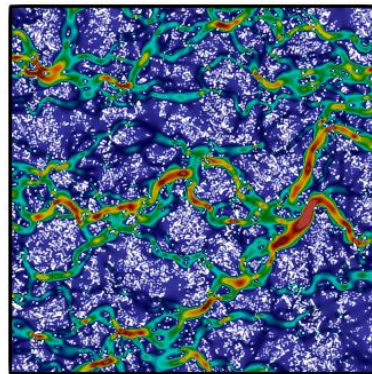
$\Sigma\chi. 199 - T^*=0.5, V_f=0.15$



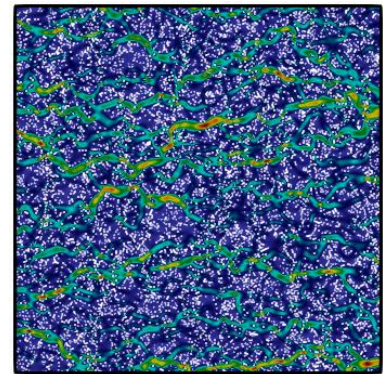
$\Sigma\chi. 200 - T^*=0.7, V_f=0.15$



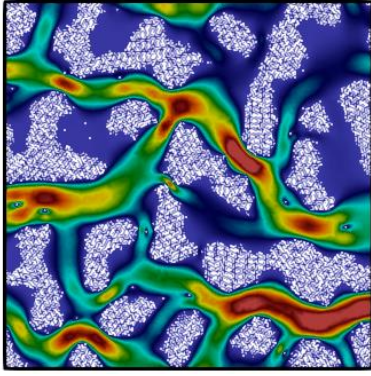
$\Sigma\chi. 201 - T^*=0.3, V_f=0.175$



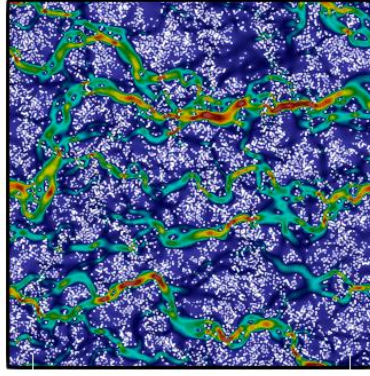
$\Sigma\chi. 202 - T^*=0.5, V_f=0.175$



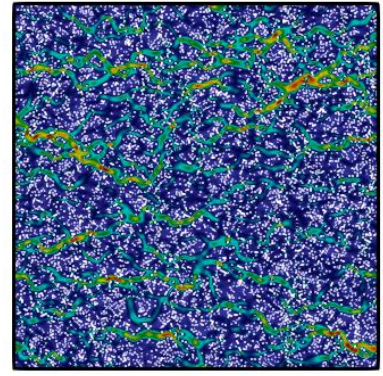
$\Sigma\chi. 203 - T^*=0.7, V_f=0.175$



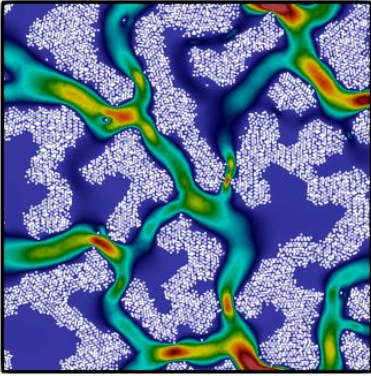
$\Sigma\chi. 204 - T^*=0.3, V_f=0.2$



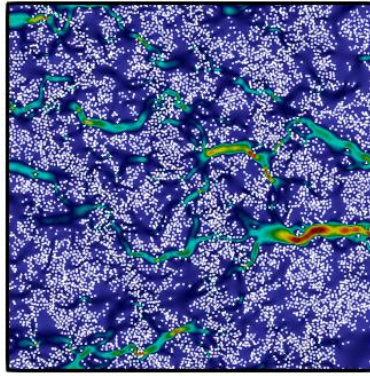
$\Sigma\chi. 205 - T^*=0.5, V_f=0.2$



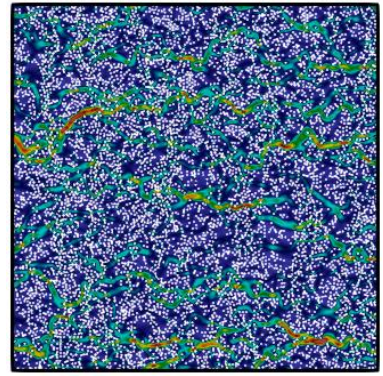
$\Sigma\chi. 206 - T^*=0.7, V_f=0.2$



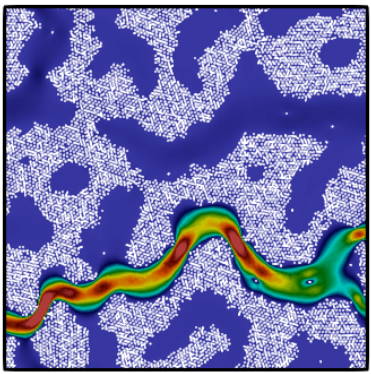
$\Sigma\chi. 207 - T^*=0.3, V_f=0.25$



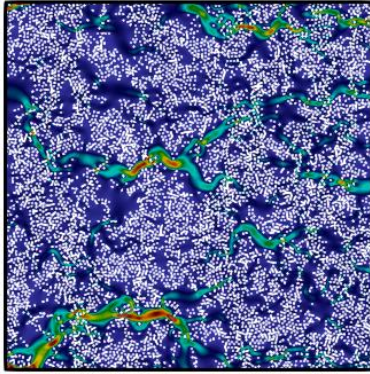
$\Sigma\chi. 208 - T^*=0.5, V_f=0.25$



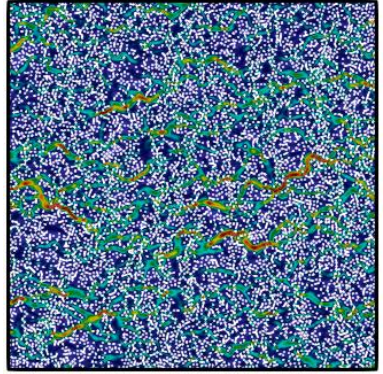
$\Sigma\chi. 209 - T^*=0.7, V_f=0.25$



$\Sigma\chi. 210 - T^*=0.3, V_f=0.3$



$\Sigma\chi. 211 - T^*=0.5, V_f=0.3$



$\Sigma\chi. 212 - T^*=0.7, V_f=0.3$