



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ  
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ  
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

**Μακροσκοπικές ιδιότητες σύνθετων υλικών με τυχαίες  
μικροδομές σωματιδιακού τύπου: *Η επίδραση της  
κατανομής των σωματιδίων σε πολλαπλές κλίμακες***

**Θησέας Σαπλαούρας**

Επιβλέποντες

Μ. Αγόρας, Επίκουρος Καθηγητής, Μη Γραμμικά Σύνθετα Υλικά - Θεωρίες Ομογενοποίησης

Ν. Αράβας, Καθηγητής, Υπολογιστική Μηχανική των Κατασκευών

Α. Παπαθανασίου, Καθηγητής, Διεργασίες Διαμόρφωσης και

Ροϊκές Ιδιότητες Πολυμερών Σύνθετων Μέσων

Βόλος, Φεβρουάριος 2023

© 2023 Σαπλαούρας Θησέας

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).

# Περιεχόμενα

<b>Κατάλογος σχημάτων</b>	<b>v</b>
<b>1 Εισαγωγή</b>	<b>1</b>
<b>2 Το Θεωρητικό Πλαίσιο</b>	<b>3</b>
2.1 Τα Σύνθετα Υλικά & Οι Ιδιότητες των Επιμέρους Φάσεων	3
2.2 Τα Χαρακτηριστικά των Τυχαίων Σύνθετων Υλικών με Περιοδική Μικροδομή	4
2.2.1 Τυχαίες Μικροδομές	4
2.2.2 Οι Γεωμετρίες των Μικροδομών P0, P2 και P1	5
2.3 Η Μακροσκοπική Απόκριση & Η Ομογενοποίηση των P0	7
2.4 Η Μακροσκοπική Απόκριση των P2 και P1	8
2.5 Οι Εκτιμήσεις των Hashin-Shtrikman	10
2.5.1 Οι Εκτιμήσεις των Hashin-Shtrikman για τις P0	10
2.5.2 Οι Εκτιμήσεις των Hashin-Shtrikman για τις P2	11
2.5.3 Οι Εκτιμήσεις των Hashin-Shtrikman για τις P1	12
2.6 Οι Γραφικές Παραστάσεις των Εκτιμήσεων των Hashin-Shtrikman για P0 VS P2	12
<b>3 Η Γεωμετρική Κατασκευή των Μικροδομών</b>	<b>15</b>
3.1 Ο Αλγόριθμος του RSA στο $\mathbb{C}$	15
3.2 Τα Σμήνη στο $\mathbb{C}$	18
3.3 Ο RSA για Στραμμένη Κυψελίδα	20
3.4 Ο Υπολογισμός των Ακτίνων	21
3.5 Ορισμένα Γεωμετρικά Αποτελέσματα	21
<b>4 Οι Αριθμητικές Αναλύσεις &amp; Αποτελέσματα</b>	<b>29</b>
4.1 Πλεγματοποίηση & Τα Στοιχεία	29
4.2 Οι Αναλύσεις για τις Επίπεδες P0 $\rightarrow$ P2	29
4.3 Οι Αναλύσεις για τις Επίπεδες P0 για Απολύτως Απαραμόρφωτες Ίνες & Κυλινδρικούς Πόρους	29
4.4 Οι Αναλύσεις για τις Επίπεδες P1 για Απολύτως Απαραμόρφωτες Ίνες & Κυλινδρικούς Πόρους	33
4.5 Οι Αναλύσεις για τις Επίπεδες P2 για Απολύτως Απαραμόρφωτες Ίνες	33
<b>5 Τα Συμπεράσματα</b>	<b>41</b>
<b>Βιβλιογραφία</b>	<b>43</b>



# Κατάλογος σχημάτων

2.1	Το Αντιπροσωπευτικό Στοιχείο Όγκου-ή-RVE υφίσταται μόνο όταν υπάρχει ξεκάθαρη διάκριση κλίμακας μήκους, δηλαδή $\ell \ll L$ και θεωρητικά $\ell/L \rightarrow 0$ . Γεωμετρίες σαν αυτές οι οποίες αποτελούνται από ίδια σωματίδια ή σωματίδια που δεν υπάρχει ξεκάθαρη διάκριση κλίμακας μήκους <i>ανά μεταξύ τους</i> , καλούνται ως απλής κλίμακας και συμβολίζονται ως P0. . . . .	4
2.2	Οι RVEs των μικροδομών P2 & P1. Τα μεγάλα σωματίδια ανήκουν στην μεσοκλίμακα και τα μικρά στην μικροκλίμακα. Ειδικά για την P1, τα μεγάλα «σωματίδια» είναι αυτά που φαίνονται με τις διακεκομμένες γραμμές, ενώ εντός της φραγμένης περιοχής τους υπάρχουν τα μικρά σωματίδια, δημιουργώντας δηλαδή <i>σμήνη σωματιδίων</i> . . . . .	6
2.3	Οι γραφικές παραστάσεις για τον υπολογισμό των της συγκέντρωσης των σωματιδίων εντός φραγμένης περιοχής, δηλαδή για σμήνη σωματιδίων. Η σχέση είναι η $c^{(2,2)} = c^{(f)}/c^{(2)}$ όπου $c^{(2)}$ είναι συνολικά το περιεχόμενο των φραγμένων περιοχών. Βλέπουμε πως για $c^{(2,2)} < 50\%$ απαιτούνται πολύ μεγάλες συγκεντρώσεις $c^{(2)}$ που ορίζονται απ' τις φραγμένες περιοχές. . . . .	8
2.4	Η γεωμετρική αναπαράσταση ενός προβλήματος ομογενοποίησης. <b>Οι γεωμετρίες σχεδιάστηκαν καταχρηστικά</b> , καθώς είναι εμφανές ότι το $\Omega$ δεν είναι RVE, καθώς επίσης οι μεταβολές στα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του σώματος μεταξύ <i>απαραμόρφωτης και παραμορφωμένης κατάστασης είναι αμελητέες</i> . Το σημαντικό είναι ότι οι $\Omega$ και $\tilde{\Omega}$ για να παραμορφωθούν το ίδιο απαιτείται διαφορετική ενέργεια. Σκοπός είναι η διαφορά των δύο δυναμικών να είναι ελάχιστη. . . . .	9
2.5	Η γεωμετρία P2 αν θεωρηθεί ότι είναι αντιπροσωπευτική τόσο ως προς το $\Omega^{(2)}$ όσο και ως προς το $\Omega^{(1,2)}$ . Αν $d^{(2)}$ και $d^{(1,2)}$ είναι οι διάμετροι των σωματιδίων $\Omega^{(2)}$ και $\Omega^{(1,2)}$ αντίστοιχα, τότε $d^{(2)} \ll L$ και $d^{(1,2)} \ll \ell$ . Προφανώς θα ισχύουν επιπλέον ότι $\ell \ll L$ καθώς και $d^{(1,2)} \ll d^{(2)}$ . Ανάλογα ισχύουν και για τις γεωμετρίες P1. . . . .	10
2.6	Το ομογενές μέτρο διογκώσεως για την 1-κλίμακα μήκους <b>με σφαιρικούς πόρους</b> V.S. 2-κλίμακες μήκους με <b>σφαιρικούς πόρους</b> στην <i>μικροκλίμακα</i> και την <i>μεσοκλίμακα</i> για <i>ίσες μερικές συγκεντρώσεις</i> . Όπως ξέρουμε από τα προβλήματα του Eshelby, για μικρές $f \ll 1$ δεν υπάρχει επίδραση της κατανομής σε πολλαπλές κλίμακες μήκους. . . . .	12
2.7	Το ομογενές μέτρο διατμήσεως για την 1-κλίμακα μήκους <b>με σφαιρικούς πόρους</b> V.S. 2-κλίμακες μήκους με <b>σφαιρικούς πόρους</b> στην <i>μικροκλίμακα</i> και την <i>μεσοκλίμακα</i> για <i>ίσες μερικές συγκεντρώσεις</i> . Όπως ξέρουμε από τα προβλήματα του Eshelby, για μικρές $f \ll 1$ δεν υπάρχει επίδραση της κατανομής σε πολλαπλές κλίμακες μήκους. . . . .	13
2.8	Το ομογενές μέτρο ελαστικότητας για την 1-κλίμακα μήκους <b>με σφαιρικούς πόρους</b> V.S. 2-κλίμακες μήκους με <b>σφαιρικούς πόρους</b> στην <i>μικροκλίμακα</i> και την <i>μεσοκλίμακα</i> για <i>ίσες μερικές συγκεντρώσεις</i> . Όπως ξέρουμε από τα προβλήματα του Eshelby, για μικρές $f \ll 1$ δεν υπάρχει επίδραση της κατανομής σε πολλαπλές κλίμακες μήκους. . . . .	13
2.9	Το ομογενές μέτρο ελαστικότητας για την 1-κλίμακα μήκους <b>με σφαιρικούς πόρους</b> V.S. 2-κλίμακες μήκους με <b>σφαιρικούς πόρους</b> στην <i>μικροκλίμακα</i> και την <i>μεσοκλίμακα</i> για <i>ίσες μερικές συγκεντρώσεις</i> . Όπως ξέρουμε από τα προβλήματα του Eshelby, για μικρές $f \ll 1$ δεν υπάρχει επίδραση της κατανομής σε πολλαπλές κλίμακες μήκους. . . . .	14

2.10	Το ομογενές μέτρο διατιμήσεως για την 1-κλίμακα μήκους με <b>απολύτως σκληρές ίνες</b> V.S. 2-κλίμακες μήκους με <b>απολύτως σκληρές ίνες</b> στην <i>μικροκλίμακα</i> και την <i>μεσοκλίμακα</i> για <i>ίσες μερικές συγκεντρώσεις</i> . Όπως ξέρουμε από τα προβλήματα του Eshelby, για μικρές $c^{(f)} \ll 1$ δεν υπάρχει επίδραση της κατανομής σε πολλαπλές κλίμακες μήκους. . . . .	14
3.1	Δύο σωματίδια που παρήχθησαν μέσω του RSA με κέντρα τους τα $z_1$ και $z_2$ εντός της μοναδιαίας κυψελίδας $[0, 1] \times [0, i]$ , καθώς και η τοποθέτησή τους στους 8 γείτονες που συνορεύουν με αυτήν. Προφανώς, η διαδικασία συνεχίζεται μέχρι να τοποθετηθούν όσα σωματίδια επιθυμούμε και σε όποια συγκέντρωση. . . . .	16
3.2	Ο ιδεώδης κύκλος (διακεκομμένη) που περιγράφεται από τον μιγαδικό $Z_n$ , και οι ιδεώδεις δίσκοι $z_1$ και $z_2$ . Όπως φαίνεται, το κέντρο του $z_2$ , τοποθετήθηκε σε σημείο τέτοιο ώστε η ακτίνα του να υπερβαίνει τα όρια του κύκλου, σε αντίθεση με τον $z_1$ . Στόχος είναι να προσδιοριστεί ο μιγαδικός αριθμός $f(r_a)e^{i\theta_a}$ με αρχή το κέντρο $Z_n$ . . . . .	19
3.3	Η περιστροφή την κυψελίδας για γωνία $\varphi$ μέσω ενός παράγοντα φάσης $e^{i\varphi}$ . Αν $z_n$ κάποιο από τα μιγαδικά κέντρα των δίσκων, τότε το περιστραμμένο είναι απλά $z'_n = e^{i\varphi} z_n$ . . . . .	21
3.4	Μικροδομές $[x \times y] = [1 \times 1]$ RSA για $c^{(2)} = 30\%$ και $N^{(2)} = 10$ σε στροφή $\pi/3, \pi/4, \pi/6$ και 0 (από αριστερά πάνω προς δεξιά κάτω). . . . .	22
3.5	Μικροδομές $[x \times y] = [1 \times 1]$ RSA για $c^{(2)} = 30\%$ και $N^{(2)} = 50$ σε στροφή $\pi/3, \pi/4, \pi/6$ και 0 (από αριστερά πάνω προς δεξιά κάτω). . . . .	23
3.6	Μικροδομές $[x \times y] = [1 \times 1]$ RSA για $c^{(2)} = 30\%$ και $N^{(2)} = 100$ σε στροφή $\pi/3, \pi/4, \pi/6$ και 0 (από αριστερά πάνω προς δεξιά κάτω). . . . .	24
3.7	Μικροδομές $[x \times y] = [2 \times 1]$ RSA για $c^{(2)} = 30\%$ και $N^{(2)} = 10$ σε στροφή $\pi/3, \pi/4$ και $\pi/6$ (από αριστερά πάνω προς δεξιά και κάτω). . . . .	25
3.8	Μικροδομές $[x \times y] = [2 \times 1]$ RSA για $c^{(2)} = 30\%$ και $N^{(2)} = 50$ σε στροφή $\pi/3, \pi/4$ και $\pi/6$ (από αριστερά πάνω προς δεξιά και κάτω). . . . .	26
3.9	Μικροδομές $[x \times y] = [2 \times 1]$ RSA για $c^{(2)} = 30\%$ και $N^{(2)} = 100$ σε στροφή $\pi/3, \pi/4$ και $\pi/6$ (από αριστερά πάνω προς δεξιά και κάτω). . . . .	27
3.10	Σμήνη για 10 δεδομένες περιοχές συσσώρευσης $N^{(2)} = 10, 20, 30$ και 50 σωματιδίων, για $c^{(f)} = 15\%$ και $c^{(2)} = 50\%$ . . . . .	28
4.1	Η διαδικασία δημιουργίας πλέγματος μέσω του NetGen (Από Αριστερά Πάνω $\rightarrow$ Δεξιά Κάτω). Αρχικά πάμε στο <b>Mesh</b> και εκεί επιλέγουμε την ποιότητα του πλέγματος. Για τους σκοπούς της εργασίας χρησιμοποιήθηκαν τα πιο πυκνά πλέγματα, γεγονός που για τις P0 δεν έχει πάντα και ιδιαίτερο νόημα, όμως για τις P2 και P1 επιβάλλεται καθώς περιέχουν μικρά σωματίδια/πόρους. Επίσης προτιμήθηκαν τα Second Order Elements. Με την ολοκλήρωση της δημιουργίας του πλέγματος ( <b>Generate Mesh</b> ) στο <b>τέλος ΠΑΝΤΑ κάνουμε Validate Second Order</b> (αν και εφόσον χρησιμοποιηθούν) για να δούμε αν υπάρχουν «παράνομα στοιχεία» με αρνητική ιακωβιανή ή είναι πολύ μικρά $\implies$ Πρόβλημα στην Ανάλυση με το Abaqus. . . . .	30
4.2	Οι επίπεδες μικροδομές P0 για ίνες και πόρους πριν και μετά την πλεγματοποίησή τους. . . . .	31
4.3	Οι επίπεδες μικροδομές P1 για ίνες και πόρους πριν και μετά την πλεγματοποίησή τους. . . . .	32
4.4	Αποτελέσματα αναλύσεων για τυχαίες μικροδομές με $\mu^{(1)} = 50$ για $c^{(2)} = 10\% - 40\%$ και αριθμό σωματιδίων/πόρων $N^{(2)} = 20, 30, 40$ . Βλέπουμε ότι οι αναλύσεις για τους πόρους προσεγγίζουν την εκτίμηση καλύτερα όταν $N^{(2)} = 40$ σε κάθε περίπτωση, παρά για μικρότερο αριθμό. Στην περίπτωση των σκληρών ινών δεν φαίνονται διαφοροποιήσεις μέχρι και την συγκέντρωση $c^{(f)} = 20\%$ , όμως τα αποτελέσματα δεν είναι αξιόπιστα για $c^{(2)} \geq 40\%$ . . . . .	34
4.5	Αστάθειες ως προς την πλαστική διαρροή που εμφανίστηκαν σε επίπεδες P0 με κυλινδρικούς πόρους για $f = 30\%$ . . . . .	35
4.6	Εμφάνιση <b>shear-bands</b> για $N^{(2)} = 90$ και $c^{(f)} = 30\%$ . . . . .	36
4.7	5 σωματίδια μέσα σε 10-40 σμήνη με $c^{(f)} = 10\%$ όπου $\tilde{\mu}_{p,10} = 61.52, \tilde{\mu}_{p,20} = 62.87, \tilde{\mu}_{p,30} = 63.98$ και $\tilde{\mu}_{p,40} = 63.14$ και η εκτίμηση των H.S. είναι $\tilde{\mu}_p = 61.1$ . . . . .	37

4.8	5 σωματίδια μέσα σε 10-40 σμήνη με $f = 10\%$ όπου $\tilde{\mu}_{p,10} = 39.405$ , $\tilde{\mu}_{p,20} = 38.63$ , $\tilde{\mu}_{p,30} = 40.78$ και $\tilde{\mu}_{p,40} = 38.304$ και η εκτίμηση των H.S. είναι $\tilde{\mu}_p = 40.91$ . . . . .	38
4.9	Μια P2 (Πάνω) και η μεγέθυσή της (Κάτω). Δεδομένα & Συνθήκες Υπολογισμού: $N^{(2)} = 20$ , $N^{(1,2)} = 500$ , $\mu_p^{(1)} = 50$ , $\mu_p^{(2)} = 50 \times 10^3$ (θεωρητικά $\infty$ ), $c^{(f)} = 30\%$ , $\lambda = r_2/r_{1,2} = 5$ , Βαθ.Ελευθ: 4788785, Στοιχεία: 3227200. Για ισχύ 8-cpus: 11/14/2022 11:38:01 AM-11/16/2022 6:15:11 AM και δεν ολοκλήρωσε την πλαστική συμπεριφορά γιατί γέμισε η προσωρινή μνήμη. Γνωρίζουμε (όπως φαίνεται και στο Σχήμα 4.4) ότι για $c^{(f)} \leq 20\%$ η σύγκλιση επιτυγχάνεται για $N^{(2)} = 20$ σωματίδια, οι επιμέρους συγκεντρώσεις είναι 15%, για τις P2 η εκτίμηση $\tilde{\mu}_p^{H.S.} = 96.6686$ , ενώ η ανάλυση έδωσε ότι $\tilde{\mu}_p = 108.348$ , δηλαδή στο εύρος των υπολογιστικών εκτιμήσεων για $c^{(f)} = 30\%$ (όπως φαίνονται και στον Πίνακα 4.2) και διαφέρει 12.08% από την H.S.. . . . .	39





# Κεφάλαιο 1

## Εισαγωγή

Η παρούσα διπλωματική εργασία με τίτλο: «*Μακροσκοπικές ιδιότητες σύνθετων υλικών με τυχαίες μικροδομές σωματιδιακού τύπου: Η επίδραση της κατανομής των σωματιδίων σε πολλαπλές κλίμακες*», έχει ως σκοπό την μελέτη της επίδραση της χωρικής κατανομής των σωματιδίων σε πολλαπλές κλίμακες μήκους στις μακροσκοπικές μηχανικές ιδιότητες σύνθετων υλικών με τυχαίες μικροδομές σωματιδιακού τύπου, σαν αυτές που φαίνονται στο Σχήμα 2.2. Η μελέτη θα βασιστεί σε ένα σύνολο αριθμητικών αναλύσεων μοναδιαίας κυψελίδας οι οποίες θα διεξαχθούν με τη μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων (FEM) για το σκοπό της εν λόγω εργασίας. Τα αριθμητικά αποτελέσματα θα συγκριθούν με αντίστοιχα αναλυτικά αποτελέσματα τα οποία είναι διαθέσιμα από τη βιβλιογραφία όπως αυτά των Agoras and Ponte Castañeda [1]. Η μοντελοποίηση των μικροδομών θα γίνει μέσω του συμβολικού πακέτου Mathematica 12, ενώ οι υπολογισμοί μέσω του ABAQUS 2017.

Ο προσδιορισμός της σχέσεως που συνδέει τις μακροσκοπικές ιδιότητες ενός σύνθετου υλικού με τη μικροδομή και τις ιδιότητες των συνιστωσών του φάσεων αποτελεί το κεντρικό πρόβλημα της Μηχανικής των Σύνθετων Υλικών, καθώς πάνω σε αυτή τη σχέση βασίζεται τόσο η μελέτη, η ανάλυση και η βελτιστοποίηση των ιδιοτήτων των σύνθετων υλικών, όσο και ο σχεδιασμός νέων υλικών με επιθυμητές ιδιότητες. Παραδείγματα σύνθετων υλικών είναι διάφορα πολυμερή υλικά οπλισμένα με ανθρακονύματα ή υαλονύματα, σχετικά ελαφρά και μαλακά μέταλλα ενισχυμένα με σκληρότερα σωματίδια, πολυκρυσταλλικά υλικά όπως τα μέταλλα και τα κράματά τους, κράματα με μνήμη μορφής, ιξωδοελαστικά και ιξωδοπλαστικά υλικά, πολυμερή υλικά με μνήμη μορφής, πιεζοηλεκτρικά υλικά, μαγνητορεολογικά ελαστομερή, και άλλα. Τα υλικά αυτά χρησιμοποιούνται ευρέως σε σύγχρονες εφαρμογές στην αυτοκινητοβιομηχανία, στην αεροναυπηγική, στη ρομποτική, στη βιοϊατρική, κτλ.

Σε αδρές γραμμές, όπως περιγράφεται στο άρθρο των Agoras and Ponte Castañeda [1], η μακροσκοπική απόκριση των σύνθετων υλικών σε πολλαπλές κλίμακες επιτυγχάνεται μέσω της διαδικασίας της *διαδοχικής ομογενοποίησης*, η οποία λέει ότι μπορούμε να εκτιμήσουμε την μακροσκοπική απόκριση ενός σύνθετου με  $k$ -οικογένειες κλιμάκων μήκους, αν το αποσυνθέσουμε σε  $k$  προβλήματα απλής κλίμακας, στα οποία, καθώς ανεβαίνουμε κλίμακα μήκους, χρησιμοποιούμε της ομογενείς μηχανικές ιδιότητες (αν υπάρχουν φυσικά) της προηγούμενης κλίμακας. Ο κύριος στόχος της ομογενοποίησης είναι η πρόβλεψη της μακροσκοπικής συμπεριφοράς των σύνθετων υλικών συναρτήσει της συμπεριφοράς των συστατικών τους και τις καθορισμένες στατιστικές πληροφορίες της μικροδομής τους [5]. Οι μέθοδοι ομογενοποίησης είναι ισχυρά εργαλεία για την προσομοίωση της μηχανικής συμπεριφοράς των σύνθετων υλικών, με λογικό υπολογιστικό κόστος. Προηγούμενες έρευνες των Papadogianni et al. [5] και Agoras et al. [2] έχουν εκτιμήσει τις ελαστοπλαστικές ιδιότητες σύνθετων υλικών με ελλειψοειδή και σφαιρική συμμετρία. Για την ανά χείρας έρευνα, θα θεωρούμε πάντα ότι έχουμε

1. Διφασικά Σύνθετα Υλικά, και
2.  $k = 2$  οικογένειες κλίμακας μήκους.

Αναφορικά με την δομή της διπλωματικής έχουμε

- Κεφάλαιο 2ο: Παρουσιάζεται συνοπτικά η θεωρητική μελέτη για το πρόβλημα της ομογενοποίησης σε μία και πολλαπλές κλίμακες
- Κεφάλαιο 3ο: Παρουσιάζεται ο τρόπος που κατασκευάζονται οι γεωμετρίες σε πολλαπλές κλίμακες στο επίπεδο, καθώς και οι κώδικες σε *Mathematica 12* που δημιουργήθηκαν από τον συντάκτη της παρούσας διπλωματικής
- Κεφάλαιο 4ο: Παρουσιάζονται οι όσες αριθμητικές αναλύσεις μπόρεσαν και υλοποιήθηκαν επιτυχώς, και
- Κεφάλαιο 5ο: Παρουσιάζονται τα συμπεράσματα της έρευνας

Τέλος, απευθύνω ιδιαίτερες ευχαριστίες στους:

- κ. Μιχάλη Αγόρα, Επίκουρο Καθηγητή και Επιβλέπον της διπλωματικής μου εργασίας, ο οποίος μου χάρισε την ευκαιρία να παρακολουθήσω το μάθημα των *Σύνθετων Υλικών* όταν βρισκόμουν στο 3ο έτος των σπουδών μου, με αποτέλεσμα να ασχοληθώ και εγώ, όσο δηλαδή τα κατάφερα, με την μελέτη των σύνθετων υλικών.
- Χάρη Σιδερή, τελειόφοιτο του τμήματος, ο οποίος ήταν αυτός που μου έδωσε το «βάπτισμα του πυρός» ώστε να ξεκινήσω και 'γω με την σειρά μου να εργάζομαι με το Abaqus.
- Σωκράτη Ξένο, Διδακτορικό του τμήματος, που μου προσέφερε τις ιδιαίτερες γνώσεις του πάνω στο Abaqus, και πληθώρα συζητήσεων πάνω σε θεωρητικά όσο και υπολογιστικά θέματα και τεχνικές, ώστε να ξεπεραστούν τα όποια εμπόδια εμφανίζονταν αναφορικά με τις αναλύσεις μου.
- κ. Νικόλαο Αράβα, Καθηγητή και Υπεύθυνο του Εργαστηρίου Υπολογιστική Μηχανικής στο τομέα ΜΥΚ, ο οποίος με δέχθηκε ώστε να συμμετάσχω στα μαθήματα της *Μηχανικής των Συνεχών Μέσων* και την *Πλαστικότητα*, τα οποία προσφέρονταν σε μεταπτυχιακό επίπεδο.
- κ. Κ. Δανά, Αναπληρωτή Καθηγητή στο Τμήμα Μηχανικής της Ecole Polytechnique, ο οποίος συνέταξε τα εξωτερικά αρχεία για την ανάλυση διαφασικών σύνθετων υλικών στο ABAQUS
- κ. Ανδρέα Ζούπα, Επισκέπτης Καθηγητής, ο οποίος πάντα έθετε το ερώτημα «και πως θα εξηγήσεις σε έναν που ξέρει θεωρητική φυσική και δεν έχει ασχοληθεί ποτέ του με τα σύνθετα υλικά, το φυσικομαθηματικό νόημα αυτών που κάνεις;», και τέλος
- κ. Νικόλαο Χολέβα, την μοναδική Τεχνική Υποστήριξη που μπόρεσε και επιδιόρθωσε πληθώρα τεχνικών προβλημάτων που εμφανίζονταν (ειδικά δε μετά το Πάσχα του 2022) σχεδόν σε κάτι περισσότερο από μηνιαία βάση, αναφορικά κυρίως με το δίκτυο του Server στο Τμήμα.

## Κεφάλαιο 2

# Το Θεωρητικό Πλαίσιο

Στόχος του κεφαλαίου είναι η περιγραφή των γεωμετριών των μικροδομών σε μία και πολλαπλές κλίμακες, να γίνουν αναφορές στο πρόβλημα της ομογενοποίησης σε μία (Papadioti et al. [5], Agoras et al. [2]) και πολλαπλές κλίμακες μήκους, και τέλος, να γίνουν οι εκτιμήσεις των Hashin-Shtrikman για τις μικροδομές. Το πρόβλημα της ομογενοποίησης σε πολλαπλές κλίμακες αναπτύσσεται και αναλύεται από τους Agoras and Ponte Castañeda [1].

### 2.1 Τα Σύνθετα Υλικά & Οι Ιδιότητες των Επιμέρους Φάσεων

Για την ανά χειράς έρευνα, ένα ετερογενές υλικό αποτελείται από δύο φάσεις, για τις οποίες ισχύουν τα εξής

1. είναι ομογενείς
2. είναι ισότροπες με ταυστές  $\mathcal{L}_{ijkl}^{(r)} = (\kappa^{(r)} - \frac{2}{3}\mu^{(r)})\delta_{ij}\delta_{km} + \mu^{(r)}(\delta_{ik}\delta_{jm} + \delta_{im}\delta_{jk})$
3. είναι ασυμπίεστες, δηλαδή  $\nabla \cdot \mathbf{u}^{(r)} = 0$
4. είναι γραμμικώς ελαστικές, δηλαδή  $\boldsymbol{\sigma}^{(r)} = \boldsymbol{\mathcal{L}}^{(r)} : \boldsymbol{\varepsilon}^{(r)}$  και
5. είναι τέλεια πλαστικές υπακούοντας στο κριτήριο διαρροής κατά von Mises

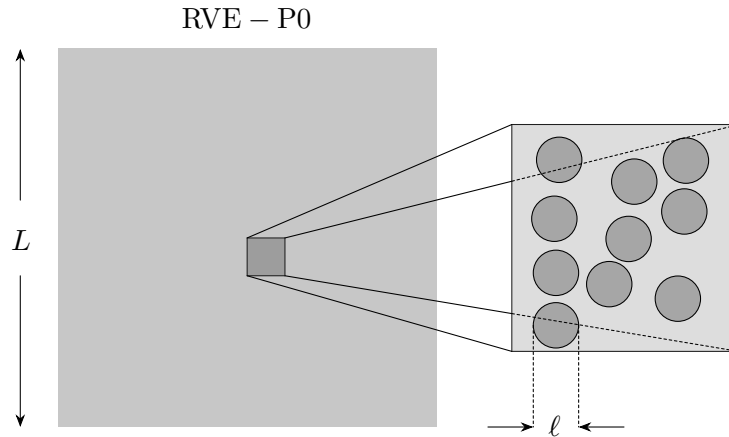
Συγκεκριμένα, μια κατηγορία των ετερογενών υλικών είναι αυτή των σύνθετων, όπου υπάρχει ο περιορισμός της διάκρισης των κλιμάκων μήκους των μεγεθών των φάσεων σε σύγκριση με την κυψελίδα. Όταν ισχύει η διάκριση κλίμακας μήκους των φάσεων, τότε η κυψελίδα ονομάζεται *Αντιπροσωπευτικό Στοιχείο Ογκου* (Representative Volume Element, ή RVE) όπως φαίνεται και στο Σχήμα 2.1. Οπότε, για όποια φάση ξεχωριστά, έστω την φάση ( $r$ ), θα ισχύει για την γραμμικά ελαστική περιοχή ότι υπάρχει κυρτή συνάρτηση δυναμικού

$$w^{(r)} = \frac{1}{2}\kappa^{(r)}\varepsilon_{ll}^2 + \mu^{(r)} \sum_{i,j} \left( \varepsilon_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\varepsilon_{ll} \right)^2, \quad r = 1, 2 \quad (2.1)$$

ως προς ένα κύριο σύστημα συντεταγμένων, όπου  $\kappa^{(r)}$  και  $\mu^{(r)}$  αποτελούν το μέτρο διογκώσεως και μέτρο διατμήσεως της κάθε φάσης ξεχωριστά, αντιστοίχως. Επιπλέον, αναφορικά με το πεδίο των μετατοπίσεων θα υπάρχει ο περιορισμός ότι  $\nabla \cdot \mathbf{u}^{(r)} = 0$  λόγω της ασυμπίεστότητας. Οι εξισώσεις ισορροπίας είναι

$$\nabla \cdot \frac{\partial w^{(r)}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{0} \Rightarrow \left( \kappa^{(r)} + \frac{1}{3}\mu^{(r)} \right) \nabla \left( \nabla \cdot \mathbf{u}^{(r)} \right) + \mu^{(r)} \nabla^2 \mathbf{u}^{(r)} = \mathbf{0}, \quad r = 1, 2$$

οι ελαστοστατικές εξισώσεις *Navier-Cauchy* για ομογενή και ισότροπα υλικά, οι οποίες ισχύουν για κάθε φάση ξεχωριστά.



Σχήμα 2.1: Το Αντιπροσωπευτικό Στοιχείο Όγκου-ή-RVE υφίσταται μόνο όταν υπάρχει ξεκάθαρη διάκριση κλίμακας μήκους, δηλαδή  $\ell \ll L$  και θεωρητικά  $\ell/L \rightarrow 0$ . Γεωμετρίες σαν αυτές οι οποίες αποτελούνται από ίδια σωματίδια ή σωματίδια που δεν υπάρχει ξεκάθαρη διάκριση κλίμακας μήκους ανά μεταξύ τους, καλούνται ως απλής κλίμακας και συμβολίζονται ως P0.

## 2.2 Τα Χαρακτηριστικά των Τυχαίων Σύνθετων Υλικών με Περιοδική Μικροδομή

### 2.2.1 Τυχαίες Μικροδομές

Η μικροδομή κάθε συγκεκριμένου σύνθετου υλικού ορίζεται από τις χαρακτηριστικές συναρτήσεις  $\chi^{(r)} = \chi^{(r)}(\mathbf{x})$  των  $r$  φάσεων που συνιστούν το υλικό. Εάν οι χαρακτηριστικές συναρτήσεις  $\chi^{(r)}$  είναι τυχαίες μεταβλητές, τότε η μικροδομή *αποκαλείται τυχαία*. Για την ακρίβεια, ο όρος «τυχαία μικροδομή-ή-τυχαίο σύνθετο υλικό» αναφέρεται σε ένα σύνολο  $\mathcal{S}$  διαφορετικών μικροδομών  $\alpha \in \mathcal{S}$ , οι οποίες υλοποιούνται με πυκνότητας πιθανότητας  $p(\alpha)$  στο  $\mathcal{S}$ . Επομένως, για ένα τυχαίο σύνθετο υλικό  $\chi^{(r)} = \chi^{(r)}(\mathbf{x}, \alpha)$  η πληροφορία για την μικροδομή αναμένεται να είναι διαθέσιμη μέσω των στατιστικών ροπών των συναρτήσεων  $\chi^{(r)} = \chi^{(r)}(\mathbf{x}, \alpha)$ . Στην πράξη, μόνο μερική πληροφορία για τη μικροδομή ενός τυχαίου σύνθετου υλικού είναι διαθέσιμη. Παρακάτω παρουσιάζονται συγκεκριμένοι ορισμοί:

- Η ροπή 1ης τάξεως της  $\chi^{(r)}(\mathbf{x}, \alpha)$  (ή, η συνάρτηση ενός σημείου) ορίζεται ως η μέση τιμή της συναρτήσεως  $\chi^{(r)}(\mathbf{x}, \alpha)$  στο  $\mathcal{S}$ :

$$p^{(r)}(\mathbf{x}) = \int_{\mathcal{S}} \chi^{(r)}(\mathbf{x}, \alpha) p(\alpha) d\alpha$$

και εκφράζει την πιθανότητα η φάση ( $r$ ) να βρίσκεται στο σημείο  $\mathbf{x}$

- Η ροπή 2ης τάξεως των  $\chi^{(r)}(\mathbf{x}, \alpha), \chi^{(s)}(\mathbf{x}', \alpha)$  (ή, οι συναρτήσεις συσχέτισης δυο σημείων) ορίζονται ως οι μέσες τιμές των γινομένων  $\chi^{(r)}(\mathbf{x}, \alpha)\chi^{(s)}(\mathbf{x}', \alpha)$  στο  $\mathcal{S}$

$$p^{(rs)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \int_{\mathcal{S}} \chi^{(r)}(\mathbf{x}, \alpha)\chi^{(s)}(\mathbf{x}', \alpha) p(\alpha) d\alpha$$

και εκφράζουν την πιθανότητα η φάση ( $r$ ) να βρίσκεται στο σημείο  $\mathbf{x}$  και, ταυτόχρονα, η φάση ( $s$ ) να βρίσκεται στο σημείο  $\mathbf{x}'$ .

- Οι ροπές μεγαλύτερης τάξεως ορίζονται ανάλογα.

Ορισμένες υποθέσεις που ισχύουν αναφέρονται στην

1. Στατιστική ομογένεια :

- Οι πιθανότητες ενός σημείου  $p^{(r)}(\mathbf{x})$  είναι ανεξάρτητες του  $\mathbf{x}$ , δηλαδή  $p^{(r)} = \text{σταθερή}$
- Οι πιθανότητες δυο σημείων  $p^{(rs)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  εξαρτώνται μόνο από την σχετική θέση των  $\mathbf{x}$  και  $\mathbf{x}'$ , δηλαδή  $p^{(rs)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = p^{(rs)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$
- Γενικότερα, οι πιθανότητες  $n$  σημείων εξαρτώνται μόνο από τη σχετική διάταξη των σημείων στο χώρο.

2. Εργοδικότητα : αν  $m = \dim \Omega$  και  $c^{(r)}$  η συγκέντρωση της  $r$  φάσης

$$p^{(r)} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \chi^{(r)}(\mathbf{x}) d^m \mathbf{x} = c^{(r)}$$

$$p^{(rs)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \chi^{(r)}(\mathbf{x} + \mathbf{x}'') \chi^{(s)}(\mathbf{x}' + \mathbf{x}'') d^m \mathbf{x}''$$

κ.ο.κ.

3. Στατιστική ανεξαρτησία για μεγάλες αποστάσεις στο  $\Omega$

$$p^{(rs)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \rightarrow c^{(r)} c^{(s)} \quad \text{καθώς} \quad \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\| \rightarrow \infty$$

η οποία καταλαβαίνουμε ότι *δεν μπορεί να ισχύει όταν έχουμε περιοδικές μικροδομές.*

4. Ελλειψοειδής συμμετρία :

$$p^{(rs)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = p^{(rs)}(\|\mathbf{Z}^{-1} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')\|)$$

όπου  $\mathbf{Z}$  είναι ένας συμμετρικός, θετικά ορισμένος τανυστής 2ας τάξεως, ο οποίος ορίζει τα ακριβή γεωμετρικά χαρακτηριστικά της ελλειψοειδούς συμμετρίας. Όταν δε ο  $\mathbf{Z} = \delta$  τότε έχουμε **Στατιστική Ισοτροπία**.

2.2.2 Οι Γεωμετρίες των Μικροδομών P0, P2 και P1

Σκοπός της παρούσας ενότητας είναι να περιγραφούν οι γεωμετρίες των κυψελίδων των μικροδομών P0, P2 και P1, καθώς και να ορισθούν οι συμβολισμοί και οι συμβάσεις υπολογισμού των συγκεντρώσεων, όπως είναι αυτές που βρίσκονται στο [1]. Για τις γεωμετρίες P0 όπως φαίνεται και στο Σχήμα 2.1, έστω  $\{\mathbf{x}_n\}_{n=1}^{N^{(2)}}$  να αποτελεί το σύνολο των  $N^{(2)}$  κέντρων/θέσεων των σωματιδίων στον RVE. Η χαρακτηριστική συνάρτηση της φάσης ( $r$ ) είναι αυτή που

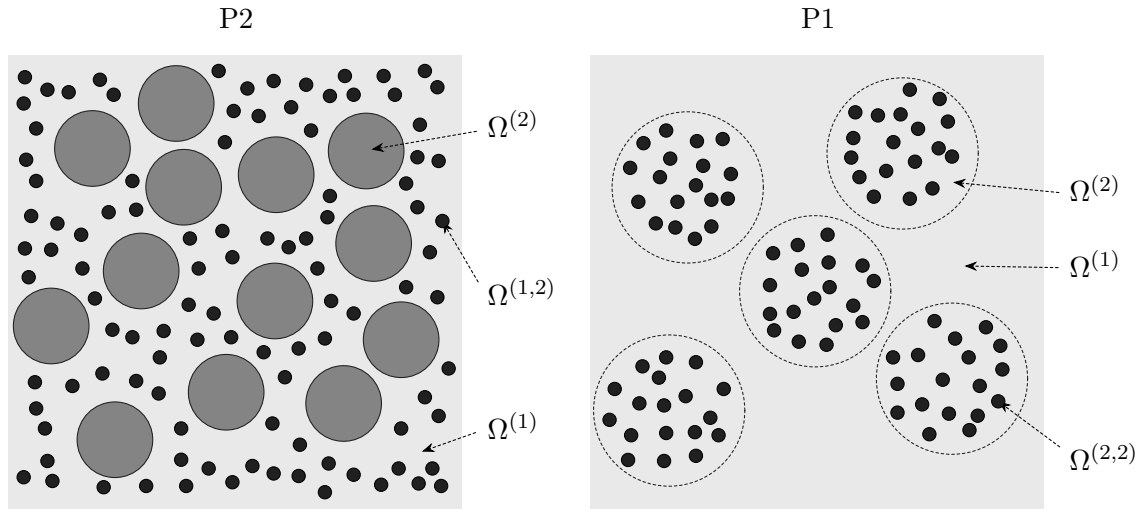
$$\chi^{(r)}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in \text{int}(\Omega^{(r)}) \\ 0, & \mathbf{x} \notin \text{cl}(\Omega^{(r)}) \end{cases}, \quad r = 1, 2$$

όπου  $\text{cl}(\Omega^{(r)}) = \text{int}(\Omega^{(r)}) \cup \partial\Omega^{(r)}$ . Είτε μιλάμε για δίσκους στο επίπεδο είτε για σφαίρες στον χώρο, αν  $R$  η ακτίνα τους αντίστοιχα, τότε η χαρακτηριστική συνάρτηση παίρνει την μορφή

$$\chi^{(2)}(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{N^{(2)}} \vartheta(R - \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_n\|)$$

όπου  $\vartheta$  αποτελεί την βηματική  $\vartheta$ -Heaviside. Η συγκέντρωση ή το κλάσμα όγκου που καταλαμβάνουν τα σωματίδια υπολογίζεται για  $m = \dim \Omega$

$$c^{(2)} = \frac{|\Omega^{(2)}|}{|\Omega|} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \chi^{(2)}(\mathbf{x}) d^m \mathbf{x}$$



Σχήμα 2.2: Οι RVEs των μικροδομών P2 & P1. Τα μεγάλα σωματίδια ανήκουν στην μεσοκλίμακα και τα μικρά στην μικροκλίμακα. Ειδικά για την P1, τα μεγάλα «σωματίδια» είναι αυτά που φαίνονται με τις διακεκομμένες γραμμές, ενώ εντός της φραγμένης περιοχής τους υπάρχουν τα μικρά σωματίδια, δημιουργώντας δηλαδή *σμήνη σωματιδίων*.

Στο Σχήμα 2.2 φαίνονται οι γεωμετρίες των μικροδομών P1 και P2. Μικροδομές σαν αυτές θεωρούνται αντιπροσωπευτικές μόνο όταν υπάρχει ξεκάθαρη διάκριση κλιμάκων μήκους σε κάθε στοιχείο της. Όταν αυτές είναι αντιπροσωπευτικές, θα καλούνται ως *Μικροδομές Σωματιδιακού Τύπου σε 2 Κλίμακες Μήκους* (προφανώς θα μπορούσε να είναι σε περισσότερες, αρκεί να ισχύει η ξεκάθαρη διάκριση). Τότε, οι κλίμακες μήκους θα ονομάζονται *μεσοκλίμακα* για τα «μεγάλα» σωματίδια και *μικροκλίμακα* για τα «μικρά» σωματίδια. Στο Σχήμα 2.5 φαίνεται η μικροδομή P2 σαν να ήταν αντιπροσωπευτική όπου διακρίνεται η μεσοκλίμακα από την μικροκλίμακα. Έστω  $\{\mathbf{x}_n\}_{n=1}^{N^{(2)}+N^{(\cdot,2)}}$  ένα σύνολο  $N^{(2)} + N^{(\cdot,2)}$  κέντρων/θέσεων όλων των σωματιδίων (μικρών και μεγάλων) στον RVE της κάθε κατηγορίας. Η χαρακτηριστική συνάρτηση της φάσης  $(r, p)$

$$\chi^{(r,p)}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in \text{int}(\Omega^{(r,p)}) \\ 0, & \mathbf{x} \notin \text{cl}(\Omega^{(r,p)}) \end{cases}, \quad r = 1, 2$$

όπου  $\text{cl}(\Omega^{(r,p)}) = \text{int}(\Omega^{(r,p)}) \cup \partial\Omega^{(r,p)}$ . Ομοίως με παραπάνω, είτε μιλάμε για δίσκους στο επίπεδο είτε για σφαίρες στον χώρο, αν  $R_p$  η ακτίνα από τις  $k$ -οικογένειες, τότε η χαρακτηριστική συνάρτηση παίρνει την μορφή

$$\chi^{(2)}(\mathbf{x}) = \sum_{p=1}^k \sum_{n=1}^{N^{(p,2)}} \vartheta(R_p - \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_n\|)$$

ενώ η *μερική συγκέντρωση* που καταλαμβάνουν τα σωματίδια υπολογίζεται για  $m = \dim \Omega$ .

$$c^{(\cdot,2)} = \frac{|\Omega^{(2)}|}{|\Omega^{(\cdot)}|} = \frac{1}{|\Omega^{(\cdot)}|} \int_{\Omega^{(\cdot)}} \chi^{(2)}(\mathbf{x}) d^m \mathbf{x}$$

Με βάση τα παραπάνω, για τις μερικές συγκεντρώσεις  $c^{(2)}$  και  $c^{(\cdot,2)}$  στην μεσοκλίμακα και την μικροκλίμακα αντίστοιχα, ανάλογα με την γεωμετρία διακρίνουμε τα εξής:

- Για τις P2 βλέπουμε πως η μικροκλίμακα βρίσκεται στον φορέα του σύνθετου, δηλαδή εντός της φάσης (1), ενώ
- Για τις P1 βλέπουμε πως η μικροκλίμακα βρίσκεται εντός των «σωματιδίων» (είναι η φραγμένη περιοχή), δηλαδή εντός της φάσης (2).

Γεωμετρίες σαν τις P1 καλούνται σμήνη, καθώς τα σωματίδια συσσωρεύονται εντός φραγμένων περιοχών (οι διακεκομμένοι κύκλοι στο Σχήμα 2.2). Με βάση τους παραπάνω ορισμούς, βλέπουμε πως ορίζονται δύο χώροι, ανάλογα με το πού βρίσκονται τα σωματίδια<sup>1</sup>. Έχουμε

$$\text{Για τις P2 : } c^{(2)} = \frac{|\Omega^{(2)}|}{|\Omega|} \quad \text{και} \quad c^{(1,2)} = \frac{|\Omega^{(1,2)}|}{|\Omega^{(1)}|} \quad (2.2)$$

$$\text{Για τις P1 : } c^{(2)} = \frac{|\Omega^{(2)}|}{|\Omega|} \quad \text{και} \quad c^{(2,2)} = \frac{|\Omega^{(2,2)}|}{|\Omega^{(2)}|} \quad (2.3)$$

με  $|\Omega^{(1)}| = |\Omega| - |\Omega^{(2)}|$ , δηλαδή ο όγκος της μήτρας και των σωματιδίων που ανήκουν στην μικροκλίμακα. Για να υπολογίσουμε την συνολική συγκέντρωση για τις P2 κάνουμε

$$c^{(1,2)} = \frac{|\Omega^{(1,2)}|}{|\Omega^{(1)}|} = \frac{|\Omega^{(1,2)}|/|\Omega|}{|\Omega^{(1)}|/|\Omega|} = \frac{\hat{c}^{(1,2)}}{1 - c^{(2)}} \Rightarrow \hat{c}^{(1,2)} = (1 - c^{(2)})c^{(1,2)}$$

όπου  $\hat{c}^{(1,2)}$  είναι η μερική συγκέντρωση που μετράται ως προς την  $\Omega$ . Οπότε, η συνολική συγκέντρωση των σωματιδίων ως προς το  $\Omega$ , έστω  $c^{(f)}$ , θα υπολογίζεται

$$c^{(f)} = c^{(2)} + \hat{c}^{(1,2)} \Rightarrow \boxed{c^{(f)} = c^{(2)} + c^{(1,2)} - c^{(2)}c^{(1,2)}} \quad (2.4)$$

Για τις P1 θα είναι, δεδομένου ότι η συνολική συγκέντρωση είναι  $c^{(f)}$

$$c^{(2,2)} = \frac{|\Omega^{(2,2)}|}{|\Omega^{(2)}|} = \frac{|\Omega^{(2,2)}|/|\Omega|}{|\Omega^{(2)}|/|\Omega|} = \frac{c^{(f)}}{c^{(2)}} \Rightarrow \boxed{c^{(f)} = c^{(2)}c^{(2,2)}} \quad (2.5)$$

Συγκεκριμένα, για λόγους απλούστευσης αναφορικά με τις P2, θα υποθέσουμε ότι έχουμε ίσες μερικές συγκεντρώσεις, δηλαδή  $c^{(2)} = c^{(1,2)} = \hat{c}$ , οπότε

$$(2.4) \xrightarrow{c^{(2)}=c^{(1,2)}=\hat{c}} \hat{c} = 1 - \sqrt{1 - c^{(f)}}$$

Τέλος, για τις P1 οι γραφικές για διάφορες συνολικές συγκεντρώσεις φαίνονται στο Σχήμα 2.3. Διαπιστώνουμε πως μέχρι και για μικρές συνολικές συγκεντρώσεις απαιτούνται, αναλόγως, μεγάλες μερικές.

## 2.3 Η Μακροσκοπική Απόκριση & Η Ομογενοποίηση των P0

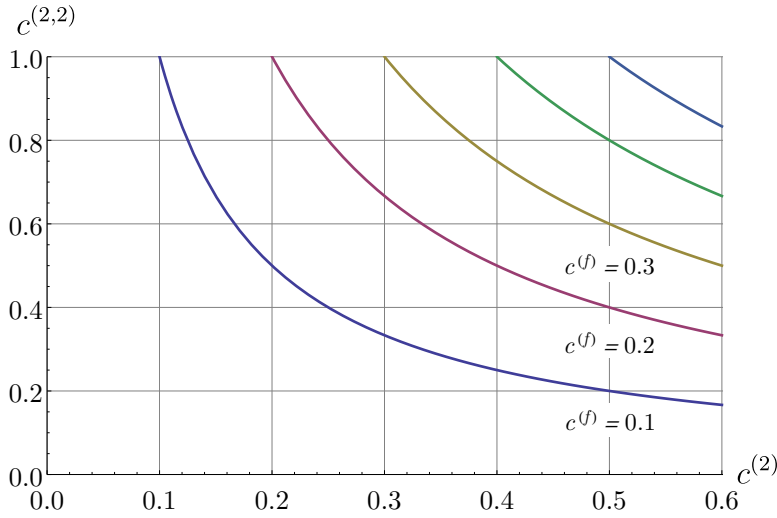
Έστω  $\mathcal{L}(\mathbf{x}) = \chi^{(1)}(\mathbf{x})\mathcal{L}^{(1)} + \chi^{(2)}(\mathbf{x})\mathcal{L}^{(2)}$  ο τοπικός τανυστής ελαστικότητας της P0. Αναφορικά με τις Συνοριακές Συνθήκες του προβλήματος, ακριβώς λόγω της συμμετρίας και της περιοδικότητας του συνόλου της μικροδομής, επιβάλλονται περιοδικές συνοριακές συνθήκες στα όρια κυψελίδων, οπότε οι μακροσκοπικές σταθερές υπολογίζονται από μία κυψελίδα και μόνο. Έτσι, για το Πρόβλημα της Ομογενοποίησης ισχύουν τα εξής:

1. Τα πεδία των τάσεων  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$  και παραμορφώσεων  $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$  που αναπτύσσονται στο υλικό είναι τέτοια ώστε

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) d^m \mathbf{x} \quad \text{και} \quad \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) d^m \mathbf{x}$$

2. **Συνοριακές Συνθήκες :**  $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}^*$ ,  $\forall \mathbf{x} \in \partial\Omega$  όπου  $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$  ένα ομοιόμορφο παμορφωσιακό πεδίο, και  $\mathbf{u}^*(\mathbf{x})$  είναι ένα πεδίο περιοδικής μετατόπισης το οποίο κατά μέση τιμή δεν παράγει παραμόρφωση στην κυψελίδα, δηλαδή  $\langle \boldsymbol{\varepsilon}^* \rangle = \langle \nabla \otimes \mathbf{u}^*(\mathbf{x}) \rangle = \mathbf{0}$  ([5],[2])

<sup>1</sup>Ένας ίσως πιο εύκολος τρόπος να αντιληφθούμε τις συμβάσεις των συμβολισμών, είναι να υποθέσουμε ότι ο φορέας, τα μεγάλα και τα μικρά σωματίδια αποτελούν τρεις ξεχωριστές φάσεις (το οποίο ξέρουμε ότι δεν ισχύει για τα εν λόγω σύνθετα). Για τις P2 ο σύνθετος φορέας αποτελείται από τον φορέα με τα μικρά σωματίδια, ενώ για τις P1 τα σύνθετα σωματίδια αποτελούνται από τον φορέα και τα μικρά σωματίδια.



Σχήμα 2.3: Οι γραφικές παραστάσεις για τον υπολογισμό των της συγκέντρωσης των σωματιδίων εντός φραγμένης περιοχής, δηλαδή για σμήνη σωματιδίων. Η σχέση είναι η  $c^{(2,2)} = c^{(f)}/c^{(2)}$  όπου  $c^{(2)}$  είναι συνολικά το περιεχόμενο των φραγμένων περιοχών. Βλέπουμε πως για  $c^{(2,2)} < 50\%$  απαιτούνται πολύ μεγάλες συγκεντρώσεις  $c^{(2)}$  που ορίζονται απ' τις φραγμένες περιοχές.

### 3. Συνθήκες στις Διεπιφάνειες των Φάσεων :

$$[\boldsymbol{\sigma}^+(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\sigma}^-(\mathbf{x})] \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad \text{και}$$

$$[\boldsymbol{\varepsilon}^+(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\varepsilon}^-(\mathbf{x})] = \frac{1}{2} \left( \mathbf{a}(\mathbf{x}) \otimes \mathbf{n}(\mathbf{x}) + [\mathbf{a}(\mathbf{x}) \otimes \mathbf{n}(\mathbf{x})]^\top \right)$$

όπου  $\mathbf{a}(\mathbf{x})$  ένα άγνωστο διανυσματικό πεδίο και  $\mathbf{n}(\mathbf{x})$  το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα την διεπιφάνεια.

Έστωσαν  $\Omega_0$  και  $\tilde{\Omega}_0$  η γεωμετρία του σύνθετου και ενός ισότροπου (ή εγκαρσίως ισότροπου όταν αναφερόμαστε στο επίπεδο) ομογενούς αναφοράς στις αρχικές τους διαμορφώσεις αντίστοιχα, οι οποίες παραμορφώνονται  $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$  κάτω από την φόρτιση  $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$  όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.4, τότε μέσω των μακροσκοπικών εξισώσεων θα είναι

$$\Omega : \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \mathcal{L}(\mathbf{x}) : \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle \quad \text{και} \quad \tilde{\Omega} : \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \tilde{\mathcal{L}} : \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$$

Έστω  $\delta$  τέτοιο ώστε

$$\delta = \frac{\|\mathcal{L} - \tilde{\mathcal{L}}\|}{\|\tilde{\mathcal{L}}\|} \quad \text{όπου} \quad \|\mathcal{L}\| = \sqrt{\text{tr}(\mathcal{L} : \mathcal{L})}$$

Το  $\Omega$  θα συμπεριφέρεται μακροσκοπικά σαν το ομογενές  $\tilde{\Omega}$  αν και μόνο αν επιτευχθεί έλεγχος σύγκλισης τέτοιος ώστε  $\delta \ll 1$ , όπως αναφέρουν οι Kachanov and Sevostianov [4] και Anoukou et al. [3].

## 2.4 Η Μακροσκοπική Απόκριση των P2 και P1

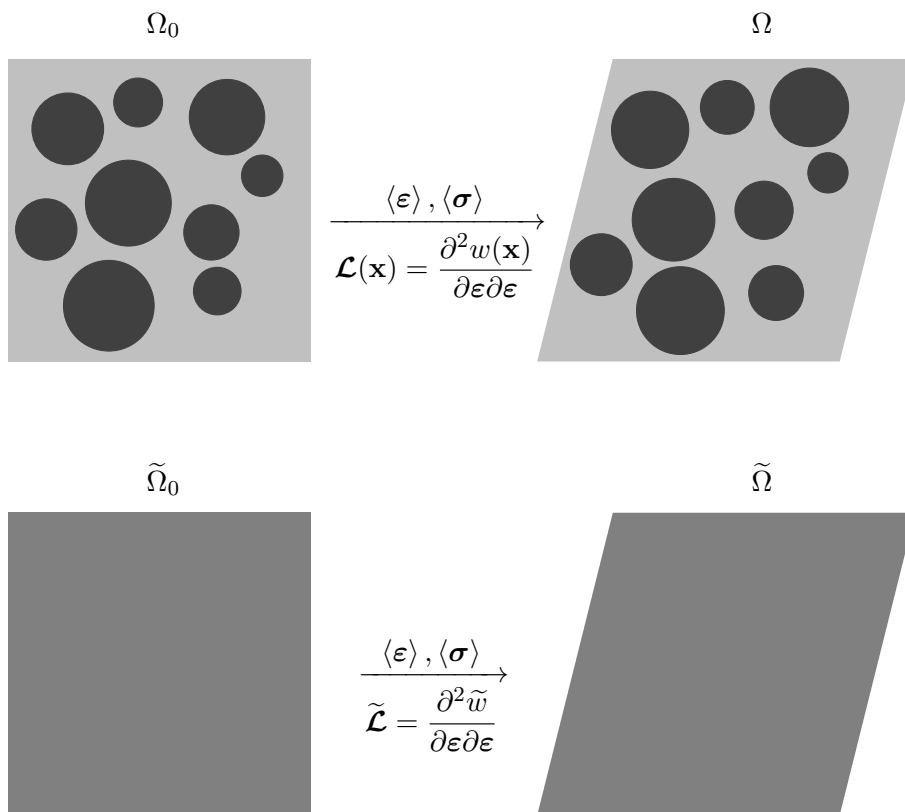
Για τον προσδιορισμό των μακροσκοπικών ιδιοτήτων των P2 και P1, ακολουθούμε την διαδικασία της *διαδοχικής ομογενοποίησης* ([1]), όπου ανάλογα το πρόβλημα, εκτιμούμε πρώτα τις μακροσκοπικές ιδιότητες της μικροκλίμακας (όπως ακριβώς περιγράφηκε και παραπάνω) και τις οποίες χρησιμοποιούμε ως τις ομογενοποιημένες ιδιότητες στην μεσοκλίμακα. Συγκεκριμένα,

- για τις P2 βρίσκουμε την μακροσκοπική απόκριση των μικρών σωματιδίων και του φορέα, που μαζί συνθέτουν έναν **σύνθετο φορέα** με μακροσκοπικό τανυστή

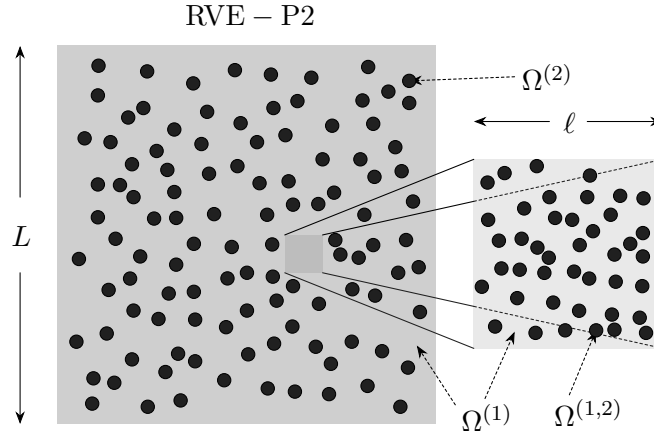
$$\tilde{\mathcal{L}}^{(1)} = \left( 2\tilde{\kappa}_p^{(1)}, \tilde{l}^{(1)}, \tilde{n}^{(1)}, 2\tilde{\mu}_p^{(1)}, 2\tilde{\mu}_n^{(1)} \right),$$

ενώ





Σχήμα 2.4: Η γεωμετρική αναπαράσταση ενός προβλήματος ομογενοποίησης. **Οι γεωμετρίες σχεδιάστηκαν καταχρηστικά**, καθώς είναι εμφανές ότι το  $\Omega$  δεν είναι RVE, καθώς επίσης οι μεταβολές στα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του σώματος μεταξύ απαραμόρφωτης και παραμορφωμένης κατάστασης είναι αμελητέες. Το σημαντικό είναι ότι οι  $\Omega$  και  $\tilde{\Omega}$  για να παραμορφωθούν το ίδιο απαιτείται διαφορετική ενέργεια. Σκοπός είναι η διαφορά των δύο δυναμικών να είναι ελάχιστη.



Σχήμα 2.5: Η γεωμετρία P2 αν θεωρηθεί ότι είναι αντιπροσωπευτική τόσο ως προς το  $\Omega^{(2)}$  όσο και ως προς το  $\Omega^{(1,2)}$ . Αν  $d^{(2)}$  και  $d^{(1,2)}$  είναι οι διάμετροι των σωματιδίων  $\Omega^{(2)}$  και  $\Omega^{(1,2)}$  αντίστοιχα, τότε  $d^{(2)} \ll L$  και  $d^{(1,2)} \ll l$ . Προφανώς θα ισχύουν επιπλέον ότι  $l \ll L$  καθώς και  $d^{(1,2)} \ll d^{(2)}$ . Ανάλογα ισχύουν και για τις γεωμετρίες P1.

- για τις P1 βρίσκουμε την μακροσκοπική απόκριση των μικρών σωματιδίων και του φορέα εντός των σωματιδίων, που μαζί συνθέτουν τα **σύνθετα σωματίδια** με μακροσκοπικό τανυστή

$$\tilde{\mathcal{L}}^{(2)} = \left( 2\tilde{\kappa}_p^{(2)}, \tilde{l}^{(2)}, \tilde{n}^{(2)}, 2\tilde{\mu}_p^{(2)}, 2\tilde{\mu}_n^{(2)} \right)$$

Ανάλογα ισχύουν και για τις **3Δ γεωμετρίες**, με την μόνη διαφορά ότι **οι μακροσκοπικοί τανυστές είναι ισότροποι**. Για τις **επίπεδες P2 & P1 αλλάζουν οι συμμετρίες ανά στάδιο ομογενοποίησης!**

## 2.5 Οι Εκτιμήσεις των Hashin-Shtrikman

Οι εκτιμήσεις των *Hashin-Shtrikman* είναι αναλυτικές εκφράσεις οι οποίες αναπτύχθηκαν για να εκτιμήσουμε τον ομογενοποιημένο μακροσκοπικό τανυστή  $\tilde{\mathcal{L}}$  σε πεπερασμένες συγκεντρώσεις, οι οποίες είναι ακριβείς 1ης τάξεως ως προς αυτές. Για αραιές συγκεντρώσεις γνωρίζουμε από τις λύσεις των προβλημάτων του Eshelby ότι δεν υπάρχουν επιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων στην μακροσκοπική απόκριση.

### 2.5.1 Οι Εκτιμήσεις των Hashin-Shtrikman για τις P0

Όλα τα υλικά είναι ασυμπίεστα, που σημαίνει ότι το  $\kappa^{(r)} \rightarrow \infty$ . Για μικροδομές απλής κλίμακας P0 που μελετήθηκαν σε θεωρητικό πλαίσιο, οι εκτιμήσεις των Hashin-Shtrikman είναι οι εξής:

- Για **Απολύτως Απαραμόρφωτα Σφαιρικά Σωματίδια** σε συγκέντρωση  $c^{(2)} = c^{(s)}$ , όπου  $\kappa^{(1)}, \kappa^{(2)} \rightarrow \infty$  και  $\mu^{(2)} \rightarrow \infty$  θα είναι

$$\frac{\tilde{\mu}}{\mu^{(1)}} = \frac{2 + 3c^{(s)}}{2(1 - c^{(s)})}$$

και προφανώς το  $\tilde{\kappa} \rightarrow \infty$ ,  $\tilde{E} = 3\tilde{\mu}$  και  $\tilde{\nu} = 1/2$ . Επιπλέον θα ισχύει ότι  $\langle \varepsilon \rangle = (1 - c^{(s)}) \langle \varepsilon \rangle^{(1)}$

- Για **Σφαιρικούς Πόρους** σε συγκέντρωση  $c^{(2)} = f$ , όπου  $\kappa^{(1)} \rightarrow \infty$ ,  $\kappa^{(2)} = 0$  και  $\mu^{(2)} = 0$  θα είναι

$$\frac{\tilde{\kappa}}{\mu^{(1)}} = \frac{4(1 - f)}{3f} \quad \text{και} \quad \frac{\tilde{\mu}}{\mu^{(1)}} = \frac{3(1 - f)}{3 + 2f}$$

και μέσω των αναλυτικών σχέσεων για ισότροπα υλικά  $\tilde{E} = \frac{9\tilde{\kappa}\tilde{\mu}}{3\tilde{\kappa} + \tilde{\mu}}$  και  $\tilde{\nu} = \frac{3\tilde{\kappa} - 2\tilde{\mu}}{2(3\tilde{\kappa} + \tilde{\mu})}$  θα είναι

$$\frac{\tilde{E}}{\mu^{(1)}} = \frac{36(1-f)}{11f+12} \quad \text{και} \quad \tilde{\nu} = \frac{f+6}{11f+12}$$

Επιπλέον θα ισχύει ότι  $\langle \sigma \rangle = (1-f) \langle \sigma \rangle^{(1)}$

- Για **Απολύτως Απαραμόρφωτες Παράλληλες Ύνες**  $c^{(2)} = c^{(f)}$ , όπου  $\kappa^{(1)}, \kappa^{(2)} \rightarrow \infty$  και  $\mu^{(2)} \rightarrow \infty$  θα είναι

$$\frac{\tilde{\mu}_p}{\mu^{(1)}} = \frac{1+c^{(f)}}{1-c^{(f)}}$$

και επιπλέον ότι  $\langle \varepsilon \rangle = (1-c^{(f)}) \langle \varepsilon \rangle^{(1)}$

- Για **Παράλληλους Κυλινδρικούς Πόρους** με  $c^{(2)} = f$  όπου  $\kappa^{(1)} \rightarrow \infty, \kappa^{(2)} = 0$  και  $\mu^{(2)} = 0$  θα είναι

$$\frac{\tilde{\mu}_p}{\mu^{(1)}} = \frac{1-f}{1+f}$$

Επιπλέον θα ισχύει ότι  $\langle \sigma \rangle = (1-f) \langle \sigma \rangle^{(1)}$ .

## 2.5.2 Οι Εκτιμήσεις των Hashin-Shtrikman για τις P2

Για να υπολογιστούν οι εκτιμήσεις των Hashin-Shtrikman για υλικά σε πολλαπλές κλίμακες, ακολουθούμε την *διαδοχική ομογενοποίηση* μέσω των απλών γεωμετριών P0. Ειδικά για τις γεωμετρίες P2 όπως φαίνονται και στο Σχήμα 2.2, αρχικά εκτιμούμε τα ομογενοποιημένα χαρακτηριστικά για τον σύνθετο φορέα  $\Omega^{(1)}$  με τα «μικρά/ούς» σωματίδια/πόρους στην μικροκλίμακα, και τέλος εκτιμούμε για την μακροκλίμακα  $\Omega$  με τα «μεγάλα/ους» σωματίδια/πόρους. Για αραιές συγκεντρώσεις  $c^{(2)} \ll 1 \Rightarrow \hat{c} \ll 1$  δεν περιμένουμε διαφοροποιήσεις μεταξύ των κλιμάκων μήκους για ίσες, πάντα, μερικές συγκεντρώσεις, γεγονός συμβατό με το πρόβλημα (των ιδιοπαραμορφώσεων) του Eshelby.

- Για **Απολύτως Στερέα Σφαιρικά Σωματίδια στην Μικροκλίμακα & την Μεσοκλίμακα** σε ίσες μερικές συγκεντρώσεις  $\hat{c} = 1 - \sqrt{1-c^{(s)}}$ , όπου  $\kappa^{(1)}, \kappa^{(2)} \rightarrow \infty$  και  $\mu^{(2)} \rightarrow \infty$  θα είναι

$$\frac{\tilde{\mu}}{\mu^{(1)}} = \left( \frac{2+3\hat{c}}{2(1-\hat{c})} \right)^2 = \frac{34-9c^{(s)}-30\sqrt{1-c^{(s)}}}{4(1-c^{(s)})}$$

και προφανώς το  $\tilde{\kappa} \rightarrow \infty, \tilde{E} = 3\tilde{\mu}$  και  $\tilde{\nu} = 1/2$ .

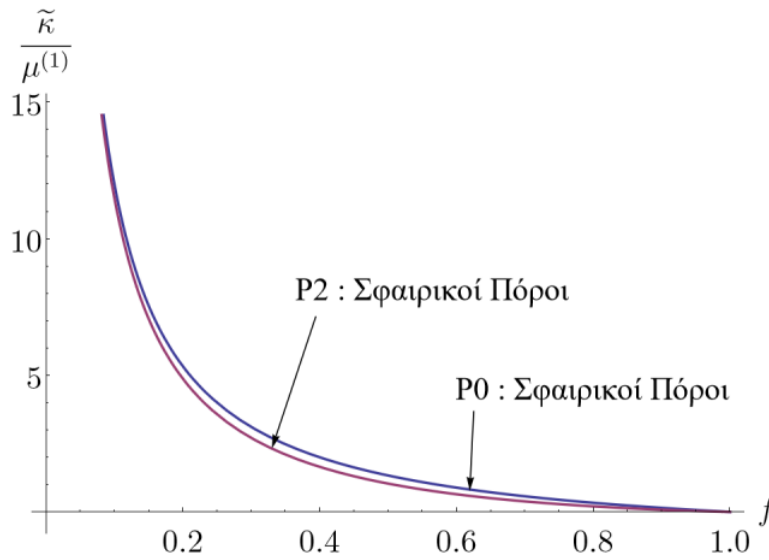
- Για **Σφαιρικούς Πόρους στην Μικροκλίμακα & την Μεσοκλίμακα** σε ίσα μερικά πορώδη  $\hat{f} = 1 - \sqrt{1-f}$ , όπου  $\mu^{(2)} = 0$  θα είναι

$$\frac{\tilde{\kappa}}{\mu^{(1)}} = \frac{2(1-f)}{5(1-\sqrt{1-f})-f} \quad \text{και} \quad \frac{\tilde{\mu}}{\mu^{(1)}} = \frac{9(4\sqrt{1-f}-7)(f-1)}{(2\sqrt{1-f}-5)(13f+44\sqrt{1-f}-53)}$$

και μέσω των αναλυτικών σχέσεων για ισότροπα υλικά  $\tilde{E} = \frac{9\tilde{\kappa}\tilde{\mu}}{3\tilde{\kappa} + \tilde{\mu}}$  και  $\tilde{\nu} = \frac{3\tilde{\kappa} - 2\tilde{\mu}}{2(3\tilde{\kappa} + \tilde{\mu})}$  θα είναι

$$\frac{\tilde{E}}{\mu^{(1)}} = \frac{54(4\sqrt{1-f}-7)(f-1)}{64f\sqrt{1-f}-387f-817(1-\sqrt{1-f})} \quad \text{και}$$

$$\tilde{\nu} = \frac{14f\sqrt{1-f}-72f-161\sqrt{1-f}+188}{64f\sqrt{1-f}-387f-817(1-\sqrt{1-f})}$$



Σχήμα 2.6: Το ομογενές μέτρο διογκώσεως για την 1-κλίμακα μήκους με σφαιρικούς πόρους V.S. 2-κλίμακες μήκους με σφαιρικούς πόρους στην μικροκλίμακα και την μεσοκλίμακα για ίσες μερικές συγκεντρώσεις. Όπως ξέρουμε από τα προβλήματα του Eshelby, για μικρές  $f \ll 1$  δεν υπάρχει επίδραση της κατανομής σε πολλαπλές κλίμακες μήκους.

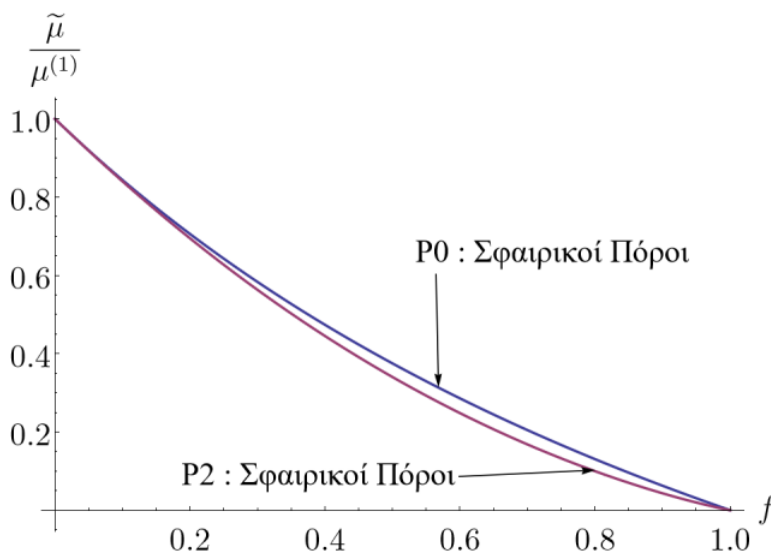
- Για Απολύτως Στερεές Παράλληλες Ύνες στην Μικροκλίμακα & την Μεσοκλίμακα σε ίσες μερικές συγκεντρώσεις  $\hat{c} = 1 - \sqrt{1 - c(f)}$ , όπου  $\kappa^{(1)}, \kappa^{(2)} \rightarrow \infty$  και  $\mu^{(2)} \rightarrow \infty$  θα είναι

$$\frac{\tilde{\mu}_p}{\mu^{(1)}} = \left( \frac{1 + \hat{c}}{1 - \hat{c}} \right)^2 = \frac{5 - c(f) - 4\sqrt{1 - c(f)}}{1 - c(f)}$$

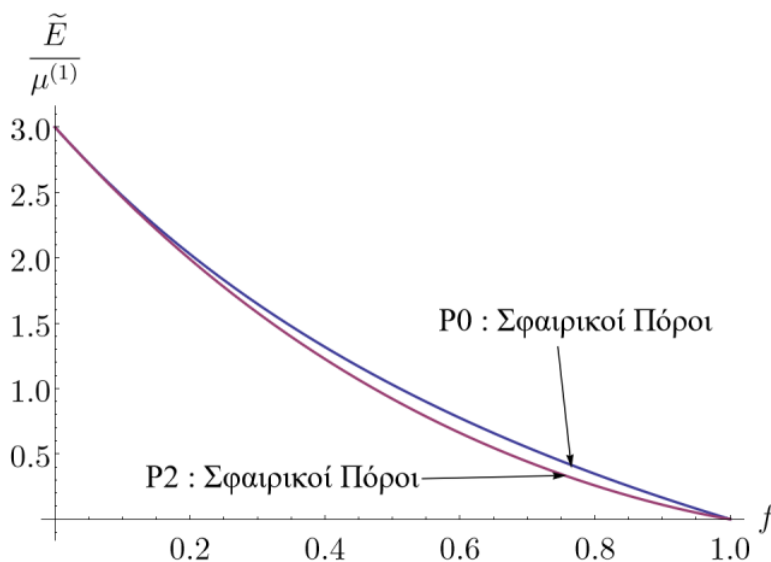
### 2.5.3 Οι Εκτιμήσεις των Hashin-Shtrikman για τις P1

Οι εκτιμήσεις αυτές δεν διαφέρουν από αυτές στην P0, με την μόνη διαφορά ότι η συνολική συγκέντρωση υπολογίζεται από την σχέση (2.5).

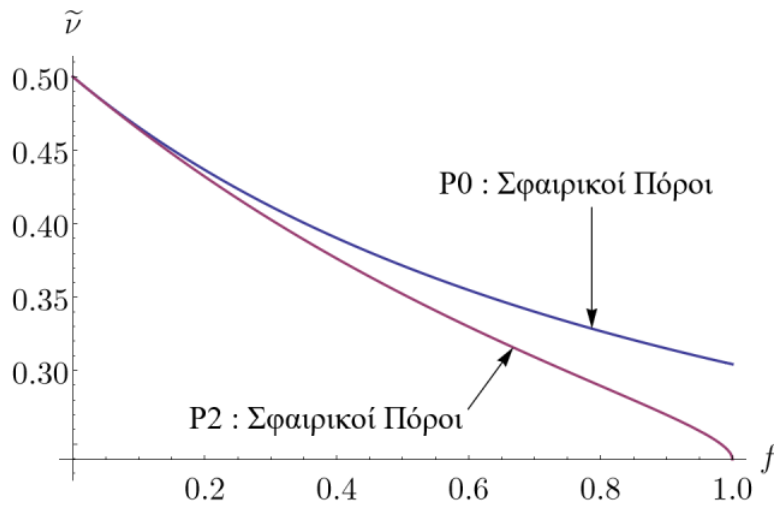
## 2.6 Οι Γραφικές Παραστάσεις των Εκτιμήσεων των Hashin-Shtrikman για P0 VS P2



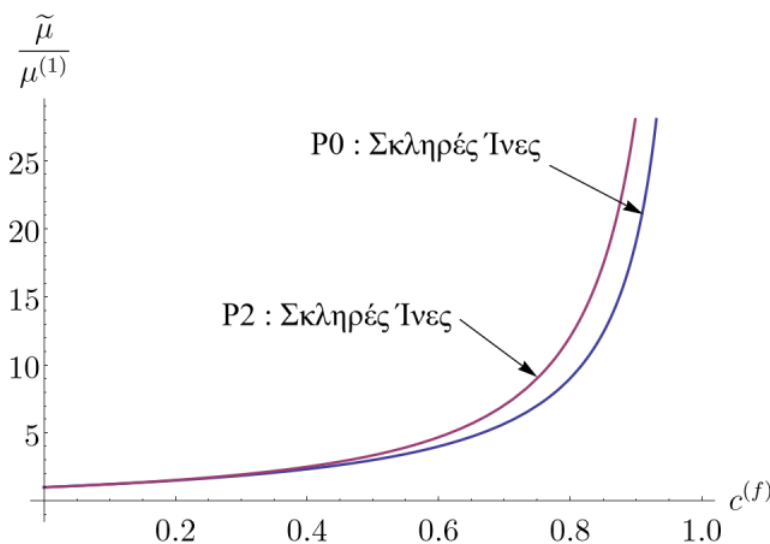
Σχήμα 2.7: Το ομογενές μέτρο διατμήσεως για την 1-κλίμακα μήκους με σφαιρικούς πόρους V.S. 2-κλίμακες μήκους με σφαιρικούς πόρους στην μικροκλίμακα και την μεσοκλίμακα για ίσες μερικές συγκεντρώσεις. Όπως ξέρουμε από τα προβλήματα του Eshelby, για μικρές  $f \ll 1$  δεν υπάρχει επίδραση της κατανομής σε πολλαπλές κλίμακες μήκους.



Σχήμα 2.8: Το ομογενές μέτρο ελαστικότητας για την 1-κλίμακα μήκους με σφαιρικούς πόρους V.S. 2-κλίμακες μήκους με σφαιρικούς πόρους στην μικροκλίμακα και την μεσοκλίμακα για ίσες μερικές συγκεντρώσεις. Όπως ξέρουμε από τα προβλήματα του Eshelby, για μικρές  $f \ll 1$  δεν υπάρχει επίδραση της κατανομής σε πολλαπλές κλίμακες μήκους.



Σχήμα 2.9: Το ομογενές μέτρο ελαστικότητας για την 1-κλίμακα μήκους με **σφαιρικούς πόρους** V.S. 2-κλίμακες μήκους με **σφαιρικούς πόρους** στην *μικροκλίμακα* και την *μεσοκλίμακα* για *ίσες μερικές συγκεντρώσεις*. Όπως ξέρουμε από τα προβλήματα του Eshelby, για μικρές  $f \ll 1$  δεν υπάρχει επίδραση της κατανομής σε πολλαπλές κλίμακες μήκους.



Σχήμα 2.10: Το ομογενές μέτρο διατμήσεως για την 1-κλίμακα μήκους με **απολύτως σκληρές ίνες** V.S. 2-κλίμακες μήκους με **απολύτως σκληρές ίνες** στην *μικροκλίμακα* και την *μεσοκλίμακα* για *ίσες μερικές συγκεντρώσεις*. Όπως ξέρουμε από τα προβλήματα του Eshelby, για μικρές  $c^{(f)} \ll 1$  δεν υπάρχει επίδραση της κατανομής σε πολλαπλές κλίμακες μήκους.

## Κεφάλαιο 3

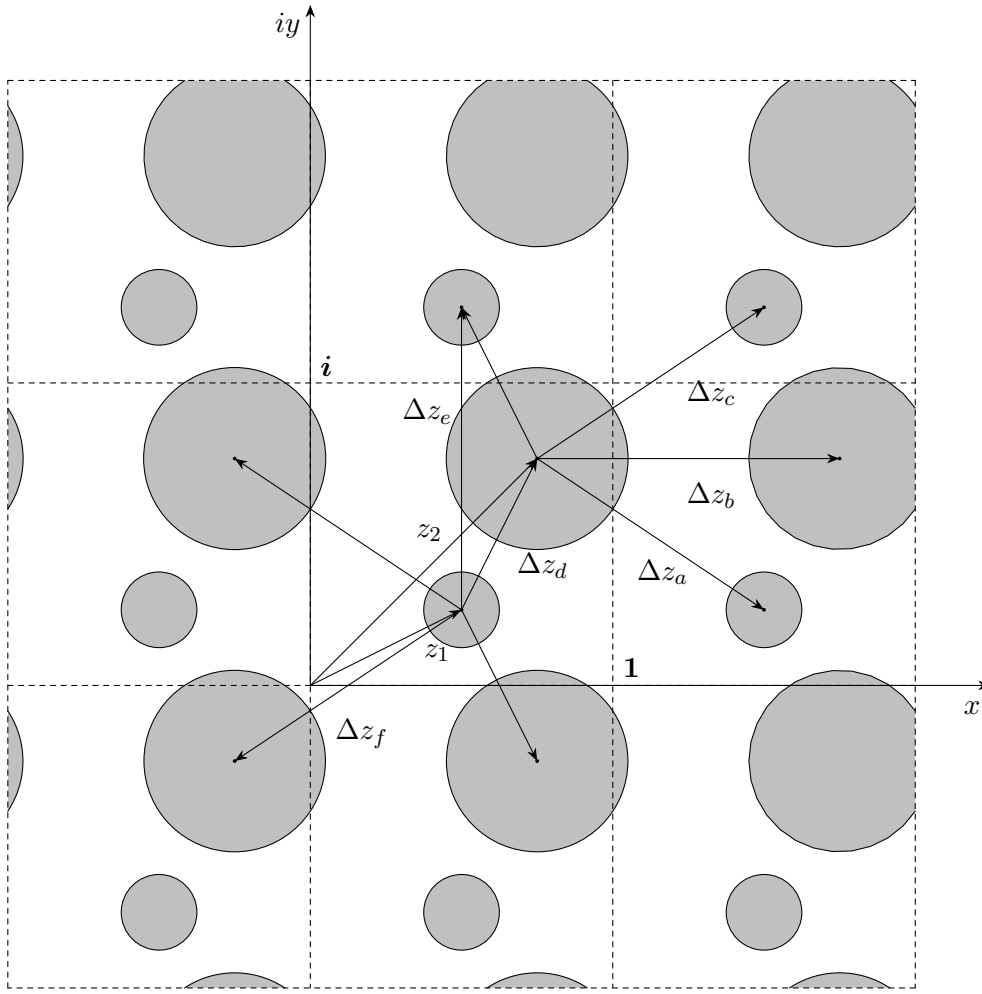
# Η Γεωμετρική Κατασκευή των Μικροδομών

Στο παρόν κεφάλαιο θα παρουσιαστεί ο τρόπος κατασκευής των κυψελίδων στο επίπεδο, οι οποίες θα αποτελούν τον RVE για ινώδη περιοδικές μικροδομές. Θεωρούμε πως οι ίνες είναι κύλινδροι, όπου οι άξονές τους είναι αυστηρά όλοι παράλληλοι. Αυτό σημαίνει πως υπάρχει επίπεδο κάθετο στους άξονες αυτούς, όπου η τομή του με τους κυλίνδρους είναι δίσκοι ακτίνας  $r_k$ . Το επίπεδο (κατοπτρικής συμμετρίας) αυτό με τους δίσκους θα αποτελεί την προσέγγιση του REV του σύνθετου, καθώς, για να είναι αντιπροσωπευτικό θα πρέπει να υπάρχει και διάκριση κλίμακας μήκους όπως φαίνεται και στο Σχήμα 2.1, γεγονός που απαιτεί πολλά μικρού μεγέθους σωματίδια (ίνες με μικρή διατομή). Αν το επίπεδο αντιπροσωπεύει την φάση (1) (την μήτρα δηλαδή), οι ίνες αποτελούν την φάση (2). Επιπλέον, μπορούμε να υποθέτουμε ότι οι παράλληλες ίνες μπορούν να έχουν την όποια διατομή, αρκεί να μην έχουν συσσωματωθεί/αλληλοκαλυφθεί. Αυτές θα απέχουν ανά μεταξύ τους μια απόσταση, έστω  $\varepsilon \times r_k > 0$ , καθώς και μια απόσταση από τα σύνορα της κυψελίδας, έστω με  $h \times r_k > 0$ . Τόσο το  $\varepsilon$  όσο και το  $h$ , θα καθορίζονται με τρόπο τέτοιο ώστε να μην υπάρχει θέμα με την δημιουργία των πλεγμάτων, ή με την μετέπειτα ανάλυση, όπως φαίνεται και στους Segurado and Llorca [6]. Όπως θα αναφερθεί και παρακάτω, ειδικά ο προσδιορισμός του  $\varepsilon$  είναι τόσο σημαντικός, καθώς θα αποτελέσει καθοριστικό παράγοντα που θα εξασφαλίσει την επιτυχία της κατασκευής του RVE. Ο μοναδικός τρόπος που μπορεί να βρεθεί η μεγαλύτερη δυνατή τιμή του γίνεται μέσω της διαδικασίας «δοκιμής-και-σφάλματος», καθώς εξαρτάται από την συγκέντρωση των σωματιδίων και τον αριθμό τους. Συγκεκριμένα, όσο λιγότερες είναι οι ίνες που πρέπει να καλύψουν μεγάλες συγκεντρώσεις, τόσο προσεγγίζουμε το όριο κορεσμού-ή-διαπίδυσης (Percolation Threshold), το οποίο αυτό όριο για το επίπεδο, όπως αποδεικνύεται στον Torquato [7], προσεγγίζεται για συγκεντρώσεις  $c^{(2)} > 50\%$ .

### 3.1 Ο Αλγόριθμος του RSA στο $\mathbb{C}$

Πριν αναφερθούμε στον αλγόριθμο του RSA, είναι σκόπιμο να καταγραφεί ότι ο συντάκτης προτίμησε να επιλέξει το μιγαδικό επίπεδο  $\mathbb{C}$  για την υλοποίηση του αλγορίθμου, παρά το  $\mathbb{R}^2$ . Αυτό έγινε καθαρά και μόνο για προσωπική διευκόλυνση και για κανέναν άλλο λόγο, διότι όπως αποδεικνύεται, το μιγαδικό επίπεδο έχει τα ίδια τοπολογικά χαρακτηριστικά με το πραγματικό, δηλαδή το  $\mathbb{C} \sim \mathbb{R}^2$  (διαβάζεται «το μιγαδικό επίπεδο είναι ισόμορφο του πραγματικού»), αλλά έχει διαφορετικά αλγεβρικά χαρακτηριστικά (διαφορετική αλγεβρική δομή). Αυτό πρακτικά σημαίνει ότι δεν πρόκειται να επηρεάσει το τελικό (γεωμετρικό) αποτέλεσμα. Τέλος, για την υλοποίηση του RSA χρησιμοποιήθηκε το συμβολικό πακέτο *Mathematica 12*, αυτό έχει την δυνατότητα να αποδίδει αποτελέσματα σε μιγαδική μορφή, καθώς και να λειτουργεί πολύ καλά με το μιγαδικό επίπεδο. Ακριβώς αυτό το γεγονός θα εκμεταλλευτούμε παρακάτω, ενώ η αξία του θα φανεί ιδίως για την δημιουργία των σμηνών.

Ο αλγόριθμος του RSA (Random Sequential Addition-ή-Adsorption) περιγράφει την διαδικασία κατά την οποία παράγεται τυχαία, μη αντιστρεπτά, η διαδοχική τοποθέτηση μη επικαλυπτόμενων σωματιδίων εντός ενός όγκου (Torquato [7]). Εν προκειμένω, όγκος αυτός θα είναι η μοναδιαία κυψελίδα, ενώ τα σωματίδια θα είναι αυτά



Σχήμα 3.1: Δύο σωματίδια που παρήχθησαν μέσω του RSA με κέντρα τους τα  $z_1$  και  $z_2$  εντός της μοναδιαίας κυψελίδας  $[0, 1] \times [0, i]$ , καθώς και η τοποθέτησή τους στους 8 γείτονες που συνορεύουν με αυτήν. Προφανώς, η διαδικασία συνεχίζεται μέχρι να τοποθετηθούν όσα σωματίδια επιθυμούμε και σε όποια συγκέντρωση.

όπου τα κέντρα τους θα είναι οι μιγαδικοί αριθμοί  $z_n$ . Επιπλέον, επειδή μακροσκοπικά ορίζεται περιοδική δομή, σημαίνει ότι όλες οι γειτονιές που συνορεύουν με τον RVE θα πρέπει να είναι συνεχείς. Έτσι, κάθε δίσκος που ανήκει τον RVE, θα ανήκει και στους γειτονικούς RVE's που συνορεύουν με αυτόν. Εφόσον η κυψελίδα ορίζεται ως ένα ορθογωνικό μιγαδικό χωρίο  $[0, 1] \times [0, i] \subseteq \mathbb{C}$  (ισόμορφο του  $[0, 1] \times [0, 1] \subseteq \mathbb{R}^2$ ), τότε συνορεύει με 8 γείτονες, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 3.1 Με την τυχαία τοποθέτηση ενός δίσκου, έστω  $z_1$ , εντός της κυψελίδας, ταυτόχρονα τοποθετούνται και όλοι οι δίσκοι που βρίσκονται στους 8 γείτονες ως εξής

$$z_1 \pm 1, \quad z_1 \pm i, \quad z_1 \pm (1 + i), \quad z_1 \pm (1 - i)$$

ή εναλλακτικά τοποθετούνται μέσω της συνάρτησης:

$$z_{1,k} = z_1 + \left[ \sqrt{2} + (1 - \sqrt{2}) \times (k \bmod 2) \right] e^{i \frac{(k-1)\pi}{4}}, \quad \forall k \in [1, 8]$$

Με την τυχαία τοποθέτηση ενός επιπλέον δίσκου, έστω  $z_2$ , γίνεται ο έλεγχος όλων των δυνατών συνδιασμών των αποστάσεων  $|\Delta z_a|, |\Delta z_b|, \dots, |\Delta z_f|, \dots$  μέσω της σχέσης

$$|\Delta z_{m,n}| = \sqrt{(z_m - z_n)(z_m - z_n)^*}$$



ενώ το κέντρο γίνεται δεκτό μόνο όταν δεν αλληλοεπικαλύπτεται με τα υπόλοιπα σωματίδια εντός και των γειτονικών κυψελίδων όταν

$$|\Delta z_{m,n}| \geq (1 + \varepsilon_1)r_1 + (1 + \varepsilon_1)r_2, \quad m \in \Omega^{(1)} \text{ και } n \in \Omega^{(2)}$$

με  $r_1$  και  $r_2$  να αποτελούν τις ακτίνες των δίσκων και  $\varepsilon_1, \varepsilon_2 > 0$  δύο σταθερές. Είναι προφανές πως όταν οι δείκτες αναφέρονται στο ίδιο  $\Omega^{(k)}$  τότε  $|\Delta z_{m,n}| \geq (2 + \varepsilon_k)r_k$ . Με κάθε επιπλέον τυχαία τοποθέτηση δίσκων πρέπει να γίνει πάλι η ίδια διαδικασία, έως ότου τοποθετηθούν όλοι οι δίσκοι που επιθυμούμε, ώστε να καλύψουν μια δεδομένη συγκέντρωση. Έτσι λειτουργεί ο RSA στο  $\mathbb{C}$ .

Μια επιπλέον συνθήκη που πρέπει να ικανοποιείται, είναι αυτή που λέει ότι τα σωματίδια πρέπει να απέχουν δεδομένη απόσταση  $h \times r_k > 0$  από τα σύνορα της κυψελίδας. Αυτό είναι κάτι που απαιτούμε συμπληρωματικά να ισχύει, καθώς υπάρχει ο κίνδυνος όταν οι δίσκοι οριακά να εφάπτονται με τα σύνορα του RVE, να μην καθίσταται δυνατή η δημιουργία πλεγμάτων, βασικό στοιχείο για την μετέπειτα ανάλυση.

Ο κώδικας σε Mathematica που κανείς μπορεί να φτιάξει τις P0 μέσω του RSA είναι ο παρακάτω:

```
ClearAll[c, NP, r, R, z, Z, w, W, f, F, l, d];
edge=Complex[1, 1];
c[1]=0.3;
NP[1]=40;
r[1]:=Sqrt[(c[1]*Re[edge]*Im[edge])/(Pi*NP[1])];

dist[P_, B_, a_, b_, c_, d_] :=
Sqrt[Re[(z[P, a, c]-z[B, b, d])*Conjugate[z[P, a, c]-z[B, b, d]]]];
```

Do[

```
Label[centre1];
z[1, i, 1]=RandomComplex[edge];
z[1, i, 2]=z[1, i, 1]+Re[edge];
z[1, i, 3]=z[1, i, 1]-Re[edge];
z[1, i, 4]=z[1, i, 1]+Im[edge]I;
z[1, i, 5]=z[1, i, 1]-Im[edge]I;
z[1, i, 6]=z[1, i, 1]+edge;
z[1, i, 7]=z[1, i, 1]+Conjugate[edge];
z[1, i, 8]=z[1, i, 1]-Conjugate[edge];
z[1, i, 9]=z[1, i, 1]-edge;
```

```
If[Between[Re[z[1, i, 1]]+r[1], {Re[edge], Re[edge]+0.1r[1]}] ||
Between[Im[z[1, i, 1]]+r[1], {Im[edge], Im[edge]+0.1r[1]}] ||
Between[Re[z[1, i, 1]]-r[1], {-0.1r[1], 0}] ||
Between[Im[z[1, i, 1]]-r[1], {-0.1r[1], 0}]
, Goto[centre1], Continue];
```

```
Do[If[dist[1, 1, i, m, n, k]!=0 &&
dist[1, 1, i, m, n, k]<=(2+0.1)r[1]
, Goto[centre1]
, {m, 1, i}, {n, 1, 9}, {k, 1, 9}];
, {i, 1, NP[1]}];
```

l=0;

Do[

```
If[Re[z[1, i, n]]<Re[edge]+r[1] && Re[z[1, i, n]]>-r[1] &&
```

```

Im[z[1,i,n]] < Im[edge] + r[1] &&
Im[z[1,i,n]] > - r[1], {l=1+1,w[1]=z[1,i,n]}, {n,1,9}, {i,1,NP[1]}]
Do[f[i]={Re[w[i]], Im[w[i]]}, {i,1,1}];
Do[W[i,n]={Re[z[1,i,n]], Im[z[1,i,n]]}, {i,1,NP[1]}, {n,1,9}]

```

### 3.2 Τα Σμήνη στο $\mathbb{C}$

Στην ενότητα αυτή θα αναλυθεί το γεωμετρικό πρόβλημα κατασκευής των σμηνών. Αυτό είναι ουσιαστικά ένα πρόβλημα τυχαίας τοποθέτησης δίσκων εντός μιας φραγμένης περιοχής (εν προκειμένω ενός κύκλου). Για να επιτευχθεί αυτό, προϋποθέτει την ύπαρξη κέντρων, έστω τα οποία δημιουργούνται από τον RSA εντός της κυψελίδας  $[0, 1] \times [0, i]$ . Έστω  $Z_n$  μιγαδικός αριθμός ο οποίος περιγράφει το κέντρο του  $n$ -κύκλου, και η ακτίνα του είναι  $R$ . Έστωσαν  $z_1$  και  $z_2$  δύο τυχαίοι μιγαδικοί αριθμοί οι οποίοι πιθανώς βρίσκονται εντός του  $n$ -κύκλου με κέντρο το  $Z_n$  όπως φαίνεται και στο Σχήμα 3.2. Για να βρίσκονται οι  $z_1$  και  $z_2$  εντός του οφείλουν

$$z_1 - Z_n = f(r_1)e^{i\theta_1} \quad \text{καθώς και} \quad z_2 - Z_n = f(r_2)e^{i\theta_2}$$

όπου  $r_1, r_2 \ll R$  οι ακτίνες και  $\theta_1, \theta_2 \in [0, 2\pi]$  τα βασικά ορίσματα των μιγαδικών  $z_1$  και  $z_2$  αντίστοιχα. Σκοπός είναι ο προσδιορισμός της πραγματικής συνάρτησης  $f(r_a)$ . Η τυχαία αυτή συνάρτηση είναι φραγμένη στο διάστημα  $(0, R - r_a], \forall r_a \ll R$  καθώς ο σκοπός είναι να δημιουργηθούν δίσκοι ακτίνας  $r_a$  εντός του μεγαλύτερου κύκλου  $R$ . Οπότε, η συνάρτηση θα πάρει την απλή μορφή

$$f(r_a) = \kappa(R - r_a), \quad \kappa \in [-1, 1]$$

όπου  $\kappa \in [-1, 1]$  κάποιος πραγματικός αριθμός. Τελικώς, οι θέσεις των σημείων που θα τοποθετούνται εντός του κύκλου, θα τοποθετούνται και στους γείτονες όμως φαίνεται παρακάτω

$$z_a = Z_n + (R - r_a)\kappa e^{i\theta_a}, \quad z_{a,k} = z_a + \left[ \sqrt{2} + \left(1 - \sqrt{2}\right) \times (k \bmod 2) \right] e^{i\frac{(k-1)\pi}{4}}, \quad \forall k \in [1, 8]$$

όπου  $\kappa e^{i\theta_a}$  είναι ένας μιγαδικός αριθμός με τυχαίο μέτρο  $\kappa \in [-1, 1]$  και τυχαίο βασικό όρισμα  $\theta_a \in [0, 2\pi]$ . Το φυσικό νόημα των σταθερών  $\kappa$  και  $\theta_a$  είναι αντίστοιχα το κατά πόσο κεντρικά και σε πόση στροφή αναφορικά με το κέντρο θα τοποθετηθούν οι απαιτούμενοι δίσκοι. Αν τα κέντρα τοποθετούνται εντός του κύκλου, τότε θα πρέπει να γίνει επιπλέον ο έλεγχος των μεταξύ τους αποστάσεων, και των αποστάσεων από τα σύνορα (όπως δηλαδή και παραπάνω). Έτσι λειτουργεί ο RSA για την δημιουργία σμηνών σωματιδίων.

Γενικά τα σμήνη δεν είναι εύκολα υλοποιήσιμες κατασκευές, καθώς:

- Εξαρτάται την  $c^{(2)} \Rightarrow c^{(2,2)}$  (βλέπε εξίσωση (2.5)) και
- Εξαρτάται από τον  $N^{(2,2)}$  (αριθμός σωματιδίων εντός της φραγμένης περιοχής)

Οι γεωμετρικοί λόγοι που μπορεί να δυσκολεύουν την κατασκευή τους είναι ότι:

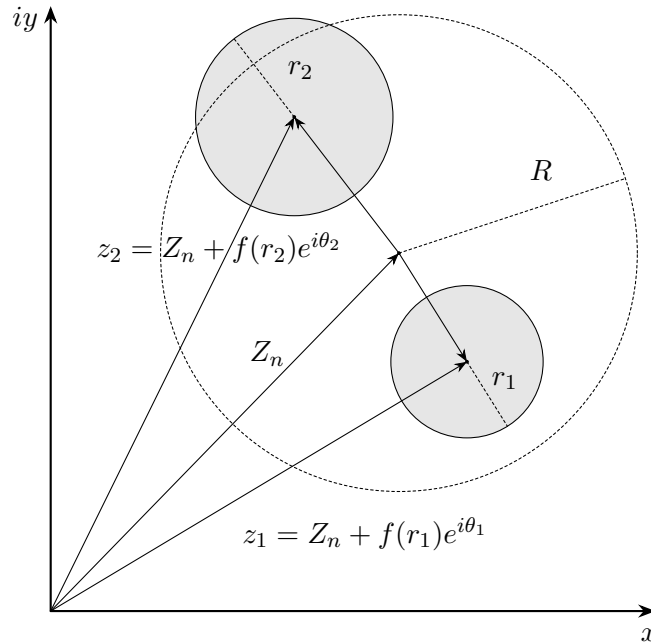
1. Εξαρτάται την  $c^{(2)}$  γιατί όσο μικρότερη είναι  $\Rightarrow$  τόσο μεγαλύτερη είναι  $c^{(2,2)}$  (Σχήμα 2.3)
2. Εξαρτάται από τον  $N^{(2,2)}$ , καθώς όσο λιγότερα είναι και σε συνδυασμό με την τυχαία τοποθέτησή τους  $\Rightarrow$  σπατάλη χώρου προς εκμετάλλευση για τοποθέτηση των υπόλοιπων  $\Rightarrow$  προσεγγίζουμε το όριο κορεσμού.

Ένας τρόπος που εν μέρει ξεπερνά τα παραπάνω προβλήματα είναι να επιτρέψουμε να ξεφεύγουν τα σωματίδια από τα όρια των κύκλων, δηλαδή

$$z_a(\theta_a) = Z_n + [R - (1 - m)r_a]\kappa e^{i\theta_a}, \quad m > 0$$

όπου  $m$  είναι το ποσοστό της ακτίνας που επιτρέψουμε να «δραπετεύει» από την φραγμένη περιοχή (βλέπε στο Σχήμα 3.2 δίσκο ακτίνας  $r_2$ ). Σε αυτή την περίπτωση, πρέπει να γίνει έλεγχος και μεταξύ των υπόλοιπων σμηνών, προς αποφυγή αλληλεπικάλυψης.

Ο κώδικας σε Mathematica που κανείς μπορεί να φτιάξει σμήνη P1 μέσω του RSA είναι ο παρακάτω:



Σχήμα 3.2: Ο ιδεώδης κύκλος (διακεκομμένη) που περιγράφεται από τον μιγαδικό  $Z_n$ , και οι ιδεώδεις δίσκοι  $z_1$  και  $z_2$ . Όπως φαίνεται, το κέντρο του  $z_2$ , τοποθετήθηκε σε σημείο τέτοιο ώστε η ακτίνα του να υπερβαίνει τα όρια του κύκλου, σε αντίθεση με τον  $z_1$ . Στόχος είναι να προσδιοριστεί ο μιγαδικός αριθμός  $f(r_a)e^{i\theta_a}$  με αρχή το κέντρο  $Z_n$ .

```
c [ 2 ] = 0.1 ;
NPM [ 1 ] = 20 ;
R [ 1 ] = Sqrt [ c [ 2 ] / ( NP [ 1 ] * NPM [ 1 ] * Pi ) ] ;
```

```
Dist1 [ P_ , B_ , a_ , b_ , e_ , c_ , d_ ] :=
Sqrt [ Re [ ( Z [ P , a , e , c ] - Z [ B , b , e , d ] ) * Conjugate [ Z [ P , a , e , c ] - Z [ B , b , e , d ] ] ] ] ;
```

```
Do [
```

```
Label [ centre3 ] ;
c [ angle_ ] := Cos [ angle ] + I * Sin [ angle ] ;
Z [ 1 , i , j , 1 ] =
z [ 1 , j , 1 ] + ( r [ 1 ] - 0.8 R [ 1 ] ) * RandomReal [ { -1 , 1 } ] * c [ RandomReal [ { 0 , 2 * Pi } ] ] ;
Z [ 1 , i , j , 2 ] = Z [ 1 , i , j , 1 ] + 1. ;
Z [ 1 , i , j , 3 ] = Z [ 1 , i , j , 1 ] - 1. ;
Z [ 1 , i , j , 4 ] = Z [ 1 , i , j , 1 ] + I ;
Z [ 1 , i , j , 5 ] = Z [ 1 , i , j , 1 ] - I ;
Z [ 1 , i , j , 6 ] = Z [ 1 , i , j , 1 ] + 1. + I ;
Z [ 1 , i , j , 7 ] = Z [ 1 , i , j , 1 ] + 1. - I ;
Z [ 1 , i , j , 8 ] = Z [ 1 , i , j , 1 ] - 1. + I ;
Z [ 1 , i , j , 9 ] = Z [ 1 , i , j , 1 ] - 1. - I ;
```

```
Do [ If [ Between [ Re [ Z [ 1 , i , j , k ] ] + R [ 1 ] , { 1 , 1 + 0.1 R [ 1 ] } ] ||
Between [ Im [ Z [ 1 , i , j , k ] ] + R [ 1 ] , { 1 , 1 + 0.1 R [ 1 ] } ] ||
Between [ Re [ Z [ 1 , i , j , 1 ] ] - R [ 1 ] , { -0.1 R [ 1 ] , 0 } ] ||
Between [ Im [ Z [ 1 , i , j , k ] ] - R [ 1 ] , { -0.1 R [ 1 ] , 0 } ]
, Goto [ centre3 ] , Continue ] , { k , 1 , 9 } ] ;
```

```

Do[ If[ Dist1 [ 1 , 1 , i , m , j , n , k ] != 0 &&
      Dist1 [ 1 , 1 , i , m , j , n , k ] <= ( 2 + 0 . 1 ) R [ 1 ]
      , Goto [ centre3 ]
      , { m , 1 , i } , { n , 1 , 9 } , { k , 1 , 9 } ] ;
  , { i , 1 , NPM [ 1 ] } , { j , 1 , NP [ 1 ] } ] ;

d = 0 ;
Do[
  If [ Re [ Z [ 1 , i , j , n ] ] < 1 + R [ 1 ] && Re [ Z [ 1 , i , j , n ] ] > - R [ 1 ] &&
      Im [ Z [ 1 , i , j , n ] ] < 1 + R [ 1 ] &&
      Im [ Z [ 1 , i , j , n ] ] > - R [ 1 ] , { d = d + 1 , W [ d ] = Z [ 1 , i , j , n ] } ]
  , { n , 1 , 9 } , { j , 1 , NP [ 1 ] } , { i , 1 , NPM [ 1 ] } ]
Do [ F [ i ] = { Re [ W [ i ] ] , Im [ W [ i ] ] } , { i , 1 , d } ] ;

```

### 3.3 Ο RSA για Στραμμένη Κυψελίδα

Η λογική είναι αυτή που φαίνεται στο Σχημα 3.3

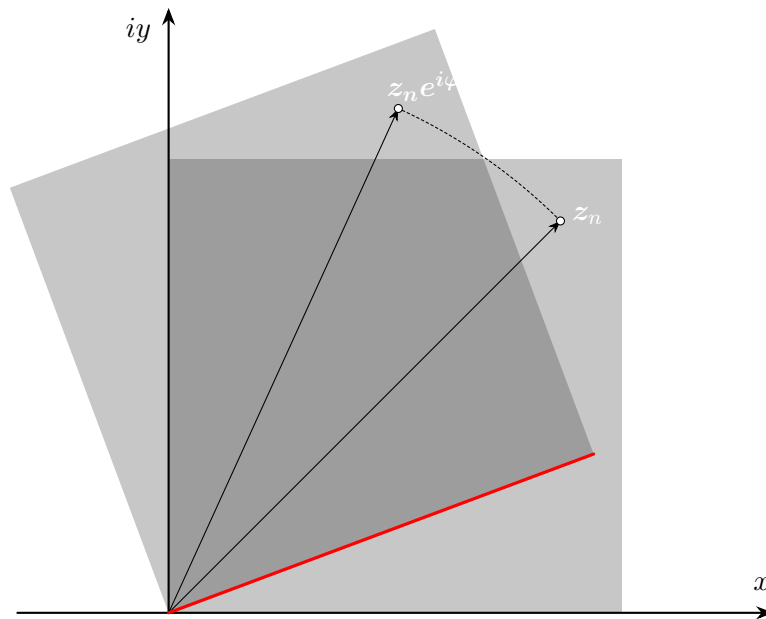
Ο κώδικας σε Mathematica που κανείς μπορεί να φτιάξει περιστραμμένες ορθογωνικές Ρ0 για όποιες γωνίες είναι ο παρακάτω:

```

angle = Pi / 4 ;
diagonal = Complex [ 1 , 1 ] ;
c [ 1 ] = 0 . 3 ;
NP [ 1 ] = 10 ;
r [ 1 ] = Sqrt [ ( c [ 1 ] * Re [ diagonal ] * Im [ diagonal ] ) / ( Pi * NP [ 1 ] ) ] ;
dist [ P_ , B_ , a_ , b_ , c_ , d_ ] :=
Sqrt [ Re [ ( z [ P , a , c ] - z [ B , b , d ] ) * Conjugate [ z [ P , a , c ] - z [ B , b , d ] ] ] ] ;
a [ 1 ] = Re [ diagonal ] ;
a [ 2 ] = -Re [ diagonal ] ;
a [ 3 ] = Im [ diagonal ] * I ;
a [ 4 ] = -Im [ diagonal ] * I ;
a [ 5 ] = diagonal ;
a [ 6 ] = -diagonal ;
a [ 7 ] = Conjugate [ diagonal ] ;
a [ 8 ] = -Conjugate [ diagonal ] ;
Do [ b [ n ] = a [ n ] * Exp [ I * angle ] , { n , 1 , 8 } ]
Do[
  Label [ centre10 ] ;
  z [ 1 , i , 1 ] = RandomComplex [ diagonal ] * Exp [ I * angle ] ;
  Do [ z [ 1 , i , n ] = z [ 1 , i , 1 ] + b [ n - 1 ] , { n , 2 , 9 } ] ;

  Do [ If [ dist [ 1 , 1 , i , m , n , k ] != 0 &&
        dist [ 1 , 1 , i , m , n , k ] <= ( 2 + 0 . 1 ) r [ 1 ]
        , Goto [ centre10 ] , { m , 1 , i } , { n , 1 , 9 } , { k , 1 , 9 } ] ;
    , { i , 1 , NP [ 1 ] } ] ;

```



Σχήμα 3.3: Η περιστροφή την κυψελίδας για γωνία  $\varphi$  μέσω ενός παράγοντα φάσης  $e^{i\varphi}$ . Αν  $z_n$  κάποιο από τα μιγαδικά κέντρα των δίσκων, τότε το περιστραμμένο είναι απλά  $z'_n = e^{i\varphi} z_n$ .

### 3.4 Ο Υπολογισμός των Ακτίνων

- Για την περίπτωση της μίας οικογένειας  $N^{(2)}$  δίσκων, η ακτίνα υπολογίζεται απλά απ' την σχέση:

$$N^{(2)}\pi r_2^2 = c^{(2)}L^2 \Rightarrow r_2 = \sqrt{\frac{c^{(2)}}{\pi N^{(2)}}}L$$

- Για την κατηγορία των δύο οικογενειών είναι

$$\lambda^2 = \frac{r_2^2}{r_{1,2}^2} = \frac{N^{(1,2)}}{N^{(2)}} \times \frac{N^{(2)}\pi r_2^2}{N^{(1,2)}\pi r_{1,2}^2} \Rightarrow \lambda^2 = \frac{N^{(2,2)}c^{(2)}}{N^{(2,1)}\widehat{c}^{(1,2)}}$$

Έτσι, οι ακτίνες υπολογίζονται απλά ως

$$r_2 = \sqrt{\frac{c^{(2)}}{\pi N^{(2)}}}L \quad \text{και} \quad r_{1,2} = \frac{r_2}{\lambda}$$

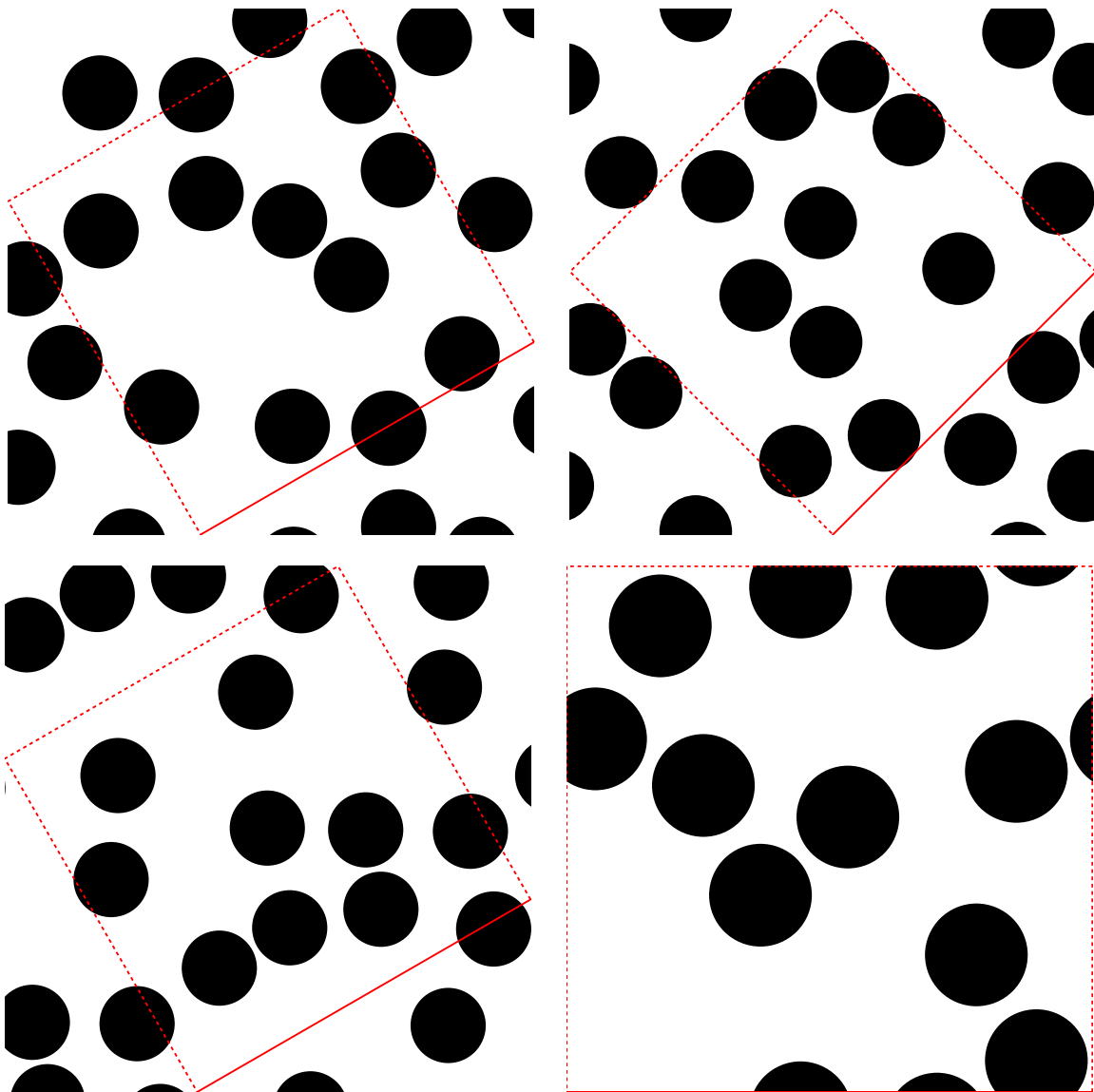
Ο λόγος που επιλέχθηκε αυτός ο τρόπος υπολογισμού, είναι γιατί πρέπει πάντα να έχουμε στο νου μας την «ξεκάθαρη διάκριση των κλιμάκων μήκους». Θεωρητικά, η καλή διάκριση έρχεται όταν  $\lambda \rightarrow \infty$ .

- Για την περίπτωση όπου έχουμε τα  $N^{(2)}$  σμήνη και  $N^{(2,2)}$  δίσκους ανά σμήνος, δεδομένου του πόσα σμήνη θέλουμε και σε ποια «εικονική» συγκέντρωση η ακτίνα των σωματιδίων υπολογίζεται απλά

$$r_{2,2} = \sqrt{\frac{c^{(2,2)}}{N^{(2,2)}}}r_2 = \sqrt{\frac{c^{(2,2)}}{N^{(2,2)}}} \times \sqrt{\frac{c^{(2)}}{\pi N^{(2)}}}L \Rightarrow r_{2,2} = \sqrt{\frac{c^{(f)}}{\pi N^{(2,2)}N^{(2)}}}$$

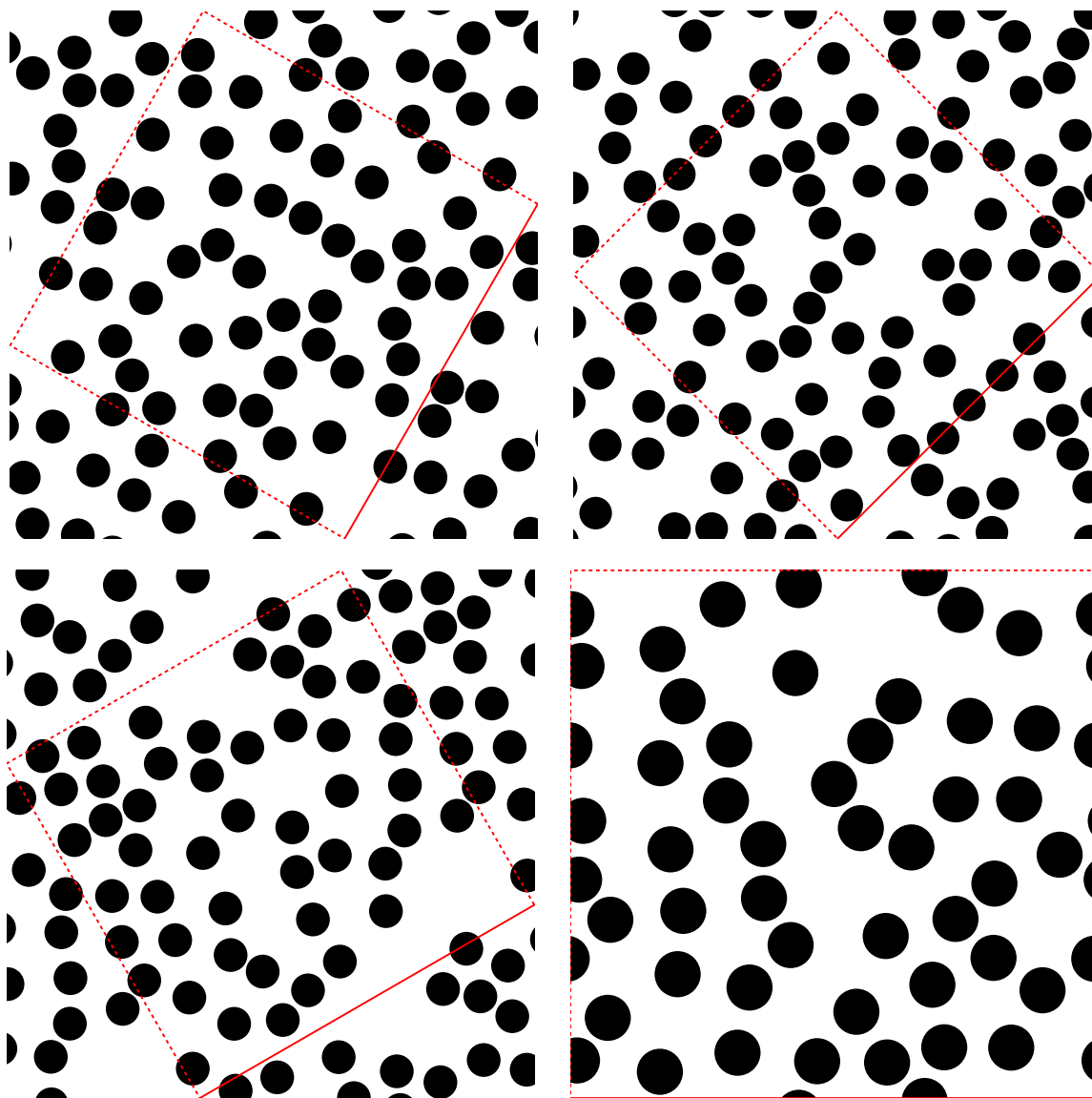
### 3.5 Ορισμένα Γεωμετρικά Αποτελέσματα

Θα παρουσιαστούν ορισμένα γεωμετρικά αποτελέσματα που δημιουργήθηκαν από τους παραπάνω κώδικες μέσω της Mathematica 12. Σκοπός εδώ είναι η επίδειξη και όχι κάποιος άλλος. Ούτως ή άλλως, το πρόβλημα δυσκολεύει όταν κανείς περιστρέφει τις γεωμετρίες, καθώς αν ένας δίσκος δεν πληρεί την προϋπόθεση τότε

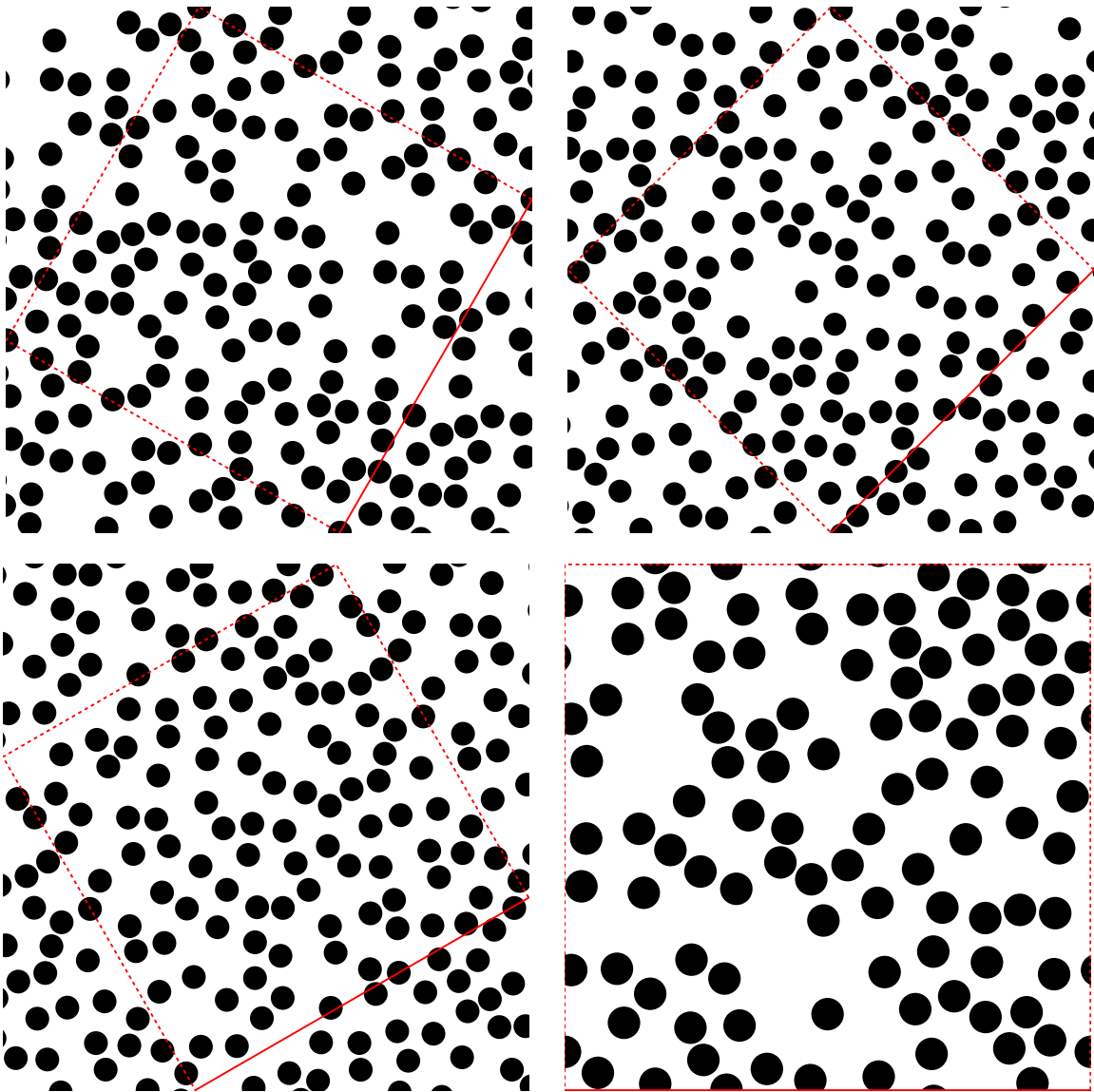


Σχήμα 3.4: Μικροδομές  $[x \times y] = [1 \times 1]$  RSA για  $c^{(2)} = 30\%$  και  $N^{(2)} = 10$  σε στροφή  $\pi/3$ ,  $\pi/4$ ,  $\pi/6$  και  $0$  (από αριστερά πάνω προς δεξιά κάτω).

πρέπει να αλλάξει από τον RVE, ενώ μπορεί να ήταν έγκυρος (δηλαδή να ήταν ένα αποδεκτό κέντρο που πληρούσε όλες τις προϋποθέσεις των αποστάσεων). Προφανώς, για τις γεωμετρίες που χρησιμοποιήθηκαν, τηρήθηκαν ότι πρέπει τουλάχιστον το 10% των ακτίνων να βρίσκεται εντός του RVE. Τέλος, η χρησιμότητα των περιστραμμένων γεωμετριών μπορεί να φανεί όταν κανείς εκτιμήσει τις ελαστικές σταθερές, και να δει πόσο διαφέρουν από τις μη περιστραμμένες. Αν διαφέρουν λίγο ή βρίσκονται εντός των τυπικών αποκλίσεων, τότε επιβεβαιώνεται η υπόθεση της ισοτροπίας.

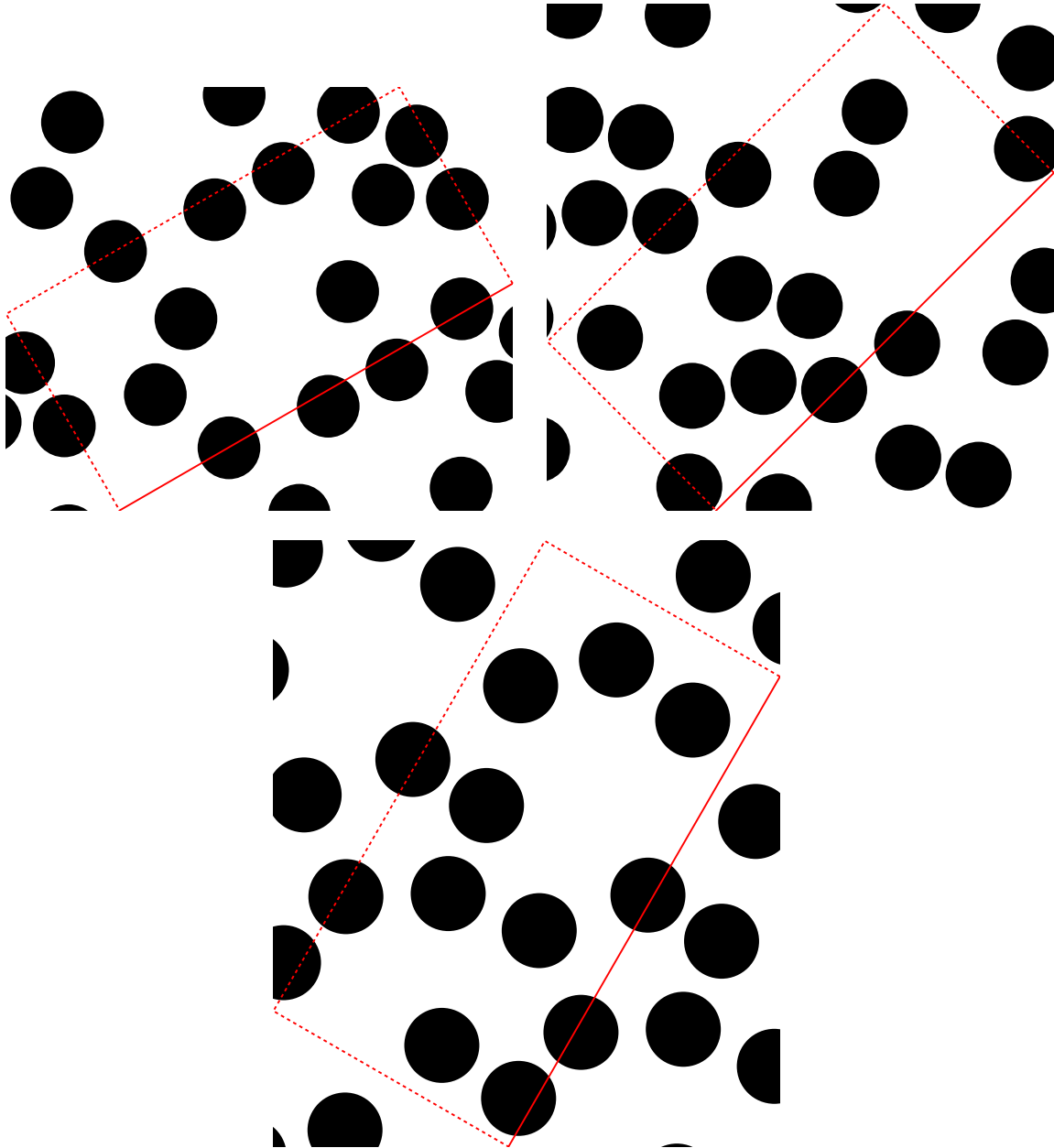


Σχήμα 3.5: Μικροδομές  $[x \times y] = [1 \times 1]$  RSA για  $c^{(2)} = 30\%$  και  $N^{(2)} = 50$  σε στροφή  $\pi/3$ ,  $\pi/4$ ,  $\pi/6$  και  $0$  (από αριστερά πάνω προς δεξιά κάτω).

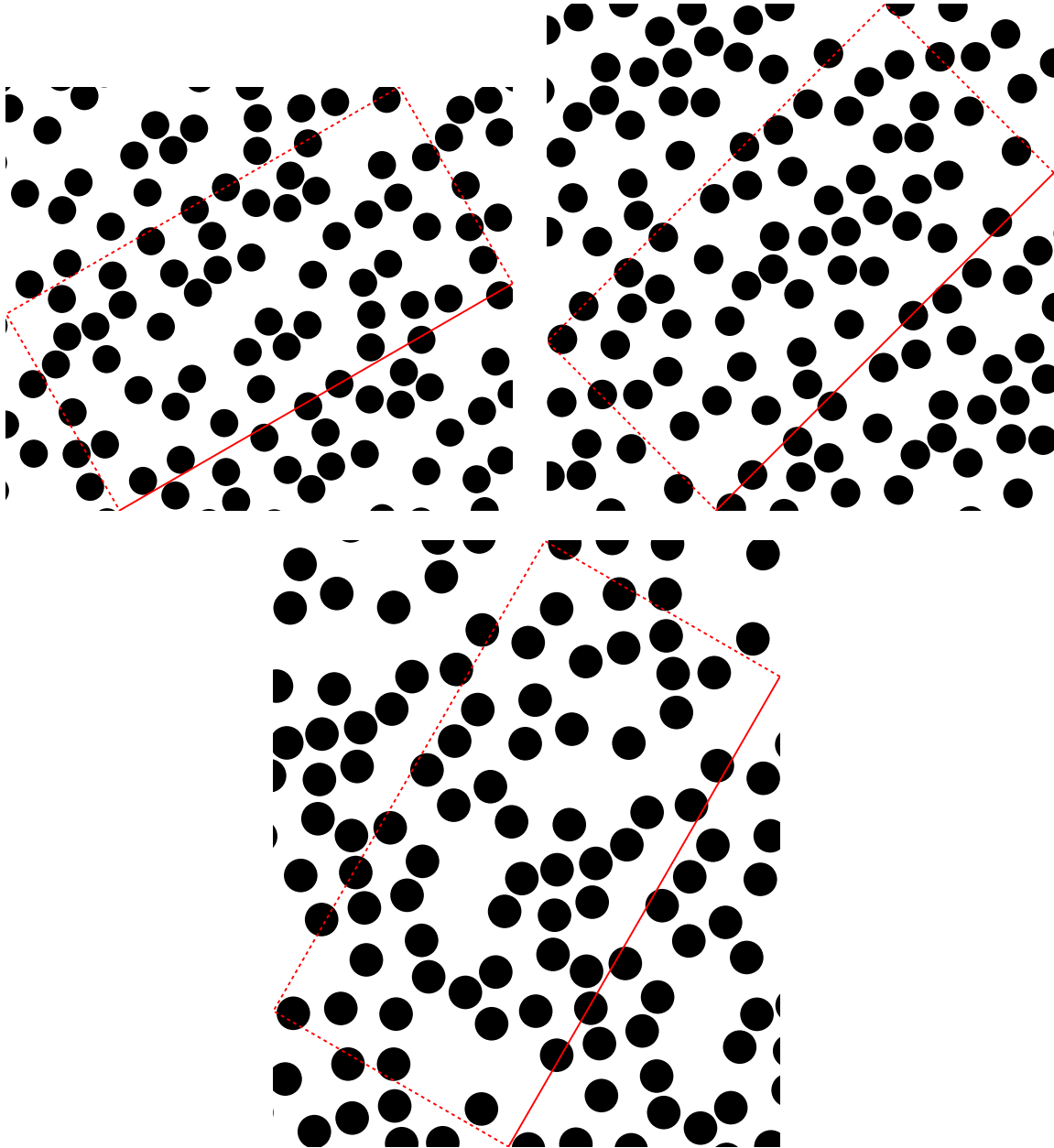


Σχήμα 3.6: Μικροδομές  $[x \times y] = [1 \times 1]$  RSA για  $c^{(2)} = 30\%$  και  $N^{(2)} = 100$  σε στροφή  $\pi/3$ ,  $\pi/4$ ,  $\pi/6$  και 0 (από αριστερά πάνω προς δεξιά κάτω).

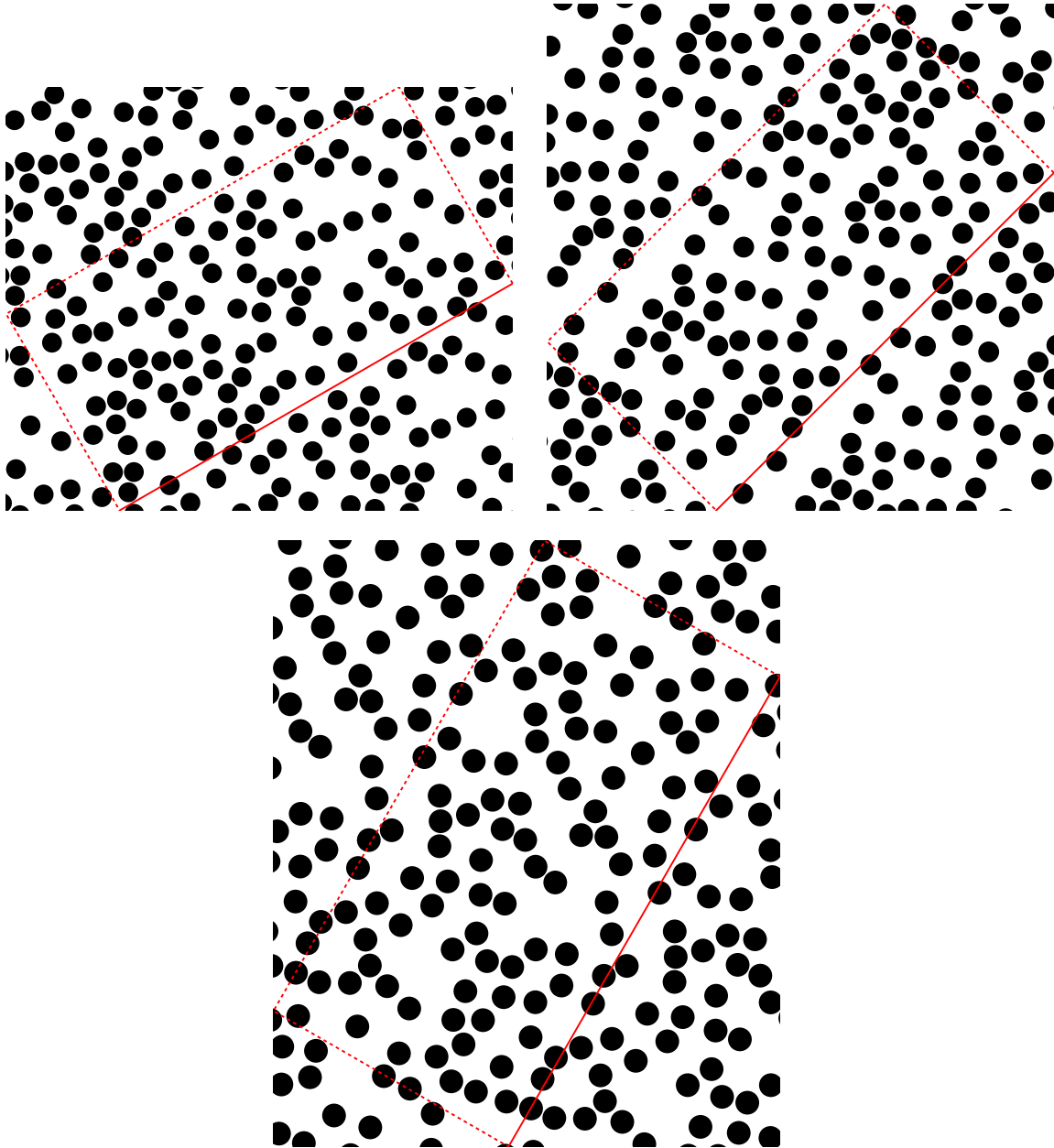




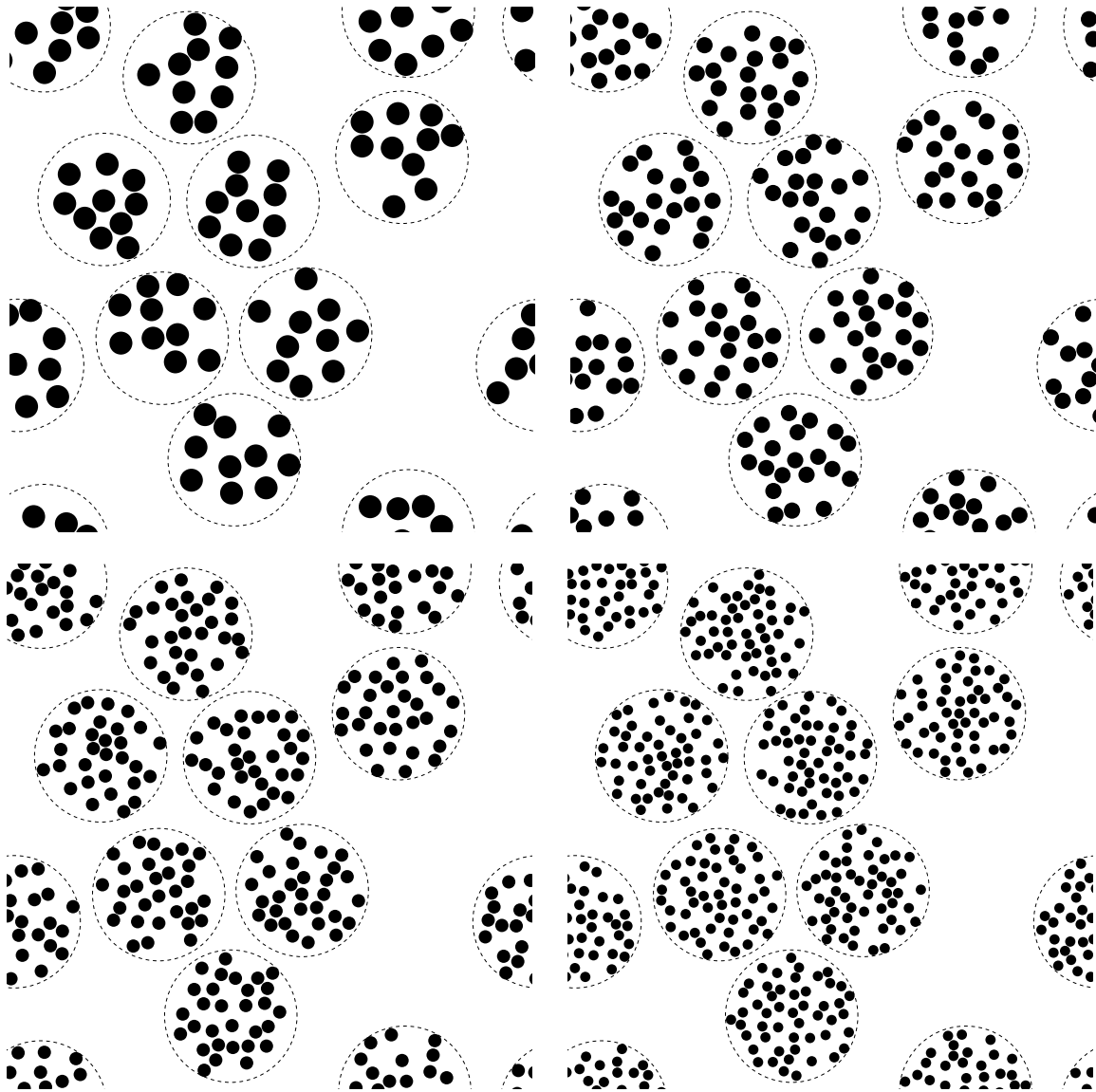
Σχήμα 3.7: Μικροδομές  $[x \times y] = [2 \times 1]$  RSA για  $c^{(2)} = 30\%$  και  $N^{(2)} = 10$  σε στροφή  $\pi/3$ ,  $\pi/4$  και  $\pi/6$  (από αριστερά πάνω προς δεξιά και κάτω).



Σχήμα 3.8: Μικροδομές  $[x \times y] = [2 \times 1]$  RSA για  $c^{(2)} = 30\%$  και  $N^{(2)} = 50$  σε στροφή  $\pi/3$ ,  $\pi/4$  και  $\pi/6$  (από αριστερά πάνω προς δεξιά και κάτω).



Σχήμα 3.9: Μικροδομές  $[x \times y] = [2 \times 1]$  RSA για  $c^{(2)} = 30\%$  και  $N^{(2)} = 100$  σε στροφή  $\pi/3$ ,  $\pi/4$  και  $\pi/6$  (από αριστερά πάνω προς δεξιά και κάτω).



Σχήμα 3.10: Σμήνη για 10 δεδομένες περιοχές συσσώρευσης  $N^{(2)} = 10, 20, 30$  και 50 σωματιδίων, για  $c^{(f)} = 15\%$  και  $c^{(2)} = 50\%$ .

## Κεφάλαιο 4

# Οι Αριθμητικές Αναλύσεις & Αποτελέσματα

Στο κεφάλαιο αυτό θα παρουσιαστούν όσες αναλύσεις ολοκληρώθηκαν επιτυχώς και έδωσαν αποτελέσματα. Σε γενικές γραμμές, κανείς μπορεί να λύσει τα προβλήματα P0 → P2 απευθείας και να εξάγει τα δεδομένα του. Όμως, οι πραγματικές γεωμετρίες P2 εν γένει απαιτούν πολλά σωματίδια όμως φαίνονται και στο Σχήμα 4.9 και είναι υπολογιστικά χρονοβόρες, ειδικά δε άμα συμπεριληφθούν οι πλαστικές συμπεριφορές μπορεί να είναι ατελέσφορες οι προσπάθειες του H.Y..

### 4.1 Πλεγματοποίηση & Τα Στοιχεία

Τα πλέγματα δημιουργήθηκαν μέσω του ελεύθερου λογισμικού [NetGen](#). Με βάση τις οδηγίες που δίνονται για το Abaqus 17, όταν τα υλικά είναι ασυμπιεστα επιβάλλεται να χρησιμοποιηθούν τα στοιχεία τύπου **C3D10H** (βλέπε την ενότητα *Choosing between regular and hybrid elements*).

### 4.2 Οι Αναλύσεις για τις Επίπεδες P0 → P2

Για τις επίπεδες γεωμετρίες, στόχος ήταν να εκτιμηθεί το μακροσκοπικό μέτρο διατμήσεως  $\tilde{\mu}_p$ . Για την εύρεση του  $\tilde{\mu}_p = \frac{\tilde{E}_p}{2(1 + \tilde{\nu}_p)}$ , αρκεί να υπολογιστούν σε **επίπεδη παραμορφωσιακή κατάσταση** ( $\epsilon_{13} = \epsilon_{23} = \epsilon_{33} = 0$ ) και να υποβληθούν σε **καθαρή διάτμηση** ( $\epsilon_{11} = -\epsilon_{22} \Rightarrow \tilde{\nu}_p = 1$ ), όπου προκύπτει για την μακροσκοπικό μέτρο διατμήσεως με την επίλυση των Πεπερασμένων Στοιχείων μέσω του ABAQUS 2017

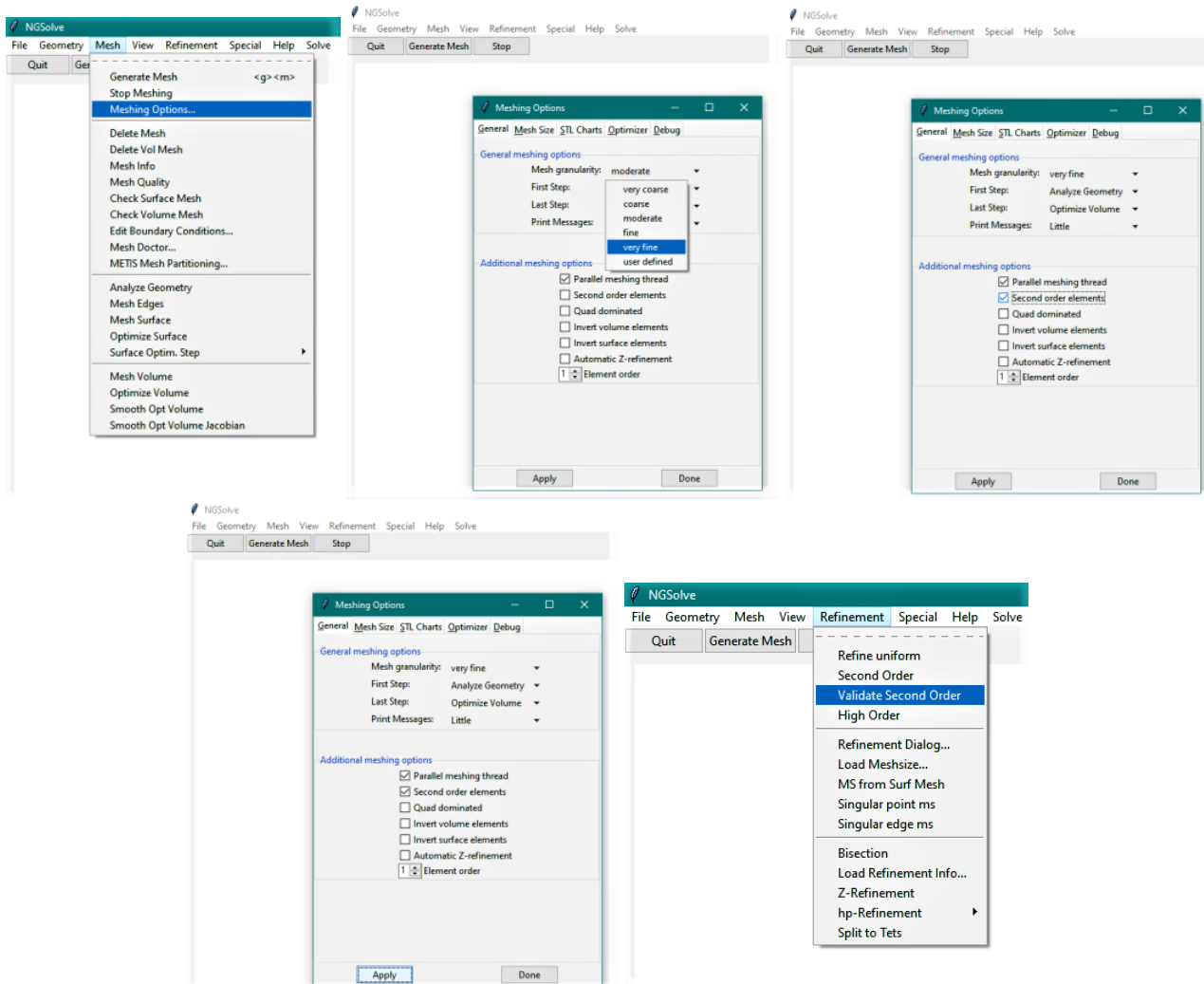
$$\tilde{\mu}_p = \frac{\langle \sigma_{11} \rangle}{2 \langle \epsilon_{11} \rangle}, \quad \langle \epsilon_{11} \rangle \approx \frac{1}{|\Omega|} \sum_{n=1}^{NEL} \epsilon_{11}(n) |\Delta V_n|, \quad \langle \sigma_{11} \rangle \approx \frac{1}{|\Omega|} \sum_{n=1}^{NEL} \sigma_{11}(n) |\Delta V_n| \quad (4.1)$$

όπου  $NEL = \text{ο αριθμός των στοιχείων}$ , και  $|\Delta V_n|$  αποτελεί τον όγκο του  $n$ -στοιχείου, όπου πρέπει  $|\Omega| = \sum_{n=1}^{NEL} |\Delta V_n|$  (Agoras et al. [2]).

### 4.3 Οι Αναλύσεις για τις Επίπεδες P0 για Απολύτως Απαραμόρφωτες Ίνες & Κυλινδρικούς Πόρους

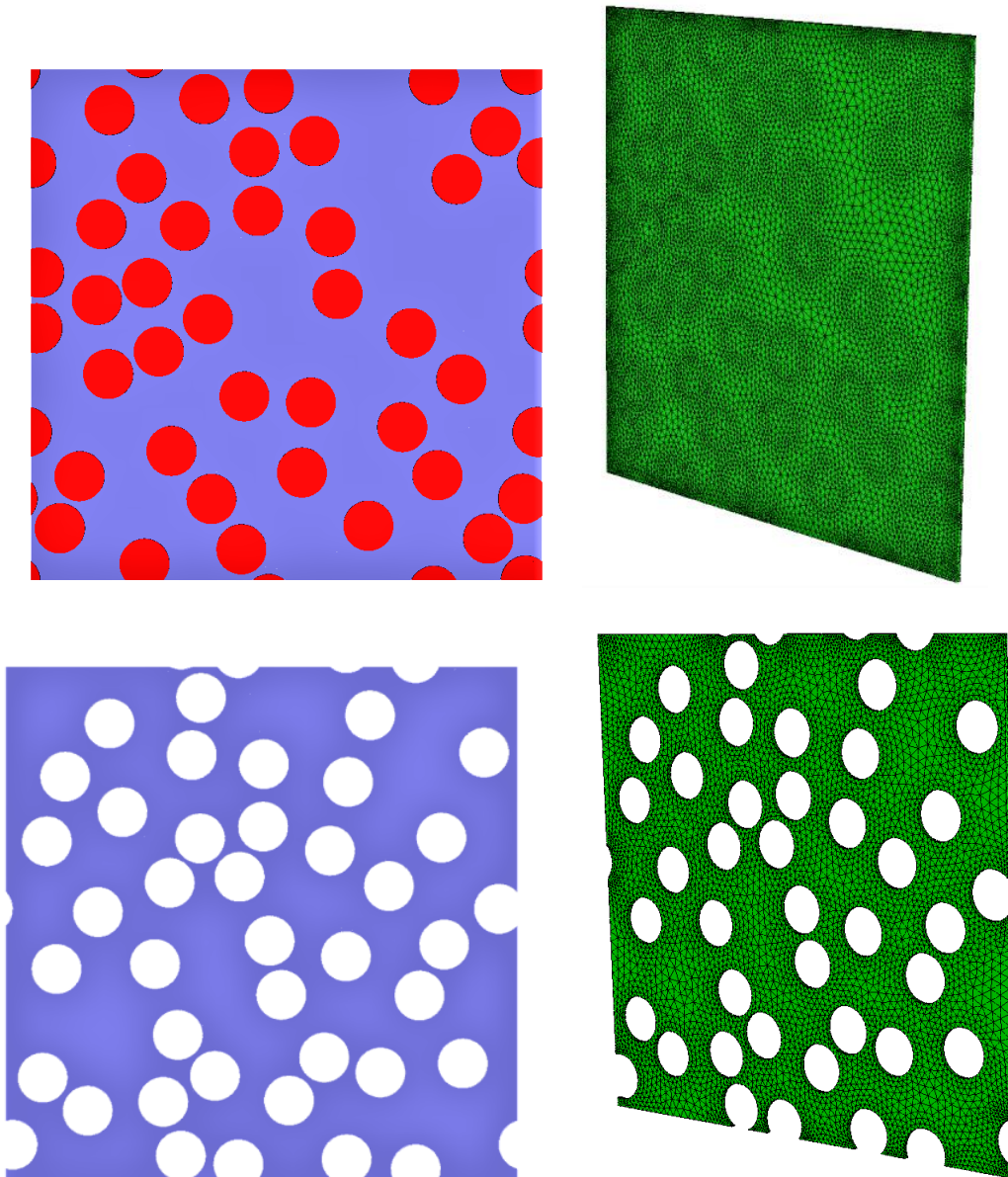
Όπως φαίνεται και στο Σχήμα 4.4, υπολογίστηκαν για  $N^{(2)} = 20 \rightarrow 40$  για  $c^{(2)} = 10\% \rightarrow 40\%$ , όπου

- Για  $f = 10\%$  για  $N^{(2)} = 40$  η απόκριση είναι  $\tilde{\mu}_p = 41.21$  και διαφέρει κατά 0.73% της εκτίμησης των H.S.
- Για  $f = 20\%$  για  $N^{(2)} = 40$  η απόκριση είναι  $\tilde{\mu}_p = 29.28$  και διαφέρει κατά 12.16% της εκτίμησης των H.S.

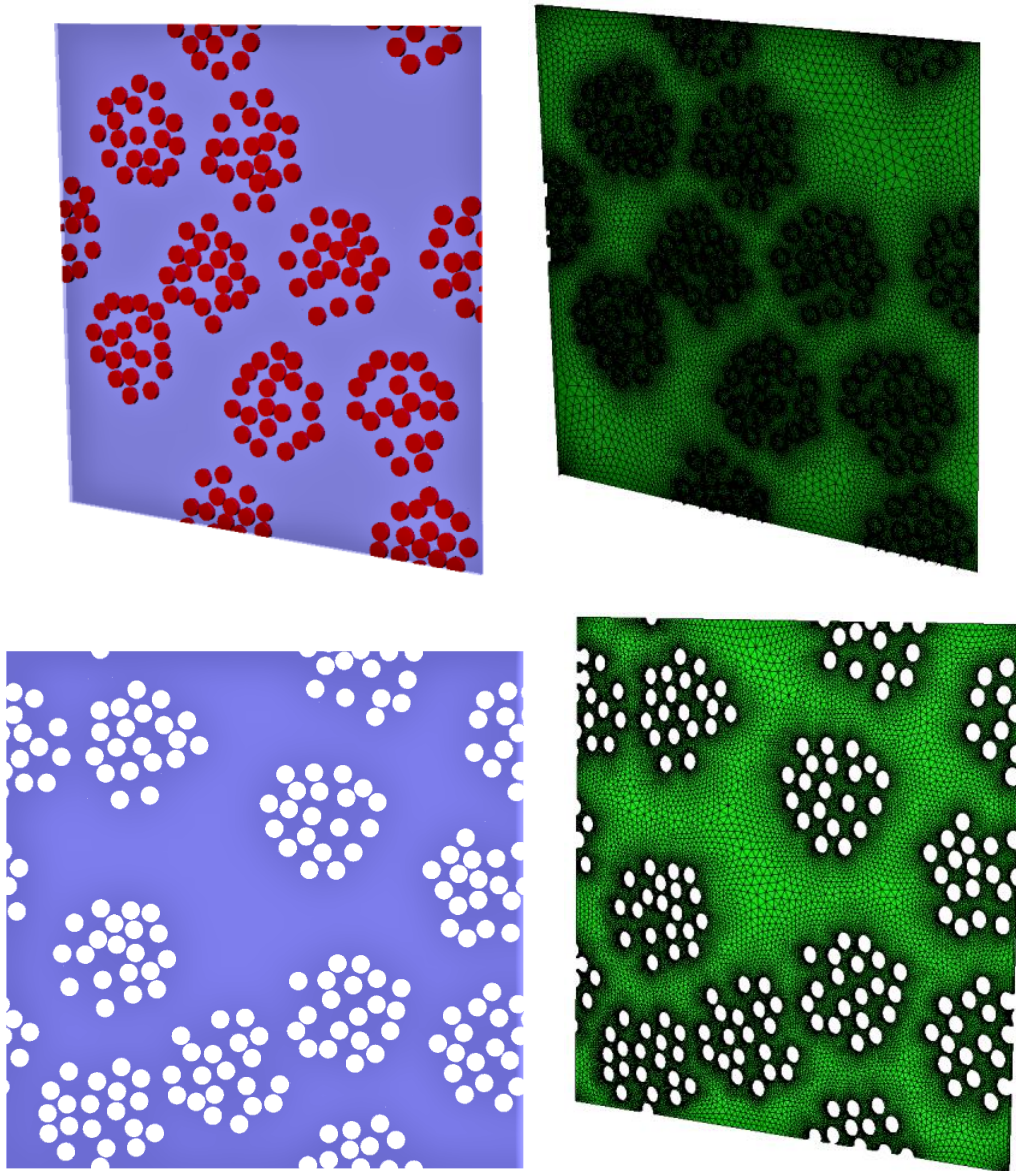


Σχήμα 4.1: Η διαδικασία δημιουργίας πλέγματος μέσω του NetGen (Από Αριστερά Πάνω → Δεξιά Κάτω). Αρχικά πάμε στο **Mesh** και εκεί επιλέγουμε την ποιότητα του πλέγματος. Για τους σκοπούς της εργασίας χρησιμοποιήθηκαν τα πιο πυκνά πλέγματα, γεγονός που για τις P0 δεν έχει πάντα και ιδιαίτερο νόημα, όμως για τις P2 και P1 επιβάλλεται καθώς περιέχουν μικρά σωματίδια/πόρους. Επίσης προτιμήθηκαν τα Second Order Elements. Με την ολοκλήρωση της δημιουργίας του πλέγματος (**Generate Mesh**) στο **τέλος ΠΑΝΤΑ κάνουμε Validate Second Order** (αν και εφόσον χρησιμοποιηθούν) για να δούμε αν υπάρχουν «παράνομα στοιχεία» με αρνητική ιακωβιανή ή είναι πολύ μικρά  $\implies$  Πρόβλημα στην Ανάλυση με το Abaqus.

§ 4.3. Οι Αναλύσεις για τις Επίπεδες P0 για Απολύτως Απαραμόρφωτες Ίνες & Κυλινδρικούς Πόρους



Σχήμα 4.2: Οι επίπεδες μικροδομές P0 για ίνες και πόρους πριν και μετά την πλεγματοποίησή τους.



Σχήμα 4.3: Οι επίπεδες μικροδομές P1 για ίνες και πόρους πριν και μετά την πλεγματοποίησή τους.



#### § 4.4. Οι Αναλύσεις για τις Επίπεδες P1 για Απολύτως Απαραμόρφωτες Ίνες & Κυλινδρικούς Πόρους

$c^{(f)}$	$N^{(2)}$	$\mu_p^{(2)}$	$\tilde{\mu}_p$	Αύξηση ( $\times\%$ )
10%	30	$150 \times 10^3$	63.08	
10%	30	$150 \times 10^{10}$	63.19	+0.16%
50%	10	$150 \times 10^3$	235	
50%	10	$150 \times 10^{10}$	240	+2.13%

Πίνακας 4.1: Με αλλαγή του μέτρου διατμήσεως των σωματιδίων από  $150 \times 10^3 \rightarrow 150 \times 10^{10}$ , φαίνεται ότι για  $c^{(f)} = 50\%$  έχουμε απόκλιση του μακροσκοπικού μέτρου διατμήσεως, η οποία είναι πρακτικά ανούσια και ειδικά για μικρές συγκεντρώσεις αμελητέα. Παρεμπιπτόντως, η εκτίμηση  $\tilde{\mu}_p = 235$  ήταν μία από τις δύο εκτιμήσεις που έγιναν για  $c^{(f)} = 50\%$ , με την δεύτερη να είναι  $\tilde{\mu}_p = 166$ , γεγονός που δείχνει την αστάθεια των λύσεων για μεγάλες συγκεντρώσεις.

$c^{(f)} = 30\%$	No1	No2	No3	No4	No5	No6	No7	No8	No9	No10
$N^{(2)} = 20$	<b>100.7</b>	108.7	102.6	104.3	104.2	<b>109.8</b>	106.7	104.0	106.9	107.6
$N^{(2)} = 30$	103.1	102.5	105.6	<b>114.4</b>	<b>99.0</b>	103.4	106.2	105.1	99.8	104.2

Πίνακας 4.2: 10 διαφορετικές ανακατανομές για  $N^{(2)} = 20$  και για 30 σκληρές ίνες και οι μακροσκοπικές εκτιμήσεις για το  $\tilde{\mu}_p$ . Φαίνεται ότι η μέση τιμή για τις 20 ίνες είναι  $\langle \mu_p \rangle_{20} = 105.6$  ενώ για τις 30 είναι  $\langle \mu_p \rangle_{30} = 104.3$  και διαφέρουν κατά 13.7% και 12.3% της εκτίμησης των Hashin-Shtrikman που δίνουν το κάτω φράγμα  $\tilde{\mu}_p = 92.9$

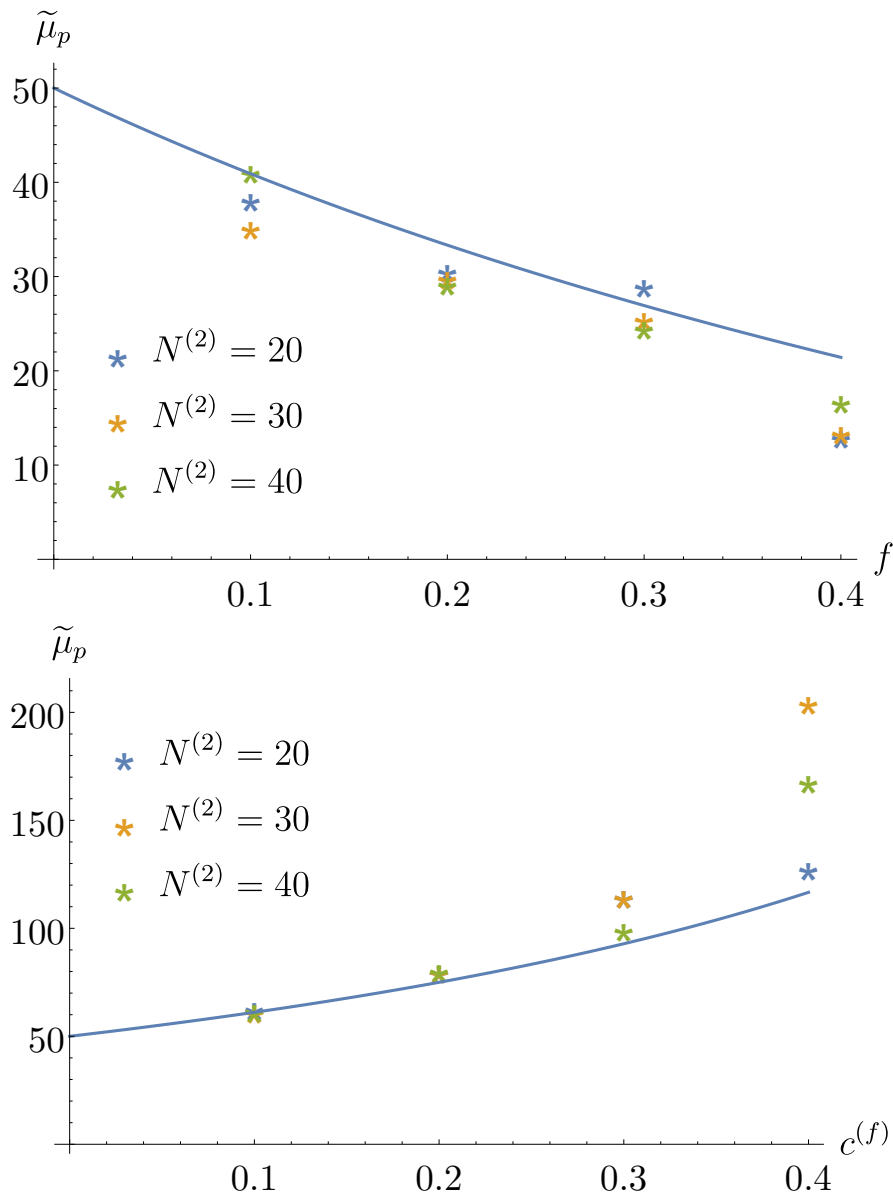
- Για  $f = 30\%$  για  $N^{(2)} = 40$  η απόκριση είναι  $\tilde{\mu}_p = 24.69$  και διαφέρει κατά 8.28% της εκτίμησης των H.S.
- Για  $f = 40\%$  για  $N^{(2)} = 40$  η απόκριση είναι  $\tilde{\mu}_p = 16.8$  και διαφέρει κατά 21.60% της εκτίμησης των H.S.
- Για  $c^{(f)} = 10\%$  για  $N^{(2)} = 40$  η απόκριση είναι  $\tilde{\mu}_p = 62.30$  και διαφέρει κατά 1.95% της εκτίμησης των H.S.
- Για  $c^{(f)} = 20\%$  για  $N^{(2)} = 40$  η απόκριση είναι  $\tilde{\mu}_p = 80.84$  και διαφέρει κατά 7.79% της εκτίμησης των H.S.
- Για  $c^{(f)} = 30\%$  για  $N^{(2)} = 40$  η απόκριση είναι  $\tilde{\mu}_p = 99.53$  και διαφέρει κατά 7.19% της εκτίμησης των H.S.
- Για  $c^{(f)} = 40\%$  για  $N^{(2)} = 40$  η απόκριση είναι  $\tilde{\mu}_p = 168.34$  και διαφέρει κατά 44.3% της εκτίμησης των H.S.

#### 4.4 Οι Αναλύσεις για τις Επίπεδες P1 για Απολύτως Απαραμόρφωτες Ίνες & Κυλινδρικούς Πόρους

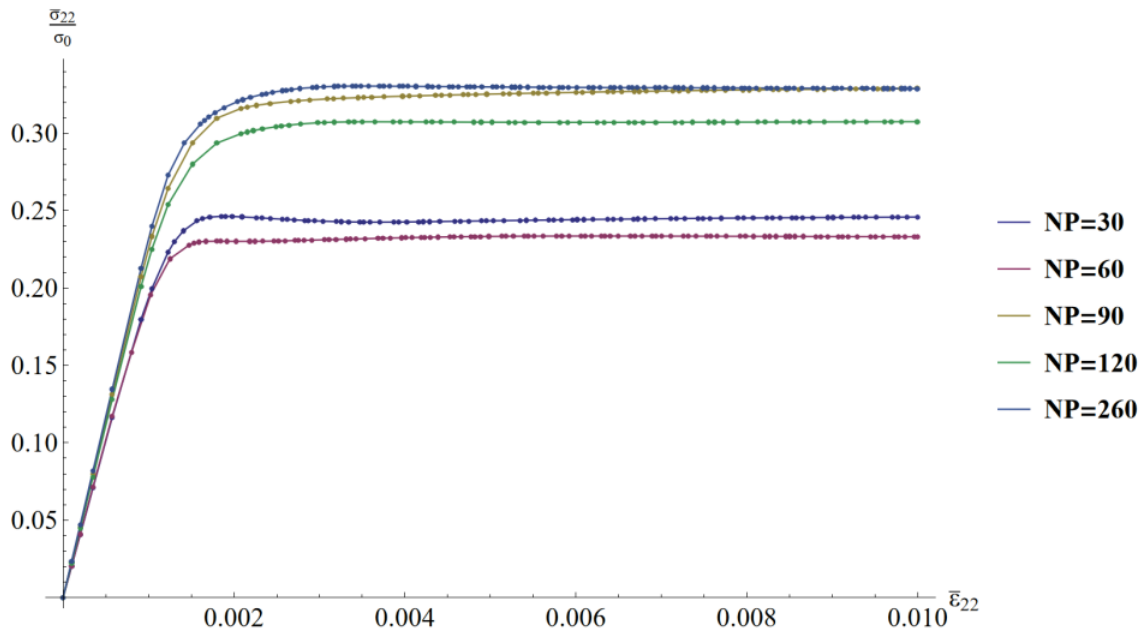
Οι αναλύσεις που έγιναν για την σύγκλιση ως προς τον αριθμό των σημνών  $N^{(2)}$  για σκληρές ίνες φαίνονται στο Σχήμα 4.7 ενώ για τους κυλινδρικούς πόρους στο Σχήμα 4.8. Για αυτή την κατηγορία, η απευθείας ανάλυση είναι ιδανικότερη της διαδοχικής, καθώς, εν γένει θα πρέπει να γίνουν αναλύσεις σε υψηλές συγκεντρώσεις, ενώ όπως φαίνεται και στο Σχήμα 4.4, για  $c^{(2)} > 40\%$  τα αποτελέσματα δεν μπορούν να είναι αξιόπιστα.

#### 4.5 Οι Αναλύσεις για τις Επίπεδες P2 για Απολύτως Απαραμόρφωτες Ίνες

Οι αναλύσεις για τις Επίπεδες P2 δεν επιτεύχθηκαν στον βαθμό που έπρεπε, δηλαδή στην εύρεση σύγκλισης του ομογενοποιημένου μέτρου διατμήσεως. Δοκιμάστηκαν μόνο για απολύτως απαραμόρφωτες ίνες και όχι για κυλινδρικούς πόρους, διότι στους κυλινδρικούς πόρους βρέθηκαν αστάθειες ως προς το όριο διαρροής (βλέπε



Σχήμα 4.4: Αποτελέσματα αναλύσεων για τυχαίες μικροδομές με  $\mu^{(1)} = 50$  για  $c^{(2)} = 10\% - 40\%$  και αριθμό σωματιδίων/πόρων  $N^{(2)} = 20, 30, 40$ . Βλέπουμε ότι οι αναλύσεις για τους πόρους προσεγγίζουν την εκτίμηση καλύτερα όταν  $N^{(2)} = 40$  σε κάθε περίπτωση, παρά για μικρότερο αριθμό. Στην περίπτωση των σκληρών ιών δεν φαίνονται διαφοροποιήσεις μέχρι και την συγκέντρωση  $c^{(f)} = 20\%$ , όμως τα αποτελέσματα δεν είναι αξιόπιστα για  $c^{(2)} \geq 40\%$ .



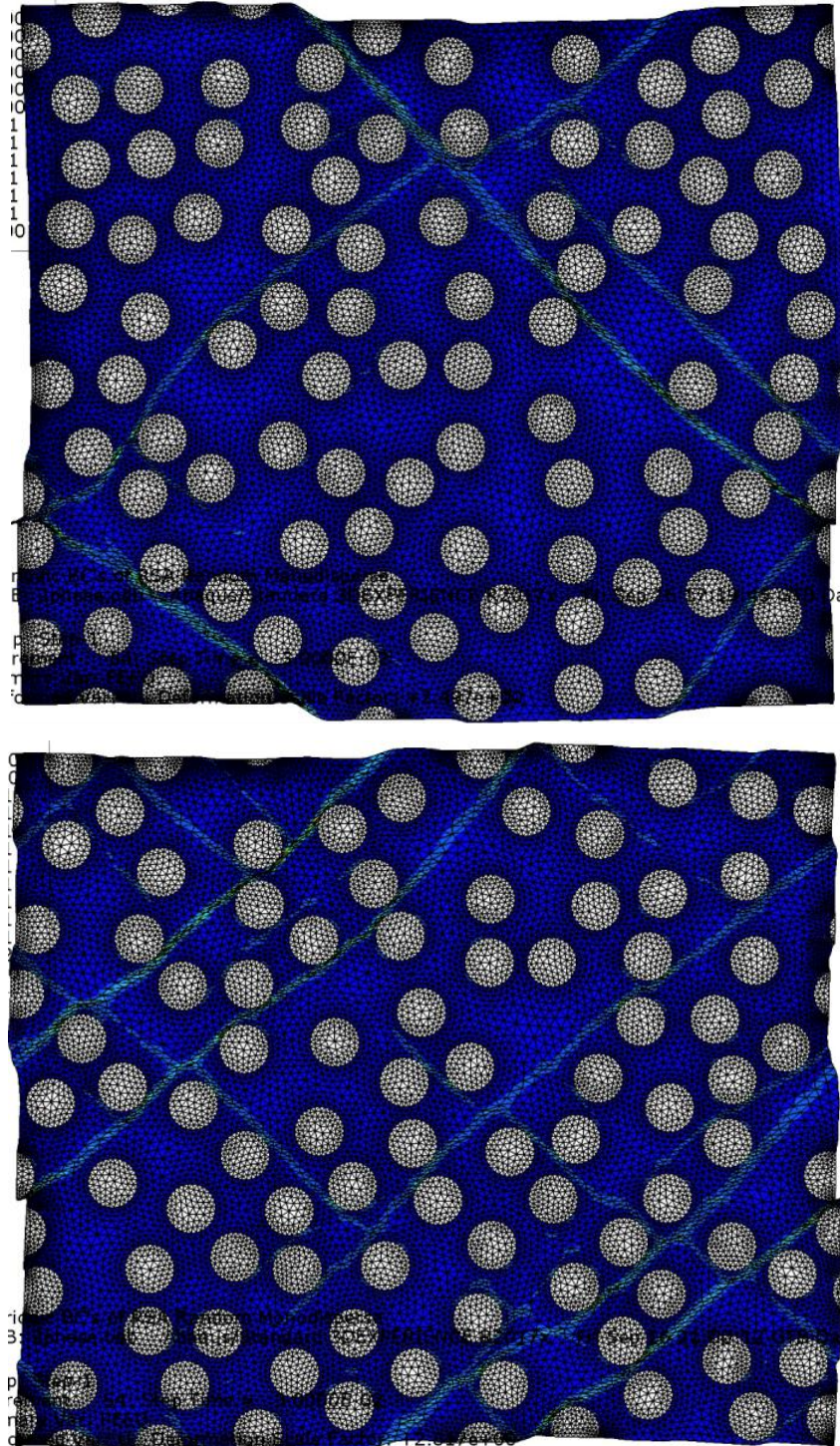
Σχήμα 4.5: Αστάθειες ως προς την πλαστική διαρροή που εμφανίστηκαν σε επίπεδες P0 με κυλινδρικούς πόρους για  $f = 30\%$ .

Σχήμα 4.5). Στο Σχήμα 4.9 δίνονται περισσότερες λεπτομέρειες αναφορικά με τα δεδομένα και τις συνθήκες υπολογισμού μιας μικροδομής.

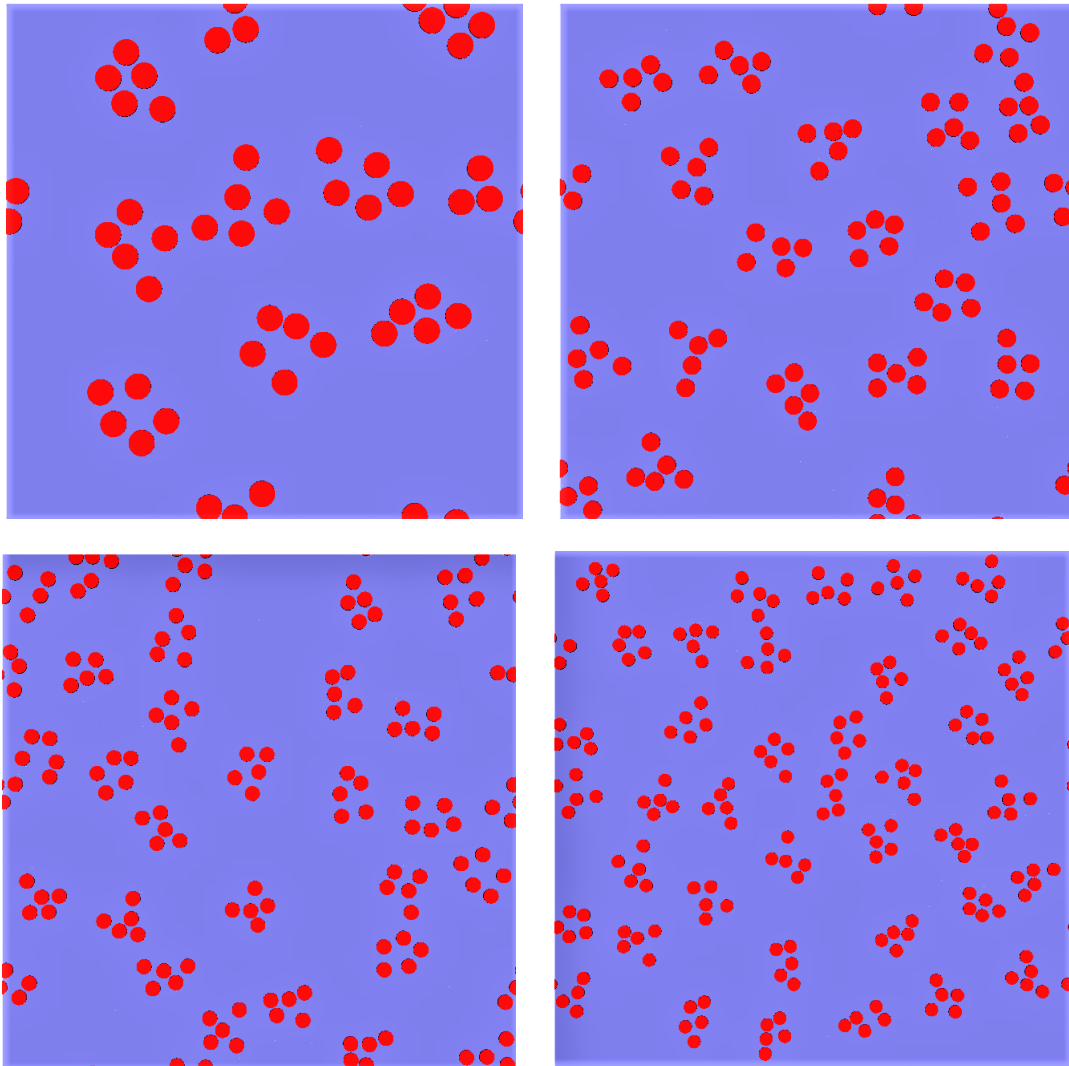
Ο διαφορετικός τρόπος επίλυσης γίνεται μέσω της διαδοχικής ομογενοποίησης/ανάλυσης που περιγράφεται με στόχο να βρεθεί η σύγκλιση 5 ελαστικών σταθερών στην μικροκλίμακα με ομογενοποιημένο τανυστή

$$\tilde{\mathcal{L}}^{(1)} = \left( 2\tilde{k}_p^{(1)}, \tilde{l}^{(1)}, \tilde{n}^{(1)}, 2\tilde{\mu}_p^{(1)}, 2\tilde{\mu}_n^{(1)} \right)$$

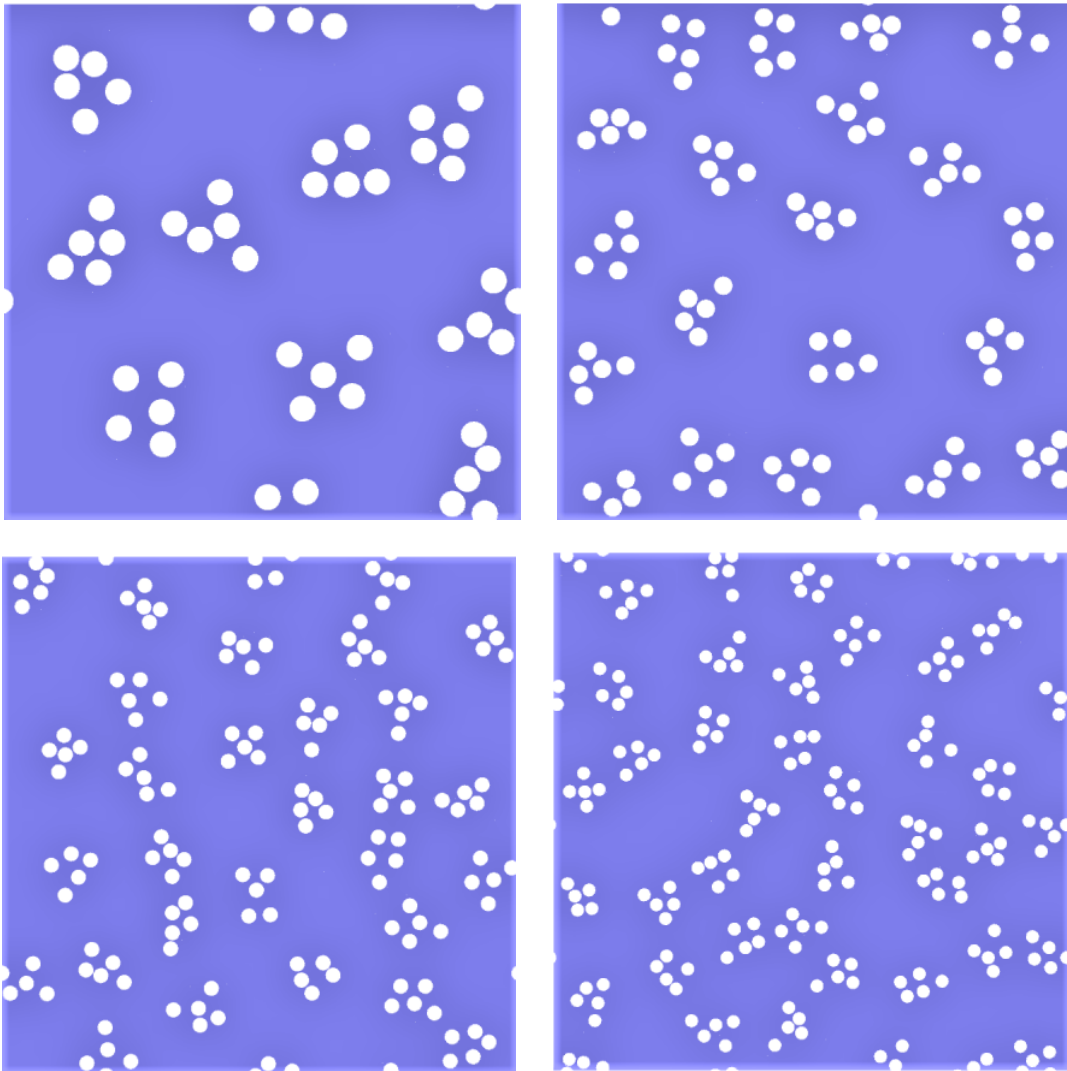
ώστε ο παραπάνω να είναι ο ομογενοποιημένος τανυστής του **σύνθετου φορέα**.



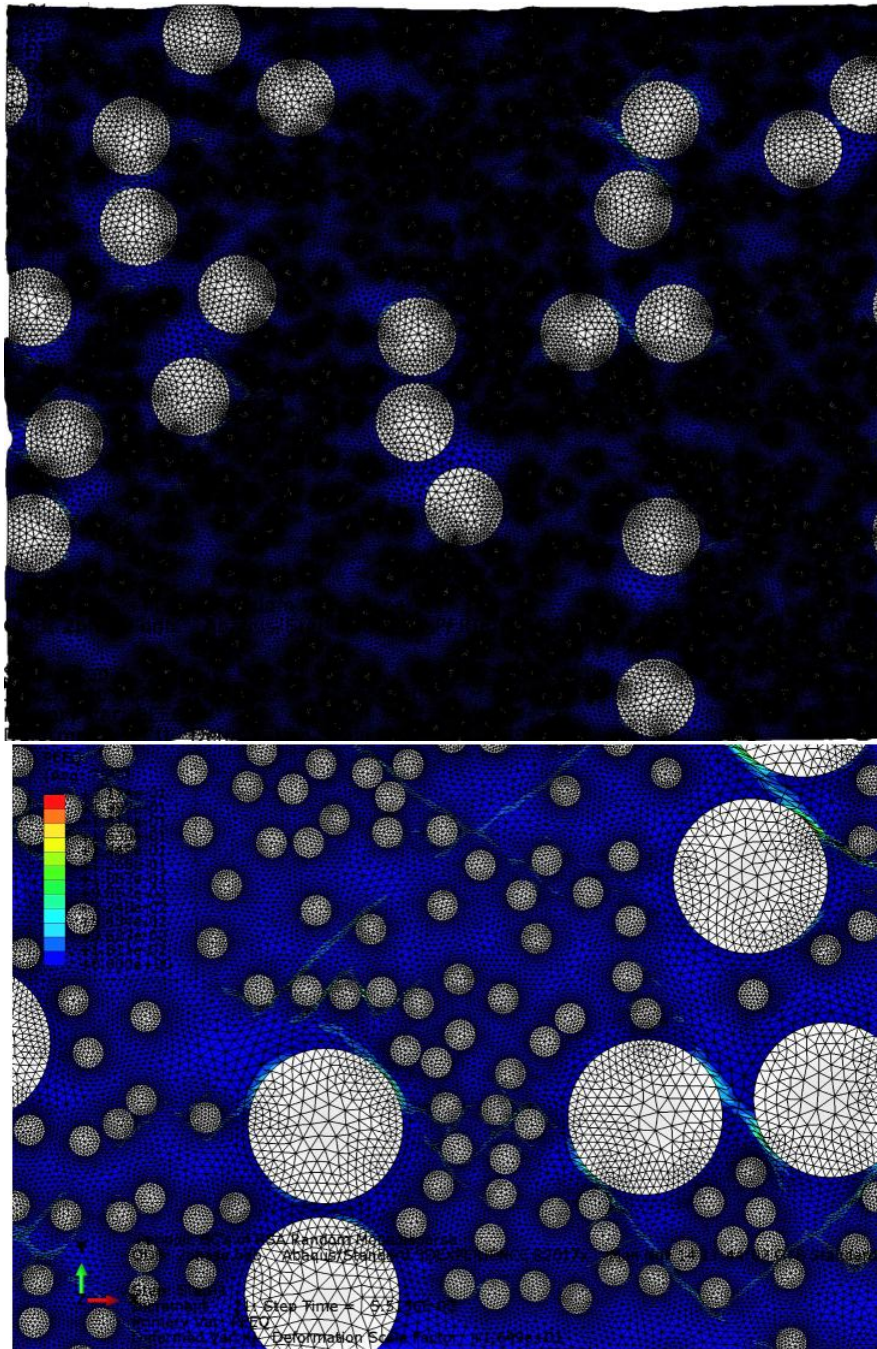
Σχήμα 4.6: Εμφάνιση **shear-bands** για  $N^{(2)} = 90$  και  $c^{(f)} = 30\%$ .



Σχήμα 4.7: 5 σωματιδία μέσα σε 10-40 σμήνη με  $c^{(f)} = 10\%$  όπου  $\tilde{\mu}_{p,10} = 61.52, \tilde{\mu}_{p,20} = 62.87, \tilde{\mu}_{p,30} = 63.98$  και  $\tilde{\mu}_{p,40} = 63.14$  και η εκτίμηση των H.S. είναι  $\tilde{\mu}_p = 61.1$



Σχήμα 4.8: 5 σωματίδια μέσα σε 10-40 σμήνη με  $f = 10\%$  όπου  $\tilde{\mu}_{p,10} = 39.405$ ,  $\tilde{\mu}_{p,20} = 38.63$ ,  $\tilde{\mu}_{p,30} = 40.78$  και  $\tilde{\mu}_{p,40} = 38.304$  και η εκτίμηση των H.S. είναι  $\tilde{\mu}_p = 40.91$



Σχήμα 4.9: Μια P2 (Πάνω) και η μεγέθυνσή της (Κάτω). Δεδομένα & Συνθήκες Υπολογισμού:  $N^{(2)} = 20$ ,  $N^{(1,2)} = 500$ ,  $\mu_p^{(1)} = 50$ ,  $\mu_p^{(2)} = 50 \times 10^3$  (θεωρητικά  $\infty$ ),  $c^{(f)} = 30\%$ ,  $\lambda = r_2/r_{1,2} = 5$ , Βαθ.Ελευθ: 4788785, Στοιχεία: 3227200. Για ισχύ 8-cpus: 11/14/2022 11:38:01 AM-11/16/2022 6:15:11 AM και δεν ολοκλήρωσε την πλαστική συμπεριφορά γιατί γέμισε η προσωρινή μνήμη. Γνωρίζουμε (όπως φαίνεται και στο Σχήμα 4.4) ότι για  $c^{(f)} \leq 20\%$  η σύγκλιση επιτυγχάνεται για  $N^{(2)} = 20$  σωματίδια, οι επιμέρους συγκεντρώσεις είναι 15%, για τις P2 η εκτίμηση  $\tilde{\mu}_p^{H.S.} = 96.6686$ , ενώ η ανάλυση έδωσε ότι  $\tilde{\mu}_p = 108.348$ , δηλαδή στο εύρος των υπολογιστικών εκτιμήσεων για  $c^{(f)} = 30\%$  (όπως φαίνονται και στον Πίνακα 4.2) και διαφέρει 12.08% από την H.S..





## Κεφάλαιο 5

# Τα Συμπεράσματα

Η παρούσα διπλωματική εργασία σε αυτό το σημείο κλείνει. Τα συμπεράσματα που προέκυψαν είναι τα εξής:

1. Για τις επίπεδες P0 που μελετήθηκαν σίγουρα υπάρχει σύγκλιση για τις Απολύτως Απαραμόρφωτες ίνες στα  $N^{(2)} = 20$  για  $c^{(f)} \leq 20\%$ .
2. Οι επίπεδες P2 απαιτούσαν πολλά σωματίδια ώστε να υπολογιστούν οι ελαστοπλαστικές ιδιότητες, συγκεκριμένα  $N^{(1,2)} \sim \lambda^2 N_*^{(2)}$  όπου  $\lambda = r_{(2)}/r_{(1,2)}$  και  $N_*^{(2)} = \min N^{(2)}$  τέτοιος ώστε να έχουμε σύγκλιση ως προς την ισότροπη ομογενή περίπτωση.
3. Δεν υπολογίστηκαν όλες οι ομογενοποιημένες ελαστικές σταθερές που να περιγράφουν την μακροσκοπική απόκριση εγκαρσίως ισότροπων υλικών, είτε με σκληρά σωματίδια, είτε με πόρους, καθώς δεν υλοποιήθηκε ποτέ.
4. Οι επίπεδες P1 έχουν «περιορισμένο εύρος» περιπτώσεων ώστε να υπολογιστούν είτε απευθείας είτε μέσω της διαδοχικής ομογενοποίησης, καθώς απαιτούνται εν γένει μεγάλες συγκεντρώσεις ώστε να μην ισχύει ότι  $c^{(2)} \ll 1$ .
5. Γενικά οι πλαστικές συμπεριφορές ήταν αυτές όπου καθυστερούσαν πολύ ώστε το Abaqus να μπορέσει να βρει την σύγκλιση ως προς το όριο διαρροής, και ειδικά για τις P2 δεν τα κατάφερε (Σχήμα 4.9). Ακόμα, στους πόρους στο επίπεδο βρέθηκαν αστάθειες ως προς την διαρροή τους (Σχήμα 4.5)
6. **Το πρόβλημα των πολλαπλών κλιμάκων δεν έχει ολοκληρωθεί!**

*Όμως, δημιουργήθηκαν όλοι οι απαραίτητοι κώδικες, οι οποίοι είναι καταγεγραμμένοι σε κάθε κατηγορία μικροδομής, που κανείς μπορεί να χρησιμοποιήσει ώστε να μπορέσει να συνεχίσει την έρευνα...*



# Βιβλιογραφία

- [1] M. Agoras and P. Ponte Castañeda. Homogenization estimates for multi-scale nonlinear composites. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 30(6):828–843, 2011. ISSN 0997-7538. doi: <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2011.05.007>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0997753811000738>.
- [2] M. Agoras, K. Garyfallogiannis, and N. Aravas. On the macroscopic response and field statistics in particulate composites with elasto-plastic phases and random microstructures. *Journal of Applied Mechanics*, 88(3), 2021.
- [3] K. Anoukou, R. Brenner, F. Hong, M. Pellerin, and K. Danas. Random distribution of polydisperse ellipsoidal inclusions and homogenization estimates for porous elastic materials. *Computers & Structures*, 210:87–101, 2018.
- [4] M. Kachanov and I. Sevostianov. *Micromechanics of Materials, with Applications*, volume 249. Springer, 2018.
- [5] I. Papadioti, K. Danas, and N. Aravas. A methodology for the estimation of the effective yield function of isotropic composites. *International Journal of Solids and Structures*, 87:120–138, 2016.
- [6] J. Segurado and J. Llorca. A numerical approximation to the elastic properties of sphere-reinforced composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50(10):2107–2121, 2002.
- [7] S. Torquato. Random heterogeneous materials: Microstructure and macroscopic properties. *Interdisciplinary Applied Mathematics*, 16, 2002.