

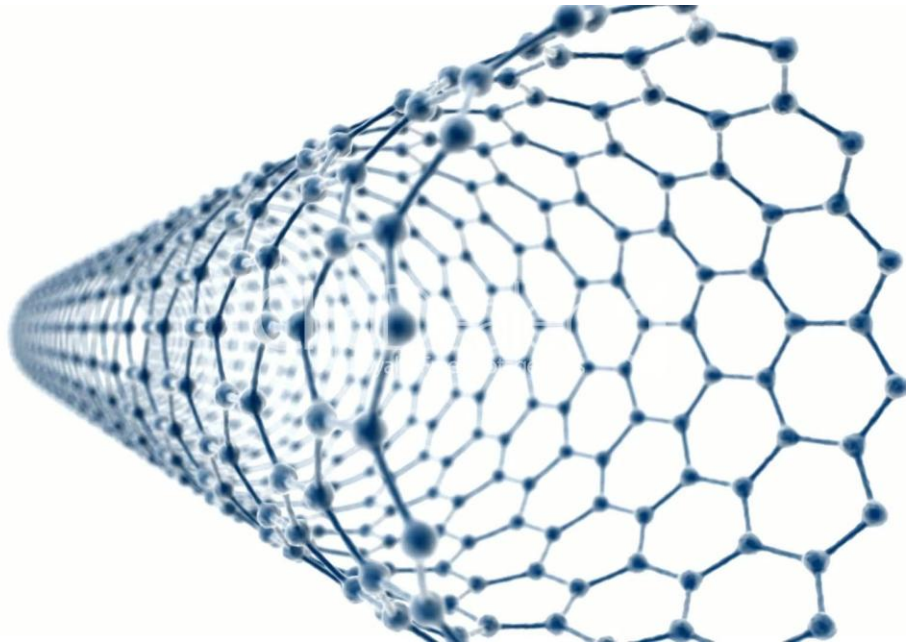


ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

Σχολή Πολιτικών Μηχανικών

Εργαστήριο Στατικής και Αντισεισμικών Ερευνών

Διερεύνηση καταστατικής σχέσεως σκυροδέματος ενισχυμένο με νανο-σωλήνες άνθρακα με ανάλυση πολλαπλών κλιμάκων



Ιμπραημάκης Μάριος

Διπλωματική εργασία

Επιβλέπων: Βησσαρίων Παπαδόπουλος, Δρ. Πολιτικός Μηχανικός,

Επίκουρος Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, Οκτώβριος 2016

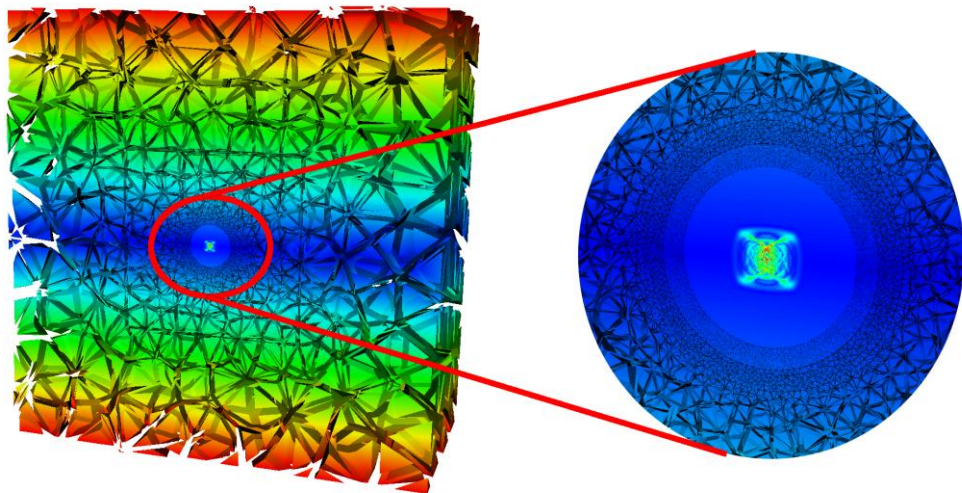


ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

Σχολή Πολιτικών Μηχανικών

Εργαστήριο Στατικής και Αντισεισμικών Ερευνών

Διερεύνηση καταστατικής σχέσεως σκυροδέματος ενισχυμένο με νανο-σωλήνες άνθρακα με ανάλυση πολλαπλών κλιμάκων



Ιμπραημάκης Μάριος

Διπλωματική Εργασία

Επιβλέπων: Βησσαρίων Παπαδόπουλος, Δρ. Πολιτικός Μηχανικός,

Επίκουρος Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, Οκτώβριος 2016

Copyright © Μάριος Ιμπραημιάκης, 2016

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση σε αρχείο πληροφοριών, διανομή, αναπαραγωγή, μετάφραση ή μετάδοση της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό, υπό οποιαδήποτε μορφή και με οποιοδήποτε μέσο επικοινωνίας, ηλεκτρονικό ή μηχανικό, χωρίς την προηγούμενη έγγραφη άδεια του συγγραφέα. Επιτρέπεται η αναπαραγωγή, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν στη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Η έγκριση της διπλωματικής εργασίας από τη Σχολή Πολιτικών Μηχανικών του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου δεν υποδηλώνει αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα (Ν. 5343/1932, Άρθρο 202).

Copyright © Marios Impaimakis, 2016

All Rights Reserved

Neither the whole nor any part of this diploma thesis may be copied, stored in a retrieval system, distributed, reproduced, translated, or transmitted for commercial purposes, in any form or by any means now or hereafter known, electronic or mechanical, without the written permission from the author. Reproducing, storing and distributing this thesis for non-profitable, educational or research purposes is allowed, without prejudice to reference to its source and to inclusion of the present text. Any queries in relation to the use of the present thesis for commercial purposes must be addressed to its author.

Approval of this diploma thesis by the School of Civil Engineering of the National Technical University of Athens (NTUA) does not constitute in any way an acceptance of the views of the author contained herein by the said academic organisation (L. 5343/1932, art. 202).

Μάριος Ιμπραημάκης (2016)

Διερεύνηση καταστατικής σχέσεως σκυροδέματος ενισχυμένο με νανο-σωλήνες άνθρακα με ανάλυση
πολλαπλών κλιμάκων
Εργαστήριο Στατικής και Αντισεισμικών ερευνών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Αθήνα.

Marios Impraimakis (2016)

Investigation of constitutive equation for concrete reinforced with carbon nano-tubes via multiscale analysis
method.

Institute of Structural Analysis and Antiseismic Research,
National Technical University of Athens, Greece

Ευχαριστίες

Έπειτα από πέντε μαγικά χρόνια, λοιπόν, στον κόσμο της επιστήμης μέσω του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου, έφτασε η στιγμή να επιλέξω εκείνο το αντικείμενο που με κέρδισε περισσότερο. Η επιλογή ήταν δύσκολη καθώς το αντικείμενο του πολιτικού μηχανικού είναι φοβερά ευρύ τόσο σε πλήθος όσο και ποιότητα δραστηριοτήτων. Τελικά, το αντικείμενο που ταίριαζε περισσότερο στα θέλω μου είναι αυτό της υπολογιστικής μηχανικής. Σε αυτά τα μαθήματα έγινε και η πρώτη επαφή που είχα με τον Επίκουρο καθηγητή κ. Βησσαρίων Παπαδόπουλο όπου από την πρώτη μόλις στιγμή ξεχώρισα το ήθος και το υψηλό επίπεδο γνώσεων του. Τα αντίστοιχα, και με το παραπάνω, ανακάλυψα αυτούς τους μήνες που συνεργαστήκαμε για την διπλωματική μου εργασία. Σε μία περίοδο που είχε άρχισε να ατονεί μέσα μου το πάθος για την επιστήμη του πολιτικού μηχανικού, ο κ. Παπαδόπουλος κατάφερε να βγάλει από μέσα μου όλον τον ενθουσιασμό και το μεράκι μου. Σε αυτό συνετέλεσαν πολλοί παράγοντες όπως το θέμα που μου πρότεινε, οι γνώσεις του για το αντικείμενο και κυρίως ο χαρακτήρας του που συμπεριλαμβάνει τους καλούς τρόπους, την καλή διάθεση και την πίστη στους φοιτητές του. Καταφέρνει συνεχώς να εμπνέει τα μέλη της ερευνητικής του ομάδας δείχνοντας τους πόσο χρήσιμοι και σημαντικοί είναι. Στην συνέχεια θέλω να ευχαριστήσω έναν πολύ ιδιαίτερο άνθρωπο. Αναφέρομαι στον Δημήτρη Σάββα και όποιος τον γνωρίζει ξέρει πολύ καλά σε τι χαρακτήρα ανθρώπου αλλά και γνώστη της επιστήμης κάνω λόγο, και συνεπώς δε θα προσθέσω κάτι επί αυτών. Αφιέρωσε ώρες επί ωρών στο εργαστήριο, όχι μόνο για να με βοηθήσει με την εκμάθηση λογισμικών, αλλά και στο να καθίσει να κατανοήσει και να σχολιάσει όλες τις μεθοδολογίες αλλά και τα αποτελέσματα της έρευνας. Σε μικρότερο βαθμό θέλω να ευχαριστήσω τους Μαρία Ταβλάκη και Γιάννη Καλογέρη που ανήκουν στην ερευνητική ομάδα του κ. Παπαδόπουλου και γνωρίζουν οι ίδιοι την συμβολή τους στην εργασία. Δε μπορώ να μην αναγνωρίσω την συμβολή των φίλων Ραφαήλ, Στέλιο, Ηλία και Ευαγγελία, όχι μόνο στην εργασία, αλλά και συνολικά στα 5 έτη των σπουδών. Σας ευχαριστώ για όλες τις ατελείωτες ώρες που περάσαμε στα διαλείματα, στο μάθημα, σε εξόδους, σε ταξίδια κ.α. να συζητάμε και να περνάμε καλά. Εν κατακλείδι, θέλω να δηλώσω την εκτίμησή μου σε όλα τα μέλη ΔΕΠ που με συμβούλεψανε, βοήθησαν και αφιέρωσαν λίγο από τον χρόνο τους στο γραφείο τους σε στιγμές δύσκολων αποριών για το μέλλον των σπουδών μου όλα αυτά τα πέντε χρόνια. Τους ευχαριστώ ειλικρινά και δεν ξεχνώ τα λόγια τους. Για το τέλος αφήνω τους ανθρώπους που χωρίς αυτούς δε θα έγραφα τώρα αυτήν την εργασία, την οικογένειά μου.

Μάριος Ιμπραημιάκης

Οκτώβριος 2016

marios_ibraimakis@hotmail.com



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΠΟΛΙΤΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΣΤΑΤΙΚΗΣ ΚΑΙ ΑΝΤΙΣΕΙΣΜΙΚΩΝ ΕΡΕΥΝΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**Διερεύνηση καταστατικής σχέσεως σκυροδέματος ενισχυμένο με
νανο-σωλήνες άνθρακα με ανάλυση πολλαπλών κλιμάκων**

Μάριος Ιμπραημάκης

Επιβλέπων: Επίκουρος Καθηγητής Βησσαρίων Παπαδόπουλος

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η παρούσα εργασία χρησιμοποιεί τα σύγχρονα εργαλεία της υπολογιστικής μηχανικής για να μελετήσει την μη γραμμική συμπεριφορά σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs. Συγκεκριμένα, δημιουργούνται και τίθενται σε ανάλυση προσομοιώσεις δοκιμών με την μέθοδο των Πεπερασμένων στοιχείων. Επειδή, όμως, η τάξη μεγέθους των διαστάσεων των νανοσωληνων και του δοκιμίου σκυροδέματος είναι χνώδης, χρησιμοποιούνται μέθοδοι ανάλυσης πολλαπλών κλιμάκων. Οι κλίμακες των υπό ανάλυση δοκιμών είναι κύβος διαστάσεων πλευράς 1,2 nm για το δοκίμιο μόνο με νανοσωλήνες άνθρακα και 10 mm, 40 mm και 150 mm για κάθε τάξη μεγέθους αδρανών, αντίστοιχα. Οι τάξεις μεγέθους των αδρανών προκύπτουν ανάλογα με την κατηγορία κοσκίνου όπου διέρχονται και ο διαχωρισμός τους γίνεται ώστε το μοντέλο δοκιμίου να έχει τόσους βαθμούς ελευθερίας ώστε να μπορεί να αναλυθεί από το πρόγραμμα πεπερασμένων στοιχείων Abaqus. Οι νανοσωλήνες άνθρακα και τα αδρανή ομογενοποιούνται στο υπόλοιπο υλικό ώστε να θεωρηθεί, εν τέλει, ομογενές και συμπαγές. Συνεπώς, η επόμενη ανάλυση στην αλληλουχία των αναλύσεων πολλαπλών κλιμάκων έχει συμπεριλάβει την πληροφορία της μηχανικής συμπεριφοράς του προηγούμενου σταδίου, και προχωρά στην εισαγωγή των νέων παραμέτρων μέχρις ότου γίνει ανάλυση του πραγματικού δοκιμίου διαστάσεων πλευράς κύβου 150 mm. Η διερεύνηση γίνεται για λόγο όγκου αδρανών 60 φ% και ποσότητα νανοσωληνων άνθρακα κατά βάρος 0,00 %, 0,10 %, 2,00% και 10,00%, όπου όμως η τελευταία ανάλυση δεν ανταποκρίνεται σε εφικτό πρόβλημα με πραγματικά δεδομένα. Τα CNTs εισήχθησαν με την τεχνική του ενσωματωμένου στοιχείου ενώ τα αδρανή ως πραγματικά μέρη του δοκιμίου. Πραγματοποιήθηκαν ελαστικές και ανελαστικές αναλύσεις επί όλων των κλιμάκων, όπως και του τελικού δοκιμίου των 150 mm που είναι η ουσία της έρευνας σε αυτήν την

εργασία. Τέλος, πριν εξαχθεί το τελικό πόρισμα για την ικανότητα αυτού του νέου νανοσύνθετου υλικού, γίνεται διερεύνηση της ανθεκτικότητας θραύσης του σκυροδέματος με ή χωρίς την ενίσχυση των CNTs. Τα υπολογιστικά αποτελέσματα συγκρίθηκαν με πειραματικά. Τα θετικά συμπεράσματα είναι εμφανή στις ελαστικές αναλύσεις αλλά πολύ περισσότερο στις μη γραμμικές αναλύσεις όπως εν τέλει προέκυψε ολόκληρη η καμπύλη τάσεων – σ – παραμορφώσεων – ε – του υλικού σε θλίψη και εφελκυσμό.



NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS

SCHOOL OF CIVIL ENGINEERING

INSTITUTE OF STRUCTURAL ANALYSIS AND ANTISEISMIC RESEARCH

DIPLOMA THESIS

Investigation of constitutive equation for concrete reinforced with carbon nano-tubes via multiscale analysis method.

Marios Impraimakis

Supervisor: Ass. Professor Vissarion Papadopoulos

ABSTRACT

The Diploma thesis you are given uses the most updated computational tools so as to study the nonlinear response of concrete reinforced with Carbon Nano-Tubes (CNTs). Specifically, specimen simulations are produced and then, run in Abaqus software. Nevertheless, due to enormous difference of specimens' sizes, the whole processing uses multiscale analysis methods. The analysis scales are 1,2 nm for specimen reinforced with carbon nanotubes, while the other three scales are 10 mm, 40 mm and 150 mm, respectively. All these scales are indeed needed, otherwise there would be so many degree of freedoms that they cannot, in any way, be managed. In the sequel, carbon nanotubes and aggregates are being embedded into cement paste through homogenization method. Consequently, every next Abaqus analysis is a new concrete specimen involving all past information of mechanical behavior simulation of smaller scales. Finally, real dimension specimen of 150 mm size is analyzed in order to exported important results for practice engineers. The investigation is taking place for 60 % aggregates volume fraction and 0,00 %, 0,10 %, 2,00 %, 10,00 % weight fraction for carbon nano-tubes. The 10,00 % carbon nano-tube weight fraction simulation has not real response and it is useful only for numerical conclusions. Carbon nano-tubes are being imported by embedded element technique, while aggregates are being imported as distinctive parts of cement paste specimen. Elastic or inelastic analysis are taking place for

every size of specimens, especially for 150 mm size specimen which is the most important so as to be led into safe scientific conclusions. In the end, in order to have a spherical view of concrete reinforced with carbon nanotube problem, fracture toughness simulations run. These solutions concern concrete with or without carbon nanotube reinforcement. All numerical results are compared to similar experimental data being found in literature. Positive conclusions are profound for elastic analysis but even more, for inelastic results as reinforced concrete stress strain curves indicate.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

1. ΑΝΑΛΥΣΗ ΠΟΛΛΑΠΛΩΝ ΚΛΙΜΑΚΩΝ ΓΙΑ ΤΗ ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ.....	1
1.1 Επιστήμη Υπολογιστικής Μηχανικής.....	2
1.2 Ανάλυση Πολλαπλών Κλιμάκων.....	3
1.3 Ομογενοποίηση 1 ^{ης} τάξεως.....	4
1.3.1 Επίλυση στο Επίπεδο Μικροκλίμακας.....	6
1.3.2 Σύζευξη Μακροκλίμακας και Μικροκλίμακας.....	8
1.3.2.1 Παραμόρφωση.....	8
1.3.2.2 Τάση.....	8
1.3.2.3 Συνεπές Εφαπτομενικό Μητρώο.....	9
1.4 Νανο-Σωλήνες Άνθρακα.....	9
1.4.1 Ατομική Δομή των Νανο-σωλήνων Άνθρακα.....	10
1.4.2 Δομική Μοριακή Μηχανική.....	12
1.4.3 Ισοδύναμο Στοιχείο Δοκού του Μονότοιχου Νανოსωλήνα Άνθρακα.....	15
1.5 Η Τεχνική του Ενσωματωμένου Στοιχείου (Embedded Element Technique).....	16
1.6 Στοιχεία Αριθμητικής Επίλυσης Μη Γραμμικών Εξισώσεων.....	18
1.6.1 Μέθοδος Newton-Raphson.....	18
1.6.2 Μέθοδος Newton-Raphson (Modified).....	19
1.6.3 Μέθοδος Euler.....	19
1.7 Ανθεκτικότητα Θραύσης (Fracture Toughness).....	21
2. ΣΚΥΡΟΔΕΜΑ ΕΝΙΣΧΥΜΕΝΟ ΜΕ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΑΝΘΡΑΚΑ.....	24
2.1 Σκυρόδεμα.....	25
2.2 Αλγόριθμος Κατασκευής Δοκιμίου Σκυροδέματος.....	28
2.3 Αλγόριθμος Προσομοίωσης του Δοκιμίου Σκυροδέματος από την MATLAB στο Λογισμικό Πακέτο Abaqus.....	40

2.4	Αλγόριθμος Κατασκευής Δοκιμίου Νανοσωλήνων Άνθρακα (CNTs).....	48
2.5	Αλγόριθμος Προσομοίωσης του Δοκιμίου Σκυροδέματος με ισοδύναμες δοκούς ΕΒΕ νανοσωλήνων άνθρακα CNTs από την MATLAB στο Λογισμικό Πακέτο Abaqus.....	58
2.6	Μοντέλο Θραύσης Σκυροδέματος (Concrete Damage Model).....	63
3.	ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΦΑΡΜΟΓΗ.....	68
3.1	Πειραματικά αποτελέσματα μηχανικής συμπεριφοράς σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα.....	69
3.2	Αριθμητικά Αποτελέσματα Ελαστικής Ανάλυσης.....	72
3.3	Μεθοδολογία Μετάβασης Μη Ελαστικής Ανάλυσης από Κλίμακα σε Κλίμακα και Αριθμητική Εφαρμογή.....	82
3.4	Αριθμητικά Αποτελέσματα Μη Ελαστικής Ανάλυσης.....	88
3.6	Αριθμητικά Αποτελέσματα Ανθεκτικότητας Θραύσης.....	90
4.	ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ – ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΟΙ ΣΤΟΧΟΙ.....	99
4.1	Συμπεράσματα.....	100
4.2	Προτάσεις για Περαιτέρω Μελλοντική Έρευνα.....	102
5.	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....	105

ΣΧΗΜΑΤΑ

Σχήμα 1.1.....	3
Σχήμα 1.2.....	5
Σχήμα 1.3.....	5
Σχήμα 1.4.....	5
Σχήμα 1.5.....	7
Σχήμα 1.6.....	11
Σχήμα 1.7.....	12
Σχήμα 1.8.....	13
Σχήμα 1.9.....	13
Σχήμα 1.10.....	13
Σχήμα 1.11.....	16
Σχήμα 1.12.....	17
Σχήμα 1.13.....	20
Σχήμα 1.14.....	20
Σχήμα 1.15.....	22
Σχήμα 2.1.....	26
Σχήμα 2.2.....	26
Σχήμα 2.3.....	29
Σχήμα 2.4.....	31
Σχήμα 2.5.....	38
Σχήμα 2.6.....	39
Σχήμα 2.7.....	42
Σχήμα 2.8.....	43
Σχήμα 2.9.....	43
Σχήμα 2.10.....	44
Σχήμα 2.11.....	51
Σχήμα 2.12.....	52

Σχήμα 2.13.....	52
Σχήμα 2.14.....	53
Σχήμα 2.15.....	59
Σχήμα 2.16.....	59
Σχήμα 2.17.....	60
Σχήμα 2.18.....	60
Σχήμα 2.19.....	61
Σχήμα 2.20.....	61
Σχήμα 2.21.....	64
Σχήμα 3.1.....	68
Σχήμα 3.2.....	68
Σχήμα 3.3.....	69
Σχήμα 3.4.....	69
Σχήμα 3.5.....	73
Σχήμα 3.6.....	73
Σχήμα 3.7.....	74
Σχήμα 3.8.....	74
Σχήμα 3.9.....	75
Σχήμα 3.10.....	75
Σχήμα 3.11.....	76
Σχήμα 3.12.....	76
Σχήμα 3.13.....	77
Σχήμα 3.14.....	77
Σχήμα 3.15.....	78
Σχήμα 3.16.....	78
Σχήμα 3.17.....	79
Σχήμα 3.18.....	79
Σχήμα 3.19.....	80
Σχήμα 3.20.....	83

Σχήμα 3.21.....	83
Σχήμα 3.22.....	84
Σχήμα 3.23.....	84
Σχήμα 3.24.....	85
Σχήμα 3.25.....	85
Σχήμα 3.26.....	87
Σχήμα 3.27.....	89
Σχήμα 3.28.....	89
Σχήμα 3.29.....	92
Σχήμα 3.30.....	93
Σχήμα 3.31.....	93
Σχήμα 3.32.....	94
Σχήμα 3.33.....	94
Σχήμα 3.34.....	95
Σχήμα 3.35.....	95

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1^ο
ΑΝΑΛΥΣΗ
ΠΟΛΛΑΠΛΩΝ
ΚΛΙΜΑΚΩΝ ΓΙΑ
ΤΗ ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ
ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑΣ
ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ
ΑΝΘΡΑΚΑ

1.1 Επιστήμη Υπολογιστικής Μηχανικής

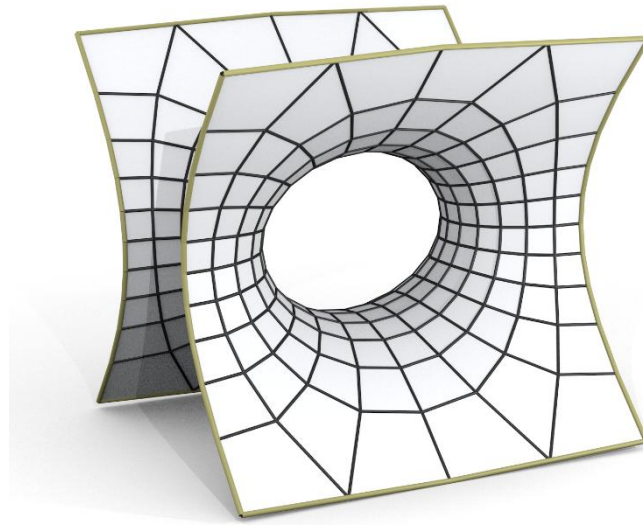
Η Υπολογιστική μηχανική (computational mechanics) είναι ο κλάδος της επιστήμης που ασχολείται με τη μηχανική, έχοντας ως κύριο εργαλείο τον υπολογιστή. Αυτή είναι και η κύρια διαφορά της από την Αναλυτική μηχανική και την Πειραματική μηχανική. Οι τρεις αυτοί κλάδοι, είτε αλληλένδετα είτε με επαλήθευση του ενός από τους άλλους συμβάλλουν στην κατανόηση και εκμετάλλευση των φαινομένων της φύσης, κυρίως της μηχανικής. Έτσι προβάλλονται συνεχώς όλο και μεγαλύτερα επιτεύγματα της στην αυτοκινητοβιομηχανία, στη διαστημική, στην αστρονομία, την κλιματική αλλαγή αλλά ακόμα και στην ιατρική, τη χημεία και τη βιολογία όπως αναλύει περίτεχνα η επιτροπή των Ηνωμένων Πολιτειών Αμερικής θεωρητικής και εφαρμοσμένης μηχανικής [1]. Η επιστήμη της Υπολογιστικής μηχανικής μετρά ήδη πάνω από 50 χρόνια και αναμφισβήτητα θεωρείται από τις πλέον υποσχόμενες ερευνητικές προσπάθειες. Οι τρεις βασικοί κλάδοι της είναι τα μαθηματικά, η επιστήμη των υπολογιστών, και βεβαίως η μηχανική. Καλύπτει ένα τεράστιο φάσμα επιστημονικής έρευνας που θα μπορούσε να κατηγοριοποιηθεί στα εξής:

- Υπολογιστική Ρευστομηχανική
- Υπολογιστική Θερμοδυναμική
- Υπολογιστικός Ηλεκτρομαγνητισμός
- Υπολογιστική Μηχανική Στερεών

Για τη επίλυση όλων των παραπάνω προβλημάτων εφαρμόζονται μαθηματικές επιλύσεις μερικών διαφορικών εξισώσεων, γραμμικής άλγεβρας και αριθμητικής ανάλυσης. Η τελευταία έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον στην υπολογιστική μηχανική και σε ότι αφορά αυτήν, έχουν εφευρεθεί και εφαρμοστεί διάφοροι μέθοδοι με κυριότερους τις:

- Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων
- Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών
- Μέθοδος Συνοριακών Στοιχείων

Η συγκεκριμένη εργασία χρησιμοποιεί ως εργαλεία την Υπολογιστική μηχανική στερεών και τη μέθοδο των Πεπερασμένων στοιχείων. Η μέθοδος των Πεπερασμένων στοιχείων, που οι προεκτάσεις της ξεπερνούν σε μέγεθος βιβλίο, είναι η συντριπτικά επικρατέστερη μέθοδος σε προβλήματα μηχανικής στερεών. Η βασική της ιδέα είναι η διακριτοποίηση του στερεού σε μικρότερα κομμάτια που λέγονται στοιχεία (Σχήμα 1.1) , επίλυση αυτών των στοιχείων με απλές εξισώσεις και προσαρμογή αυτών σε εξισώσεις που αναλύουν ολόκληρο το πρόβλημα [2]. Καθώς όμως το πρόβλημα των υλικών ενισχυμένων με νανο-υλικά έχει τεράστιο χάσμα μεγεθών θα εφαρμοστούν στην εργασία, παράλληλα και σε συνεργασία, μέθοδοι ανάλυσης πολλαπλών κλιμάκων όπως αναλύονται στις παραγράφους 1.2 και 1.3.



Σχήμα 1.1: Διακριτοποίηση αντικειμένου

1.2 Ανάλυση Πολλαπλών Κλιμάκων

Η ανάλυση πολλαπλών κλιμάκων (multiscale analysis) είναι μια σύγχρονη και υποσχόμενη ομάδα μεθόδων που επιλύουν προβλήματα μεγάλης κλίμακας που, όμως, εξαρτούν την συμπεριφορά τους από δομές και ιδιότητες μιας μικρότερης κλίμακας (Σχήμα 1.2). Με τέτοιους μεθόδους επιτυγχάνεται να αποφεύγονται δυσβάσταχτα υπολογιστικά κόστη που παρά την εμφάνιση Υπερ – υπολογιστικών ή/και μεθόδων παράλληλης επεξεργασίας (parallel computing) δεν ξεπερνιούνται. Τέτοια προβλήματα που αφορούν στη μηχανική των στερεών είναι, συνήθως, βιομηχανικά ή φυσικά υλικά όπως για παράδειγμα μεταλλικά κράματα, πολυκρυσταλλικά υλικά, γαιώδη ή βραχώδη υλικά ή και βιο-υλικά. Η ετερογένεια έχει σημαντικό αντίκτυπο στην παρατηρούμενη μακροσκοπική συμπεριφορά των πολυφασικών αυτών υλικών καθώς το μέγεθος, το σχήμα, η χωρική κατανομή και οι ιδιότητες των στοιχείων που απαρτίζουν τη μικροδομή και των αντίστοιχων διεπιφανειών τους επηρεάζουν την τελική μηχανική συμπεριφορά του υλικού και κατά συνέπεια της κατασκευής. Η μελέτη της σχέσης μεταξύ φαινομένων της μικροδομής και μακροσκοπικής συμπεριφοράς όχι μόνο καθιστά δυνατή την πρόβλεψη της συμπεριφοράς των υπαρχόντων πολυφασικών υλικών, αλλά και παρέχει ένα εργαλείο σχεδιασμού της μικροδομής ενός υλικού, έτσι ώστε η προκύπτουσα μακροσκοπική συμπεριφορά να παρουσιάζει τα απαιτούμενα χαρακτηριστικά. Μια επιπρόσθετη πρόκληση για την προσομοίωση σε πολλαπλές κλίμακες (multiscale modeling) προέρχεται από τις συνεχείς τεχνολογικές ανακαλύψεις, π.χ. τη μείωση του μεγέθους των προϊόντων, την ανάπτυξη έξυπνων υλικών που έχουν εφαρμογές στην ηλεκτρονική και την αυξανόμενη πολυπλοκότητα των διαδικασιών μορφοποίησης-έλασης (forming operations). Στις εφαρμογές μικρού μεγέθους, η επίδραση της μικροδομής δε μπορεί πια να θεωρηθεί

αμελητέα σε σχέση με το μέγεθος του στοιχείου, οδηγώντας έτσι στα, όπως αποκαλούνται, φαινόμενα κλίμακας (size effects).

Σύμφωνα με τον Feyel, F. [3] οι μέθοδοι ανάλυσης πολλαπλών κλιμάκων μπορούν να διαχωριστούν σε δύο κύριες κατηγορίες:

- **Διαδοχικές Μέθοδοι:** Πραγματοποιείται λεπτομερής ανάλυση στη μικροκλίμακα η οποία επηρεάζει τις ιδιότητες μιας μεγαλύτερης κλίμακας. Στη συνέχεια πραγματοποιείται μια ανάλυση στη μεγάλη κλίμακα λαμβάνοντας υπόψιν αυτούς τους μηχανισμούς. Ουσιαστικά, οι καταστατικοί νόμοι των υλικών της μικροκλίμακας υπολογίζονται εκ των προτέρων και στη συνέχεια χρησιμοποιούνται για τη συμπεριφορά του υλικού στη μακροκλίμακα. Η εν λόγω διαδικασία επιτυγχάνεται μέσω της ομογενοποίησης 1^{ης} τάξεως (βλέπε παράγραφο 1.3) και είναι η κατηγορία μεθόδων που θα χρησιμοποιηθεί στην εργασία.
- **Ενοποιημένες Μέθοδοι:** Πραγματοποιείται διακριτοποίηση της μικροδομής και χρησιμοποιούνται κανόνες ομογενοποίησης που συνδέουν την συμπεριφορά της μακροκλίμακας με αυτής της μικροκλίμακας. Εν τέλει, εφαρμόζεται παράλληλη επεξεργασία στο επίπεδο μακροκλίμακας και το επίπεδο μικροκλίμακας.

Η κύρια λογική της μεθόδου, σύμφωνα με την Kouznetsova [4], βασίζεται στην κατασκευή ενός αρκετά μικρού αντιπροσωπευτικού στοιχείου (Representative Volume Element – RVE) και στη συνέχεια εφαρμογή των ιδιοτήτων αυτού στα Gauss point (σημεία ολοκλήρωσης) της επίλυσης της μακροκλίμακας με τη μέθοδο των Πεπερασμένων στοιχείων. Το στοιχείο RVE επαναλαμβάνεται είτε αυτούσιο στο υλικό μας, που ορίζεται ως Καθολική Περιοδικότητα – Global Periodicity είτε σε τοπικά σημεία αυτού ως Τοπική Περιοδικότητα – Local Periodicity (σχήμα 1.3).

1.3 Ομογενοποίηση 1^{ης} Τάξεως

Ομογενοποίηση πρώτης τάξεως (First Order Homogenization) είναι η διαδικασία κατά την οποία η μηχανική συμπεριφορά της μικροκλίμακας, που προκύπτει μετά από κατάλληλες συνοριακές συνθήκες που υποδεικνύει η μακροκλίμακα, ενσωματώνεται στην μακροκλίμακα. Τα βήματα για την επίτευξη της ομογενοποίησης είναι:

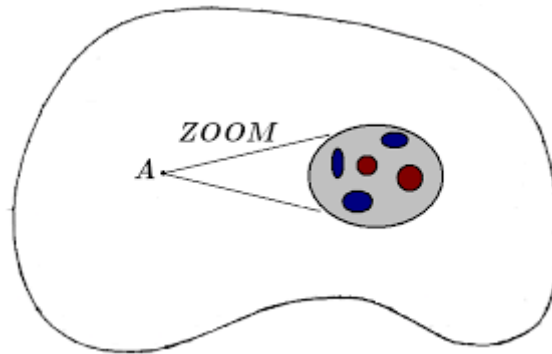
α) καθορισμός του αντιπροσωπευτικού όγκου της μικροκλίμακας (RVE), στον οποίο θεωρείται ότι η καταστατική συμπεριφορά των συστατικών του στοιχείων είναι γνωστή,

β) η διατύπωση των συνοριακών συνθηκών της μικροκλίμακας βάσει των γνωστών μεταβλητών της μικροκλίμακας και η εφαρμογή τους στον αντιπροσωπευτικό όγκο (RVE) (μετάβαση από τη μακροκλίμακα στη μικροκλίμακα),

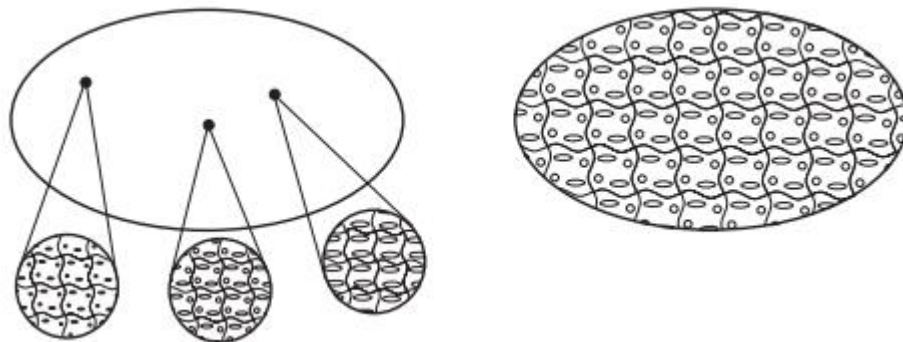
γ) υπολογισμός των άγνωστων μεταβλητών της μακροκλίμακας από την ανάλυση του παραμορφωμένου αντιπροσωπευτικού όγκου (μετάβαση από τη μικροκλίμακα στη μακροκλίμακα),

δ) υπολογισμός της αριθμητικής σχέσης μεταξύ των γνωστών και των αγνώστων μεταβλητών της μακροκλίμακας.

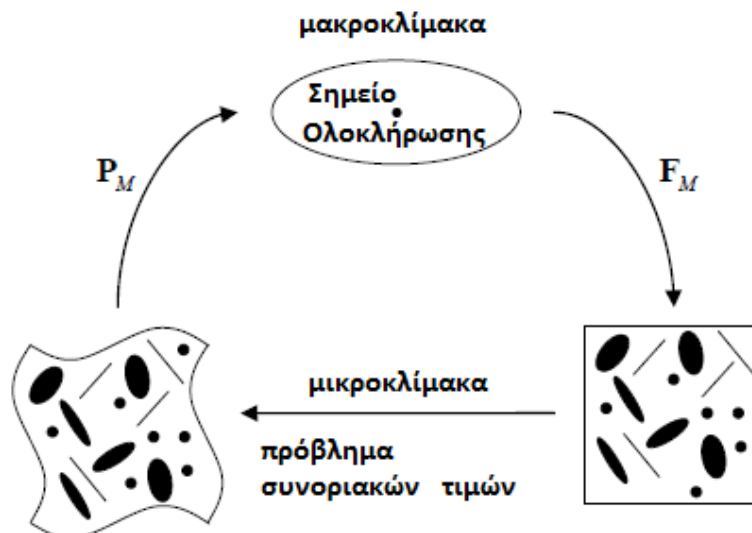
Κατά τη διαδικασία της υπολογιστικής ομογενοποίησης πρώτης τάξεως, για κάθε υλικό σημείο της μακροδομής (δηλαδή για τα σημεία ολοκλήρωσης του δικτύου



Σχήμα 1.2: Σχηματική απεικόνιση υλικού που εξαρτά την συμπεριφορά του από ιδιότητες μικροδομών. Στο σημείο A παρατηρούμε το RVE.



Σχήμα 1.3: Αριστερά τοπική και δεξιά καθολική περιοδικότητα RVE.



Σχήμα 1.4: Πορεία υπολογιστικής ομογενοποίησης πρώτης τάξεως

διακριτοποίησης σε επίπεδο μακροκλίμακας, όταν χρησιμοποιείται η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων) υπολογίζεται ο μακροσκοπικός τανυστής της κλίσης της παραμόρφωσης F_M (deformation gradient tensor). Από εδώ και στο εξής, ο δείκτης “ M ” θα αναφέρεται σε ποσότητα της μακροκλίμακας και ο δείκτης “ m ” θα συμβολίζει ποσότητα της μικροκλίμακας. Ο τανυστής της παραμόρφωσης F_M για ένα μακροσκοπικό σημείο χρησιμοποιείται, στη συνέχεια, για να διαμορφώσει τις συνοριακές συνθήκες, οι οποίες επιβάλλονται στον αντιπροσωπευτικό όγκο (RVE) που έχει αντιστοιχηθεί στο σημείο αυτό. Μετά την επίλυση του προβλήματος συνοριακών τιμών για τον αντιπροσωπευτικό όγκο, υπολογίζεται ο μακροσκοπικός τανυστής των τάσεων P_m εξάγοντας το μέσο όρο του προκύπτοντος πεδίου των τάσεων στον όγκο του αντιπροσωπευτικού στοιχείου. Κατά συνέπεια, προκύπτει εύκολα η αριθμητική σχέση τάσεων- παραμόρφωσης στο μακροσκοπικό σημείο. Επιπρόσθετα, εξάγεται το τοπικό μακροσκοπικό συνεπές εφαπτομενικό μητρώο από τη δυσκαμψία της μικροδομής (Σχήμα 1.4).

1.3.1 Επίλυση στο Επίπεδο Μικροκλίμακας

Έστω το RVE που φαίνεται στο Σχήμα 1.5. Το εν λόγω RVE, αν και σχηματικά παρουσιάζεται επίπεδο (δισδιάστατο), επεξηγεί με σαφήνεια την διαδικασία επίλυσης ενός τρισδιάστατου RVE. Το RVE αρχικά βρίσκεται στη θέση με διάνυσμα \vec{X} σε απαραμόρφωτη κατάσταση με όγκο V_0 . Μετά την επιβολή του φορτίου θα βρίσκεται στη θέση \vec{x} , ενώ θα έχει παραμορφωθεί σε όγκο V . Το πεδίο παραμόρφωσης του RVE ορίζεται από τον τανυστή κλίσης της παραμόρφωσης στην μικροκλίμακα ως:

$$F_M = (\nabla_{om} \vec{x})^T \quad (1.1)$$

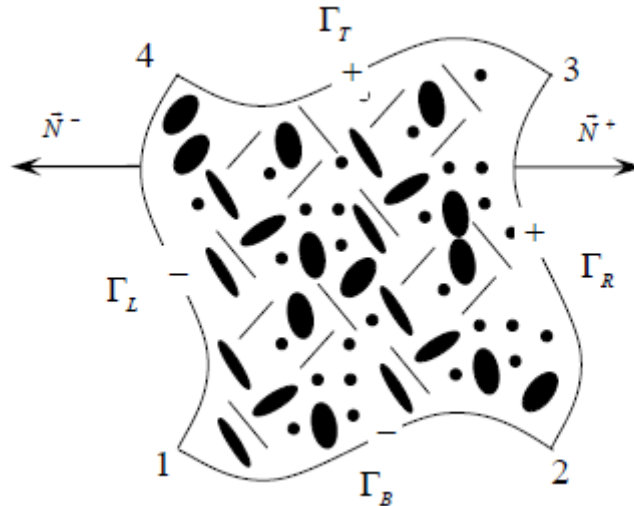
όπου, ο τελεστής κλίσης ∇_{om} λαμβάνεται υπόψιν στη αρχική κατάσταση παραμόρφωσης. Το RVE παραμένει πάντα σε κατάσταση ισορροπίας και αυτό μπορεί να διατυπωθεί είτε σε όρους τανυστή Cauchy, σ_m , είτε σε όρους του πρώτου Piola – Kirchhoff τανυστή των τάσεων $P_m = \det(F_m) \sigma_m (F_m)^{-T}$. Σύμφωνα με τις δύο εκφράσεις, τις εξισώσεις ισορροπίας και την παράλειψη μαζικών δυνάμεων προκύπτει:

$$\nabla_m \sigma_m = \vec{0}, \text{ στο } V \quad (1.2)$$

και

$$\nabla_m P_m^T = \vec{0}, \text{ στο } V_0 \quad (1.3)$$

όπου, ∇_m ο τελεστής κλίσης στην εκάστοτε κατάσταση του RVE. Η μετάβαση από τη μακροκλίμακα στη μικροκλίμακα πραγματοποιείται επιβάλλοντας το μακροσκοπικό τανυστή της κλίσης της παραμόρφωσης F_M στη μικροδομή του αντιπροσωπευτικού όγκου μέσω μιας συγκεκριμένης προσέγγισης. Ο απλούστερος τρόπος είναι να υποτεθεί ότι τα συστατικά της μικροδομής υφίστανται μια σταθερή παραμόρφωση που ταυτίζεται με τη μακροσκοπική. Στη βιβλιογραφία, η παραπάνω προσέγγιση είναι γνωστή ως η υπόθεση Taylor (ή Voigt). Μια άλλη απλή στρατηγική είναι να υποτεθεί μια ίδια σταθερή τάση (και επιπρόσθετα ίδια στρόφη) σε όλα τα συστατικά (Sachs (or Reuss) assumption). Αυτές οι απλοποιημένες μέθοδοι δεν απαιτούν τη λεπτομερή προσομοίωση της μικροδομής. Συνεπώς, παρέχουν πολύ προσεγγιστικές εκτιμήσεις των συνολικών ιδιοτήτων των υλικών.



Σχήμα 1.5: Σχηματική απεικόνιση ενός τυπικού δισδιάστατου αντιπροσωπευτικού στοιχείου RVE.

Η υπόθεση του Taylor συνήθως υπερεκτιμά τη συνολική δυσκαμψία, ενώ η υπόθεση Sachs οδηγεί σε υποεκτίμηση της δυσκαμψίας. Πιο ακριβείς είναι οι στρατηγικές μέσης τιμής, οι οποίες απαιτούν την επίλυση του λεπτομερούς προβλήματος συνοριακών τιμών της μικροδομής και μεταφέρουν τις δεδομένες μακροσκοπικές μεταβλητές στη μικροδομή του αντιπροσωπευτικού όγκου μέσω συνοριακών συνθηκών. Συνήθως, χρησιμοποιούνται τρεις τύποι συνοριακών συνθηκών οι οποίες είναι οι εξής:

α) **Καθορισμένες Μετακινήσεις:** Σε αυτή τη περίπτωση η νέα θέση του RVE δίνεται από το διάνυσμα

$$\vec{x} = F_M \vec{X} \quad \text{με } \vec{X} \text{ στο } \Gamma_0 \quad (1.4)$$

όπου, Γ_0 το απαραμόρφωτο σύνορο του RVE.

β) **Καθορισμένες επιφανειακές τάσεις:** Επιβάλλεται τάση

$$\vec{t} = \sigma_m \vec{n} \quad \text{στο } \Gamma \quad (1.5)$$

ή

$$\vec{p} = P_M \vec{N} \quad \text{στο } \Gamma_0 \quad (1.6)$$

όπου \vec{n} και \vec{N} είναι τα κάθετα διανύσματα στα τρέχοντα (Γ) και στα αρχικά (Γ_0) σύνορα του αντιπροσωπευτικού όγκου, αντίστοιχα.

γ) **Καθορισμένη Περιοδικότητα:** Οι συνθήκες περιοδικότητας για τον αντιπροσωπευτικό όγκο διατυπώνονται στη γενική τους μορφή ως εξής

$$\vec{x}^+ - \vec{x}^- = F_M (\vec{X}^+ - \vec{X}^-) \quad (1.7)$$

και

$$\vec{p}^+ = -\vec{p}^- \quad (1.8)$$

όπου, η σχέση (1.7) επιβάλλει τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες, ενώ η σχέση (1.8) επιβάλλει αντισυμμετρικά διανύσματα τάσεων στο σύνορο του αντιπροσωπευτικού όγκου. Οι πλευρές Γ_0^- και Γ_0^+ του συνόρου του συνόρου του αντιπροσωπευτικού όγκου ορίζονται έτσι ώστε $\vec{N}^+ = \vec{N}^-$ στα αντίστοιχα σημεία των Γ_0^- και Γ_0^+ (Σχήμα 1.5). Για τον δισδιάστατο αντιπροσωπευτικό όγκο, που φαίνεται στο Σχήμα 1.5, η περιοδική συνθήκη (1.7) μπορεί να αναδιατυπωθεί στην ακόλουθη μορφή:

$$\vec{x}_R = \vec{x}_L + \vec{x}_2 - \vec{x}_1 \quad (1.9)$$

και

$$\vec{x}_T = \vec{x}_B + \vec{x}_4 - \vec{x}_1 \quad (1.10)$$

Όπου, τα \vec{x}_R , \vec{x}_L , \vec{x}_T και \vec{x}_B δηλώνουν το διάνυσμα θέσης στο αριστερό, το δεξιό, το κάτω και το άνω σύνορο του αντιπροσωπευτικού όγκου, αντίστοιχα. Τα $\vec{x}_i = 1, 2, 4$ είναι τα διανύσματα θέσης των γωνιακών σημείων 1, 2 και 4 στην παραμορφωμένη κατάσταση. Αυτά τα διανύσματα θέσης επιβάλλονται σύμφωνα με τη σχέση:

$$\vec{x}_i = F_M \vec{X}_i, \quad i = 1, 2, 4 \quad (1.11)$$

1.3.2 Σύζευξη Μακροκλίμακας και Μικροκλίμακας

Η σύζευξη μεταξύ της μακροκλίμακας και της μικροκλίμακας γίνεται βάσει θεωρημάτων υπολογισμού μέσης τιμής.

1.3.2.1 Παραμόρφωση

Η πρώτη από τις σχέσεις υπολογισμού μέσης τιμής αφορά στη σύζευξη των κινηματικών ποσοτήτων της μικροκλίμακας και της μακροκλίμακας. Έτσι, γίνεται η παραδοχή ότι ο τανυστής της κλίσης της μακροσκοπικής παραμόρφωσης F_M είναι ίσος με τη μέση τιμή του τανυστή της κλίσης της παραμόρφωσης στον όγκο του αντιπροσωπευτικού στοιχείου F_m :

$$\begin{aligned} F_M &= \frac{1}{V_0} \int_{V_0} F_M dV_0 = \\ &= \frac{1}{V_0} \int_{\Gamma_0} \vec{x} \vec{N} d\Gamma_0 = \frac{1}{V_0} \int_{\Gamma_0} \{x\} \{N\}^T d\Gamma_0 \end{aligned} \quad (1.12)$$

όπου, χρησιμοποιήθηκε το θεώρημα της απόκλισης για να μετασχηματίσει το τριπλό ολοκλήρωμα πάνω στον απαραμόρφωτο όγκο του αντιπροσωπευτικού στοιχείου σε ένα επιφανειακό ολοκλήρωμα. Με βάση αυτά, μπορούν πολύ εύκολα να αποδειχθεί ότι η σχέση (1.12) επαληθεύεται εύκολα για τις περιπτώσεις συνθηκών καθορισμένης μετατόπισης και τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες [5].

1.3.2.2 Τάση

Με παρόμοια λογική, μέσω δηλαδή υπολογισμού μέσης τιμής για το πρώτο τανυστή Piola – Kirchhoff των τάσεων PM βρίσκουμε στη βιβλιογραφία [4] επιλύσεις για τη τάση ως:

$$\begin{aligned}
P_M &= \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \nabla_{om} (P_m^T \vec{X}) dV_0 = \\
&= \frac{1}{V_0} \int_{\Gamma_0} \vec{N} P_m^T \vec{X} d\Gamma_0 = \frac{1}{V_0} \int_{\Gamma_0} \vec{p} \vec{X} d\Gamma_0
\end{aligned} \tag{1.13}$$

Εφαρμόζοντας τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες (1.9), (1.10), (1.11) για το δισδιάστατο αντιπροσωπευτικό στοιχείο που φαίνεται στο Σχήμα (1.5), μπορεί να επαληθευτεί ότι μόνο οι εξωτερικές δυνάμεις στους τρεις κόμβους στους οποίους επιβάλλεται μια καθορισμένη μετακίνηση συνεισφέρουν στο επιφανειακό ολοκλήρωμα (1.13):

$$P_M = \frac{1}{V_0} \sum_{i=1,2,4} \vec{f}_i \vec{X}_i \tag{1.14}$$

όπου \vec{f}_i είναι οι προκύπτουσες εξωτερικές δυνάμεις στους κόμβους του συνόρου.

1.3.2.3 Συνεπές Εφαπτομενικό Μητρώο

Ας θεωρήσουμε την περίπτωση των συνοριακών συνθηκών στις οποίες καθορίζονται πλήρως οι μετακινήσεις των συνοριακών κόμβων (σχέση 1.4). Το ολικό σύστημα των εξισώσεων της μικροκλίμακας αναδιατάσσεται στη μορφή:

$$\begin{bmatrix} \underline{K}_{pp} & \underline{K}_{pf} \\ \underline{K}_{fp} & \underline{K}_{ff} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \delta \underline{u}_p \\ \delta \underline{u}_f \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \delta \underline{f}_p \\ \underline{0} \end{Bmatrix} \tag{1.15}$$

όπου, $\delta \underline{u}_p$ και $\delta \underline{f}_p$ είναι οι στήλες με τις μετακινήσεις και τις εξωτερικές δυνάμεις των συνοριακών κόμβων και $\delta \underline{u}_f$ είναι η στήλη με τις μετακινήσεις των υπόλοιπων (εσωτερικών) κόμβων. Τα \underline{K}_{pp} , \underline{K}_{pf} , \underline{K}_{fp} , \underline{K}_{ff} είναι τα αντίστοιχα τμήματα του καθολικού μητρώου δυσκαμψίας του αντιπροσωπευτικού όγκου. Τελικά, προκύπτουν οι λύσεις της εξίσωσης (1.15) στη βιβλιογραφία [4], δηλαδή η εύρεση του συνεπούς εφαπτομενικού μητρώου, για κάθε ξεχωριστή των τριών περιπτώσεων συνοριακών συνθηκών του αντιπροσωπευτικού όγκου RVE.

1.4 Νανο-Σωλήνες Άνθρακα

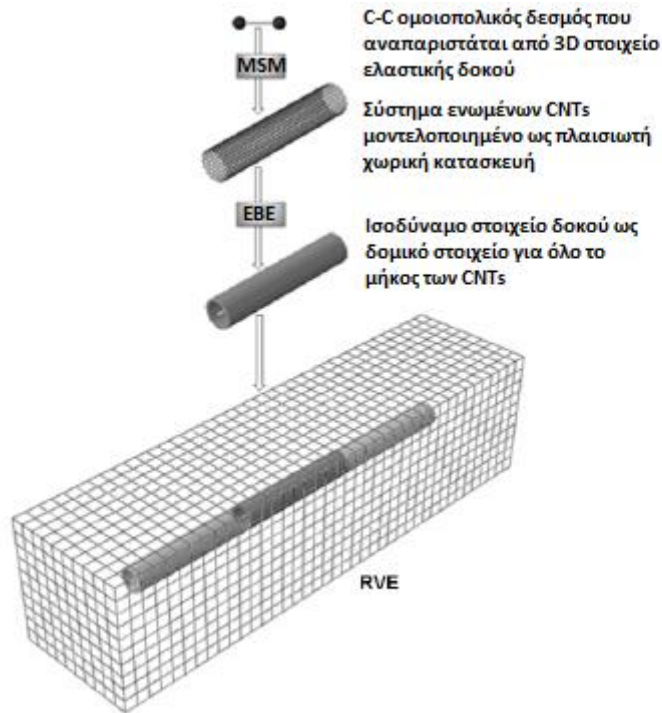
Τα τελευταία χρόνια οι νανο-σωλήνες άνθρακα (Carbon Nanotubes - CNTs) έχουν προσελκύσει το ενδιαφέρον μελετών λόγω των εκπληκτικών μηχανικών ιδιοτήτων που παρουσιάζουν. Τόσο σε πειραματικές μετρήσεις [6,7,8,9,10] όσο και αριθμητικές προσομοιώσεις [11,12,13,14] έχει υπολογιστεί το μέτρο ελαστικότητας τους στην τιμή του 1 TPa ενώ η εφελκυστική αντοχή τους έχει υπολογιστεί περίπου στην τιμή των 150 GPa. Οι παραπάνω σπουδαίες μηχανικές ιδιότητες καθώς και ο υψηλός λόγος μήκους/διαμέτρου σε συνδυασμό με την χαμηλή τους πυκνότητα καθιστούν τα CNTs ιδανικά ως ενισχυτικά στοιχεία των νανοσύνθετων υλικών. Από την σκοπιά της υπολογιστικής μηχανικής, οι κλασσικές ατομικές υπολογιστικές τεχνικές που χρησιμοποιούνται όπως για παράδειγμα η *ab initio* κβαντική χημεία (βασισμένη απευθείας στη θεμελιώδη φυσική), η μοριακή δυναμική (διατηρώντας τα άτομα, αλλά χωρίς τις συναρτήσεις κύματος) αλλά και οι προσεγγίσεις μηχανικής του συνεχούς μέσου (παραλείποντας τα άτομα και τις συναρτήσεις κύματος) είναι από τις πιο διαδεδομένες για την μοντελοποίηση των CNTs. Παρά την συνεχή και μεγάλη ανάπτυξη των υπολογιστικών δυνατοτήτων οι ατομικές υπολογιστικές

μέθοδοι όπως η *ab initio* κβαντική χημεία και η μοριακή δυναμική περιορίζονται σε αναλύσεις ατομικής κλίμακας και σε προσομοίωση φαινομένων μικρής χρονικής διάρκειας. Από την άλλη οι προσεγγίσεις μηχανικής συνεχούς μέσου υπερτερούν έναντι άλλων για την προσομοίωση φαινομένων μεγαλύτερης κλίμακας και μεγαλύτερη χρονικής διάρκειας. Η βασική τους αρχή είναι η αντικατάσταση των χημικών δεσμών μεταξύ των ατόμων που χρησιμοποιούνται από την μοριακή δυναμική με ισοδύναμα στοιχεία συνεχούς μέσου που μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε μια ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων. Η σύνδεση της μοριακής δυναμικής με την θεωρία της μηχανικής του συνεχούς μέσου επιτυγχάνεται μέσω ενεργειακών ισοδυναμιών. Η πιο γνωστή από τις προσεγγίσεις μηχανικής του συνεχούς μέσου είναι η μέθοδος της δομικής μοριακής μηχανική (Structural Molecular Mechanics - SMM) που, λόγω της απλότητας και αποτελεσματικότητας της, χρησιμοποιείται ευρέως. Στην SMM το ατομικό πλέγμα που συνθέτει τα CNTs μοντελοποιείται ως ένα πλαισιωτό δίκτυο όπου οι ομοιοπολικοί δεσμοί μεταξύ των ατόμων άνθρακα αντικαθίστανται από ισοδύναμα στοιχεία δοκού. Η ακαμψία των δοκών αυτών, που προσομοιάζει τις ενδοατομικές επιδράσεις στο ατομικό πλέγμα, προκύπτει από την ισοδυναμία των ενεργειακών εκφράσεων της δομικής μοριακής μηχανικής. Συνήθως η γραμμική συμπεριφορά των ατομικών επιδράσεων περιγράφεται στην μοριακή δυναμική από ένα δυναμικό που προσεγγίζεται από ένα πολυώνυμο δευτέρας τάξεως. Αντίστοιχα η μη γραμμική συμπεριφορά των δεσμών περιγράφεται από ένα πιο σύνθετο δυναμικό γνωστό ως δυναμικό του Morse.

Στην παρούσα μελέτη, η επίδραση της διεπιφανειακής διατμητικής αντοχής στις μηχανικές ιδιότητες του σκυροδέματος με CNTs διερευνάται με την βοήθεια αναλύσεων πολλαπλής κλίμακας. Το ατομικό πλέγμα των CNTs προσομοιώνεται με ένα πλαισιωτό δίκτυο δοκών χρησιμοποιώντας τις αρχές του SMM. Καθώς τα CNTs σχηματίζουν μακριές αλυσίδες, φτάνοντας σε μήκος κάποιων μικρών, η λεπτομερής προσομοίωση της νανοδομής τους με βάση το SMM είναι μια υπολογιστικά επίπονη διαδικασία. Για αυτόν τον λόγο το λεπτομερές μοντέλο του SMM αντικαθίσταται από μία ισοδύναμη δοκό (Equivalent Beam Element- EBE) η οποία χρησιμοποιείται ως το βασικό στοιχείο για την δόμηση των μακρών αλυσίδων των CNTs (Σχήμα 1.6). Στη συνέχεια θα παρουσιαστούν τρεις μέθοδοι μοντελοποίησης των νανο-σωλήνων άνθρακα όπως περιγράφονται από τον Δ.Ν. Σάββα [15,16,17,18]. Για μεγαλύτερη ακρίβεια, οι νανοσωλήνες άνθρακα μπορούν και πρέπει να μελετώνται και για την τυχαιότητα της διάταξης και της γεωμετρίας τους [19] που όμως στην εν λόγω εργασία δε θα γίνει ιδιαίτερη αναφορά.

1.4.1 Ατομική Δομή των Νανο-σωλήνων Άνθρακα

Ένας μονότοιχος νανοσωλήνας άνθρακα (MTNΣΑ) προσομοιώνεται με μια σωληνοειδή κατασκευή που προκύπτει από την περιέλαση ενός φύλλου γραφενίου. Οι πολύτοιχοι νανοσωλήνες άνθρακα (ΠΤΝΣΑ) αποτελούνται από ομόκεντρους MTNΣΑ διαφορετικής ακτίνας. Η ατομική δομή του νανοσωλήνα προσδιορίζεται από ένα χαρακτηριστικό διάνυσμα (chiral vector) \vec{C}_h το οποίο μαζί με την γωνία (chiral angle) θ καθορίζει την διεύθυνση δίπλωσης του φύλλου γραφενίου. Ένας MTNΣΑ με chirality (n, m) προκύπτει κόβοντας το



Σχήμα 1.6: Γραφική αναπαράσταση της μοντελοποίησης πολλαπλών κλιμάκων του RVE των CNTs. Παρατηρούμε τους ομοιοπολικούς δεσμούς μεταξύ δύο CNTs, την τρισδιάστατη πλαίσιαστη κατασκευή τους, το ισοδύναμο στοιχείο δοκού και τέλος το στοιχείο αντιπροσωπευτικού όγκου RVE.

φύλλο γραφενίου κατά μήκος των διακεκομένων γραμμών και διπλώνοντάς το κατά την διεύθυνση του chiral διάνυσματος όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.7. Το chiral διάνυσμα και η γωνία θ του chiral διάνυσματος ορίζεται ως εξής (θεωρώντας ότι τα \vec{a}_1, \vec{a}_2 είναι τα διανύσματα βάσης ενώ (n, m) είναι οι παράμετροι που χαρακτηρίζουν το chirality του νανοσωλήνα) :

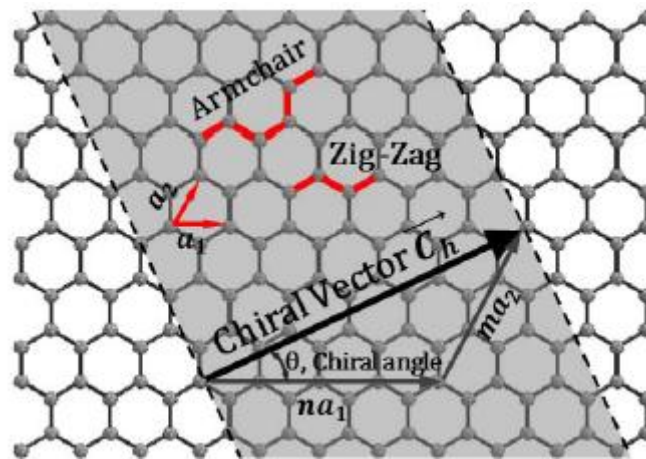
$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (1.16)$$

και

$$\theta = \text{atan} \left(\frac{\sqrt{3}m}{2n+m} \right) \quad (1.17)$$

Για $n=m$ η γωνία $\theta = 30^\circ$ και ο νανοσωλήνας χαρακτηρίζεται ως τύπου armchair, ενώ για $m=0$ η γωνία $\theta = 0^\circ$ και ο νανοσωλήνας χαρακτηρίζεται ως τύπου zig-zag. Για γωνία $\theta \in (0^\circ - 30^\circ)$ ο τύπος του νανοσωλήνα που δημιουργείται είναι (n, m) . Η διάμετρος του CNT εξαρτάται από το chiral διάνυσμα και υπολογίζεται από τις παραμέτρους n και m από τον τύπο:

$$d_{cnt} = |a_1| \frac{\sqrt{n^2 + nm + m^2}}{\pi} \quad (1.18)$$



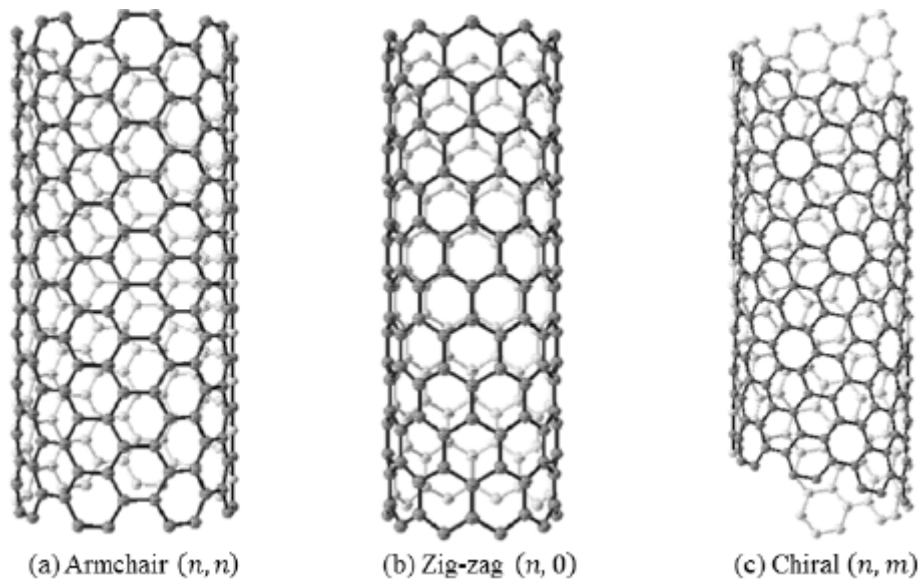
Σχήμα 1.7: Ατομικό πλέγμα φύλλου γραφενίου, επεξήγηση των παραμέτρων του chirality

1.4.2 Δομική Μοριακή Μηχανική

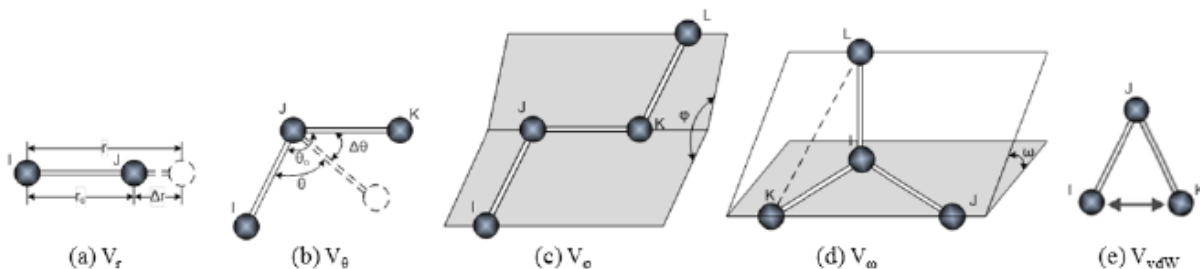
Το ατομικό πλέγμα των CNTs προσομοιώνεται με μια πλαισιωτή κατασκευή. Στο Σχήμα (1.8) παρουσιάζονται διαφορετικού τύπου chirality νανοσωλήνες άνθρακα. Η εξαγωνική διάταξη των ατόμων που φαίνεται στο Σχήμα (1.8) αποτελεί το στοιχειώδες κατασκευαστικό στοιχείο της πλαισιωτής κατασκευής. Σύμφωνα με τις αρχές της δομικής μοριακής μηχανικής η παραμόρφωση του CNT υπό εξωτερική φόρτιση καθορίζεται από τις αλληλεπιδράσεις των ατόμων [20]. Συνήθως αυτές οι δυνάμεις πεδίου εκφράζονται μέσω της δυναμικής ενέργειας του ατομικού πλέγματος. Υποθέτοντας ότι υπάρχουν ομοιότητες μεταξύ των παραμορφώσεων του ατομικού πλέγματος και των παραμορφώσεων της πλαισιωτής κατασκευής, μπορεί να οριστεί μια ισοδυναμία μεταξύ της δυναμικής ενέργειας των ατόμων του CNT σε μοριακό επίπεδο και της ενέργειας παραμόρφωσης των στοιχείων συνεχούς μέσου της πλαισιωτής κατασκευής. Από την παραπάνω ενεργειακή ισοδυναμία και τις τιμές των δυνάμεων πεδίου που καθορίζονται από την υπολογιστική χημεία, μπορούν να υπολογιστούν οι ιδιότητες του υλικού και η γεωμετρία των στοιχείων συνεχούς μέσου που συνθέτουν την πλαισιωτή κατασκευή και απαιτούνται για την ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων. Η συνολική δυναμική ενέργεια (V_{total}) η οποία χαρακτηρίζει το πεδίο δυνάμεων στο μοριακό πλέγμα εκφράζεται ως το άθροισμα των ενεργειών που οφείλονται στις διατομικές αλληλεπιδράσεις. Οι επιμέρους ενέργειες οφείλονται σε αλληλεπιδράσεις χημικού δεσμού μεταξύ των γειτονικών ατόμων αλλά και σε αλληλεπιδράσεις μεταξύ απομακρυσμένων ατόμων του μοριακού συστήματος όπως είναι οι αλληλεπιδράσεις λόγω δυνάμεων van der Waals αλλά και οι ηλεκτροστατικές αλληλεπιδράσεις [20]. Αμελώντας τις ηλεκτροστατικές επιδράσεις η συνολική δυναμική ενέργεια του μοριακού συστήματος εκφράζεται ως εξής:

$$V_{total} = \sum V_r + \sum V_\theta + \sum V_\phi + \sum V_\omega + \sum V_{vdW} \quad (1.19)$$

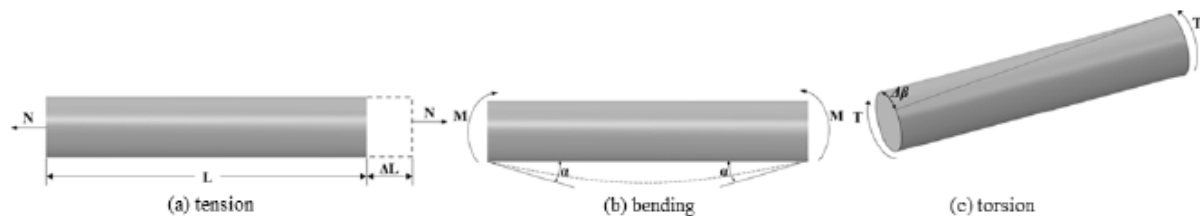
Η παραπάνω εξίσωση περιλαμβάνει τις ενδοατομικές επιδράσεις όπως αυτές περιγράφονται στο Σχήμα (1.9). V_r είναι η ενέργεια εξ' αιτίας του εφελκυσμού του δεσμού, V_θ η ενέργεια λόγω κάμψης της γωνίας του, V_ϕ η ενέργεια εξ' αιτίας της



Σχήμα 1.8: CNTs με chirality τύπου (a) armchair, (b) zig-zag and (c) chiral



Σχήμα 1.9: Ενδοατομικές επιδράσεις που συνεισφέρουν στην συνολική δυναμική ενέργεια του μοριακού συστήματος



Σχήμα 1.10: Καθαρός εφελκυσμός, κάμψη και στρέψη ομοιόμορφης δοκού

δίεδρης γωνίας στρέψης του, V_ω η ενέργεια λόγω της στρέψης εκτός επιπέδου του δεσμού και V_{vdw} η ενέργεια που οφείλεται στην ενέργεια που δεν αφορά παραμόρφωση δεσμού αλλά την van der Waals αλληλεπίδραση. Για συστήματα ομοιοπολικών δεσμών, η κύρια συνεισφορά στην συνολική δυναμική ενέργεια προέρχεται από τους τέσσερις πρώτους όρους της εξίσωσης (1.19) καθώς η συνεισφορά των αλληλεπιδράσεων van der Waals θεωρείται αμελητέα. Στο πεδίο της μοριακής μηχανικής υπάρχουν αρκετές μελέτες που προτείνουν διαφορετικές εκφράσεις των παραπάνω ενεργειακών όρων οι οποίοι εξαρτώνται από το υλικό και τις συνθήκες φόρτισης του ατομικού μοντέλου [21, 22]. Τόσο γραμμικές όσο και μη γραμμικές εκφράσεις των ενεργειακών όρων έχουν εφαρμοστεί από διάφορους μελετητές. Οι πιο διαδεδομένες είναι η έκφραση της ενέργειας ως πολυωνύμου

δευτέρας τάξεως, η έκφραση της από το δυναμικό του Morse, των Tersoff-Brenner και των Lenard-Jones. Στην παρούσα μελέτη γίνεται η υπόθεση των μικρών παραμορφώσεων του νανοσωλήνα, ώστε οι αλληλεπιδράσεις των ατόμων άνθρακα να θεωρούνται γραμμικές, επιτρέποντας επομένως την έκφραση των ενεργειακών όρων μέσω αρμονικών συναρτήσεων της μορφής:

$$V_r = \frac{1}{2}k_r(r - r_o)^2 = \frac{1}{2}k_r(\Delta r)^2 \quad (1.20)$$

$$V_\theta = \frac{1}{2}k_\theta(\theta - \theta_o)^2 = \frac{1}{2}k_\theta(\Delta\theta)^2 \quad (1.21)$$

$$V_\tau = V_\varphi + V_\omega = \frac{1}{2}k_\tau(\Delta\varphi)^2 \quad (1.22)$$

όπου k_r , k_θ , και k_τ είναι οι σταθερές των δυνάμεων αντίστασης κατά τον εφελκυσμό των δεσμών, την κάμψη τους και την στρέψη τους αντίστοιχα, ενώ Δr , $\Delta\theta$ και $\Delta\varphi$ είναι η μεταβολή της αξονικής απόστασης των ατόμων κατά τον εφελκυσμό, η μεταβολή της γωνίας τους κατά την κάμψη και η μεταβολή της γωνίας τους κατά την στρέψη του δεσμού αντίστοιχα. Στην εξίσωση (1.22) οι ενεργειακοί όροι που αναφέρονται στην δίεδρη και στην εκτός επιπέδου στρέψη του δεσμού έχουν συγχωνευθεί σε έναν μόνο όρο που αντιστοιχεί στην συνολική ενέργεια λόγω στρέψης του δεσμού γενικά. Σύμφωνα με την θεωρία της δομικής μηχανικής η ενέργεια παραμόρφωσης μιας ομοιόμορφης δοκού μήκους L που υποβάλλεται σε αξονική φόρτιση N (Σχήμα 1.10 α) δίνεται από τον τύπο:

$$V_A = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{N^2}{EA} dL = \frac{1}{2} \frac{N^2 L}{EA} = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} (\Delta L)^2 \quad (1.23)$$

όπου, ΔL είναι η αξονική επιμήκυνση της δοκού λόγω αξονικής παραμόρφωσης της. Η ενέργεια καμπτικής παραμόρφωσης της παραπάνω δοκού που υποβάλλεται σε καθαρή ροπή κάμψης M (Σχήμα 1.10 β) είναι:

$$V_M = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EA} dL = \frac{2EA}{L} a^2 = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} (2a)^2 \quad (1.24)$$

όπου, a είναι η γωνία κάμψης των άκρων της δοκού. Η ενέργεια στρεπτικής παραμόρφωσης της δοκού υπό καθαρή ροπή στρέψης T (Σχήμα 1.10 γ) είναι:

$$V_T = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = \frac{1}{2} \frac{T^2 L}{GJ} = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\Delta\beta)^2 \quad (1.25)$$

όπου, $\Delta\beta$ είναι η σχετική μεταβολή της γωνίας στρέψης των άκρων της δοκού.

Συνδυάζοντας τις παραπάνω ενεργειακές εκφράσεις που προκύπτουν από την δομική μηχανική με αυτές που προκύπτουν από την μοριακή μηχανική, εξισώσεις (1.20, 1.21, 1.22), υπολογίζονται οι παράμετροι ακαμψίας EA , EI και GJ της δοκού με γνωστές τις σταθερές των δυνάμεων αντίστασης k_r , k_θ και k_τ ως εξής:

$$EA = k_r L, \quad EI = k_\theta L, \quad GJ = k_\tau L \quad (1.26)$$

Εάν υποθέσουμε κυκλική διατομή για την δοκό που αντιπροσωπεύει τον δεσμό μεταξύ των ατόμων άνθρακα, η διάμετρος της υπολογίζεται από τις σταθερές των μοριακών δυνάμεων αντίστασης βάση του τύπου:

$$d = \sqrt[4]{\frac{EI}{EA}} = \sqrt[4]{\frac{k_{\theta}}{k_{\tau}}} \quad (1.27)$$

καταλήγοντας σε επιφάνεια διατομής $A=\pi d^2/4$, σε ροπή αδρανείας $I_x=I_y=\pi/64$ και σε πολική ροπή αδρανείας $J=\pi d^4/32$. Από την εξίσωση (1.26) προκύπτει η έκφραση του μέτρου ελαστικότητας του Young και του διατμητικού μέτρου ελαστικότητας της δοκού κυκλικής διατομής στην μορφή:

$$E = \frac{k_r^2 L}{4\pi k_{\theta}} \quad (1.28)$$

και

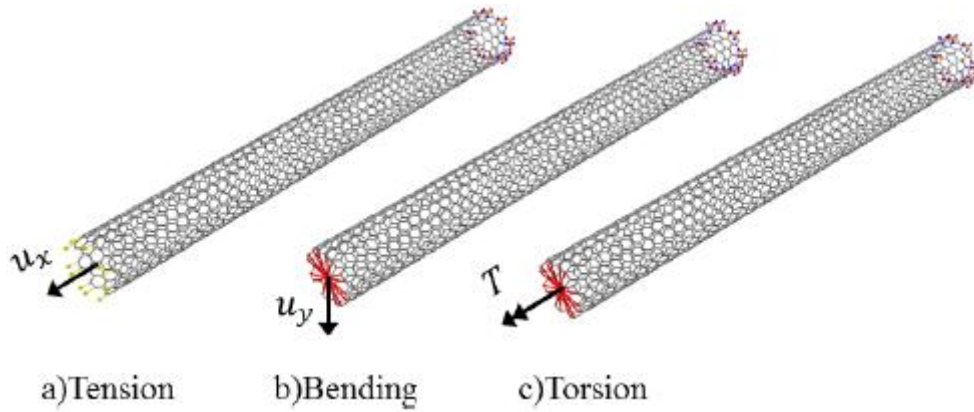
$$G = \frac{k_r^2 k_{\tau} L}{8\pi k_{\theta}^2} \quad (1.29)$$

1.4.3 Ισοδύναμο Στοιχείο Δοκού του Μονότοιχου Νανοσωλήνα Άνθρακα

Παρόλο που η μέθοδος του SMM σε σχέση με την μέθοδο της μοριακής δυναμικής (Structural Dynamics - SD), υπερβαίνει κατά την υπολογιστική διαδικασία τους περιορισμούς σε χρόνο επίλυσης και σε μέγεθος κλίμακας του προβλήματος, ωστόσο η λεπτομερής προσομοίωση της νανοδομής των CNTs καταλήγει σε ένα υπολογιστικό πρόβλημα αρκετά μεγάλου μεγέθους που καθιστά την επίλυσή του σχεδόν αδύνατη. Για παράδειγμα, η ανάλυση ενός CNT με διάμετρο 14 nm και μήκος 1 μm αντιστοιχεί σε ένα υπολογιστικό πρόβλημα της τάξης των 107 βαθμών ελευθερίας. Επομένως η ανάλυση ενός νανოსύνθετου υλικού που περιέχει έστω 1% κ.β CNTs είναι μια αρκετά επίπονη υπολογιστικά διαδικασία. Για αυτόν τον λόγο το λεπτομερές μοντέλο SMM του CNT αντικαθίσταται από μία ισοδύναμη δοκό (EBE) από γραμμικό ελαστικό υλικό. Για τον καθορισμό των παραμέτρων ακαμψίας της ισοδύναμης δοκού το λεπτομερές μοντέλο SMM του μονότοιχου νανοσωλήνα που προσομοιώνεται από ένα πλαισιωτό δίκτυο δοκών υποβάλλεται σε τρεις ανεξάρτητες φορτίσεις, εφελκυσμό, κάμψη και στρέψη. Οι συνοριακές συνθήκες καθώς και τα φορτία που επιβάλλονται σε κάθε περίπτωση απεικονίζονται στο Σχήμα (1.11). Ειδικότερα η αξονική ακαμψία της ισοδύναμης δοκού υπολογίζεται από την προσομοίωση του εφελκυσμού του CNT επιβάλλοντας στο ένα άκρο του αξονική μετατόπιση u_x ενώ το άλλο άκρο του είναι πακτωμένο όπως φαίνεται στο Σχήμα (1.11 a). Από την ανάλυση των πεπερασμένων στοιχείων υπολογίζονται οι αντιδράσεις F_x στους πακτωμένους κόμβους του λεπτομερούς μοντέλου SMM το οποίο έχει αρχικό μήκος L_0 . Η ισοδύναμη αξονική ακαμψία της δοκού δίνεται από τον τύπο:

$$(EA)_{eq} = \frac{F_x L_0}{u_x} \quad (1.30)$$

Στην περίπτωση της κάμψης του CNT επιβάλλεται στο ένα άκρο του εγκάρσια μετατόπιση u_y ενώ το άλλο άκρο του είναι πακτωμένο όπως φαίνεται στο Σχήμα (1.11 b). Οι αντιδράσεις F_y στους πακτωμένους κόμβους υπολογίζονται από την ανάλυση των πεπερασμένων στοιχείων. Η ισοδύναμη καμπτική ακαμψία της δοκού υπολογίζεται από τον τύπο:



Σχήμα 1.11: Προσομοίωση CNTs από πλαίσιο δίκτυο δοκών, συνοριακές συνθήκες και φορτία για (a) εφελκυσμό, (b) κάμψη και (c) στρέψη του λεπτομερούς μοντέλου SMM

$$(EI)_{eq} = \frac{F_y}{3u_y} L_0^3 \quad (1.31)$$

Παρομοίως, στην περίπτωση της στρέψης επιβάλλεται στρεπτική ροπή T στο ένα άκρο του CNT ενώ οι κόμβοι του άλλου άκρου του είναι πακτωμένοι όπως φαίνονται στο Σχήμα (1.11 c). Η γωνία στρέψης ϕ υπολογίζεται από την ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων και η ισοδύναμη στρεπτική ακαμψία της δοκού δίνεται από τον τύπο:

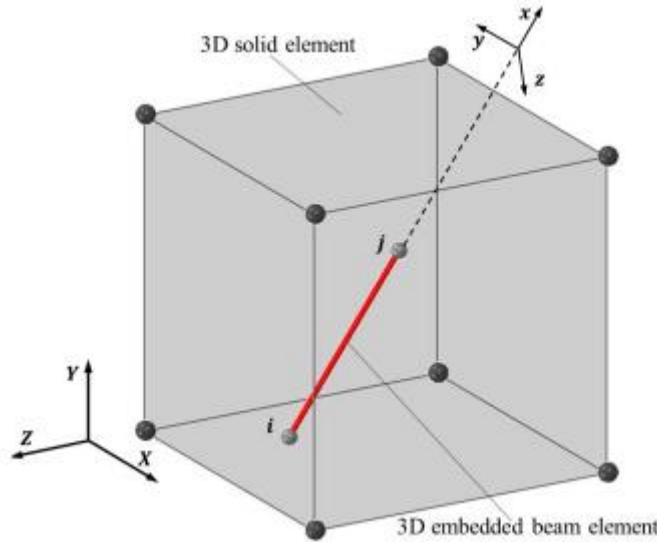
$$(GJ)_{eq} = \frac{T}{\phi} L_0 \quad (1.32)$$

1.5 Η Τεχνική του Ενσωματωμένου Στοιχείου (Embedded Element Technique)

Η τεχνική του ενσωματωμένου στοιχείου χρησιμοποιείται για την αποφυγή δημιουργίας περίπλοκου πλέγματος κατά την διακριτοποίηση του αντιπροσωπευτικού στοιχείου όγκου (RVE) του νανოსύνθετου υλικού. Με τον τρόπο αυτό αποφεύγεται η ανάγκη διακριτοποίησης της μήτρας και των CNTs με στοιχεία που έχουν κοινούς κόμβους. Το RVE αποτελείται από δύο ανεξάρτητα πλέγματα: ένα για την μήτρα της οποίας η διακριτοποίησή γίνεται με οκτακομβικά στοιχεία συνεχούς μέσου και ένα για τους νανωσωλήνες των οποίων η διακριτοποίηση γίνεται με χρήση στοιχείων τρισδιάστατων δοκών σε εν σειρά σύνδεση. Η μεταφορά των φορτίων από την μήτρα στα ενισχυτικά γίνεται μέσω κινηματικών περιορισμών που επιβάλλονται στους κόμβους των ενσωματωμένων στοιχείων. Ως ενσωματωμένα θεωρούνται τα στοιχεία των ισοδύναμων δοκών των CNTs. Το μητρώο ακαμψίας της ισοδύναμης δοκού στο γενικό σύστημα αξόνων δίνεται από την εξίσωση:

$$K^B = T^T k^b T = T^T [\int B^T D B dV_e] T \quad (1.33)$$

όπου, T είναι το μητρώο μετασχηματισμού από το τοπικό στο γενικό σύστημα αξόνων, k^b είναι το τοπικό μητρώο ακαμψίας της δοκού, D είναι το καταστατικό μητρώο του υλικού και B το μητρώο των παραγώγων των συναρτήσεων σχήματος της δοκού που συνδέει τις παραμορφώσεις με τις μετακινήσεις και τις στροφές των κόμβων της. Όταν η δοκός θεωρείται ενσωματωμένη μέσα στο οκτακομβικό στοιχείο συνεχούς μέσου της μήτρας (γονικό στοιχείο, Σχήμα 1.12), οι μεταφορικοί της βαθμοί ελευθερίας μπορούν να



Σχήμα 1.12: Γραφική αναπαράσταση του ενσωματωμένου στοιχείου της δοκού μέσα στο γονικό στοιχείο συνεχούς μέσου

συσχετιστούν με τις κομβικές μετατοπίσεις του γονικού στοιχείου της μήτρας σύμφωνα με τον κινηματικό περιορισμό:

$$\begin{bmatrix} u_i \\ u_j \\ v_i \\ v_j \\ w_i \\ w_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N^M & 0 & 0 \\ 0 & N^M & 0 \\ 0 & 0 & N^M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U^M \\ V^M \\ W^M \end{bmatrix} \quad (1.34)$$

όπου τα,

$$N^M = \begin{bmatrix} N_{1(i)} & \dots & N_{8(i)} \\ N_{1(j)} & \dots & N_{8(j)} \end{bmatrix}$$

είναι οι τιμές των συναρτήσεων σχήματος του στοιχείου συνεχούς μέσου της μήτρας, διατιμημένες στα σημεία i και j εντός του γονικού στοιχείου. Τα σημεία αυτά ταυτίζονται με την θέση των κόμβων της ενσωματωμένης δοκού (Σχήμα 1.12).

$$U^M = [U_1 \dots U_8]^T, V^M = [V_1 \dots V_8]^T, W^M = [W_1 \dots W_8]^T \quad (1.35)$$

είναι οι κομβικές μετατοπίσεις του στοιχείου της μήτρας. Τροποποιώντας το μητρώο παραμόρφωσης B της εξίσωσης (1.33) για να ληφθούν υπόψιν οι κινηματικοί περιορισμοί της εξίσωσης (1.34), καταλήγουμε στο εκτεταμένο μητρώο ακαμψίας της ενσωματωμένης δοκού \bar{K}^B που έχει διαστάσεις (30x30). Το μητρώο αυτό συνδέει τους 24 μεταφορικούς βαθμούς ελευθερίας $[U^M, V^M, W^M]$ του γονικού στοιχείου της μήτρας και τους 6 περιστροφικούς βαθμούς ελευθερίας $[\theta_{xi}, \theta_{yi}, \theta_{zi}, \theta_{xj}, \theta_{yj}, \theta_{zj}]$ της ενσωματωμένης δοκού, με τις εξωτερικές κομβικές δυνάμεις και ροπές αντίστοιχα που ασκούνται στο σύνθετο στοιχείο. Το τελικό συναθροισμένο μητρώο ακαμψίας που προκύπτει από το

γονικό στοιχείο συνεχούς μέσου της μήτρας και της ενσωματωμένης δοκού περιγράφεται ως εξής:

$$K_{(30 \times 30)} = \begin{bmatrix} K^M + \bar{K}_{TT}^B & \bar{K}_{TR}^B \\ \bar{K}_{RT}^B & \bar{K}_{RR}^B \end{bmatrix} \quad (1.36)$$

όπου, K^M είναι το μητρώο ακαμψίας του συνεχούς στοιχείου, το \bar{K}_{TT}^B αντιπροσωπεύει το μέρος του εκτεταμένου μητρώου της δοκού που σχετίζεται με τους μεταφορικούς βαθμούς ελευθερίας, το \bar{K}_{RR}^B αντίστοιχα σχετίζεται με τους περιστροφικούς βαθμούς ελευθερίας της δοκού ενώ τα \bar{K}_{TR}^B , \bar{K}_{RT}^B περιέχουν τους όρους εκείνους που συνδέουν μεταφορικούς και περιστροφικούς βαθμούς ελευθερίας.

1.6 Στοιχεία Αριθμητικής Επίλυσης Μη Γραμμικών Εξισώσεων

Η αριθμητική επίλυση των εξισώσεων που προκύπτουν σε προβλήματα μηχανικής είναι μεγάλης σπουδαιότητας. Ο σκοπός της επίλυσης είναι η μετάφραση της συμπεριφορά ενός υλικού υπολογιστικά και ,κατ' ακολουθία, η εξαγωγή συμπεράσματος για όλη την κατασκευή. Με το όρο συμπεριφορά υλικού μπορεί να εννοείται ένας μεγάλος όγκος πληροφοριών αλλά συνήθως σημαίνει κάποια καμπύλη υλικού όπως η καμπύλη τάσης παραμόρφωσης. Υπάρχουν δεκάδες μέθοδοι αριθμητικής επίλυσης, από τις οποίες άλλες διαφέρουν για την απλότητα ή την περιπλοκότητα τους και άλλες για τη ακρίβεια τους ανά ομάδα προβλημάτων. Σε αυτή την παράγραφο, θα αναφερθούν τρεις πολύ σημαντικές μέθοδοι. Παρόλο της χρησιμότητάς τους, δε θα εφαρμοστούν σε αυτήν την εργασία καθώς το μοντέλο θραύσης (damage model) του υλικού δε το απαιτεί (βλέπε κεφάλαιο 2).

1.6.1 Μέθοδος Newton-Raphson

Η μέθοδος Newton-Raphson (Σχήμα 1.13), όπως και οι υπόλοιπες που θα αναπτυχθούν, δεν αποτελεί εργαλείο της υπολογιστικής μηχανικής αποκλειστικά, αλλά έχει γενική εφαρμογή. Κατά συνέπεια, η μέθοδος θα παρουσιαστεί με τη αυστηρώς μαθηματική της διατύπωση. Ο αναγνώστης μπορεί να αντιλαμβάνεται ως τάση σ και παραμόρφωση ϵ τις εκφράσεις των συναρτήσεων $f(x)$ και των μεταβλητών x , αντίστοιχα. Τέλος μπορεί να αντιλαμβάνεται ως μέτρο ελαστικότητας E την παράγωγο του $f(x)$.

Έστω το ανάπτυγμα της σειράς Taylor της συνάρτησης $f(x)$ στη τιμή $x = x_0$:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \dots \quad (1.37)$$

Χρησιμοποιώντας μόνο τους δύο πρώτους όρους του ανάπτυγματος, μια πρώτη εκτίμηση της ρίζας της εξίσωσης $f(x) = 0$ προκύπτει από τη λύση:

$$f(x) = 0 \approx f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0) \quad (1.38)$$

Η προσεγγιστική αυτή λύση είναι:

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad (1.39)$$

Η μέθοδος Newton Raphson συνίσταται στο να βελτιώνονται οι προσεγγιστικές λύσεις μέσω της επανάληψης της παραπάνω εξίσωσης. Για παράδειγμα η δεύτερη και τρίτη προσέγγιση αυτής της ρίζας είναι:

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} \quad (1.40)$$

και

$$x_3 = x_2 - \frac{f(x_2)}{f'(x_2)} \quad (1.41)$$

αντίστοιχα. Η επαναληπτική διαδικασία μπορεί να γενικευθεί στην παρακάτω εξίσωση, όπου το i αναπαριστά το αριθμό επανάληψης (iteration number):

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (1.42)$$

Έπειτα από κάθε επανάληψη θα πρέπει να ελέγχεται αν έχει επιτευχθεί σύγκλιση στο επιθυμητό σφάλμα ε μέσω της ανίσωσης:

$$|f(x_{i+1})| < \varepsilon \quad (1.43)$$

1.6.2 Μέθοδος Newton-Raphson (Modified)

Σε αντίθεση με τα προαναφερθείσα μέθοδο, η τροποποιημένη μέθοδος Newton-Raphson (Σχήμα 1.14) αντικαθιστά τη παράγωγο του $f(x_i)$ με το:

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{(x_i - x_{i-1})} \quad (1.44)$$

Με την αντικατάσταση, ο αλγόριθμος Newton-Raphson γίνεται:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f(x_i) - f(x_{i-1})} \cdot (x_i - x_{i-1}) \quad (1.45)$$

Για την εκκίνηση της μεθόδου χρειάζονται δύο τιμές του x , έστω x_0 και x_1 . Άρα η πρώτη προσέγγιση της λύσης είναι:

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f(x_1) - f(x_0)} \cdot (x_1 - x_0) \quad (1.46)$$

Πάλι, έπειτα από κάθε επανάληψη θα πρέπει να ελέγχεται αν έχει επιτευχθεί σύγκλιση στο επιθυμητό σφάλμα ε μέσω της ανίσωσης:

$$|f(x_{i+1})| < \varepsilon \quad (1.47)$$

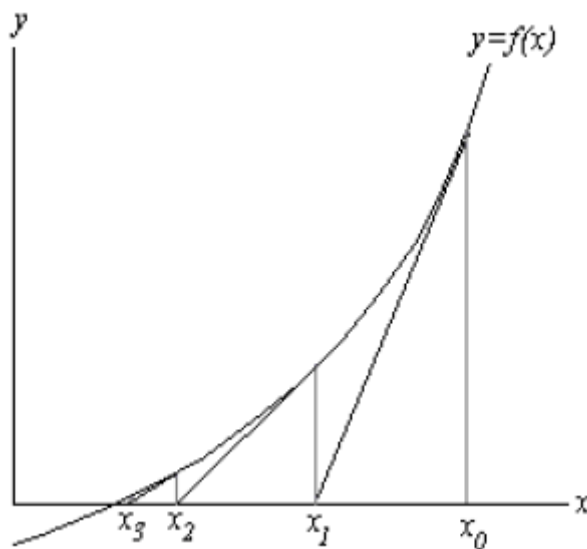
1.6.3 Μέθοδος Euler

Προκειμένου να χρησιμοποιηθεί η μέθοδο του Euler για να παραχθεί η αριθμητική επίλυση σε ένα πρόβλημα με αρχική τιμή της μορφής:

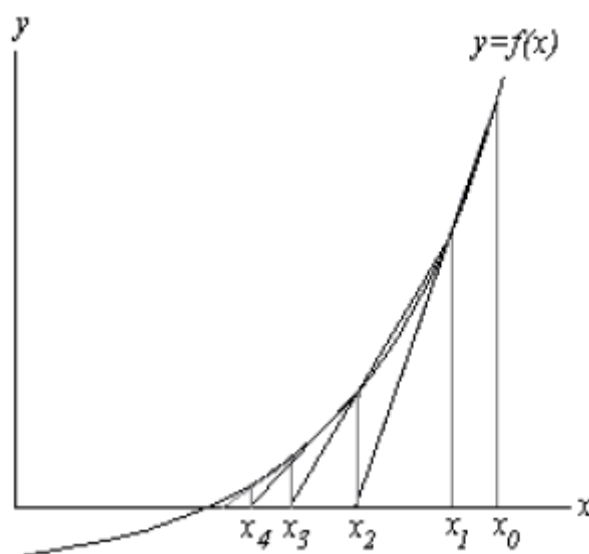
$$y' = f(x, y) \quad (1.48)$$

και

$$y(x_0) = y_0 \quad (1.49)$$



Σχήμα 1.13: Σχηματική απεικόνιση μεθόδου Newton-Raphson



Σχήμα 1.14: Σχηματική απεικόνιση τροποποιημένης μεθόδου Newton-Raphson

πρέπει να επιλεχθεί το διάστημα και η αρχική τιμή, στα οποία επιθυμούμε την επίλυση. Στη συνέχεια, διακριτοποιείται το διάστημα σε υπομήματα μήκους h . Έπειτα, χρησιμοποιώντας τις αρχικές συνθήκες ως τιμές εκκίνησης, παράγονται οι επόμενες λύσεις μέσω του αλγόριθμου:

$$x_{n+1} = x_n + h \quad (1.50)$$

και

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \quad (1.51)$$

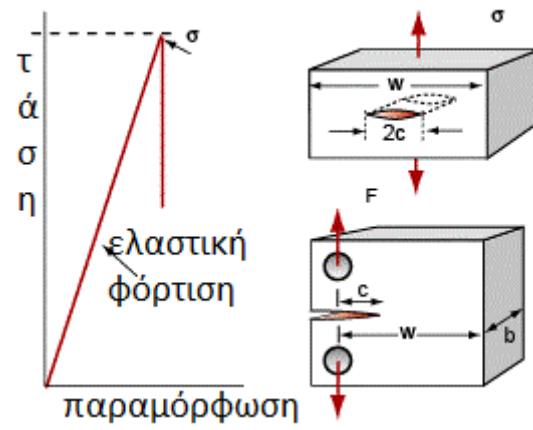
ώστε να ευρεθούν οι συντεταγμένες των σημείων της αριθμητικής επίλυσης. Τερματίζεται η διαδικασία όταν έχει ευρεθεί το δεξί άκρο του επιθυμητού διαστήματος.

1.7 Ανθεκτικότητα Θραύσης (Fracture Toughness)

Στην επιστήμη των υλικών, η ανθεκτικότητα θραύσης (fracture toughness) ορίζεται ως η ιδιότητα που περιγράφει την ικανότητα ενός υλικού με ρωγμή να αντισταθεί σε θραύση, και αποτελεί μία από τις πιο σημαντικές παραμέτρους για πολλές εφαρμογές σχεδιασμού. Ουσιαστικά, είναι ένας ποσοτικός τρόπος έκφρασης της αντοχής ενός υλικού σε πλήρη θραύση υπό την παρουσία ρωγμής. Εάν ένα υλικό έχει υψηλή τιμή ανθεκτικότητα θραύσης τότε θα υποστεί πιθανώς όλκιμη αστοχία (ductile fracture). Αντίθετα, η ψαθυρή θραύση (brittle fracture) είναι χαρακτηριστικό των υλικών με χαμηλή τιμή της παραμέτρου αυτής. Κατά το 1900 άρχισε να χρησιμοποιείται το μικροσκόπιο για τη μελέτη των μικρορωγμών και του μηχανισμού της θραύσης δίνοντας νέα ώθηση στην μελέτη του φαινομένου. Το 1919, ο Άγγλος αεροναυπηγός A.A.Griffith δημοσίευσε τα θεωρητικά και πειραματικά του αποτελέσματα γύρω από την αστοχία ψαθυρών υλικών. Ο Griffith θεώρησε ότι υπάρχει ένα ενεργειακό ισοζύγιο μεταξύ δυναμικής ενέργειας από τη φόρτιση και επιφανειακής ενέργειας από τη ρωγμή. Η εργασία του Griffith αγνοήθηκε για πάνω από 20 χρόνια, μέχρι τον Β' Παγκόσμιο Πόλεμο, οπότε η ομάδα εργασίας του G.R.Irwin την χρησιμοποίησε και την επέκτεινε. Χάρης στη πρωτοπόρο και κλασική πλέον δουλειά του ο Griffith θεωρείται σήμερα ο πατέρας της Θραυστομηχανικής. Η ενεργειακή προσέγγιση του Griffith ήταν η βάση για την ανάπτυξη της Γραμμικής Ελαστικής Θραυστομηχανικής (LEFM). Η θεώρηση αυτή είναι ακριβής μόνο όταν άλλα φαινόμενα όπως η πλαστική παραμόρφωση, απουσιάζουν. Σήμερα ο κλάδος αναπτύσσεται προς μια πιο ρεαλιστική θεώρηση που περιλαμβάνει τη πλαστική παραμόρφωση και ονομάζεται Πλαστική Ελαστική Θραυστομηχανική (PEFM). Η θραυστομηχανική (fracture mechanics), η οποία οδηγεί στην έννοια της ανθεκτικότητα θραύσης, που κατά πολύ βασίζεται στις εργασίες του A A Griffith [23], εξηγεί τη συμπεριφορά των ρωγμών σε εύθραυστα υλικά. Η ανθεκτικότητα θραύσης που σαν ποσότητα συμβολίζεται με K_{Ic} και έχει ως μονάδες το $\frac{MN}{\sqrt{m}}$, μπορεί να προσδιορισθεί φορτίζοντας εφελκυστικά ένα δείγμα υλικού με ρωγμή μήκους $2c$ εξωτερική, ή αντίστοιχα ρωγμή μήκους c εσωτερική (Σχήμα 1.15). Τότε, θεωρώντας ως σ την τάση θραύσης του υλικού, και E το μέτρο ελαστικότητας του προκύπτει:

$$K_{Ic} = Y \cdot \sigma \cdot \sqrt{\pi c} \quad (1.52)$$

όπου, $Y = 1$ στην περίπτωση εσωτερικής ρωγμής και $Y = 2/\pi$ στην περίπτωση εξωτερικής ρωγμής. Μετρώντας με αυτό τον δρόμο την εν λόγω παράμετρο έχουμε πολύ ικανοποιητικά αποτελέσματα σε υλικά κεραμικά, στο γυαλί και σε θραυστά πολυμερή. Σε όλκιμα υλικά αναπτύσσεται πλαστική ζώνη στο άκρο της ρωγμής. Εάν αυτή είναι μικρή συγκριτικά με τις διαστάσεις του δοκιμίου τότε οι μετρούμενες παράμετροι παραμένουν αξιόπιστες. Εάν όχι, χρειάζονται πολυπλοκότερες μέθοδοι. Τέλος, εάν η πλαστική ζώνη ξεπερνά το πάχος του υλικού τότε η ρωγμή δεν μεταδίδεται καθόλου και το δείγμα πλαστικοποιείται προτού θραυστεί.



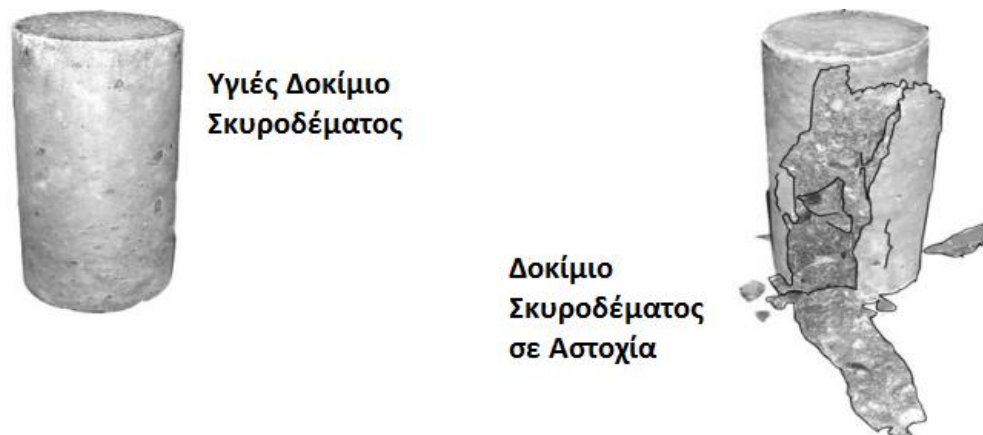
Σχήμα 1.15: Απεικόνιση δοκιμής προσδιορισμού ανθεκτικότητας θραύσης

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2^ο
ΣΚΥΡΟΔΕΜΑ
ΕΝΙΣΧΥΜΕΝΟ ΜΕ
ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ
ΑΝΘΡΑΚΑ

2.1 Σκυρόδεμα

Το σκυρόδεμα (concrete) είναι ένα από τα πιο διαδεδομένα και πολυσύχναστα κατασκευαστικά υλικά στον κόσμο, χάρη στην καλή αντοχή και ανθεκτικότητα του σε σύγκριση με το χαμηλό κόστος του (Σχήμα 2.1). Έχει ένα ιδιαίτερο πλούσιο αρχείο εφαρμογών στα έργα Πολιτικού μηχανικού, όπως για παράδειγμα τη σπουδαιότερη γέφυρα στην Ελλάδα (Σχήμα 2.2). Σε κτιριακά έργα, το σκυρόδεμα χρησιμοποιείται στα θεμέλια, τις κολόνες, τα δοκάρια, τις πλάκες, τους τοίχους αντιστήριξης κ.α. Το υλικό σκυρόδεμα έχει πολύ μεγάλη ετερογένεια στην μικροδομή του και η συνολική συμπεριφορά του είναι αρκετά περίπλοκη. Αυτό, είχε σαν αποτέλεσμα να πραγματοποιηθούν αμέτρητα πειράματα προκειμένου να προβλεφθεί η μηχανική συμπεριφορά του. Για βαθύτερη κατανόηση, αναπτύχθηκαν θεωρητικές μελέτες βασιζόμενες στην μικροδομή του και τη αλληλεπίδραση αυτών, για την πρόβλεψη του καταστατικού νόμου της μακροδομής του. Παρόλο αυτά, η επακριβής επίδραση κάθε συστατικού ξεχωριστά στην συμπεριφορά της μακροδομής δεν έχει μελετηθεί κατάλληλα. Εάν επιθυμείται τέτοια λεπτομέρεια, το σκυρόδεμα πρέπει να αναλύεται ως ένα σύνθετο υλικό πολλών κλιμάκων όπου η μικροδομή του προσομοιώνεται ρεαλιστικά. Αριθμητικές αναλύσεις σε συνδυασμό με τη θεωρία και τα πειράματα της βιβλιογραφίας θα αποτελέσουν το κύριο εργαλείο της εργασίας αυτής, όπως θα υποδεικνύει η υπολογιστική μηχανική υλικών. Στην αριθμητική προσομοίωση του σκυροδέματος σε μεσαία κλίμακα (mesoscopic level) είναι γεγονός ότι διάφορες παράμετροι όπως το σχήμα, το μέγεθος και η κατανομή των αδρανών μέσα στο μητρικό υλικό (τσιμεντοπολτός) επηρεάζουν σημαντικά την μηχανική συμπεριφορά του σκυροδέματος. Στο σημείο αυτό, τονίζεται ότι ο τσιμεντοπολτός, που ουσιαστικά αποτελεί το τσιμέντο με το νερό, θα αποκαλείται τσιμεντόπαστα (cement – paste). Ο σκοπός αυτού του κεφαλαίου είναι παράξει τυχαίες δομές μοντέλων σκυροδέματος βασιζόμενες σε παραμέτρους και πιθανοτικές κατανομές των συντεταγμένων και των μεγεθών των αδρανών. Στη συνέχεια, το παραγόμενο μοντέλο θα διακριτοποιείται με αυτόματο τρόπο για να προσομοιωθεί υπολογιστικά με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων (FEM), έτσι ώστε να αναλυθούν οι επιδράσεις κάθε συστατικού του σε κάθε κλίμακα.

Στην υπολογιστική μηχανική υλικών, το σκυρόδεμα χαρακτηρίζεται ως ένα πολυφασικό υλικό με διάφορες αντιπροσωπευτικές κλίμακες. Σε μακροσκοπικό επίπεδο, το σκυρόδεμα μπορεί χαρακτηριστεί ως ένα ετερογενές συμπαγές υλικό ενώ στις υπόλοιπες κλίμακες μπορεί να θεωρηθεί ότι αποτελείται από ξεχωριστά υλικά (αδρανή και τσιμεντόπαστα). Με περισσότερη λεπτομέρεια μπορεί να αναλυθεί και η τσιμεντόπαστα με τους πόρους και τα πολύ λεπτά και μικρά αδρανή της, που όμως δε θα μας απασχολήσει σε αυτήν την εργασία. Σκοπός όλων αυτών των αναλύσεων είναι να επιτευχθεί ένα τελικό μοντέλο υλικού που θα μπορούσε να χαρακτηριστεί ως ομογενές. Σε αυτό το ομογενές πλέον σκυρόδεμα θα εισαχθεί το μοντέλο των νανοσωλήνων άνθρακα. Κατά συνέπεια, θα είναι εφικτό να μελετηθεί η επίδραση μόνο των νανοσωλήνων άνθρακα στην συνολική μηχανική συμπεριφορά του σκυροδέματος. Για την επίτευξη της σύγκρισης θα προσομοιωθούν δοκιμές εφελκυσμού και θλίψης κυβικού δοκιμίου με πλευρά 15 cm (βλέπε συνέχεια κεφαλαίου). Επειδή όμως, όπως ειπώθηκε, δεν είναι εφικτή η



Σχήμα 2.1: Δοκίμια Υλικού Σκυροδέματος



Σχήμα 2.2: Γέφυρα Ρίου - Αντιρίου, Ελλάδα. Κατασκευασμένη από σκυρόδεμα ως επί των πλείστων.

προσομοίωση σε μία κλίμακα λόγω του μεγάλου αριθμού βαθμών ελευθερίας, θα πραγματοποιηθεί σταδιακή ανάλυση σε κλίμακες. Σημαντική παρατήρηση θα ήταν να αναφερθεί ότι στο σκυρόδεμα λαμβάνουν χώρα και άλλα φαινόμενα που επηρεάζουν την μηχανική συμπεριφορά του. Συγκεκριμένα, γύρω από τα αδρανή υπάρχει η ζώνη που ονομάζεται ζώνη διεπαφειακής μεταφοράς (interfacial transition zone) που παίζει μείζονα λόγο στη αλληλεπίδραση αδρανών και τσιμεντόπαστας [24]. Παρόλο αυτά, η ζώνη αυτή δε θα μας απασχολήσει ιδιαίτερα καθώς έχει ήδη ληφθεί υπόψιν στο damage μοντέλο του κεφαλαίου 3. Τέλος, όσον αφορά στους νανοσωλήνες άνθρακα (CNTs), δεν υπάρχει σαφής δεσμός τους με την υπόλοιπη μήτρα του υλικού. Η μελέτη της αλληλεπίδρασης τους με το υπόλοιπο υλικό αναπτύσσεται σε ολόκληρη μαθηματική

θεωρία που καλείται ολίσθηση δεσμών (bond slip), αλλά ούτε αυτή δε θα μας απασχολήσει καθώς θεωρείται ότι δεν υπάρχουν μεγάλες μετακινήσεις στους νανοσωλήνες [15,16,17,18,25]. Η νέα τάση των ερευνητών, εν κατακλείδι, είναι να μπορέσουν με χημικό τρόπο να αποφύγουν το φαινόμενο bond slip των CNTs.

Το σκυρόδεμα συναντάται σε πολλές μορφές αντοχής, ανθεκτικότητας ή άλλων ιδιοτήτων όπως ερπυσμού, χρώματος, βάρους, θερμοκρασίας κ.α. Το ίδιο συμβαίνει και για κάθε ένα από τα συστατικά του. Αναμφισβήτητα, η περισσότερη έρευνα επί του σκυροδέματος έχει επικεντρωθεί στη βελτίωση του τσιμέντου και κατά συνέπεια της τσιμεντόπαστας, χωρίς να έχουν μείνει ανεξερεύνητα τα αδρανή ή και η σχέση και αλληλεπίδραση αυτών. Ακόμα, και σε αυτήν τη εργασία, γίνεται μηχανική βελτίωση της τσιμεντόπαστας, και άρα ανήκει στην ίδια κατηγορία ερευνητικής προσπάθειας που όμως διαφέρει στο ότι δεν επιτυγχάνεται η βελτίωση με χημικό τρόπο. Για την διερεύνηση της βελτίωσης της μηχανικής συμπεριφοράς του σκυροδέματος, απαραίτητη προϋπόθεση είναι η γνώση της μηχανικής συμπεριφοράς των συστατικών του. Τα αδρανή έχουν μη γραμμική συμπεριφορά σε διάγραμμα τάσεων - σ - παραμορφώσεων - ϵ -. Αντίθετα, όμως όταν βρίσκονται σε συνεργασία με την τσιμεντόπαστα συμπεριφέρονται απολύτως ελαστικά καθώς οι μεγάλες παραμορφώσεις λαμβάνουν χώρα σε αυτήν και όχι στα αδρανή. Το μέτρο ελαστικότητας E των αδρανών προσδιορίζεται πειραματικά από 38.0 έως 54.0 GPa [26,29] ενώ ο λόγος Poisson ν τους περίπου στην τιμή 0.23 [26,29]. Η τσιμεντόπαστα παρόλο αυτά συμπεριφέρεται εντελώς μη γραμμικά σε διάγραμμα τάσεων παραμορφώσεων και είναι και ο πρωταρχικός λόγος αστοχίας του σκυροδέματος όπως θα φανεί στη συνέχεια του δεύτερου κεφαλαίου. Στην βιβλιογραφία βρίσκουμε, αρχικώς, το μέτρο ελαστικότητας E της τσιμεντόπαστας στην τιμή 20.0 έως 35.0 GPa [26, 27, 29] ενώ ο λόγος Poisson κυμαίνεται στην τιμή 0.20 έως 0.23 [26, 27, 29, 34]. Τα παραπάνω δεδομένα θεωρούνται απαραίτητα για το στήσιμο του μοντέλου του σκυροδέματος. Οι επιθυμητές τιμές μέτρου Ελαστικότητας και λόγω Poisson του σκυροδέματος σύμφωνα με πειραματικές μελέτες της βιβλιογραφίας είναι 17.0 έως 40.0 GPa [30,31] και 0.10 έως 0.20 [31], αντίστοιχα. Φυσικά, το σκυρόδεμα, όπως και η τσιμεντόπαστα, συμπεριφέρεται μη γραμμικά [35] αλλά αυτό θα αναλυθεί στην συνέχεια του κεφαλαίου. Όπως θα παρατηρηθεί στην συνέχεια της εργασίας, δεν επιτεύχθηκε η σύγκλιση στα πειραματικά δεδομένα όσον αφορά μόνο στον λόγο Poisson αλλά αυτό δε επηρεάζει ούτε τη μεθοδολογία ούτε τα τελικά αποτελέσματα. Παρόμοιο πρόβλημα έχει εμφανιστεί και σε δημοσιευμένα άρθρα [24]. Για τη μελέτη των φαινομένων της μικροδομής του σκυροδέματος χρειάστηκαν και άλλοι παράμετροι των συστατικών του όπως η πυκνότητα των αδρανών και της τσιμεντόπαστας, καθώς και ο λόγος όγκου (volume fraction) των πρώτων. Η πυκνότητα των μεγάλων αδρανών, όπως τα χαλίκια, προσδιορίζεται πειραματικά στην τιμή $2822 \frac{kg}{m^3}$ [28] ενώ για τα λεπτά αδρανή, όπως η άμμος, προσδιορίζεται πειραματικά στην τιμή $2987 \frac{kg}{m^3}$ [28]. Οι εν λόγω τιμές αναφέρονται σε φυσικά υλικά αδρανών και όχι σε τεχνητά ή ανακυκλωμένα αδρανή. Η τσιμεντόπαστα, με την σειρά της, προσδιορίζεται πειραματικά ως προς την πυκνότητα της στην τιμή 1300 έως $1800 \frac{kg}{m^3}$ [24]. Όσον αφορά εν τέλει στα αδρανή, ο λόγος όγκος τους κυμαίνεται από 0.10

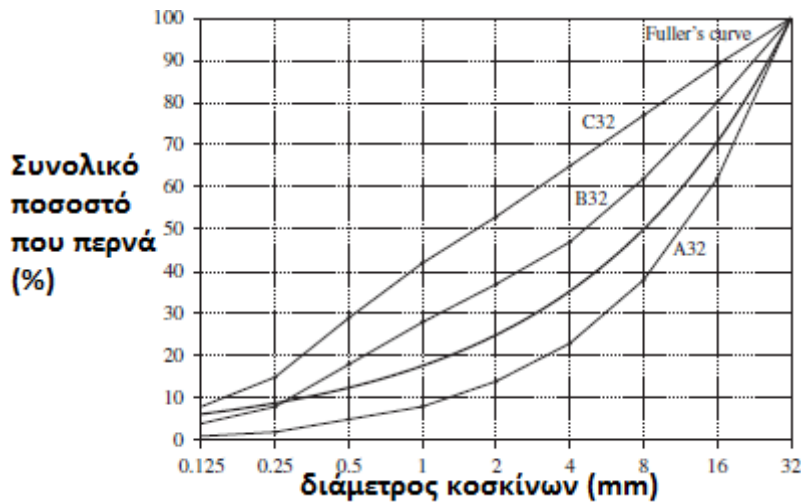
εως 0.80 κ.ο. [32], αλλά για να θεωρηθεί ικανοποιητικής αντοχής αλλά και οικονομικό το σκυρόδεμα, αυτός ο λόγος πρέπει να βρίσκεται εντός του διαστήματος 0.60 έως 0.80 κ.ο. Στην εργασία επιλέχθηκε η τιμή 0.60 που συνδυάζει ικανοποιητική αντοχή αλλά και ρεαλιστικές δυνατότητες επίλυσης των πολλών βαθμών ελευθερίας. Τέλος από τις εργασίες του Δ.Ν. Σάββα [15,16,17,18] εξάγονται οι παράμετροι για τους νανοσωληνές άνθρακα. Συγκεκριμένα μπορεί να ληφθεί ως μήκος $L = 234 \text{ nm}$ και ως διάμετρο των ΕΒΕ από νανοσωληνές άνθρακα $D = 19 \text{ nm}$. Αυτές οι τιμές είναι ενδεικτικές και θα μπορούσαν να διαφέρουν σημαντικά σε επιλύσεις άλλων συναδέλφων ερευνητών, στην εργασία όμως χρησιμοποιήθηκαν οι παραπάνω. Η πυκνότητα τους προσδιορίζεται περί τα $1800 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ ενώ το μέτρο ελαστικότητας E και το μέτρο διάτμηση G προσδιορίζονται 53.0 GPa και 25.0 GPa , αντίστοιχα. Σημαντική παρατήρηση είναι ότι αυτές οι παράμετροι αντιστοιχούν στο ΕΒΕ, δηλαδή στην ισοδύναμο δοκό, και όχι βεβαίως στα ίδια τα CNTs που όπως προειπώθηκε το μέτρο ελαστικότητας τους, για παράδειγμα, ξεπερνά το 1 TPa . Όσον αφορά, στο πλήθος τους αυτό θα κυμαίνεται από 0.10% έως 2.00% κατά βάρος. Δεν θα ήταν εφικτό μεγαλύτερο ποσοστό τους καθώς από ένα σημείο και πέρα σχηματίζουν συγκεντρωμένες ομάδων νανοσωληνών που εν τέλει επηρεάζουν αρνητικά την μηχανική συμπεριφορά του νανოსύνθετου υλικού. Για αριθμητική όμως επεξεργασία, έγινε προσομοίωση και με δοκίμιο με 10% κ.β. CNT.

2.2 Αλγόριθμος Κατασκευής Δοκιμίου Σκυροδέματος

Η διερεύνηση της σύνθετης συμπεριφοράς του σκυροδέματος απαιτεί την κατασκευή μια δομής υλικού σκυροδέματος με τυχαία κατανομή αδρανών. Τα αδρανή, εν γένει, καταλαμβάνουν το 60 με 80% του σκυροδέματος και επηρεάζουν σημαντικά τις ιδιότητες, την σύσταση και την οικονομία του. Η άμμος, τα χαλίκια και οι θραυτές πέτρες είναι τα κύρια αδρανή. Ο διαχωρισμός για την άμμο και τα χαλίκια συνήθως γίνεται για διαμέτρους 4.75 mm εκατέρωθεν. Το σχήμα των αδρανών εξαρτάται κυρίως από τον τύπο τους. Τα χαλίκια, εν γένει, έχουν στρογγυλεμένο σχήμα ενώ οι θραυτές πέτρες είναι πιο γωνιώδεις. Σε αυτήν την εργασία, χάριν απλότητας θα θεωρηθεί ότι όλα τα αδρανή έχουν σφαιρική μορφή, χωρίς βλάβη της γενικότητας. Οι καμπύλες που αναφέρονται στην κατανομή των αδρανών στο σκυρόδεμα, συνήθως εκφράζουν αυτήν ως αθροιστικό ποσοστό αδρανών που διαπερνά συγκριμένης διαμέτρου κόσκινο (Σχήμα 2.3). Αυτό μπορεί να παρουσιάζεται ως μοντέλο, αλγόριθμος, πίνακας, διάγραμμα κ.α. Μία από τις πιο φημισμένες καμπύλες είναι η κατανομή αδρανών σε διάγραμμα από τον Fuller (Σχήμα 2.3), του οποίου η καμπύλη έγκειται εντός των επιτρεπόμενων ορίων A32, B32 του γερμανικού κανονισμού DIN 1045 όπως φαίνεται στο ίδιο σχήμα. Στην πράξη το σκυρόδεμα συνήθως σχεδιάζεται με βάση την καμπύλη Fuller, η οποία οδηγεί σε βέλτιστη κατανομή πυκνότητας και αντοχής σκυροδέματος. Η εν λόγω καμπύλη μπορεί να περιγραφεί από την πολύ απλή εξίσωση:

$$P(d) = 100 \left(\frac{d}{d_{max}} \right)^n \quad (2.1)$$

όπου $P(d)$ είναι το αθροιστικό ποσοστό που διαπερνά το κόσκινα διαμέτρου d , d_{max} η μέγιστη διάμετρος των αδρανών και n είναι ο εκθέτης εξίσωσης ($n = 0.45 - 0.70$). Σε μία σύνθεση σκυροδέματος, συνήθως, η ποσότητα αδρανών δίνεται ως βάρος ανά μονάδα



Σχήμα 2.3: Καμπύλη Fuller και όρια κανονισμών

όγκου. Συνεπώς, ο ογκομετρικό λόγος των αδρανών που περιέχονται λαμβάνεται διαιρώντας το βάρος των αδρανών με τον όγκο του δοκιμίου σκυροδέματος επί την πυκνότητα των αδρανών. Μαθηματικά διατυπώνεται ως:

$$u_p = \frac{w_p}{\rho_p V} \quad (2.2)$$

όπου, u_p ο λόγος όγκων (volume fraction) των αδρανών, w_p το συνολικό βάρος των αδρανών, ρ_p το ειδικό βάρος τους και V ο συνολικός όγκος του δοκιμίου. Εάν η κατανομή των αδρανών δίνεται από μία από τις κοινές καμπύλες τότε η ποσότητα των αδρανών σε κάθε διάστημα $[d_s, d_{s+1}]$ υπολογίζεται ως:

$$V_p[d_s, d_{s+1}] = \frac{P(d_s) - P(d_{s+1})}{P(d_{max}) - P(d_{min})} \times u_p \times V \quad (2.3)$$

Όπου $V_p[d_s, d_{s+1}]$ είναι ο όγκος των αδρανών μέσα στο διάστημα $[d_s, d_{s+1}]$.

Αφού διατηρηθεί η καμπύλη σε τμήματα, ξεκινάει η διαδικασία γένεσης των αδρανών από τα μεγαλύτερα στα μικρότερα αδρανή. Τα βήματα για την γένεση των αδρανών, σύμφωνα με τον Wriggers [24] είναι τα εξής:

(α) Υπολογίζεται ο συνολικός όγκος των αδρανών που θα παραχθούν σε κάθε διάστημα κοσκίνου,

(β) Παράγεται ένα τυχαίο νούμερο της διαμέτρου του αδρανούς. Έστω ότι το αδρανές βρίσκεται εντός του κοσκίνου $[d_s, d_{s+1}]$, τότε υπολογίζεται η διάμετρος ως

$$d = d_{s+1} + n(d_s - d_{s+1}) \quad (2.4)$$

όπου, το n είναι ένας τυχαίος αριθμός ομοιόμορφα κατανεμημένος στο διάστημα 0 έως 1.

(γ) Υπολογίζεται ο όγκος του παραπάνω αδρανούς και αφαιρείται από το συνολικό όγκο αδρανών του εν λόγω τμήματος κοσκίνων,

(δ) Επαναλαμβάνονται τα βήματα (β) και (γ) έως ότου ο υπολειπόμενος όγκος αδρανών να είναι μικρότερος από την τιμή:

$$e < \frac{4}{3} \pi \left(\frac{d_{s+1}}{2} \right)^3 \quad (2.5)$$

διότι έτσι δε θα υπάρχει αρκετός χώρος για νέο αδρανές. Ο υπολειπόμενος όγκος αδρανών μεταφέρεται στη συνέχεια στο επόμενο τμήμα κοσκίνων για να παραχθούν νέα αδρανή μικρότερης διαμέτρου.

(ε) Επαναλαμβάνονται όλα τα παραπάνω βήματα για το επόμενο τμήμα μικρότερων κοσκίνων έως ότου και το τελευταίο αδρανές έχει παραχθεί.

Η παραπάνω διαδικασία μπορεί να κατανοηθεί καλύτερα στο διάγραμμα ροής (Σχήμα 2.4) ή και κατευθείαν στον κώδικα MATLAB που δίνεται στην συνέχεια της παραγράφου.

Ο όγκος του σκυροδέματος του οποίου η διαμόρφωση θα παραχθεί, μπορεί να έχει σχήμα κυβικό, κυλινδρικό ή και τυχαίο αφού εξαρτάται από τον τύπο του δοκιμίου σκυροδέματος που πρόκειται να μελετηθεί. Σε αυτήν την εργασία η γένεση διαμορφωμένων δοκιμίων θα περιορισθεί μόνο σε αυτά με κυβικό σχήμα, αφού η μελέτη αυτών αρκεί για να την εξαγωγή ασφαλών συμπερασμάτων. Για την επίτευξη της τοποθέτησης πλέον των αδρανών χρησιμοποιείται σύστημα καρτεσιανών συντεταγμένων x_i, y_i, z_i στο χώρο. Όταν ένα αδρανές έχει τοποθετηθεί, τότε ένα σημείο αναφοράς O (το κέντρο του αδρανούς) χαρακτηρίζει την θέση του. Θεωρώντας μια ομοιόμορφη κατανομή των O στον όγκο του δοκιμίου, τότε η θέση ενός αδρανούς μπορεί να είναι:

$$x = x_{min} + n(x_{max} - x_{min}) \quad (2.6)$$

και

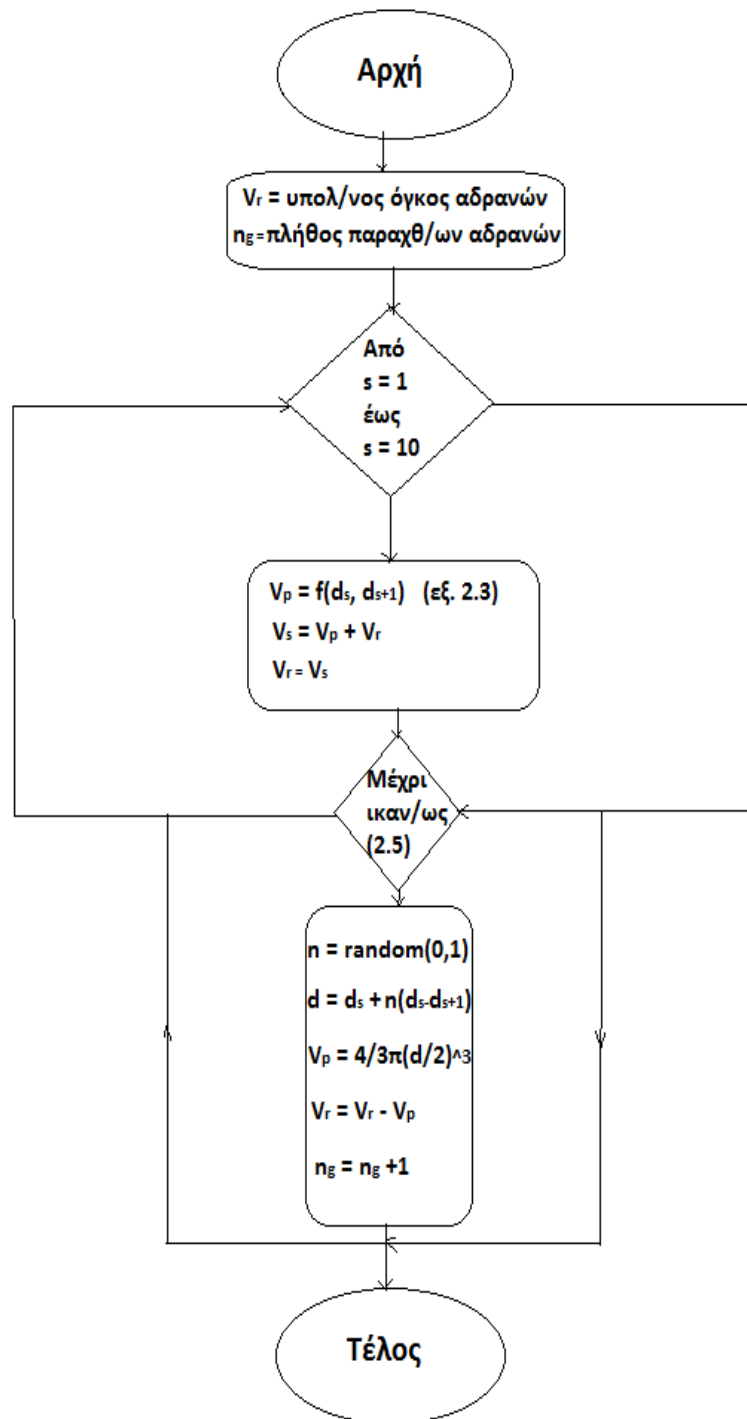
$$y = y_{min} + n(y_{max} - y_{min}) \quad (2.7)$$

και

$$z = z_{min} + n(z_{max} - z_{min}) \quad (2.8)$$

όπου, x, y, z είναι οι θέσεις του διανύσματος O , $x_{min}, y_{min}, z_{min}$ είναι οι ελάχιστες και $x_{max}, y_{max}, z_{max}$ οι μέγιστες συντεταγμένες του δοκιμίου, ενώ το n είναι τρεις ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές με ομοιόμορφη κατανομή στο 0 έως 1. Εν προκειμένω να τοποθετηθούν τα αδρανή στο δοκίμιο, δύο προϋποθέσεις πρέπει να τηρούνται. Πρώτον, όλο το αδρανές πρέπει να βρίσκεται εντός του δοκιμίου. Δεύτερον, δε πρέπει να υπάρχει υπερκάλυψη μεταξύ των αδρανών. Και για τα δύο κριτήρια γίνονται ειδικοί έλεγχοι όπως θα φανεί στο διάγραμμα ροής (Σχήμα 2.5) αλλά και στον κώδικα παρακάτω. Επιπρόσθετα αυτών των δύο ελέγχων, κάθε αδρανές πρέπει να περικλείεται από ένα λεπτό στρώμα μητρικού φιλμ (mortar film) το οποίο έχει κάποιες ελάχιστες διαστάσεις. Αυτό, υπονοεί ότι υπάρχει μια ελάχιστη απόσταση γ μεταξύ του σωματιδίου αδρανούς και ενός άλλου σωματιδίου

αδρανούς. Η κατανομή της τιμής του γ παίζει σημαντικό ρόλο στην γεωμετρική διαμόρφωση του δοκιμίου. Μια μεγάλη τιμή του οδηγεί σε καλύτερη διαμόρφωση του αλλά σε πιο κοστοβόρα διαδικασία τοποθέτηση των αδρανών. Τα αντίθετα συμβαίνουν για (συνέχεια μετά από επτά σελίδες)



Σχήμα 2.4: Διάγραμμα ροής αλγορίθμου γένεσης αδρανών

```

clear;
clc;

%1. Taking Process
dist = [32, 16, 8, 4, 2, 1, 0.5, 0.25, 0.125];
w_p = input('Give total weight(kgr) wp of aggregate particles: '); %0.5
ro_p = 2850/1000000000;
a_side = input('Give cubical side a (mm): '); %150
V = a_side^3;
u_p = w_p / (ro_p * V)
V_r = 0;
n_g = [ 0 , 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0];
n_agg = 0;
for i = 1:4
    V_p = ( P(dist(i)) - P(dist(i+1)) ) / (P(32)+P(0.25)) * u_p * V;
    V_s = V_p + V_r;
    V_r = V_s;
    while(true)
        if V_r < 3/4 * pi * (dist(i+1)/2)^3
            break
        end
        n = rand;
        d = dist(i+1) + n * (dist(i) - dist(i+1));
        V_p = 3/4 * pi * (d/2).^3;
        V_r = V_r - V_p;
        n_g(i) = n_g(i) + 1;
        n_agg = n_agg + 1;
        MATRIX(n_agg,1) = n_agg;
        MATRIX(n_agg,2) = d;
    end
end

```

```
n_g(i);
end
% figure(1)
% pie(n_g)
% close all
n_agg

%2. Placing process
figure(2);
[x,y,z] = sphere(10);
x_min = 0;
y_min = 0;
z_min = 0;
x_max = a_side;
y_max = a_side;
z_max = a_side;
gamma = 0.02;
i = 1;
while(true)
    if i==n_agg + 1
        break
    end
    n_x = rand;
    n_y = rand;
    n_z = rand;
    x_ = x_min + n_x * (x_max - x_min);
    y_ = y_min + n_y * (y_max - y_min);
    z_ = z_min + n_z * (z_max - z_min);
    if x_ + MATRIX(i,2)/2 + gamma*MATRIX(i,2)/2 > x_max
        while (true)
```

```
    if x_ + MATRIX(i,2)/2 + gamma*MATRIX(i,2)/2 < x_max
        break
    end
    n_x = rand;
    x_ = x_min + n_x * (x_max - x_min);
end
end
if y_ + MATRIX(i,2)/2 + gamma*MATRIX(i,2)/2 > y_max
    while (true)
        if y_ + MATRIX(i,2)/2 + gamma*MATRIX(i,2)/2 < y_max
            break
        end
        n_y = rand;
        y_ = y_min + n_y * (y_max - y_min);
    end
end
if z_ + MATRIX(i,2)/2 + gamma*MATRIX(i,2)/2 > z_max
    while (true)
        if z_ + MATRIX(i,2)/2 + gamma*MATRIX(i,2)/2 < z_max
            break
        end
        n_z = rand;
        z_ = z_min + n_z * (z_max - z_min);
    end
end
if x_ - MATRIX(i,2)/2 - gamma*MATRIX(i,2)/2 < x_min
    while (true)
        if x_ - MATRIX(i,2) - gamma*MATRIX(i,2) > x_min
            if x_ + MATRIX(i,2)/2 + gamma*MATRIX(i,2)/2 < x_max
                break
            end
        end
    end
end
```

```
    end
  end
  n_x = rand;
  x_ = x_min + n_x * (x_max - x_min);
  end
end
if y_ - MATRIX(i,2)/2 - gamma*MATRIX(i,2)/2 < y_min
  while (true)
    if y_ - MATRIX(i,2)/2 - gamma*MATRIX(i,2)/2 > y_min
      if y_ + MATRIX(i,2)/2 + gamma*MATRIX(i,2)/2 < y_max
        break
      end
    end
  end
  n_y = rand;
  y_ = y_min + n_y * (y_max - y_min);
  end
end
if z_ - MATRIX(i,2)/2 - gamma*MATRIX(i,2)/2 < z_min
  while (true)
    if z_ - MATRIX(i,2)/2 - gamma*MATRIX(i,2)/2 > z_min
      if z_ + MATRIX(i,2)/2 + gamma*MATRIX(i,2)/2 < z_max
        break
      end
    end
  end
  n_z = rand;
  z_ = z_min + n_z * (z_max - z_min);
  end
end
if i==1
  TREATY = [ 1, 1];
else
```

```

TREATY = ones(i-1,2);
for j = 1:i-1
    s = sqrt((MATRIX(j,3)-x_)^2 + (MATRIX(j,4) - y_)^2 +...
(MATRIX(j,5)-z_)^2);
    if s < (1+gamma)*MATRIX(j,2)/2 + (1+gamma)*MATRIX(i,2)/2
        TREATY(j,2) = 0; % allazoume thesi
    else
        TREATY(j,2) = 1;
    end

end

end
end
if min(TREATY)==1
    MATRIX(i,3) = x_;
    MATRIX(i,4) = y_;
    MATRIX(i,5) = z_;

    if i==1
        mesh(MATRIX(i,2)/2*x+x_, MATRIX(i,2)/2*y+y_,MATRIX(i,2)/2*z+z_);
    else
        hold on
        mesh(MATRIX(i,2)/2*x+x_, MATRIX(i,2)/2*y+y_,MATRIX(i,2)/2*z+z_);
    end

    i = i + 1

else
    i = i;
end

end

end
MATRIX
axis([0 a_side 0 a_side 0 a_side])

```



```

box
ΕΝΩ Η ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ P ΔΙΝΕΤΑΙ ΑΠΟ ΤΟΝ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟ:
function cumulative_percentage = P(d)

n = 0.45;

cumulative_percentage = 100 * ( d / 32 ) ^ n;

end

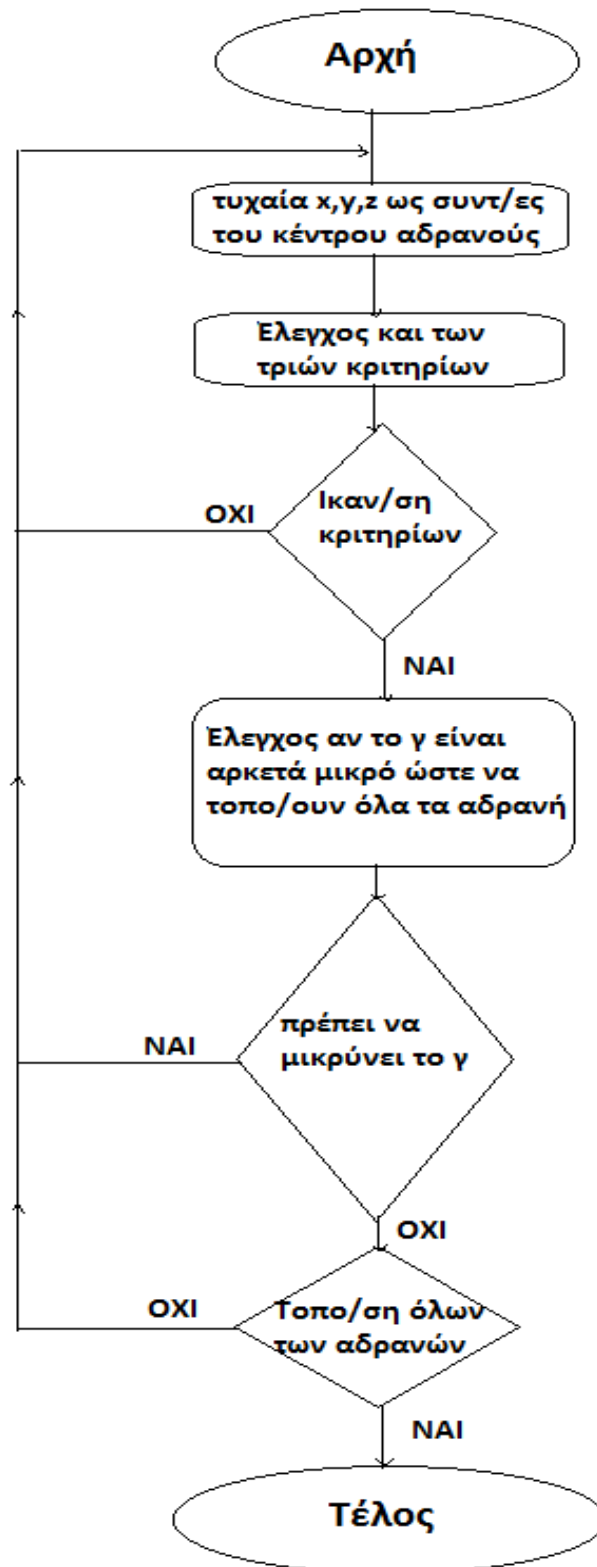
```

Κώδικας του αλγορίθμου σε γλώσσα MATLAB που εμπεριέχει και την γένεση και την τοποθέτηση των αδρανών.

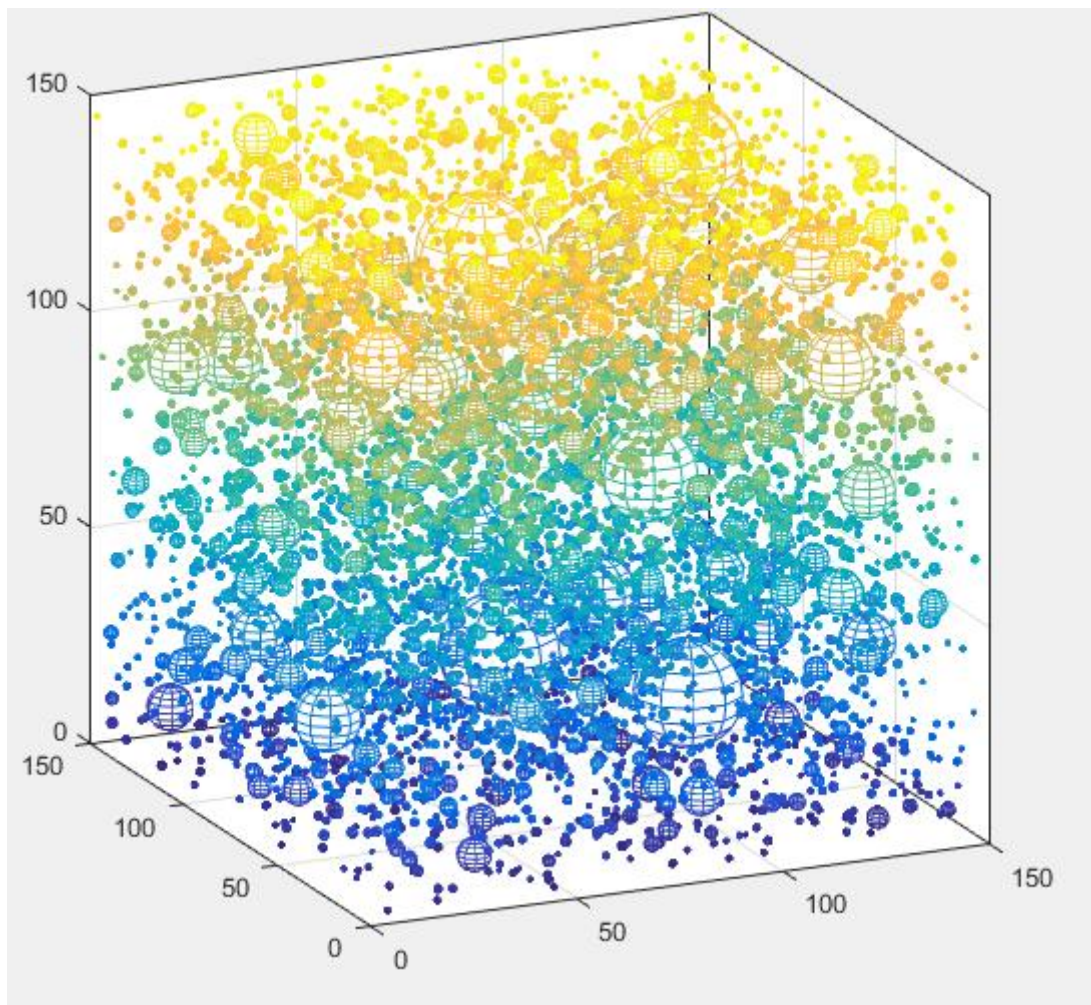
μικρές τιμές του γ . Κατά την εκκίνηση της διαδικασίας τοποθέτησης, μια αρχική τιμή δίνεται στο γ που εξαρτάται από τον λόγο όγκου των αδρανών. Όταν παρατηρηθούν δυσκολίες στην τοποθέτηση, αυτή η τιμή μειώνεται όλο και περισσότερο έτσι ώστε να είναι εφικτό να τοποθετηθούν όλα τα αδρανή στο δοκίμιο. Αυτή η τρίτη προϋπόθεση μπορεί να ελέγχεται ταυτόχρονα με τις προηγούμενες, αφού αρκεί να μεγαλώσουμε την διάμετρο του αδρανούς κατά $(1 + \gamma)$ ώστε να την λάβουμε υπόψιν μας. Το σύνολο της διαδικασίας μπορεί να περιγραφεί ως αλγόριθμος με βάση τα παρακάτω βήματα:

- (α) τυχαίες συντεταγμένες του κέντρου του αδρανούς παράγονται,
- (β) γίνεται έλεγχος για το αν ικανοποιούνται και τα τρία παραπάνω κριτήρια.
- (γ) Εάν ικανοποιούνται και τα τρία κριτήρια τότε το αδρανές τοποθετείται στο δοκίμιο και συνεπώς οι συντεταγμένες του καταγράφονται στο μητρώο αδρανών (βλέπε κώδικα MATLAB). Σε αντίθετη περίπτωση οδηγούμαστε πάλι στο βήμα (α).
- (δ) Εάν ο αλγόριθμος κολλήσει σε ένα αδρανές για μεγάλο αδρανών επαναλήψεων τότε ο αλγόριθμος σταματά και ξεκινά από την αρχή με μικρότερο γ .
- (ε) Επαναλαμβάνονται όλα τα παραπάνω βήματα όσες φορές χρειαστεί έτσι ώστε να τοποθετηθούν όλα τα αδρανή στο δοκίμιο.

Παραπάνω παρουσιάζεται ο κώδικας του αλγορίθμου σε γλώσσα MATLAB που εμπεριέχει και την γένεση και την τοποθέτηση των αδρανών. Στην συνέχεια παρουσιάζεται το διάγραμμα ροής (Σχήμα 2.5) της τοποθέτησης των αδρανών έτσι ώστε να γίνει πιο κατανοητή η διαδικασία στον αναγνώστη. Ακόμα στο Σχήμα (2.6) δίδεται σε εικόνα η τοποθέτηση των αδρανών σε ένα δοκίμιο σκυροδέματος με λόγο όγκου αδρανών 60 %. Σημαντική σημείωση σε αυτό το σημείο είναι ότι υπάρχει μια ολόκληρη μεθοδολογία για το πως αυτό το δοκίμιο θα προσομοιωθεί στο λογισμικό πακέτο Abaqus. Για αυτήν την μεθοδολογία θα γίνει αναφορά στην παράγραφο 2.3 όπου θα χρειαστεί νέος κώδικας σε γλώσσα Python αυτήν την φορά. Η γλώσσα Python είναι μια νέα και πολλά υποσχόμενη γλώσσα προγραμματισμού και αποτελεί δωρεάν λογισμικό (open source). Ο κύριος όμως λόγος που χρησιμοποιήθηκε στην εν λόγω μεθοδολογία είναι διότι το απαιτεί το Abaqus. Δηλαδή, για να μπορέσει κανείς να δώσει χειροκίνητα εντολές στο λογισμικό πακέτο πρέπει να συντάξει έναν κώδικα σε script που να υπακούει πάρα πολλούς και μάλιστα αυστηρά δια



Σχήμα 2.5: Διάγραμμα ροής τοποθέτησης αδρανών



Σχήμα 2.6: Δοκίμιο σκυροδέματος πλευράς 15 εκατοστών, με τοποθετημένα τα αδρανή όπως προκύπτει από το κώδικα MATLAB.

τυπωμένους κανόνες σύνταξης. Αυτά, λοιπόν, τα script συντάσσονται σε γλώσσα python για το λογισμικό πακέτο και μπορεί εύκολα κανείς να αναζητήσει πληροφορίες για την σύνταξη τους σε διάφορα βοηθήματα (manuals, tutorials) που η ίδια εταιρεία του λογισμικού έχει δημοσιοποιήσει.

2.3 Αλγόριθμος Προσομοίωσης του Δοκιμίου Σκυροδέματος από την MATLAB στο Λογισμικό Πακέτο Abaqus

Όπως προειπώθηκε υπάρχει μια ολόκληρη μεθοδολογία για το πως αυτό το δοκίμιο θα προσομοιωθεί στο λογισμικό πακέτο Abaqus. Το πρόβλημα έγκειται σε πολλούς τομείς:

(α) τα αδρανή ενός δοκιμίου ακόμα και της πιο μικρής κλίμακας ξεπερνούν σε πλήθος τα 200 και συνεπώς θα ήταν φοβερά ασύμφορο χρονικά και κοπιαστικό να τοποθετηθούν χειροκίνητα.

(β) Αν πάλι τοποθετούνταν χειροκίνητα, θα υπήρχε εξίσου σημαντικά μεγάλος κόπος να στο να δοθούν χαρακτηριστικά και ιδιότητες σε αυτά, όπως για παράδειγμα το μέτρο ελαστικότητας τους.

(γ) Άλλη ιδέα θα ήταν να μετατρέψουμε το δοκίμιο σε μορφή CAD (Computer Aided Design) και στην συνέχεια να μετατρέπαμε αυτό σε αρχείο CAE (Computer Aided Engineering). Αυτό δε θα ήταν πολύ χρήσιμο φυσικά αφού θα χρειαζόταν πάλι σημαντικός κόπος έτσι ώστε να δημιουργηθεί το

A/A	D	x	y	z
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1.0000	23.9738	112.6901	38.2643	75.8936
2.0000	31.3559	82.0823	20.7937	22.3941
3.0000	21.4462	38.6262	126.1076	38.1423
4.0000	25.3643	52.4976	29.4893	37.6626
5.0000	19.5810	92.4067	70.9933	52.7489

Μητρώο αδρανών όπως προκύπτει από τον αλγόριθμο MATLAB.

αρχείο CAD. Σημαντική παρατήρηση σε αυτό το σημείο είναι να αναφερθεί ότι υπάρχει μια σύγχρονη και υποσχόμενη τάση ενοποίησης των CAD και CAE σε μία διαδικασία μέσω την μεθόδους της ισογεωμετρικής ανάλυσης. Μάλιστα, υπάρχει έντονο ενδιαφέρον και σημαντικά αποτελέσματα από ερευνητές του εργαστηρίου Στατικής και Αντισεισμικών ερευνών πάνω στον αντικείμενο αυτό υπό την ηγεσία του Καθηγητή Μ. Παπαδρακάκη.

Για τους παραπάνω λόγους δημιουργήθηκε νέος κώδικας αλγορίθμου σε γλώσσα Python. Όπως ειπώθηκε, η γλώσσα Python είναι μια νέα και πολλά υποσχόμενη γλώσσα προγραμματισμού και αποτελεί δωρεάν λογισμικό (open source). Ο κύριος, όμως, λόγος που χρησιμοποιήθηκε στην εν λόγω μεθοδολογία είναι διότι το απαιτεί το Abaqus. Δηλαδή, για να μπορέσει κανείς να δώσει χειροκίνητα εντολές στο λογισμικό πακέτο πρέπει να συντάξει έναν κώδικα σε script που να υπακούει πάρα πολλούς και μάλιστα αυστηρά δια τυπωμένους κανόνες σύνταξης. Αυτά, λοιπόν, τα script συντάσσονται σε γλώσσα python για το λογισμικό πακέτο και μπορεί εύκολα κανείς να αναζητήσει πληροφορίες για την σύνταξη τους σε διάφορα βοηθήματα (manuals, tutorials) που η ίδια εταιρεία του λογισμικού έχει δημοσιοποιήσει. Τα βήματα του αλγορίθμου φαίνονται παρακάτω:

(α) κατασκευή ενός κυβικού κουτιού. Αυτό θα αποτελέσει στην συνέχεια την μήτρα του υλικού, δηλαδή του σκυροδέματος. Οι διαστάσεις αυτού, όπως θα φανεί στην συνέχεια, διαφέρουν αναλόγως της κλίμακας. Συγκεκριμένα γίνονται αναλύσεις με διαστάσεις δοκιμών πλευράς 1 mm, 10 mm, 40 mm και οι τελικές διαστάσεις πλευράς 150 mm.

(β) δημιουργία των μηχανικών χαρακτηριστικών της μήτρας. Δηλαδή δίνεται το μέτρο ελαστικότητας και ο λόγος Poisson στην περίπτωση γραμμικής ανάλυσης και η καμπύλη τάσης παραμόρφωσης ή το μοντέλο θραύσης σε περίπτωση μη γραμμικής ανάλυσης.

(γ) αντιστοίχιση αυτών των ιδιοτήτων με τη μήτρα ώστε το λογισμικό πακέτο να αντιλαμβάνεται ποιο υλικό έχει ποιες ιδιότητες.

(δ) Στην συνέχεια, δημιουργούνται και τα μηχανικά χαρακτηριστικά των αδρανών τα οποία θα χρησιμοποιηθούν αργότερα όταν δημιουργηθούν γεωμετρικά πρώτα αυτά.

(ε) Ακολουθώντας, ο αλγόριθμος διαβάζει το μητρώο των αδρανών που υπήρξε ως αποτέλεσμα (output) του κώδικα MATLAB (μητρώο εν ονόματι MATRIX). Αυτό το μητρώο αποτελείται από 5 στήλες. Με την σειρά οι στήλες εμπεριέχουν τον αύξοντα αριθμό τους αδρανούς, την διάμετρο στις

τελευταίες τρεις στήλες τις συντεταγμένες καρτεσιανού συστήματος στο χώρο. Για παράδειγμα ένα μητρώο 5 αδρανών θα μπορούσε να είναι στην παραπάνω μορφή όπως διαφαίνεται.

(ζ) Στο επόμενο βήμα δημιουργούμε τα αδρανή ως γεωμετρικά στοιχεία στο χώρο, το καθένα με την συγκεκριμένη διάμετρο του.

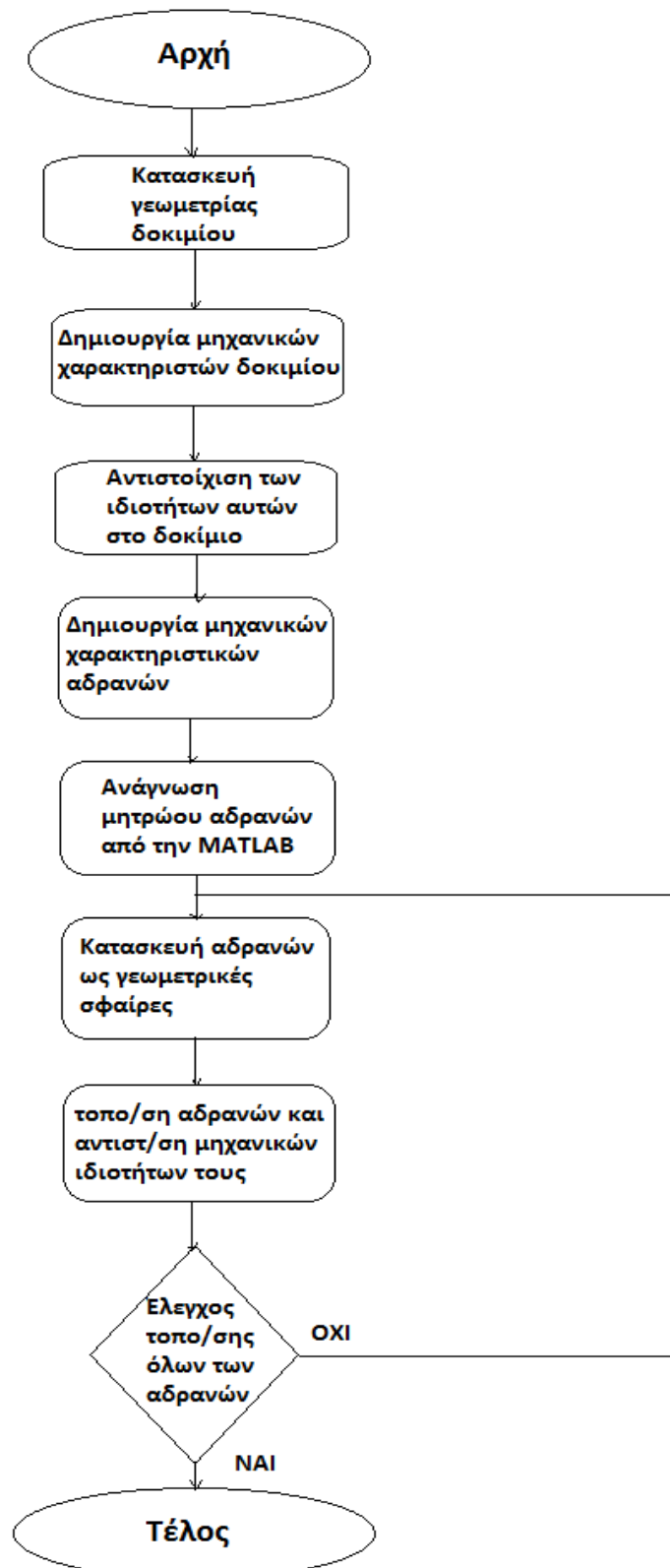
(η) τοποθετούμε στο χώρο κάθε αδρανές με βάση την γεωμετρικό κέντρο του Ο όπως δίδεται από το μητρώο αδρανών.

(θ) Τέλος, κάθε αδρανές παράλληλα με τα δύο παραπάνω βήματα λαμβάνει τα χαρακτηριστικά της μηχανικής συμπεριφοράς του που σε αυτήν την εργασία είναι κοινά για όλα τα αδρανή και πιο συγκεκριμένα, έχει δοθεί ελαστική συμπεριφορά σε όλα τα αδρανή καθώς οι παραμορφώσεις που δέχονται οδηγεί μόνο στον ελαστικό κλάδο της πραγματικής μη γραμμικής συμπεριφοράς τους.

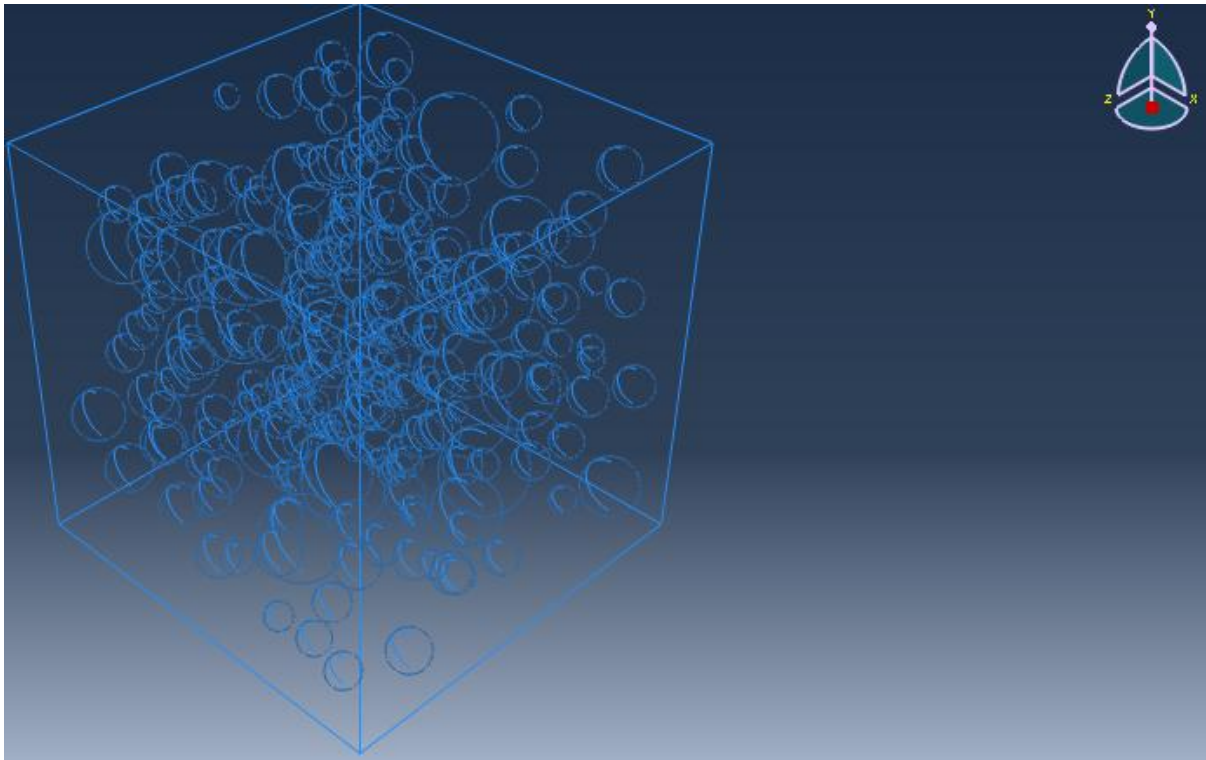
(ι) Επαναλαμβάνονται όλα τα παραπάνω βήματα (ζ), (η), (θ) έως ότου εξαντληθεί όλο το μητρώο των αδρανών και τοποθετηθεί κάθε ένα στην μοναδική θέση του στο χώρο, με την συγκεκριμένη μοναδική διάμετρο του και το μητρικό φιλμ (mortar film) γύρω του, όπως επεξηγήθηκε στην προηγούμενη παράγραφο.

Η δημιουργία script για τη μετάφραση δεδομένων χειροκίνητα στο abaqus είναι ένα πολύ ισχυρό εργαλείο που επιτρέπει τον συνδυασμό της χρήσης της λειτουργίας γραφικής διαπαιφάνειας (Graphical User Interface – GUI) του abaqus και βεβαίως την δύναμη της γλώσσας προγραμματισμού Python. Η παραπάνω διαδικασία δεν δίνει τα απαραίτητα εφόδια ώστε ο αναγνώστης να κατανοήσει σε βάθος ούτε την γλώσσα Python, ούτε την διαδικασία της σύνταξης script. Παρόλο αυτά δίδεται σε συνέχεια το διάγραμμα ροής του εν λόγω αλγορίθμου (Σχήμα 2.7) ώστε να κατανοηθεί η μεθοδολογία, απεικόνιση του δοκιμίου σε κάθε κλίμακα (Σχήματα 2.8, 2.9, 2.10) αλλά και ολόκληρος ο κώδικας ώστε να είναι εφικτή η πρώτη επαφή με την διαδικασία για κάποιον που δεν έχει ασχοληθεί με κάτι παρόμοιο. Όλα τα παραπάνω συστήματα CAD/CAE είναι βασικά προϊόντα της Βιομηχανίας Γραφικών (Computer Graphics Industry) που έχει σαν κύριο αντικείμενο τη σύνθεση, ανάλυση και επεξεργασία εικονικών παραστάσεων. Το υψηλό ποσοστό χρήσης αυτών στην έρευνα αλλά και στην αγορά δικαιολογείται κυρίως από την άμεση εφαρμογή που βρήκαν τα συστήματα αυτά στους διάφορους τομείς των τεχνικών δραστηριοτήτων. Δε είναι όμως τα μοναδικά βοηθήματα που έχουν ως εργαλείο οι μηχανικοί. Σε σημαντικά χαμηλότερα ποσοστά, ακολουθούν συστήματα εφαρμογών επεξεργασίας εικόνων, ηλεκτρονικής δημοσίευσης, απεικόνισης δεδομένων (bar charts - pie charts κ.ά.), κίνηση εικόνων (animation) κ.λ.π. Στην περίπτωση χρήσης του υπολογιστή για διακίνηση πληροφοριών και παραγωγή καταλόγων έχουμε αυτό που λέγεται σαν Computer Aided Administration (CAA). Computer Aided Engineering (CAE) είναι το σύνολο των παραπάνω, δηλαδή:

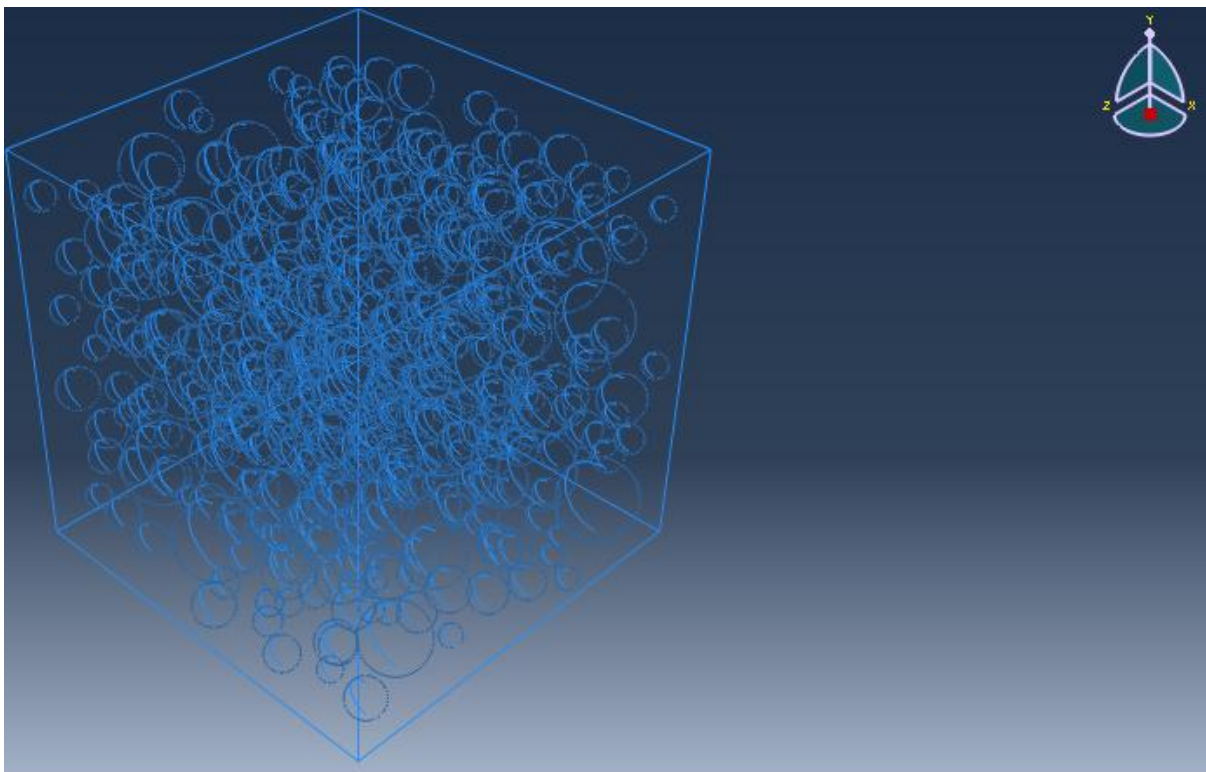
$$CAE = CAD + CAE + CADD + CAA.$$



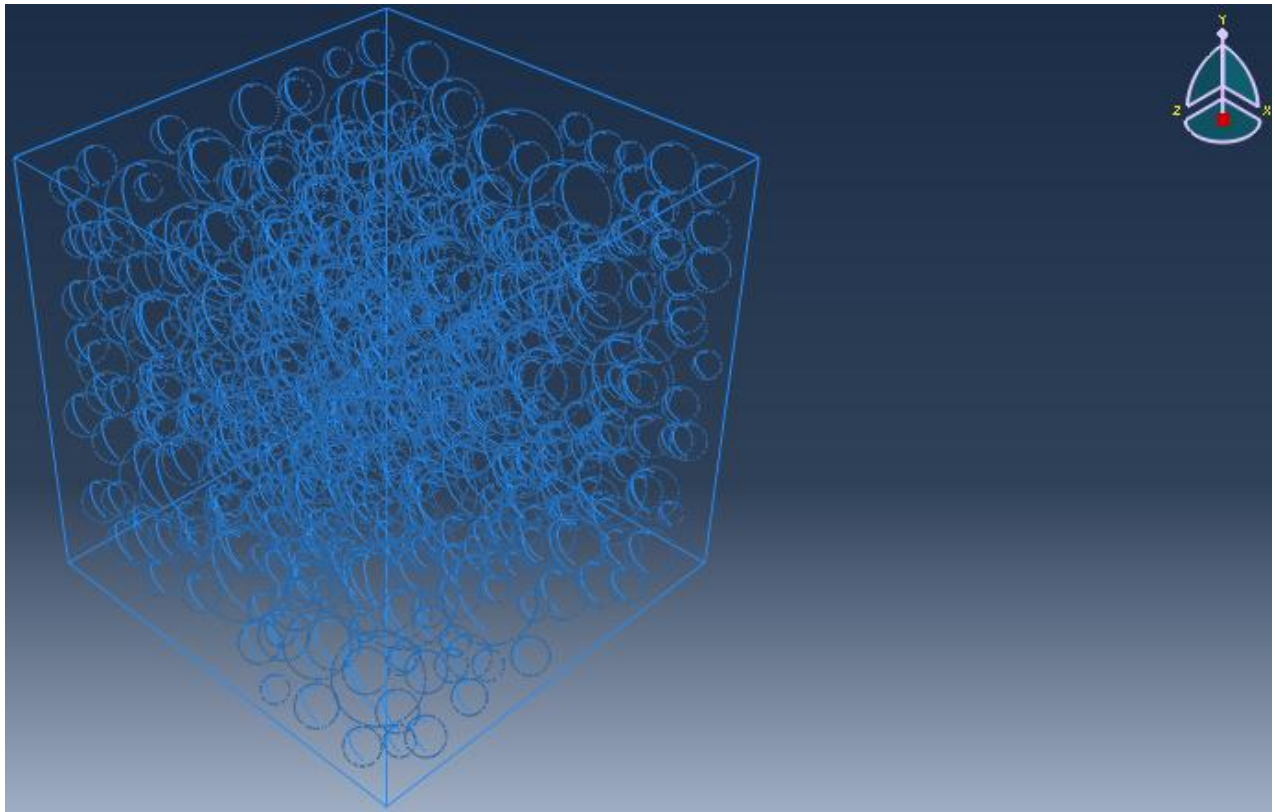
Σχήμα 2.7. Διάγραμμα ροής μεταφορά δοκιμίου από την MATLAB στο λογισμικό πακέτο Abaqus μέσω script σε γλώσσα Python



Σχήμα 2.8: Δοκίμιο σκυροδέματος πλευράς 10 mm στο λογισμικό πακέτο Abaqus ως αποτέλεσμα του script.



Σχήμα 2.9: Δοκίμιο σκυροδέματος πλευράς 40 mm στο λογισμικό πακέτο Abaqus ως αποτέλεσμα του script.



Σχήμα 2.10: Δοκίμιο σκυροδέματος πλευράς 150 mm στο λογισμικό πακέτο Abaqus ως αποτέλεσμα του script.

```
from part import *
from material import *
from section import *
from assembly import *
from step import *
from interaction import *
from load import *
from mesh import *
from job import *
from sketch import *
from visualization import *
from connectorBehavior import *
import random
import math
```



```
import numpy as np

#Euclidean Distance Measure
def euclidean_py(x, y):
    if len(x) != len(y):
        raise ValueError, "vectors must be same length"
    sum = 0
    for i in range(len(x)):
        sum += (x[i]-y[i])**2
    return math.sqrt(sum)

#Create Cube
mdb.Model(name='Model-1').ConstrainedSketch(name='__profile__', sheetSize=200.0)
mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'].rectangle(point1=(0.0, 0.0), point2=(150.0,
150.0))
mdb.models['Model-1'].Part(dimensionality=THREE_D, name='box',
type=DEFORMABLE_BODY)
mdb.models['Model-1'].parts['box'].BaseSolidExtrude(depth=150.0,
sketch=mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'])
del mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__']

#Instantiate cube
mdb.models['Model-1'].rootAssembly.Instance(dependent=OFF, name='tmpCube',
part=mdb.models['Model-1'].parts['box'])

#File Output
text_file = open("c:\Sphere_Positions.txt", "w")
```

```

mdb.models['Model-1'].Material(name='Material-box')
mdb.models['Model-1'].materials['Material-box'].Elastic(table=((2000000000.0,
0.2), ))
mdb.models['Model-1'].HomogeneousSolidSection(material='Material-box', name='Section-
box', thickness=None)
mdb.models['Model-1'].parts['box'].SectionAssignment(offset=0.0,
offsetField='', offsetType=MIDDLE_SURFACE, region=Region(cells=mdb.models['Model-
1'].parts['box'].cells.findAt(((0.0, 0.0, 0.0), ), ), ), sectionName='Section-box',
thicknessAssignment=FROM_SECTION)
mdb.models['Model-1'].Material(name='Material-Part')
mdb.models['Model-1'].materials['Material-Part'].Elastic(table=((1000000000.0,
0.3), ))
mdb.models['Model-1'].HomogeneousSolidSection(material='Material-Part', name='Section-
Part', thickness=None)
R = np.loadtxt('read_it_abaqus.txt', skiprows=1)

# Epanalipseis _____

while i<=200:
    r = int(R[i,1]/2)
    x_pos = R[i,2]
    y_pos = R[i,3]
    z_pos = R[i,4]
    mdb.models['Model-1'].ConstrainedSketch(name='__profile__', sheetSize=200.0)
    mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'].ConstructionLine(point1=(0.0, -100.0),
point2=(0.0, 100.0))
    mdb.models['Model-
1'].sketches['__profile__'].FixedConstraint(entity=mdb.models['Model-
1'].sketches['__profile__'].geometry[2])
    mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'].ArcByCenterEnds(center=(0.0, 0.0),
direction=CLOCKWISE, point1=(0.0, -r), point2=(0.0, r))

```

```

mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'].Line(point1=(0.0, -r), point2=(0.0, r))

mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'].VerticalConstraint(entity=mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'].geometry[4])

InstanceName = 'Sphere_' + str(i)
PName = 'Sphere_' + str(i)

mdb.models['Model-1'].Part(dimensionality=THREE_D, name=PName, type=DEFORMABLE_BODY)

mdb.models['Model-1'].parts[PName].BaseSolidRevolve(angle=360.0, flipRevolveDirection=OFF, sketch=mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__'])

del mdb.models['Model-1'].sketches['__profile__']

mdb.models['Model-1'].rootAssembly.Instance(dependent=OFF, name=InstanceName, part=mdb.models['Model-1'].parts[PName])

mdb.models['Model-1'].rootAssembly.translate(instanceList=(InstanceName, ), vector=(x_pos,y_pos,z_pos))

mdb.models['Model-1'].parts[PName].SectionAssignment(offset=0.0, offsetField='', offsetType=MIDDLE_SURFACE, region=Region(cells=mdb.models['Model-1'].parts[PName].cells.findAt(((0.0, 0.0, 0.0), ), )), sectionName='Section-Part', thicknessAssignment=FROM_SECTION)

i+=1

```

Κώδικας script σε γλώσσα Python για τη μεταφορά του δοκιμίου στο λογισμικό πακέτο Abaqus.

2.4 Αλγόριθμος Κατασκευής Δοκιμίου Νανοσωλήνων Άνθρακα (CNT)

Όπως ειπώθηκε, στην παρούσα μελέτη η επίδραση της διεπιφανειακής διατμητικής αντοχής στις μηχανικές ιδιότητες του σκυροδέματος με CNTs διερευνάται με την βοήθεια αναλύσεων πολλαπλής κλίμακας. Το ατομικό πλέγμα των CNTs προσομοιώνεται με ένα πλαισιωτό δίκτυο δοκών χρησιμοποιώντας τις αρχές του SMM . Καθώς τα CNTs σχηματίζουν μακριές αλυσίδες, φτάνοντας σε μήκος κάποιων μικρών, η λεπτομερής προσομοίωση της νανοδομής τους με βάση το SMM είναι μια υπολογιστικά επίπονη διαδικασία. Για αυτόν τον λόγο το λεπτομερές μοντέλο του SMM αντικαθίσταται από μία ισοδύναμη δοκό (Equivalent Beam Element- EBE) η οποία χρησιμοποιείται ως το βασικό στοιχείο για την δόμηση των μακρών αλυσίδων των CNTs. Για τον καθορισμό των παραμέτρων ακαμψίας της ισοδύναμης δοκού το λεπτομερές μοντέλο SMM του μονότοιχου νανοσωλήνα που προσομοιώνεται από ένα πλαισιωτό δίκτυο δοκών υποβάλλεται σε τρεις ανεξάρτητες φορτίσεις, εφελκυσμό, κάμψη και στρέψη. Οι συνοριακές συνθήκες καθώς και τα φορτία που επιβάλλονται σε κάθε περίπτωση

απεικονίζονται στο Σχήμα (1.11). Όπως αναφέρθηκε η μελέτη των νανοσωλήνων άνθρακα μέσα στο σκυρόδεμα γίνεται με την χρήση της τεχνικής του ενσωματωμένου στοιχείου όπου χρησιμοποιείται για την αποφυγή δημιουργίας περίπλοκου πλέγματος κατά την διακριτοποίηση του αντιπροσωπευτικού στοιχείου όγκου (RVE) του νανოსύνθετου υλικού. Με τον τρόπο αυτό αποφεύγεται η ανάγκη διακριτοποίησης της μήτρας και των CNTs με στοιχεία που έχουν κοινούς κόμβους. Το RVE αποτελείται από δύο ανεξάρτητα πλέγματα: ένα για την μήτρα της οποίας η διακριτοποίηση γίνεται με οκτακομβικά στοιχεία συνεχούς μέσου και ένα για τους νανοσωλήνες των οποίων η διακριτοποίηση γίνεται με χρήση στοιχείων τρισδιάστατων δοκών σε εν σειρά σύνδεση. Η μεταφορά των φορτίων από την μήτρα στα ενισχυτικά γίνεται μέσω κινηματικών περιορισμών που επιβάλλονται στους κόμβους των ενσωματωμένων στοιχείων.

Έτσι σε αυτήν την μελέτη δημιουργήθηκαν οι νανοσωλήνες άνθρακα με την μορφή ισοδύναμων δοκών (EBE). Οι νανοσωλήνες τοποθετήσαν σε δοκίμιο τσιμεντόπαστας διαστάσεων νανοκλίμακας. Η τοποθέτηση του έγινε με τυχαία κατανομή και τυχαία γεωμετρία μέσω νέου κώδικα MATLAB όπως φαίνεται στα σχήματα (2.11, 2.12, 2.13 και 2.14). Σε αυτήν την περίπτωση ο μόνος περιορισμός που υπήρξε είναι βεβαίως, ολοκληρός ο νανοσωλήνας άνθρακα να βρίσκεται εντός των ορίων των CNT. Για την επίτευξη αυτής της προϋπόθεσης έγινε ειδικός έλεγχος στον κώδικα. Όπως θα φανεί και στο τρίτο κεφάλαιο, έγινε διερεύνηση για ποσότητα νανοσωλήνων άνθρακα ίση με 0.10, 2.00 και 10.00 % κατά βάρος. Δεν θα ήταν εφικτό μεγαλύτερο ποσοστό τους (από 2.00 % κατά βάρος) καθώς από ένα σημείο και πέρα σχηματίζουν συγκεντρωμένες ομάδες νανοσωλήνων που εν τέλει επηρεάζουν αρνητικά την μηχανική συμπεριφορά του νανოსύνθετου υλικού. Για αριθμητική όμως επεξεργασία, έγινε προσομοίωση και με δοκίμιο με 10.00 % κ.β. CNT. Η μεταφορά από το λογισμικό πακέτο MATLAB στον abaqus χρειάστηκε εκ νέου διαδικασία διότι δεν ήταν καθόλου εύκολη υπόθεση, όπως μπορεί να υποφιαστεί κανείς σε σύγκριση με την μεταφορά των αδρανών στο εν λόγω πρόγραμμα πεπερασμένων στοιχείων. Συγκεκριμένα χρειάστηκε να δημιουργηθεί ένα μητρώο νανοσωλήνων άνθρακα που στις επτά στήλες του εμπεριέχει τον αύξοντα αριθμό του αλλά και από τρεις συντεταγμένες για κάθε ένα από τα δύο κέντρα των άνω και κάτω εδρών του κυλίνδρου. Πιο αναλυτικά, θα αναπτυχθεί αυτή καθαυτή η μεθοδολογία σε επόμενη παράγραφο. Ο σκοπός της διερεύνησης είναι ουσιαστικά να βελτιώσει την γραμμική ή την μη γραμμική συμπεριφορά της τσιμεντόπαστας το οποίο επιτυγχάνεται σε ικανοποιητικό βαθμό όπως θα δούμε στο τρίτο κεφάλαιο. Αφού βελτιωθεί η μηχανική συμπεριφορά της τσιμεντόπαστας με προσομοιώσεις μονοαξονικού εφελκυσμού και μονοαξονικής θλίψης, στην συνέχεια χρησιμοποιείται αυτή η νέα βελτιωμένη τσιμεντόπαστα στην μεθοδολογία ανάλυσης πολλαπλών κλιμάκων. Αυτή η αρχικά μικρή βελτίωση της τσιμεντόπαστας είτε σε ελαστική είτε σε ανελαστική ανάλυση μεταφέρεται και διογκώνεται όσο μεγαλώνουν οι κλίμακες. Αυτό είναι επόμενο καθώς ουσιαστικά μεγαλώνει η ποσότητα τσιμεντόπαστας και επιπλέον το μεγαλύτερο δοκίμιο καταφέρνει να παραλαμβάνει μεγαλύτερες τάσεις και έτσι να προδίδει την προσθήκη των CNTs σε σύγκριση με το απλό μη ενισχυμένο σκυρόδεμα που θα φαίνεται σε παράλληλη και παρόμοια ανάλυση με το ενισχυμένο σκυρόδεμα. Έχοντας εξάγει τις δύο καμπύλες του ενισχυμένου και μη σκυροδέματος

είμαστε σε θέση να βγάλουμε ασφαλή συμπεράσματα ως προς τη ενδυνάμωση του νέου υλικού. Παράλληλα, είναι εφικτό να εξαχθούν συμπεράσματα για άλλες παραμέτρους μέτρησης της μηχανικής ικανότητας ενός υλικού, όπως για παράδειγμα το κριτήριο της ανθεκτικότητας υλικού (fracture toughness), όπου μετριέται η ενέργεια που χρειάζεται έτσι ώστε να μεταδοθεί μια ήδη υπάρχουσα ρωγμή και εν τέλει να οδηγήσει σε αστοχία. Μια ακόμα, προέκταση θα μπορούσε να είναι η χρήση αυτών των καμπυλών για την πρόβλεψη της μη γραμμικής συμπεριφοράς του ενισχυμένου με CNTs σκυροδέματος σε ανακυκλιζόμενη φόρτιση. Αυτό θα μπορούσε να εφαρμοστεί είτε στο δοκίμιο κατευθείαν είτε κατασκευάζοντας μία προσομοίωση μιας κατασκευής όπως για παράδειγμα ενός προβόλου με κατανεμημένη δύναμη στο ένα άκρο της και πάκτωση στο άλλο. Παράλληλα, θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί η γνωστή σε όλους μας ενίσχυση με ράβδους στις εφελκόμενες ίνες ενώ όσο αφορά στην προσομοίωση, κάθε ένα από τα πεπερασμένα στοιχεία θα υπάκουγε στον νόμο της καμπύλης τάσης - σ - παραμόρφωσης - ϵ - μέχρι ενός σημείου που θα επικρατούσε ακαριαία αστοχία του ενός πεπερασμένου στοιχείου κ.ο.κ.

Τα βήματα για την ολοκλήρωση του αλγορίθμου φαίνονται παρακάτω:

(α) εισάγονται τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των ισοδύναμων δοκών EBE όπως διάμετρος και μήκος, αλλά και ποσότητα κατά βάρους στο δοκίμιο.

(β) πραγματοποιείται έναρξη βρόγχου που αυξάνει το πλήθος των EBE όλο και περισσότερο και τερματίζει όταν η ποσότητα κ.β. τους φτάσει την επιθυμητή.

(γ) ορίζονται τυχαίες συντεταγμένες του κέντρου της πρώτης έδρας του κυλίνδρου της ισοδύναμου δοκού EBE.

(δ) με τυχαία γωνία στροφής ευρίσκονται οι συντεταγμένες του απέναντι κέντρου της έδρας των κυλίνδρων έτσι ώστε το EBE να έχει πάντα το επιθυμητό κοινό μήκος.

(ε) Στην συνέχεια γίνεται ο έλεγχος για τον αν βρίσκεται εξ ολοκλήρου η ισοδύναμη δοκός εντός των διαστάσεων του δοκιμίου σκυροδέματος έτσι ώστε να μην προκύψουν αναλύσεις που δεν ανταποκρίνονται στην πραγματικότητα.

(ζ) Αν ικανοποιείται ο παραπάνω έλεγχος τότε το EBE εισάγεται μέσα στο δοκίμιο και σε γραφική μορφή αλλά κυρίως στο μητρώο των CNTs,

(η) ο αλγόριθμός επιστρέφει στο βήμα (β),

(θ) όταν ικανοποιηθεί το βήμα (β) τερματίζει ο αλγόριθμος και η διαδικασία τελειώνει έχοντας ως έξοδο (output) την γραφική απεικόνιση αλλά κυρίως το τελικό μητρώο των CNTs.

Παράλληλα με την παραπάνω διαδικασία τρέχει και ένας άλλος αλγόριθμος (συνάρτηση του κύριου αλγορίθμου – function) που σκοπό έχει την τρισδιάστατη απεικόνιση των ισοδύναμων δοκών EBE. Ο λόγος ύπαρξης του είναι ότι το λογισμικό πακέτο δεν έχει μεριμνήσει απόλυτα σωστά επί τέτοιων προβλημάτων:

(ι) ευρίσκεται το μήκος της ισοδύναμης δοκού μέσω της γεωμετρικής απόστασης των δύο κέντρων των εδρών του κυλίνδρου.

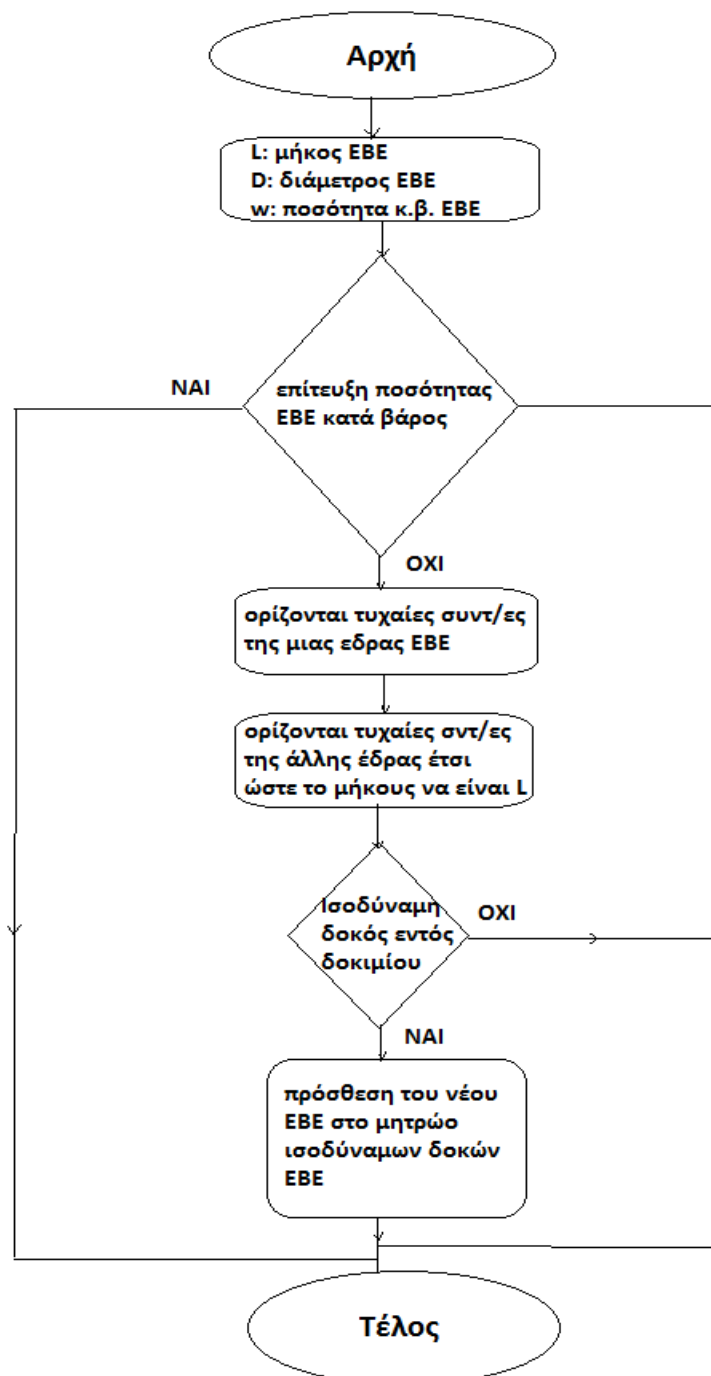
(κ) με παρόμοιο τρόπο ευρίσκεται η γωνία μεταξύ αυτών των δύο κέντρων από το σημείο 0 του καρτεσιανού συστήματος.

(λ) δημιουργούνται δύο διανύσματα (vectors) αυτών των δύο κέντρων των εδρών της ισοδύναμης δοκού

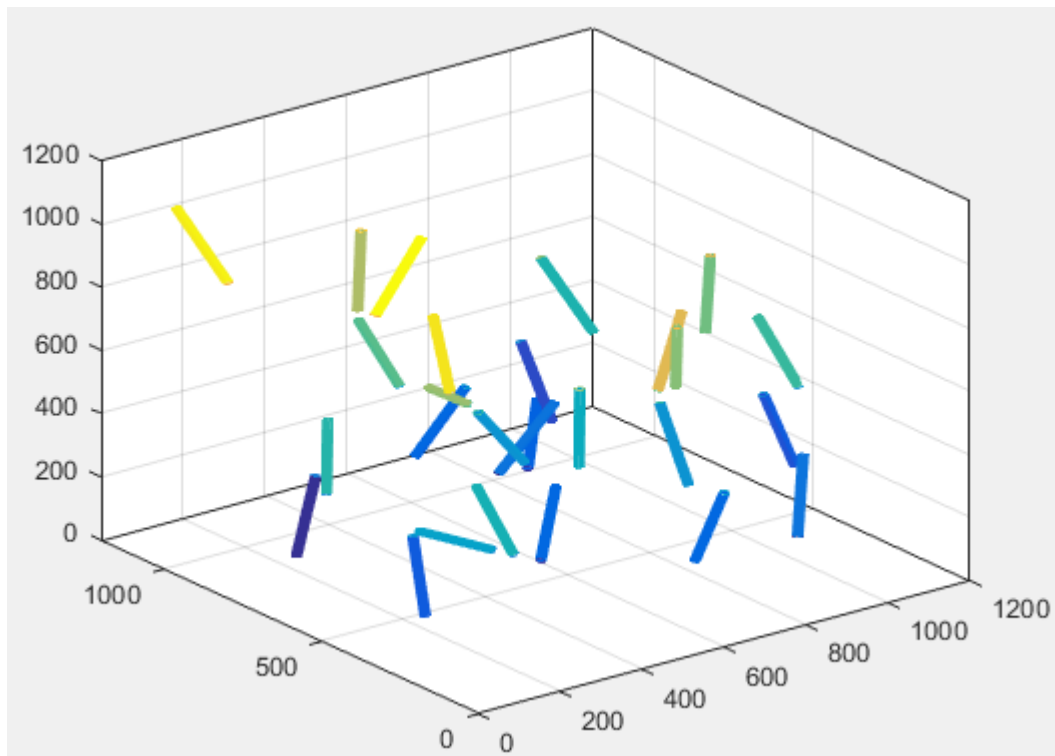
(μ) τέλος δημιουργείται μια ελικοειδής σπείρα από το πρώτο διάνυσμα στο δεύτερο, μέσω πολλών ενδιάμεσων σημείων, και έτσι απεικονίζεται το ΕΒΕ.

(ν) τέλος, αποθηκεύονται όλες αυτές οι γραφικές παραστάσεις και απεικονίζονται ταυτόχρονα όλες μαζί στον ίδιο γεωμετρικό δοκίμιο.

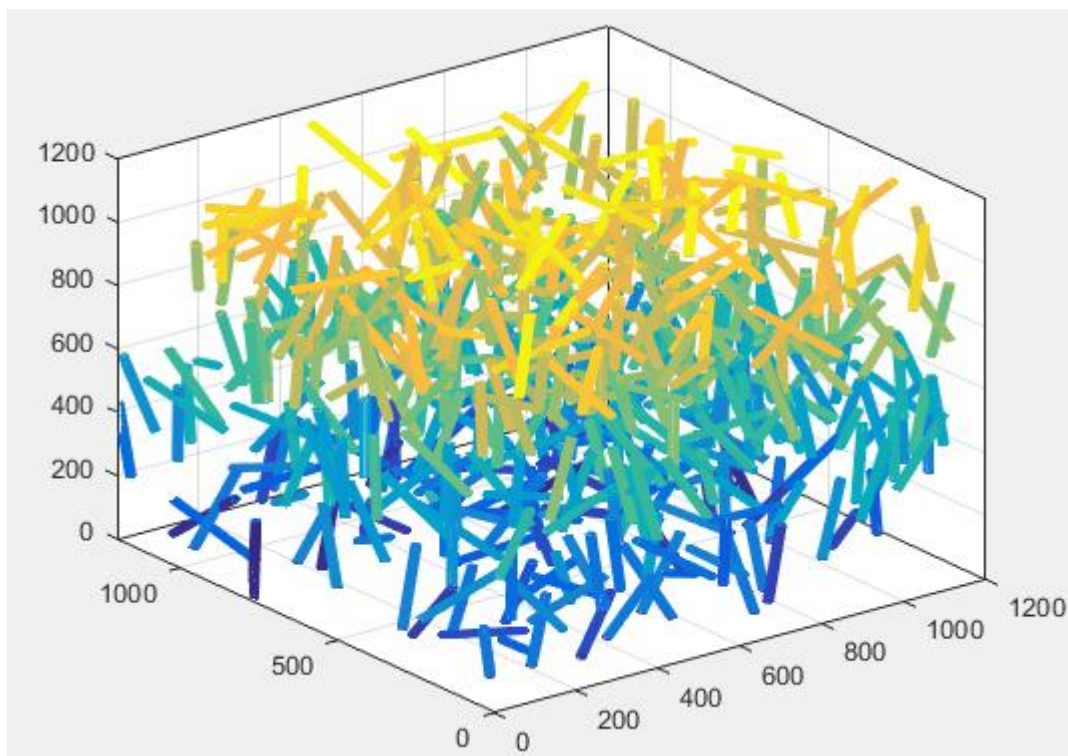
Για την περαιτέρω κατανόηση της διαδικασίας γίνεται η οπτική απεικόνιση του αλγορίθμου σε διάγραμμα ροής (Σχήμα 2.11) ενώ δίδονται και εικόνες των δοκιμίων τσιμεντόπαστας με νανοσωλήνες άνθρακα όπως προκύπτουν από το λογισμικό πακέτο MATLAB (Σχήμα 2.12, 2.13 και 2.14). Τα παραπάνω τρία διαγράμματα διαφέρουν μόνο ως προς την ποσότητα κατά βάρος των νανοσωλήνων άνθρακα CNT σε 0.10, 2.00 και 10.00 αντίστοιχα κ.β. και μπορεί αυτό να γίνει αντιληπτό με γυμνό μάτι. Οι διαστάσεις των δοκιμίων παραμένουν σταθερές ως κυβικά δοκίμια πλευράς 1200 nm.



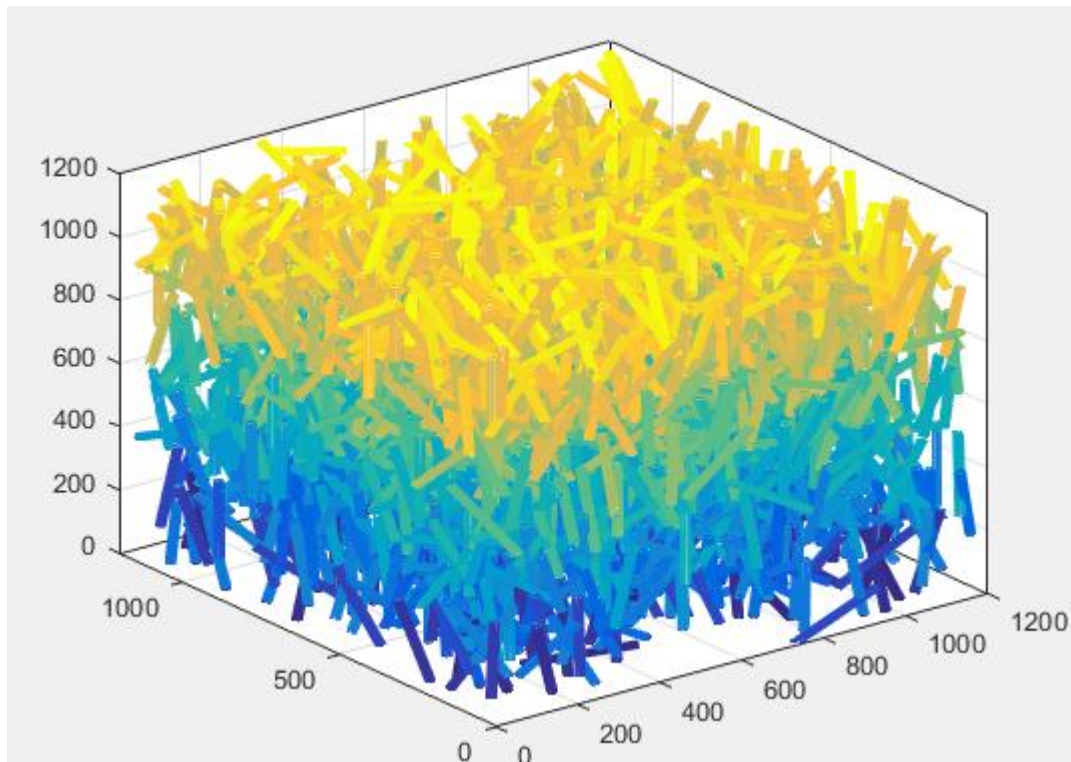
Σχήμα 2.11: Διάγραμμα ροής αλγορίθμου για παραγωγή δοκιμίου με ισοδύναμες δοκούς EBE ναοσωλήνων άνθρακα CNTs στο λογισμικό πακέτο MATLAB



Σχήμα 2.12: Σχηματική απεικόνιση δοκιμίου με ισοδύναμες δοκούς EBE 0.10 % κατά βάρος νανοσωλήνων άνθρακα CNTs όπως προκύπτει από το λογισμικό πακέτο MATLAB.



Σχήμα 2.13: Σχηματική απεικόνιση δοκιμίου με ισοδύναμες δοκούς EBE 2.00 % κατά βάρος νανοσωλήνων άνθρακα CNTs όπως προκύπτει από το λογισμικό πακέτο MATLAB.



Σχήμα 2.14: Σχηματική απεικόνιση δοκιμίου με ισοδύναμες δοκούς ΕΒΕ 10.00 % κατά βάρος νανοσωλήνων άνθρακα CNTs όπως προκύπτει από το λογισμικό πακέτο MATLAB.

```
clear;
clc;

L_cnt = input('Lenght of Carbon Nanotubes (nm): ');
D_cnt = input('Diameter of Carbon Nanotubes(nm): ');
V_cnt = pi() * (D_cnt/2)^2 * L_cnt;
L_box = input('Cube side(nm): ');
V_box = L_box^3;
U_cnt = input('Volume fraction of CNTs(%): ');
Wf = U_cnt*1800/1550 % epi tois 100 !
U_cnt = U_cnt / 100;
U = 0;
n_cnt = 1;
n_cnt_total = int64(U_cnt*V_box / V_cnt)
```

```

while (true)
  if U>U_cnt*V_box
    break
  end
  CNT_MATRIX(n_cnt,1) = n_cnt;
  n_x = rand;
  n_y = rand;
  n_z = rand;
  CNT_MATRIX(n_cnt,2) = n_x*L_box;
  CNT_MATRIX(n_cnt,3) = n_y*L_box;
  CNT_MATRIX(n_cnt,4) = n_z*L_box;
  n_xy = rand;
  xy = n_xy*L_cnt;
  n_xy_fi = rand;
  n_xy_fi = n_xy_fi*(2*pi());
  CNT_MATRIX(n_cnt,5) = CNT_MATRIX(n_cnt,2) + cos(n_xy_fi)*xy;
  CNT_MATRIX(n_cnt,6) = CNT_MATRIX(n_cnt,3) + sin(n_xy_fi)*xy;
  P = [1 0 (CNT_MATRIX(n_cnt,5)-CNT_MATRIX(n_cnt,2))^2+(CNT_MATRIX(n_cnt,6)-
CNT_MATRIX(n_cnt,3))^2-L_cnt^2];
  z_P = roots(P);
  if int64(n_cnt/2)== n_cnt/2
    CNT_MATRIX(n_cnt,7) = z_P(1) + CNT_MATRIX(n_cnt,4);
  else
    CNT_MATRIX(n_cnt,7) = z_P(2) + CNT_MATRIX(n_cnt,4);
  end
  while (true)
    if CNT_MATRIX(n_cnt,5)>L_box
      break
    end
  end

```

```
if CNT_MATRIX(n_cnt,6)>L_box
    break
end
if CNT_MATRIX(n_cnt,7)>L_box
    break
end
if CNT_MATRIX(n_cnt,5)<0
    break
end
if CNT_MATRIX(n_cnt,6)<0
    break
end
if CNT_MATRIX(n_cnt,7)<0
    break
else
    U = U + V_cnt;
    %3D plot
    N = 20;
    r1 = [CNT_MATRIX(n_cnt,2) CNT_MATRIX(n_cnt,3) CNT_MATRIX(n_cnt,4)];
    r2 = [CNT_MATRIX(n_cnt,5) CNT_MATRIX(n_cnt,6) CNT_MATRIX(n_cnt,7)];
    R = D_cnt / 2;
    if n_cnt == 1
        figure(1)
        [X,Y,Z]=cylinder2P(R,N,r1,r2);
        mesh(X,Y,Z);
    else
        hold on
        [X,Y,Z]=cylinder2P(R,N,r1,r2);
        mesh(X,Y,Z);
    end
end
```

```

    end
    n_cnt = n_cnt + 1
    break
    end
end
end
CNT_MATRIX
axis([0 L_box 0 L_box 0 L_box])
box
CNT_MATRIX = int64(CNT_MATRIX)

```

ΕΝΩ Η ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ cylinder2P δίνεται από τον αλγόριθμο:

```

function [X, Y, Z] = cylinder2P(R, N,r1,r2)

    theta = linspace(0,2*pi,N);

    m = length(R);

    if m == 1
        R = [R; R];
        m = 2;
    end

    X = zeros(m, N);
    Y = zeros(m, N);
    Z = zeros(m, N);
    v=(r2-r1)/sqrt((r2-r1)*(r2-r1)');
    R2=rand(1,3);
    x2=v-R2/(R2*v');
    x2=x2/sqrt(x2*x2');
    x3=cross(v,x2);
    x3=x3/sqrt(x3*x3');
    r1x=r1(1);r1y=r1(2);r1z=r1(3);
    r2x=r2(1);r2y=r2(2);r2z=r2(3);

```

```

vx=v(1);vy=v(2);vz=v(3);
x2x=x2(1);x2y=x2(2);x2z=x2(3);
x3x=x3(1);x3y=x3(2);x3z=x3(3);
time=linspace(0,1,m);
for j = 1 : m
    t=time(j);
    X(j, :) = r1x+(r2x-r1x)*t+R(j)*cos(theta)*x2x+R(j)*sin(theta)*x3x;
    Y(j, :) = r1y+(r2y-r1y)*t+R(j)*cos(theta)*x2y+R(j)*sin(theta)*x3y;
    Z(j, :) = r1z+(r2z-r1z)*t+R(j)*cos(theta)*x2z+R(j)*sin(theta)*x3z;
end

```

Κώδικας αλγορίθμου κατασκευής δοκιμίου με ισοδύναμες δοκούς EBE 10.00 νανοσωλήνων άνθρακα CNTs στο λογισμικό πακέτο MATLAB.

2.5 Αλγόριθμος Προσομοίωσης του Δοκιμίου Σκυροδέματος με ισοδύναμες δοκούς EBE νανοσωλήνων άνθρακα CNTs από την MATLAB στο Λογισμικό Πακέτο Abaqus

Η κατασκευή ενός δοκιμίου με ισοδύναμες δοκούς EBE των CNTs απαιτείται να πραγματοποιηθεί με αλγόριθμο που θα γεννά τα EBE. Αυτός ο αλγόριθμος (ο οποίος αναπτύχθηκε αναλυτικά στην προηγούμενη παράγραφο) παράγει το δοκίμιο ως ένα γεωμετρικό προϊόν. Αυτό στην συνέχεια είναι απαραίτητο να αναλυθεί σε ένα λογισμικό πρόγραμμα πεπερασμένων στοιχείων ώστε να μελετηθεί ως υλικό πλέον. Για να επιτευχθεί αυτό μια διαδικασία ακολουθήθηκε έτσι ώστε να αντιληφθεί το λογισμικό πακέτο Abaqus αυτό το δοκίμιο τσιμεντόπαστας και EBE. Δηλαδή, για τη μεταφορά από το λογισμικό πακέτο MATLAB στον abaqus χρειάστηκε εκ νέου διαδικασία διότι δεν ήταν καθόλου προφανής η λύση αυτού. Συγκεκριμένα χρειάστηκε να δημιουργηθεί ένα μητρώο νανοσωλήνων άνθρακα που στις επτά στήλες του εμπεριέχει τον αύξοντα αριθμό του αλλά και από τρεις συντεταγμένες για κάθε ένα από τα δύο κέντρα των άνω και κάτω εδρών του κυλίνδρου. Τα βήματα για την ολοκλήρωση της εν λόγω διαδικασίας είναι τα εξής:

(α) Κατασκευή του μητρώου των ισοδύναμων δοκών EBE όπως παρουσιάστηκε στην προηγούμενη παράγραφο.

(β) μεταφορά των δεδομένων στο excel ή σε άλλον φυλλομετρητή και επεξεργασία των δεδομένων έτσι ώστε να μπορούν να διαβαστούν από λογισμικά πακέτα CAD όπως το AUTOCAD.

(γ) μεταφορά αυτών των δεδομένων σε κείμενο text που θα αποτελέσει στην συνέχεια το αρχείο script του AUTOCAD. Το αρχείο όπως φαίνεται στην συνέχεια δίνει εντολή στο πρόγραμμα να σχεδιάσει μια γραμμή κάθε φορά που συμβολίζει το EBE έχοντας ως οδηγό τις τρεις συντεταγμένες στο χώρο των δύο κέντρων των εδρών του κυλίνδρου των ισοδύναμων δοκών.

(δ) προκύπτουν απεικονίσεις των ΕΒΕ σε δισδιάστατη μορφή που ακολούθως θα μεταφερθούν στο abaqus για ποσότητα κατά βάρος ΕΒΕ 0.10%, 2.00% και 10.00% (Σχήματα 2.15, 2.16 και 2.17).

```
LINE 1033,1121,1181 1077,925,1061 1033,1121,1181 close
```

```
LINE 400,560,778 403,556,1012 400,560,778 close
```

```
LINE 535,65,213 460,201,37 535,65,213 close
```

```
LINE 432,68,626 467,138,847 432,68,626 close
```

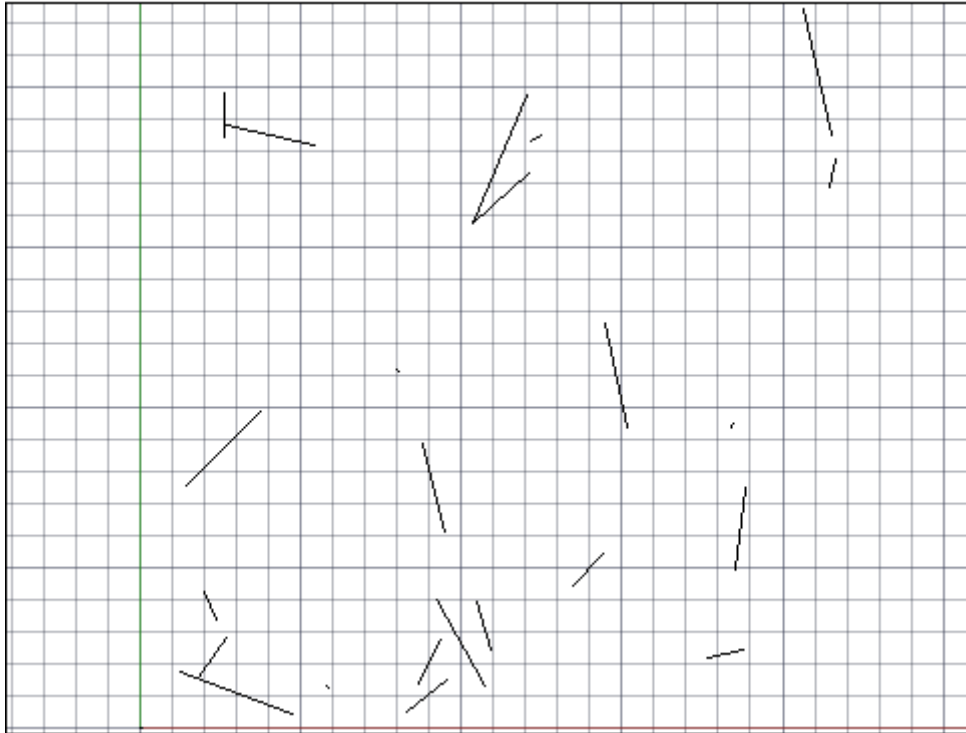
```
LINE 674,221,717 721,273,493 674,221,717 close
```

Υπόδειγμα script σχεδίασης ΕΒΕ στο λογισμικό πακέτο AUTOCAD.

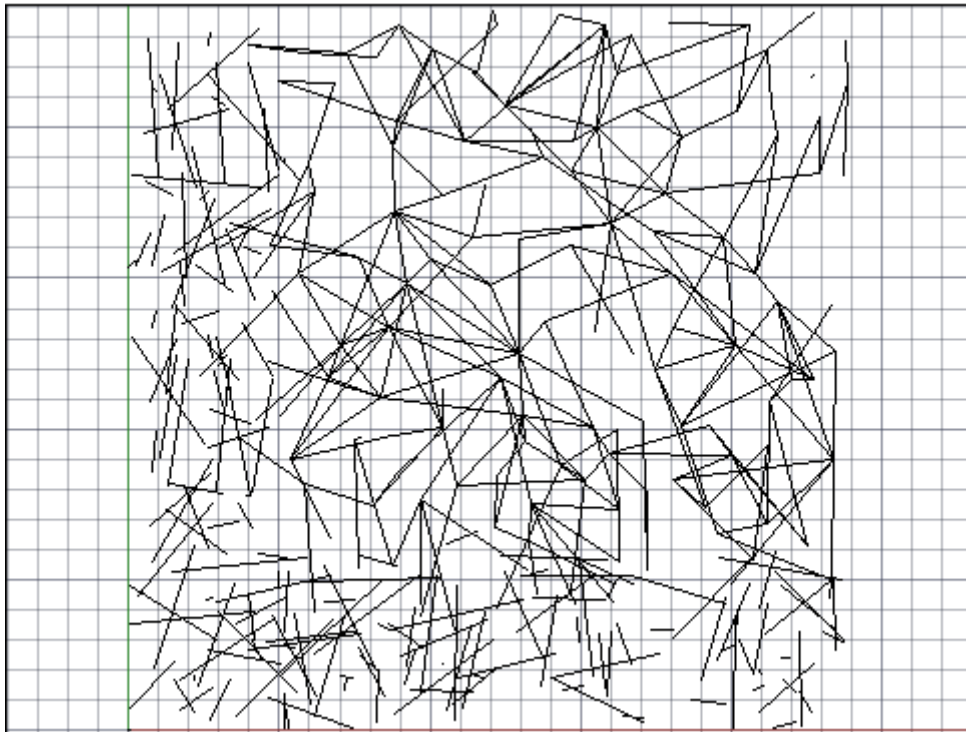
(ε) Στην συνέχεια χρειάζεται οπωσδήποτε η τροποποίηση του αρχείου DXF που παράγει το AUTOCAD σε άλλο αρχείο όπως το IGES που διαβάζει το abaqus. Αυτή η διαδικασία είναι αρκετά εύκολη και δεν θα αναλυθεί περαιτέρω.

(ζ) Εισάγονται ως ένα Part όλα τα ΕΒΕ του δοκιμίου και φυσικά ενσωματώνονται στην τιμεντόπαστα με την τεχνική του ενσωματωμένου στοιχείου.

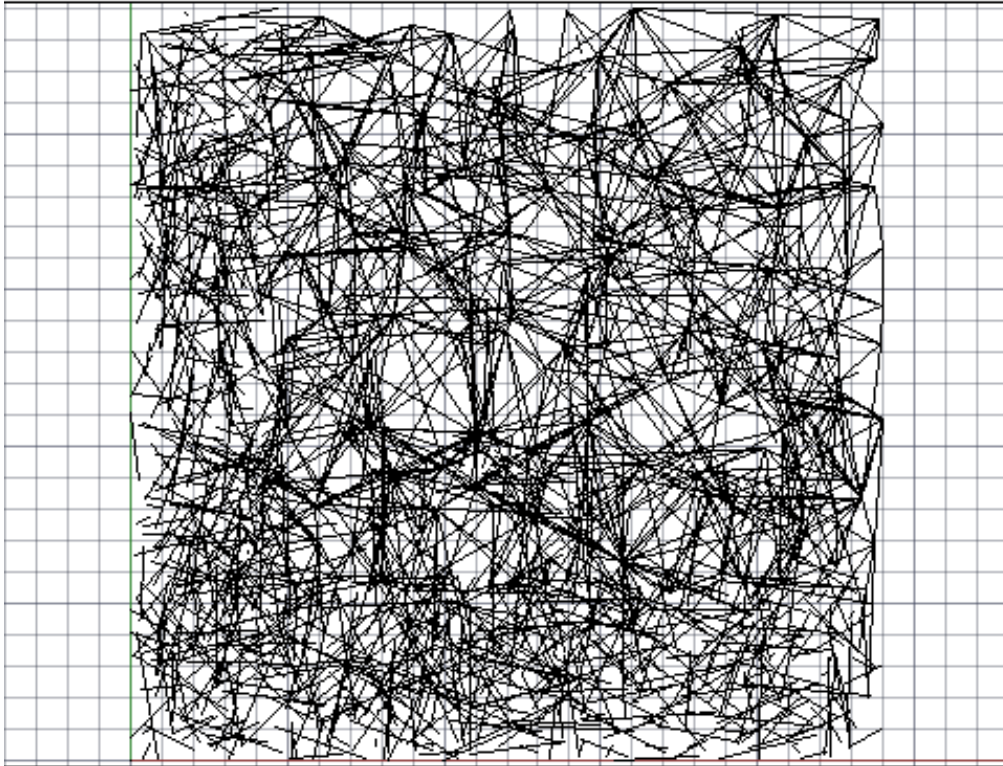
Το τελικό αποτέλεσμα φαίνεται στα σχήματα (2.18, 2.19 και 2.20). Τελικά, το δοκίμιο είναι έτοιμο να εξετασθεί με την γνωστή μεθοδολογία από το πρόγραμμα πεπερασμένων στοιχείων.



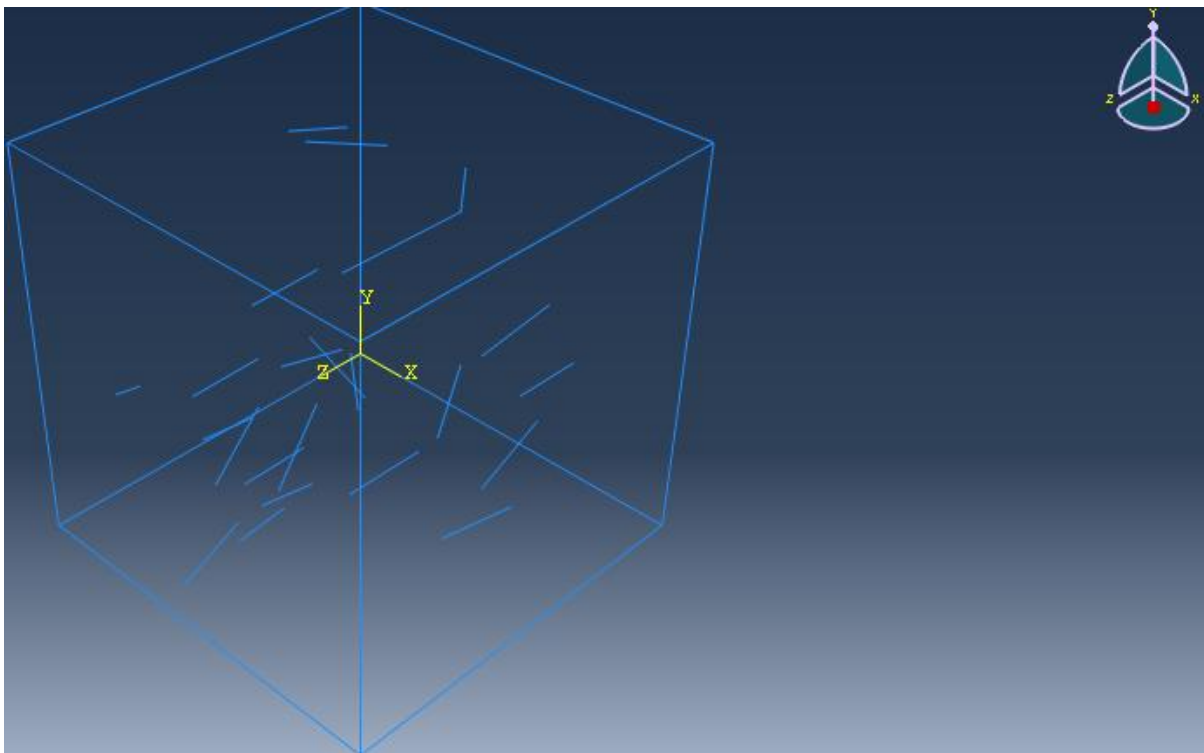
Σχήμα 2.16: Δισδιάστατη απεικόνιση στο λογισμικό πακέτο AUTOCAD ισοδύναμων δοκών EBE νανοσωλήνων άνθρακα CNTs 0.10% κ.β.



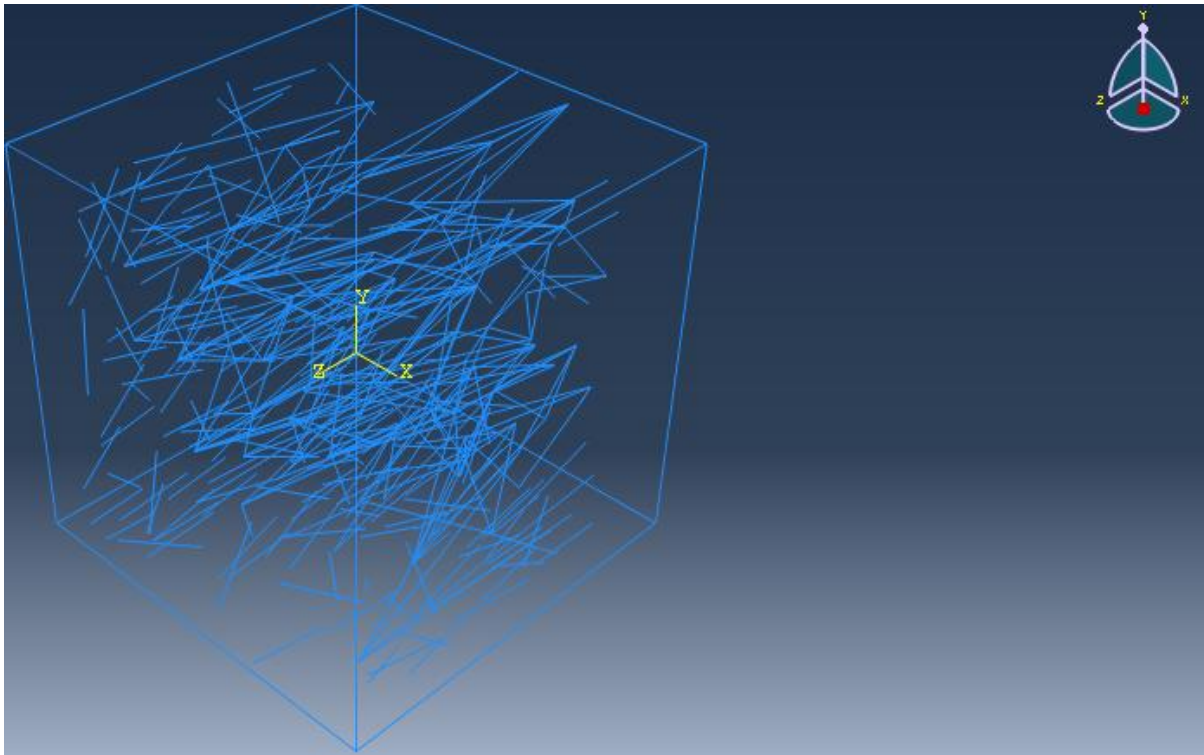
Σχήμα 2.16: Δισδιάστατη απεικόνιση στο λογισμικό πακέτο AUTOCAD ισοδύναμων δοκών EBE νανοσωλήνων άνθρακα CNTs 2.00% κ.β.



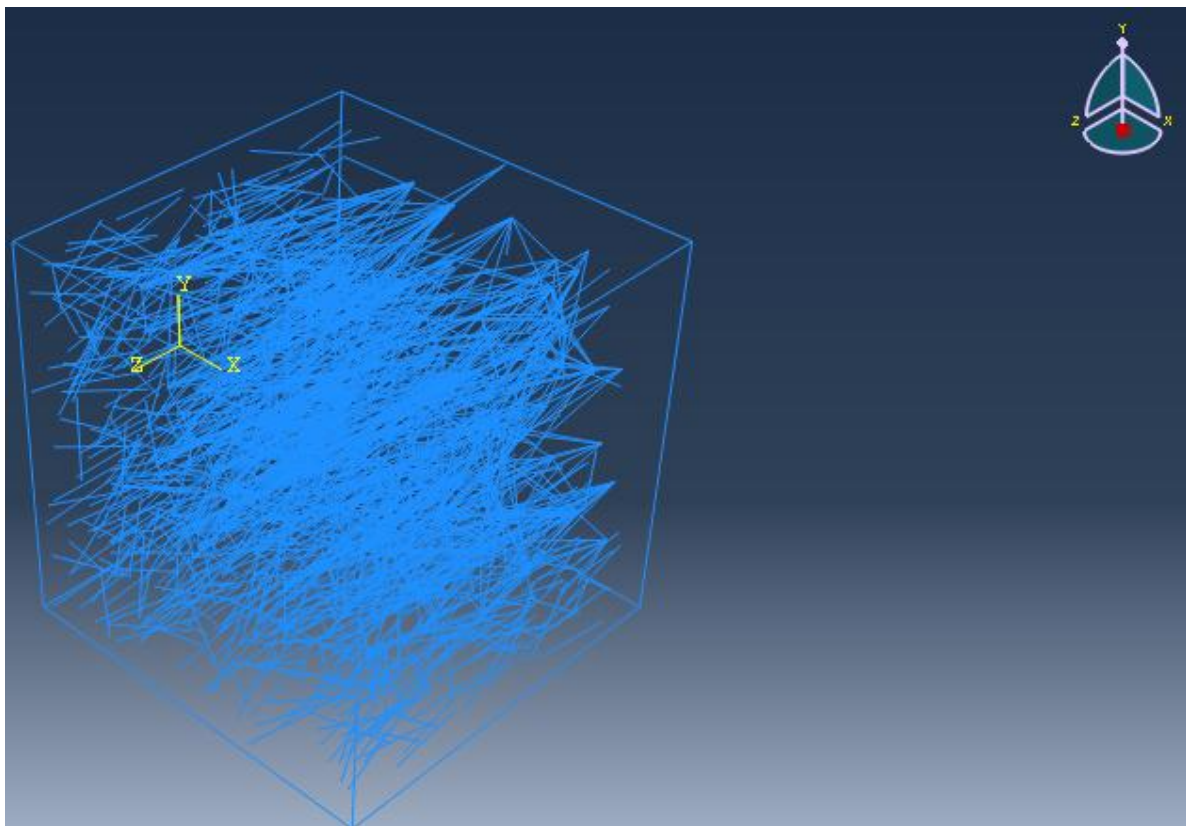
Σχήμα 2.17: Δισδιάστατη απεικόνιση στο λογισμικό πακέτο AUTOCAD ισοδύναμων δοκών ΕΒΕ νανοσωλήνων άνθρακα CNTs 10.00% κ.β.



Σχήμα 2.18: Τρισδιάστατη απεικόνιση στο λογισμικό πακέτο Abaqus ισοδύναμων δοκών ΕΒΕ νανοσωλήνων άνθρακα CNTs 0.10% κ.β.



Σχήμα 2.19: Τρισδιάστατη απεικόνιση στο λογισμικό πακέτο Abaqus ισοδύναμων δοκών EBE νανοσωλήνων άνθρακα CNTs 2.00% κ.β.



Σχήμα 2.20: Τρισδιάστατη απεικόνιση στο λογισμικό πακέτο Abaqus ισοδύναμων δοκών EBE νανοσωλήνων άνθρακα CNTs 10.00% κ.β.

2.6 Μοντέλο Θραύσης Σκυροδέματος (Concrete Damage Model)

Οι αριθμητικές προσομοιώσεις και οι διαδικασίες πρόβλεψης της θραύσης των υλικών έχουν βελτιωθεί σημαντικότερα τα τελευταία χρόνια. Η έρευνα στην θραύση του σκυροδέματος που υπόκειται σε ακραίες φορτίσεις είναι απαραίτητη για την περαιτέρω βελτίωση στην χρήση του σκυροδέματος. Έχει γίνει γενικώς αποδεκτό ότι η παραμόρφωση του σκυροδέματος συνδέεται με πολύ περίπλοκες προοδευτικές αστοχίες, που χαρακτηρίζονται από την έναρξη, την διάδοση και την συνένωση των ρωγμών του εξαιτίας της ετερογένειας του. Το συγκεκριμένο πρόβλημα έχει μελετηθεί εκτενώς από πολλούς ερευνητές όπως οι Carpinteri και Aliabadi [36], Lemaitre [37], Lemaitre και Sermage [38], Fanning και Kelly [39] ή Rots [40]. Στα προηγούμενα, χρησιμοποιούνται κλασικά μαθηματικά μοντέλα που βασίζονται στην ελαστικότητα, πλαστικότητα και την βισκοελαστικότητα για την περιγραφή της μη γραμμικής μηχανικής συμπεριφοράς του σκυροδέματος. Στις αρχές του 1970 αναπτύχθηκαν μοντέλα βασιζόμενα στην μη γραμμική θραυστομηχανική και την μηχανική του συνεχούς μέσου για την προσομοίωση η εξάπλωση των ρωγμών και την υποβάθμιση (degradation) της στιβαρότητας του υλικού σκυροδέματος. Παρόλο αυτά, αυτά τα κλασικά μοντέλα εν γένει αμελούν την ετερογένεια του σκυροδέματος θεωρώντας το ως ένα ομογενές υλικό. Αυτές του είδους οι ομογενοποιήσεις είναι ανίκανες να χαρακτηρίσουν την συνολικά διαδικασία θραύσης από την έναρξη, την διάδοση και την συνένωση των μικρορωγμών που καταλήγουν στις ρωγμές στην κλίμακα του σκυροδέματος. Ακόμα περισσότερο, αυτά τα μοντέλα δεν αντανακλούν την τυχαιότητα των ιδιοτήτων των επιμέρους κλιμάκων του σκυροδέματος και κατά συνέπεια είναι ανίκανα να κατανοήσουν τα φυσικά φαινόμενα στην αστοχία του σκυροδέματος.

Στο μοντέλο που χρησιμοποιήθηκε σε αυτήν την εργασία, η υποβάθμιση της στιβαρότητας του υλικού προτείνεται ως ισοτροπική. Συνεπώς, ο νόμος τάσεων - σ - παραμορφώσεων - ε - του ελαστοθραυστικού υλικού δίνεται ως:

$$\sigma = (1 - D) E \varepsilon \quad (2.9)$$

όπου, η παράμετρος θραύσης D κυμαίνεται από 0 στο άθικτο έως 1 στο εντελώς κατεστραμμένο από θραύση σκυρόδεμα. Η ελαστική ενέργεια ανά μονάδα μάζας δίνεται παρακάτω ως:

$$\rho \psi = \frac{1}{2} (1 - D) \varepsilon E \varepsilon \quad (2.10)$$

η οποία γίνεται η υπόθεση ότι παραμένει σταθερή. Η ενέργεια απελευθέρωσης θραύσης δίνεται από τον λόγο:

$$Y = -\rho \frac{\partial \psi}{\partial D} = \frac{1}{2} \varepsilon E \varepsilon \quad (2.11)$$

με τον λόγο της διαχεόμενης ενέργειας:

$$\dot{\phi} = -\rho \frac{\partial \psi}{\partial D} \dot{D} \quad (2.12)$$

Από την στιγμή που η διαχεόμενη ενέργεια πρέπει να είναι θετική ή μηδέν, ο λόγος θραύσης υπόκειται στην ίδια ανισότητα αφού η ενέργεια θραύσης είναι πάντα θετική.

Η εξέλιξη και πρόοδος της θραύσης βασίζεται στην ποσότητα της έκτασης της παραμόρφωσης όπου το υλικό βιώνει κατά την μηχανική καταπόνηση του. Γίνεται υπόθεση ότι η θραύση οδηγείται από την ισοδύναμη παραμόρφωση (equivalent strain) που εξαρτάται από τις τρεις κύριες παραμορφώσεις ως:

$$\tilde{\varepsilon}(\varepsilon) = \sqrt{\sum_{i=1}^3 (\langle \varepsilon_i \rangle_+)^2} \quad (2.13)$$

όπου, $\langle \cdot \rangle_+$ είναι το Macauley bracket και ε_i οι κύριες παραμορφώσεις. Η συνάρτηση φόρτισης της θραύσης είναι:

$$f(\tilde{\varepsilon}, \kappa) = \tilde{\varepsilon} - \kappa \quad (2.14)$$

όπου το κ είναι το κατώτερο όριο της ανάπτυξης της θραύσης. Αρχικώς, η τιμή του είναι το κ_0 όπου αυτό συσχετίζεται με βάση την μέγιστη τάση του υλικού σε μονοαξονικό εφελκυσμό και το μέτρο ελαστικότητας E ως:

$$\kappa_0 = \frac{f_t}{E} \quad (2.15)$$

Κατά την διάρκεια της φόρτισης το κ υποτίθεται ότι παίρνει την μέγιστη τιμή της ισοδύναμης παραμόρφωσης που επιτεύχθηκε κατά την ιστορία φόρτισης.

Έαν $f(\tilde{\varepsilon}, \kappa) = 0$ και $\dot{f}(\tilde{\varepsilon}, \kappa) = 0$, τότε: (2.16)

$$\begin{cases} D=g(\kappa) \\ \kappa=\tilde{\varepsilon} \end{cases} \text{ με } \dot{D} \geq 0 \text{ αλλιώς } \begin{cases} \dot{D}=0 \\ \dot{\kappa}=0 \end{cases} \quad (2.17)$$

Εξαιτίας της διαφοράς της μηχανικής απόκρισης του σκυροδέματος σε εφελκυσμό και θλίψη, η μεταβλητή θραύσης χωρίζεται σε δύο μέρη:

$$D = a_t D_t + a_c D_c \quad (2.18)$$

όπου, D_t και D_c είναι οι μεταβλητές θραύσης σε εφελκυσμό και θλίψη, αντίστοιχα. Συνδυάζονται με τις σταθερές βάρους a_t και a_c , που προσδιορίζονται ως συνάρτηση των αρχικών κύριων παραμορφώσεων ε_{ti} και ε_{ci} εξαιτίας των θετικών και αρνητικών τάσεων:

$$\varepsilon_t = (1 - D) E^{-1} \sigma_t \quad (2.19)$$

Και

$$\varepsilon_c = (1 - D) E^{-1} \sigma_c \quad (2.20).$$

Οι συντελεστές βάρους a_t και a_c , που χρησιμεύουν στην επιλογή του τελικού συντελεστή θραύσης D , προσδιορίζονται ως εξής:

$$\begin{aligned}
 \kappa_0 &\approx 1 \times 10^{-4} \\
 0.7 &\leq A_t \leq 1.2 \\
 10^4 &\leq B_t \leq 5 \times 10^4 \\
 1 &\leq A_c \leq 1.5 \\
 10^3 &\leq B_c \leq 2 \times 10^3 \\
 1.0 &\leq \beta \leq 1.05
 \end{aligned}$$

Σχήμα 2.21: Πίνακας χαρακτηριστικών τιμών των μεταβλητών του μοντέλου θραύσης

$$\alpha_t = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\langle \varepsilon_{ti} \rangle \langle \varepsilon_i \rangle}{\xi^2} \right)^\beta \quad (2.21)$$

και

$$\alpha_c = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\langle \varepsilon_{ci} \rangle \langle \varepsilon_c \rangle}{\xi^2} \right)^\beta \quad (2.22)$$

Σε μονοαξονικό εφελκυσμό $\alpha_t = 1$ και $\alpha_c = 0$ ενώ σε μονοαξονική θλίψη $\alpha_t = 0$ και $\alpha_c = 1$. Συνεπώς, τα D_t και D_c μπορούν να προσδιορισθούν ξεχωριστά από δοκιμές μονοαξονικής φόρτισης. Η εξέλιξη της θραύσης παρέχεται σε ολοκληρωμένη μορφή ως συνάρτηση της μεταβλητής κ :

$$D_t = 1 - \frac{\kappa_0(1-A_t)}{\kappa} - \frac{A_t}{\exp[B_t(\kappa - \kappa_0)]} \quad (2.23)$$

και

$$D_c = 1 - \frac{\kappa_0(1-A_c)}{\kappa} - \frac{A_c}{\exp[B_c(\kappa - \kappa_0)]} \quad (2.23).$$

Υπάρχουν οκτώ παράμετροι για το μοντέλο. Το μέτρο ελαστικότητας E και ο λόγος Poisson ν μετριοούνται μέσω δοκιμής μονοαξονικής θλίψης. Οι παράμετροι A και B προσαρμόζονται ώστε να ταιριάζουν στην συμπεριφορά του σκυροδέματος στο εργαστήριο. Τέλος, η τιμή της μεταβλητής β είναι συνήθως μονάδα. Στο σχήμα (2.21) φαίνονται χαρακτηριστικές τιμές αυτών των μεγεθών.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3^ο

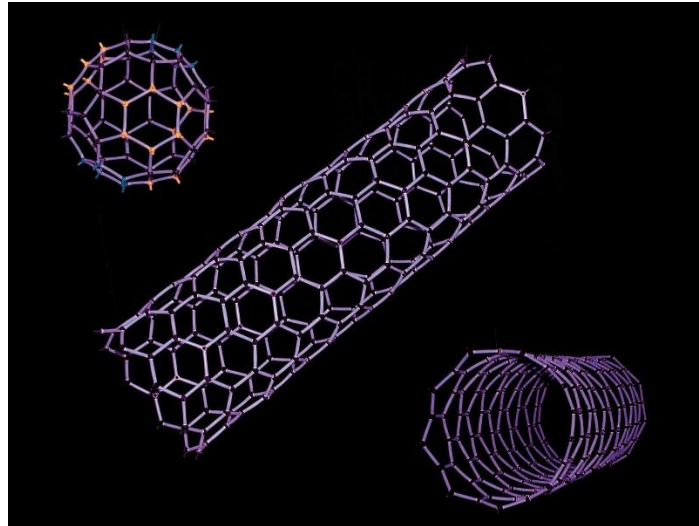
ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ

ΕΦΑΡΜΟΓΗ

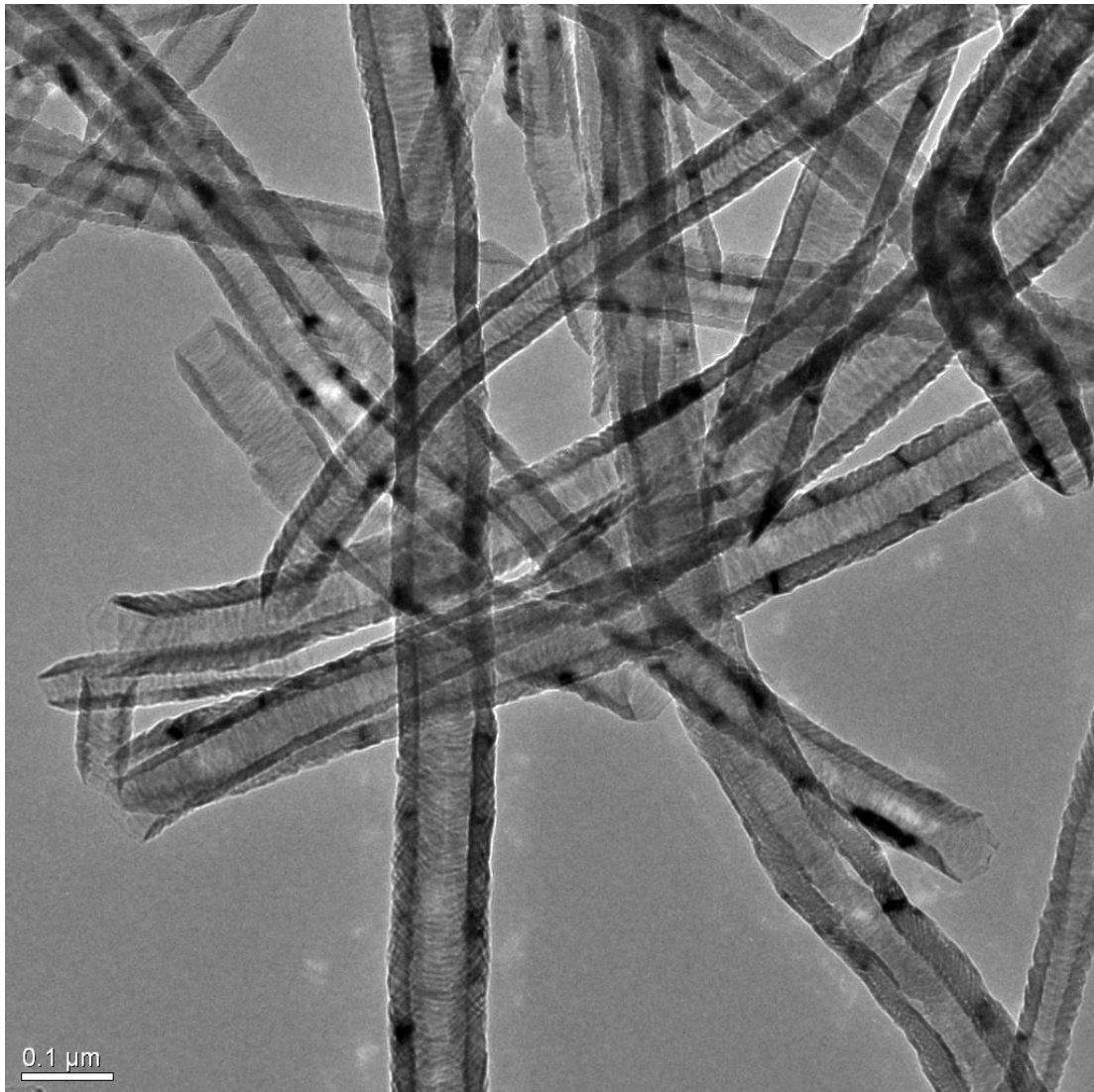
3.1 Πειραματικά αποτελέσματα μηχανικής συμπεριφοράς σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα.

Οι Musso, Tulliani, Ferro, Tagliaferro [41] προσπάθησαν να βελτιώσουν την μηχανική συμπεριφορά της τσιμεντόπαστας. Για να το πετύχουν αυτό πρόσθεσαν νανοσωλήνες άνθρακα CNTs σε ποσότητα 0,50 % κατά βάρος στην τσιμεντόπαστα. Για την ασφαλή εξαγωγή των χαρακτηριστικών των δειγμάτων χρησιμοποιήθηκαν διάφορα σύγχρονα εργαλεία πειραμάτων όπως στρεπτοσκόπιο ή ακτίχες X και ηλεκτρονικό μικροσκόπιο (σχήμα 3.1, 3.2, 3.3, 3.4). Τα αποτελέσματα ήταν ενθαρρυντικά καθώς η βελτίωση της μηχανικής συμπεριφοράς της τσιμεντόπαστας κυμάνθηκε σε ποσοστά από 13,0 έως 17,0 %. Παράλληλα, οι Makar, Margeson, Luh [42] πειραματίστηκαν με τρία διαφορετικά δείγματα τσιμεντόπαστας. Το πρώτο είχε λόγο νερού προς τσιμέντο ίσο με 0,80 ενώ τα υπόλοιπα δύο 0,50 και 0,40, αντίστοιχα. Το ποσοστό που προστέθηκαν νανοσωλήνες άνθρακα προσέγγισε την τιμή του 2,00% κατά βάρος. Οι μετρήσεις έγιναν συναρτήσει της ενυδάτωσης της τσιμεντόπαστας και ακόμα, οι μετρήσεις ελήφθησαν ανά 5 ημέρες μέχρι να σταθεροποιηθεί η συμπεριφορά του υλικού. Χρησιμοποιήθηκαν πάλι σύγχρονες συσκευές εντοπισμού αντιδράσεων του υλικού σε μηχανική καταπόνηση όπως οι προηγούμενοι ερευνητές ή άλλες καινοτόμες συσκευές όπως θερμικές κάμερες για αντίστοιχες αναλύσεις. Τα αποτελέσματα ήταν εξίσου ενθαρρυντικά (μέσω του Vickers Hardness test) καθώς η βελτίωση στην μηχανική συμπεριφορά της τσιμεντόπαστας κυμάνθηκε από 10,00% έως 20,00%. Παρατηρήθηκε όμως ότι η περαιτέρω ενυδάτωση της τσιμεντόπαστας έχει ως αποτέλεσμα να αντιστρέφονται τα θετικά αποτελέσματα των νανοσωλήνων άνθρακα. Παρόμοια έρευνα παρήγαγαν και οι Sobolkina, Mechtcherine, Khavrus, Maier, Mende, Ritschel, Leonhardt [43] με την διαφορά ότι ήταν οι μόνοι ερευνητές που μελέτησαν στο πρόβλημα στατικά αλλά και δυναμικά. Στην περίπτωση της δυναμικής φόρτισης υπήρξαν τρομερά αισιόδοξα αποτελέσματα καθώς η αύξηση της μηχανικής συμπεριφοράς ξεπέρασε το 20,00% για ποσότητα 0,25% κατά βάρος νανοσωλήνων άνθρακα. Παράλληλα υπήρξε και μια μικρή αύξηση της τάξεως του 10,00% στην μηχανική συμπεριφορά της τσιμεντόπαστας σε εφελκυσμό. Ανεπιτυχώς, δεν υπήρξε σχεδόν καθόλου βελτίωση της μηχανικής συμπεριφοράς σε στατική φόρτιση. Μάλιστα, θα μπορούσαν να ισχυριστούν οι αρθρογράφοι ότι σε κάποιες περιπτώσεις υπήρξε μείωση της αντοχής.

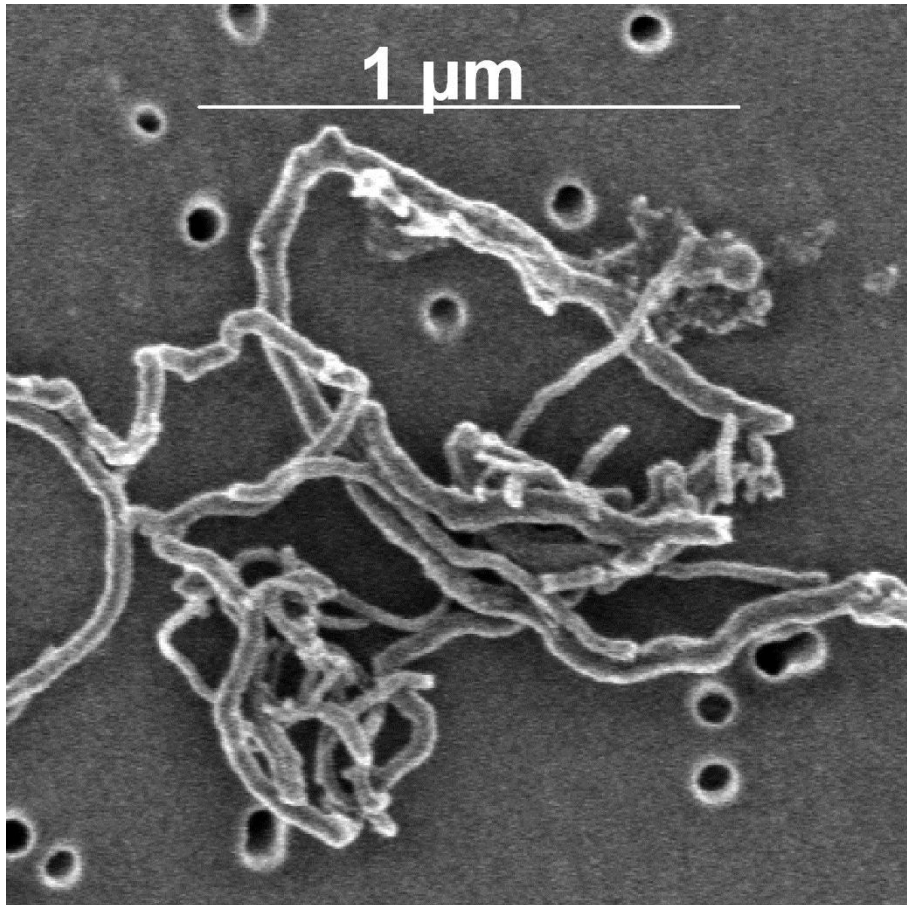
Οι νανοσωλήνες άνθρακα, που όπως μπορεί να παρατηρηθεί στις παραπάνω εργασίες, συναντώνται σε διάφορες μορφές με βάση την χημική σύνθεση τους ή την χημική συνένωση τους με την υπόλοιπη μήτρα. Αυτός είναι ο κύριος λόγος που παρατηρούνται μεγάλες αποκλίσεις ανά μελέτη αυτών σε διάφορα δημοσιευμένα επιστημονικά άρθρα. Η γνώση πάνω σε αυτό το νέο υλικό που ανακαλύφθηκε το 1991, παραμένει ελάχιστη έως ανύπαρκτη, και αυτός είναι ο λόγος της μη εφαρμογής τους στην πράξη. Παρόλο αυτά τα αποτελέσματα είναι πάντα λίγο ως πολύ αισιόδοξα και η έρευνα επί αυτών παραμένει αμείωτη. Στην παρούσα μελέτη η βελτίωση της μηχανικής συμπεριφοράς κυμάνθηκε σε ποσοστό κοντά στο 6,00% το οποίο δεν μπορεί να θεωρηθεί αδιάφορο. Βεβαίως, η μη γραμμική ανάλυση έδωσε τα αισιόδοξα αποτελέσματα. Αντίθετα, η ελαστική ανάλυση δεν



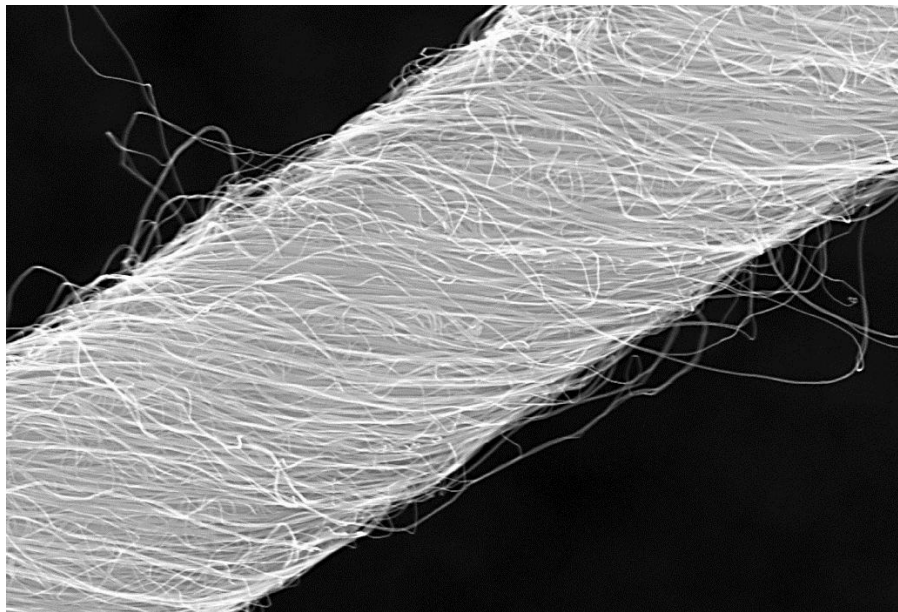
Σχήμα 3.1: Μαθηματική μοντελοποίηση των νανοσωλήνων άνθρακα



Σχήμα 3.2: Νανοσωλήνες άνθρακα όπως παρατηρούνται από ηλεκτρονικά μικροσκόπια. Φωτογραφία: Leonhardt, Leibniz Institute.



Σχήμα 3.3: Νανωσωλήνες άνθρακα μεγάλου μήκους όπως παρατηρούνται από ηλεκτρονικά μικροσκόπια.



Σχήμα 3.4: Νανωσωλήνες άνθρακα, με μεγάλο ποσοστό μεγέθυνσης, από ηλεκτρονικό μικροσκόπιο ώστε να είναι ορατή η μικροδομή τους.

έδωσε θετικά στοιχεία για την χρήση αυτών των σύνθετων υλικών. Όλα τα αποτελέσματα του σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα φαίνονται αναλυτικά με διαγράμματα και εικόνες στην συνέχεια του κεφαλαίου, ενώ σε ότι αφορά στους μεθόδους, χρησιμοποιήθηκαν κατά ακρίβεια οι μεθοδολογίες του δεύτερου κεφαλαίου.

3.2 Αριθμητικά Αποτελέσματα Ελαστικής Ανάλυσης

Για την διερεύνηση της μηχανικής βελτίωσης της τσιμεντόπαστας πραγματοποιήθηκαν μεγάλους πλήθους αναλύσεις. Αυτές οι αναλύσεις αναλόγως της διακριτοποίησης που είχαν κυμάνθηκαν χρονικά από 1 λεπτό έως και παραπάνω από 720 λεπτά, δηλαδή παραπάνω από 12 ώρες αναλύσεων. Μάλιστα στην περίπτωση των μη γραμμικών αναλύσεων με μια πολύ πυκνή διακριτοποίηση, πειστήκαμε ότι δεν γίνεται να πραγματοποιηθεί ολοκληρωμένη ανάλυση με έναν απλό οικιακό υπολογιστή, όσο κι αν σύγχρονος είναι. Αυτό συμβαίνει παρότι διατηρήθηκε το πρόβλημα σε τέσσερις διαφορετικές κλίμακες. Η τελική λύση στο πρόβλημα δόθηκε μέσω της επανάληψης πολλών πυκνών ελαστικών αναλύσεων με ένα συνεχόμενο μειούμενο μέτρο ελαστικότητας για συνεχόμενη αύξηση στην ανηγμένη παραμόρφωση. Περισσότερες λεπτομέρειες για αυτό το έξυπνο δρόμο στην μεθοδολογία δίνεται στην παράγραφο 3.3. Στην συνέχεια θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα όπως προέκυψαν από αναλύσεις στο πρόγραμμα πεπερασμένων στοιχείων Abaqus. Θα παρουσιαστούν τρεις πίνακες και τρία ραβδογράμματα. Ακόμα, θα παρουσιαστεί το τελικό ραβδόγραμμα που συγκρίνει όλα τα σκυροδέματα αναλόγως της ποσότητας κατά βάρος νανοσωλήνων άνθρακα τους. Σε κάθε ένα από τους παρακάτω πίνακες δίνεται ως υπέρτιτλος η ποσότητα νανοσωλήνων άνθρακα CNTs σε μορφή ποσοστού κατά βάρους τσιμεντόπαστας. Ο επόμενος τίτλος του πίνακα θα αναφέρεται στο λόγο κατά όγκο των αδρανών στο δοκίμιο του σκυροδέματος. Όπως έχει αναφερθεί αυτός ο λόγος επιλέχθηκε στην τιμή 60 % που αποτελεί αρκετά ρεαλιστική τιμή καθώς συνδυάζει υψηλές αντοχές σκυροδέματος και οικονομία υλικού. Στην συνέχεια πάλι σε επίπεδο στηλών, φαίνονται τέσσερις στήλες σε κάθε κλίμακα ελαστικής ανάλυσης. Η πρώτη στήλη απεικονίζει την συνολική αντίδραση της επιφάνειας έδρασης του δοκιμίου σε κάθε κλίμακα. Στην συνέχεια, η αντίδραση διαιρεμένη με την επιφάνεια της πλευράς του δοκιμίου δίνει την τάση που ασκείται στο δοκίμιο σε κατακόρυφη διεύθυνση. Στην δεύτερη κατά σειρά στήλη το μέτρο ελαστικότητας του δοκιμίου όπως προκύπτει την ανάλυση. Αυτό προκύπτει ως:

$$\frac{F}{A} = E \frac{\Delta l}{L} \quad (3.1)$$

όπου, F η αντίδραση της επιφάνειας, A το εμβαδόν της επιφάνειας, Δl η παραμόρφωση του δοκιμίου και τέλος L το μήκος της πλευράς του δοκιμίου. Στην τρίτη και τέταρτη στήλη, φαίνεται ο λόγος Poisson ν του δοκιμίου σε κάθε οριζόντια διεύθυνση. Αυτός προκύπτει ως:

$$\nu = \frac{\bar{u}_1}{\frac{\Delta l}{L}} + \frac{\bar{u}_2}{\frac{\Delta l}{L}} \quad (3.2)$$

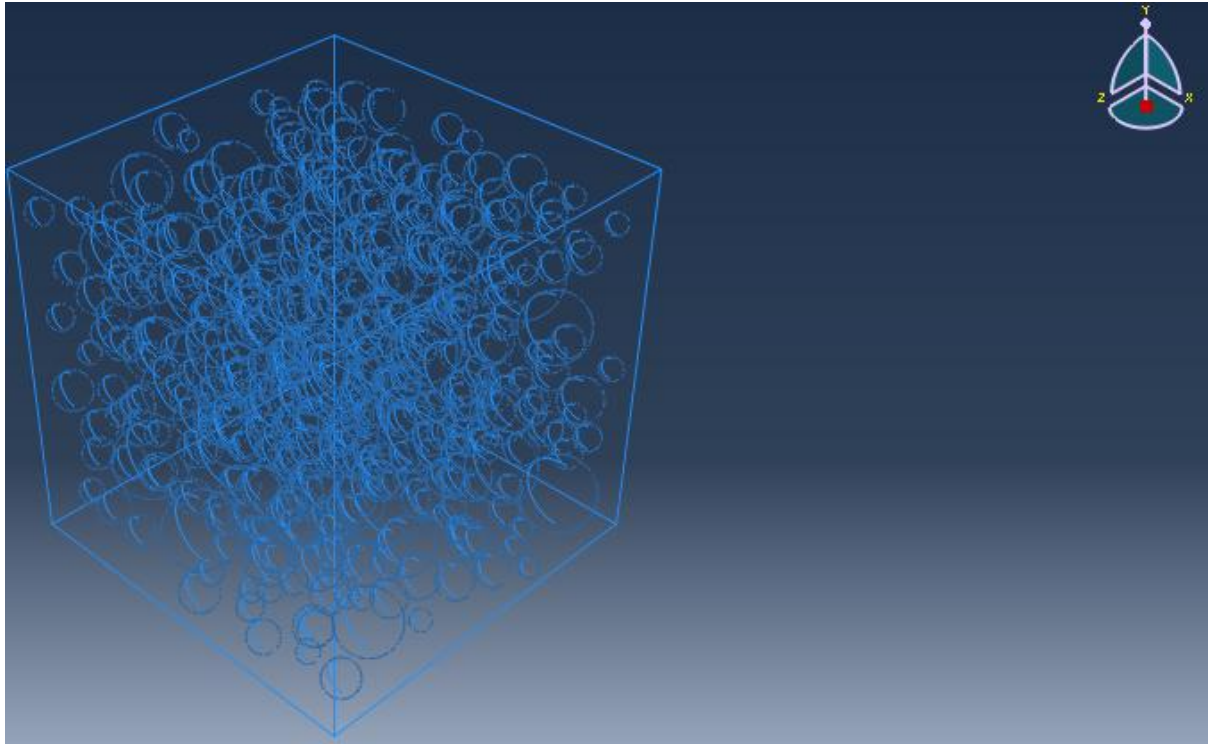
όπου, \bar{u} η μέση τιμή των μετακινήσεων σε κάθε πλευρά των δύο οριζόντιων διευθύνσεων. Η μέση τιμή των δύο λόγων Poisson, οδηγεί στον τελικό λόγο που απεικονίζεται στην πέμπτη στήλη. Τέλος, στην τελευταία στήλη υπολογίζεται με αναλυτικό τρόπο το μέτρο διάτμησης G της συγκεκριμένης ανάλυσης ως:

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (3.3)$$

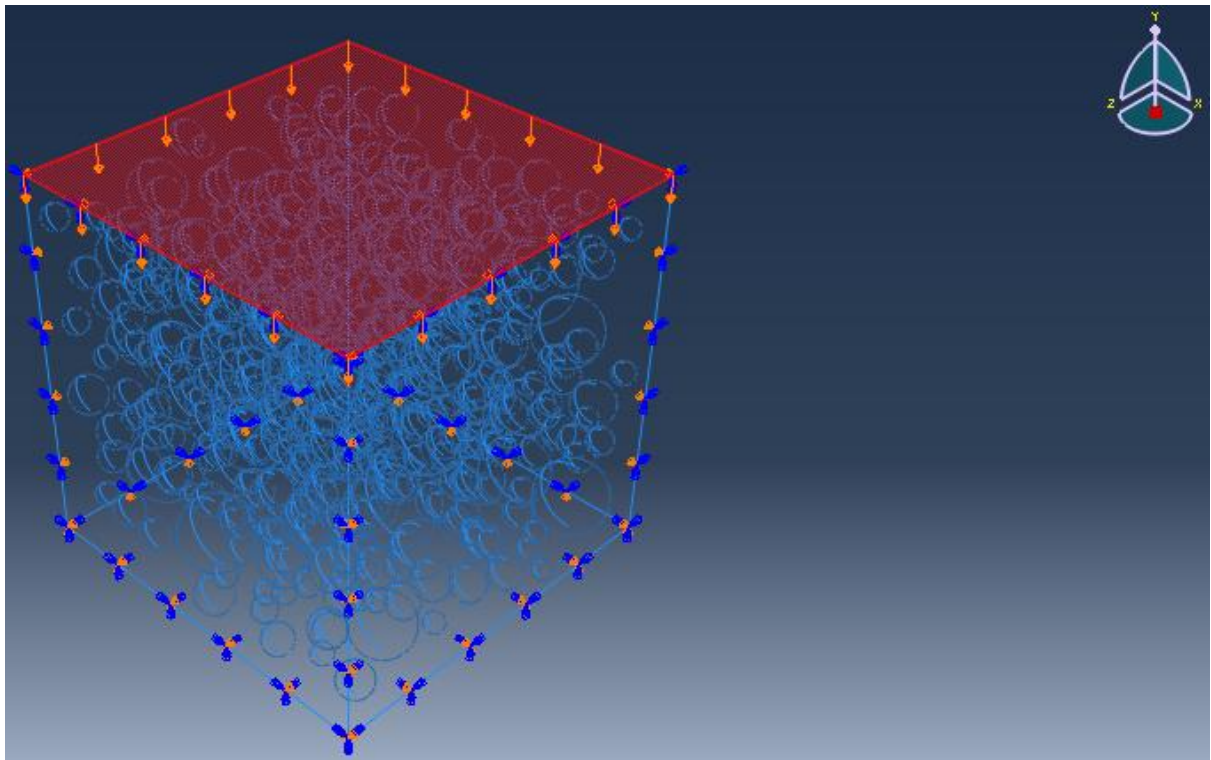
Όσον αφορά στην διακριτοποίηση κατά σειρά του πίνακα, αυτή δίνει πληροφορίες ως προς το μέγεθος της πλευράς του δοκιμίου καθώς και της μεθόδου διακριτοποίησης του πλέγματος των πεπερασμένων στοιχείων στο πρόγραμμα Abaqus. Τα ραβδογράμματα, παράλληλα και σε συνεργασία με τους πίνακες, οπτικοποιούν τα αριθμητικά αποτελέσματα για την καλύτερη εποπτεία τους. Με μπλε χρώμα στα τρία πρώτα διαγράμματα παρουσιάζονται οι κλίμακες των 1,2 μm , με πορτοκαλί των 10 mm, με γκρι χρώμα των 40 mm και τέλος με κίτρινο χρώμα απεικονίζουν τις ιδιότητες του πραγματικού δοκιμίου των 150 mm. Στο τελευταίο ραβδόγραμμα, με την ίδια σειρά χρωμάτων συγκρίνονται το σκυρόδεμα, το σκυρόδεμα ενισχυμένο με 0,10% CNTs, το σκυρόδεμα ενισχυμένο με 2,00% CNTs και τέλος το σκυρόδεμα ενισχυμένο με 10,00% CNTs. Όλα τα παραπάνω απεικονίζονται στα Σχήματα (3.1, 3.2, 3.3, 3.4, 3.5, 3.6, 3.7, 3.8, 3.9, 3.10, 3.11, 3.12).

Πιο ειδικά, στο σχήμα (3.5) παρατηρείται το αρχικό μοντέλο του δοκιμίου ως γεωμετρικό σχήμα. Στο σχήμα (3.6) φαίνονται οι συνοριακές συνθήκες στήριξης και φόρτισης του δοκιμίου. Συγκεκριμένα, στην κάτω έδρα εφαρμόστηκε συμμετρία ως προς y (δηλαδή, κύλιση ως προς y και δέσμευση στροφών κατά τους άξονες x και z) ενώ σε μία από τις δύο πλάγιες ανά διεύθυνση έδρες εφαρμόστηκε συμμετρία ως προς x (δηλαδή, κύλιση ως προς x και δέσμευση στροφών κατά τους άξονες z και y) και ως προς z (δηλαδή, κύλιση ως προς z και δέσμευση στροφών κατά τους άξονες x και y), αντίστοιχα. Τέλος, ασκήθηκε μοναδιαία μετατόπιση στην πάνω έδρα του δοκιμίου. Στο σχήμα (3.7) παρατηρείτε η διακριτοποίηση του δοκιμίου. Αναλόγως της κλίμακας, και άρα των διαστάσεων του, το πλήθος των πεπερασμένων στοιχείων κυμαίνεται από 400.000 έως 800.000. Χρησιμοποιήθηκαν, εν τέλει, τετραεδρικά στοιχεία για την μήτρα όπως και τις σφαίρες επίσης. Στο σχήμα (3.8) ξεκινά η ανάλυση του δοκιμίου στο λογισμικό πακέτο Abaqus. Στο σχήμα (3.9) παρατηρείται η παραμορφωμένη κατάσταση του δοκιμίου σε μονοαξονική θλίψη. Οι διαφορετικές αποχρώσεις αντανακλούν την διαφορετική ενταντική κατάσταση των τάσεων μέσα σε αυτό, ενώ στο σχήμα (3.10) παρατηρείτε το ίδιο μόνο για τα αδρανή. Δηλαδή, έχει αφαιρεθεί η μήτρα γραφικά ώστε να παρατηρηθεί η κατανομή των τάσεων στα αδρανή. Όπως είναι επόμενο, τα αδρανή δέχονται πολύ μεγαλύτερες τάσεων ενώ αντίθετα δέχονται πολύ μικρότερες παραμορφώσεις σε σύγκριση με την μήτρα. Αυτό είναι λογικό, καθώς στις μηχανικές καταπονήσεις στην φύση, το πιο δυνατό υλικό παραλαμβάνει το μεγαλύτερο μέρος της φόρτισης. Το ίδιο συμβαίνει και στις κατασκευές Πολιτικού μηχανικού. Στο σχήμα (3.11) παρατηρείται η κατανομή των αντιδράσεων της βάσης του δοκιμίου. Συγκεκριμένα, απεικονίζεται η αντίδραση κατά y κάθε ενός από του 441 κόμβους πεπερασμένων στοιχείων της κάτω έδρας του δοκιμίου. Στην συνέχεια η άθροιση αυτών δίνει την τελική αντίδραση στη φόρτιση του δοκιμίου,

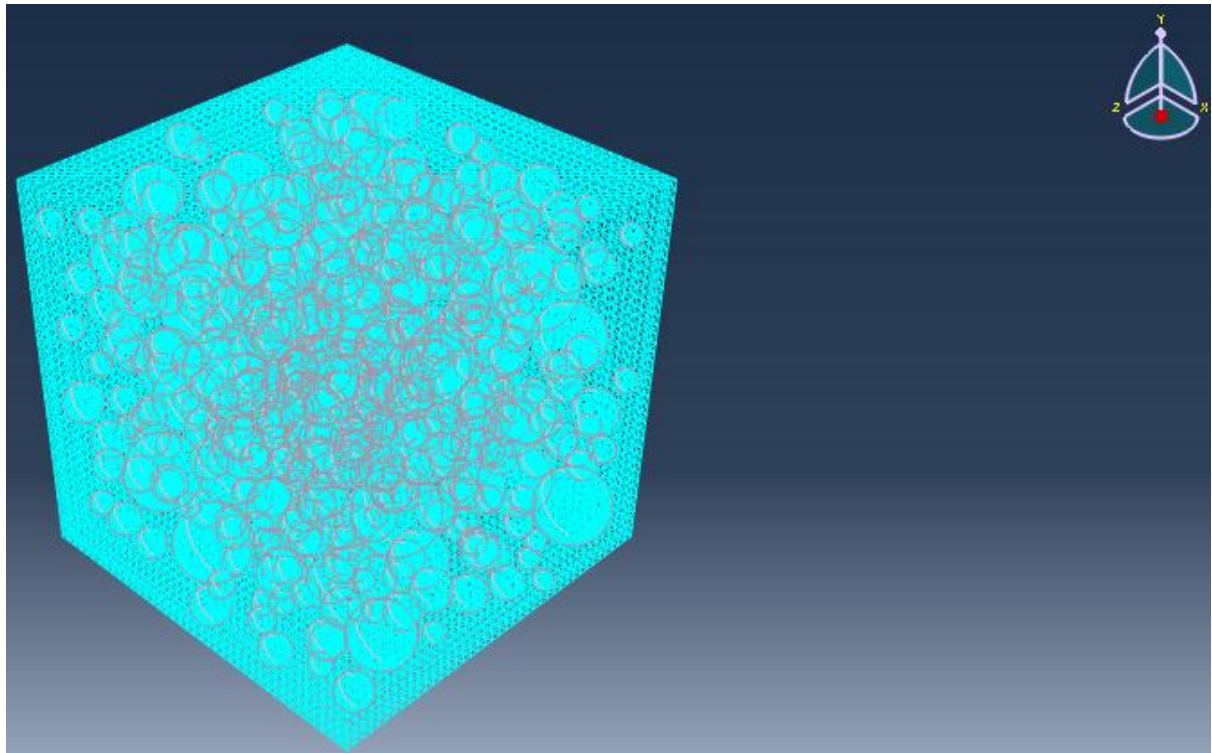
όπως διαφαίνεται στο σχήμα (3.12). Στα επόμενα τρία σχήματα απεικονίζεται οι πίνακες αποτελεσμάτων. Στο δοκίμιο σκυροδέματος ενισχυμένο 0,10 % CNTs κατά βάρος παρατηρείται συνολική αύξηση του μέτρου ελαστικότητας κατά 0,2 %, στο δοκίμιο σκυροδέματος ενισχυμένο 2,00 % CNTs κατά βάρος παρατηρείται συνολική αύξηση του μέτρου ελαστικότητας κατά 0,5 %, ενώ τέλος . στο δοκίμιο σκυροδέματος ενισχυμένο 10,00 % CNTs κατά βάρος παρατηρείται συνολική αύξηση του μέτρου ελαστικότητας κατά 4,50 %. Αυτή η πολύ μικρή αύξηση του μέτρου ελαστικότητας ήταν αναμενόμενα μη αισιόδοξη καθώς όσον αφορά στον ελαστικό κλάδο, τα δύο υλικά (τσιμεντόπαστα και ισοδύναμοι δοκοί νανοσωλήνων άνθρακα) έχουν παραπλήσιες μηχανικές ιδιότητες. Συνεπώς το αποτέλεσμα μπορεί να χαρακτηριστεί λογικό και αναμενόμενο. Υπενθυμίζεται ότι η ανάλυση των 10,00 % κατά βάρος CNTs προσομοιώνεται χωρίς πραγματικό αντίκρισμα στην πράξη. Εντυπωσιακή, αντίθετα, είναι η αύξηση του μέτρου ελαστικότητας από κλίμακα σε κλίμακα που κυμαίνεται σε 25,5 % για σκυρόδεμα ενισχυμένο με 0,10 % CNTs, 26 % για σκυρόδεμα ενισχυμένο με 2,00 % CNTs και τέλος 30 % για σκυρόδεμα ενισχυμένο με 10,00 % CNTs. Η αύξηση του μέτρου ελαστικότητας από κλίμακα σε κλίμακα οφείλεται στην προσθήκη ανά κλίμακα περισσότερων και μεγαλύτερων αδρανών που παράλληλα έχουν μεγαλύτερο μέτρο ελαστικότητας από την υπόλοιπη μήτρα. Δηλαδή, σε κάθε κλίμακα ενσωματώνονται τα αδρανή στην τσιμεντόπαστα, ενώ σε κάθε νέα κλίμακα εισάγονται και άλλα μεγαλύτερα αδρανή ώστε να ενσωματωθούν σε αυτήν την. Αυτή η διαδικασία, όπως έχει αναλυθεί σε αυτήν την εργασία ονομάζεται ομογενοποίηση και είναι η κύρια ιδέα της ανάλυσης πολλαπλών κλιμάκων. Αν δεν είχε ακολουθεί η παραπάνω διαδικασία, τότε τα αποτελέσματα θα ήταν σχεδόν ταυτόσημα για την μηχανική συμπεριφορά του δοκιμίου. Η διαφορά έγκειται στο ότι δεν θα ήταν εφικτό να επιλυθεί υπολογιστικά το πρόβλημα με έναν οικιακό υπολογιστή, όσο κι αν σύγχρονος ήταν. Στα τελευταία σχήματα απεικονίζονται γραφικώς τα παραπάνω αποτελέσματα ώστε γίνουν αντιληπτά οπτικώς σε ραβδογράμματα. Στον κατακόρυφο άξονα απεικονίζεται το μέτρο ελαστικότητας κάθε ανάλυσης. Στον οριζόντιο άξονα απεικονίζονται οι διαστάσεις του κυβικού δοκιμίου, δηλαδή η μετάβαση από κλίμακα. Στο τελευταίο σχήμα, συγκρίνονται μόνο τα τελικά αποτελέσματα των σκυροδεμάτων ενισχυμένων με νανοσωλήναν άνθρακα, δηλαδή τα αποτελέσματα των κλιμάκων 150 mm.



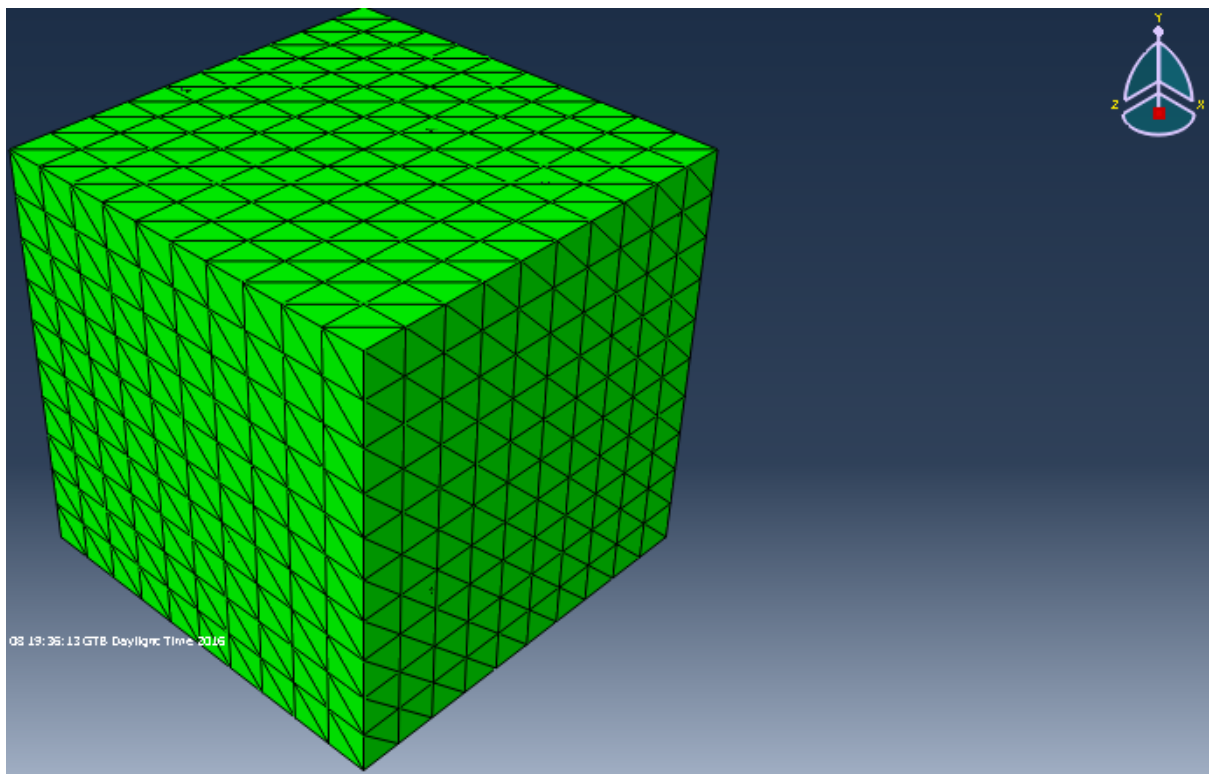
Σχήμα 3.5: Απεικόνιση μοντέλο δοκιμίου ως γεωμετρικού σχήματος.



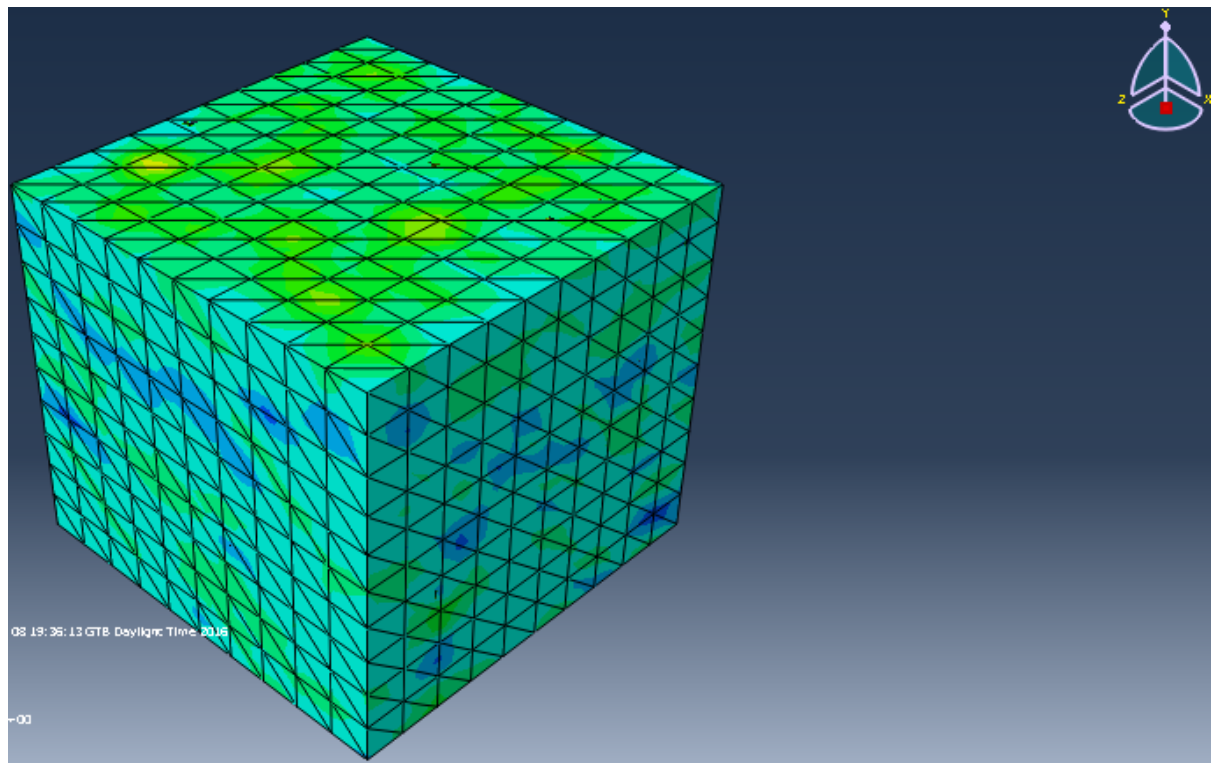
Σχήμα 3.6: Σχηματική απεικόνιση συνοριακών συνθηκών φόρτισης και στήριξης του δοκιμίου. Στην κάτω έδρα εφαρμόστηκε συμμετρία ως προς y (δηλαδή, κύλιση ως προς y και δέσμευση στροφών κατά τους άξονες x και z) ενώ σε μία από τις δύο πλάγιες ανά διεύθυνση έδρες εφαρμόστηκε συμμετρία ως προς x (δηλαδή, κύλιση ως προς x και δέσμευση στροφών κατά τους άξονες z και y) και ως προς z (δηλαδή, κύλιση ως προς z και δέσμευση στροφών κατά τους άξονες x και y), αντίστοιχα. Τέλος, ασκήθηκε μοναδιαία μετατόπιση στην πάνω έδρα του δοκιμίου.



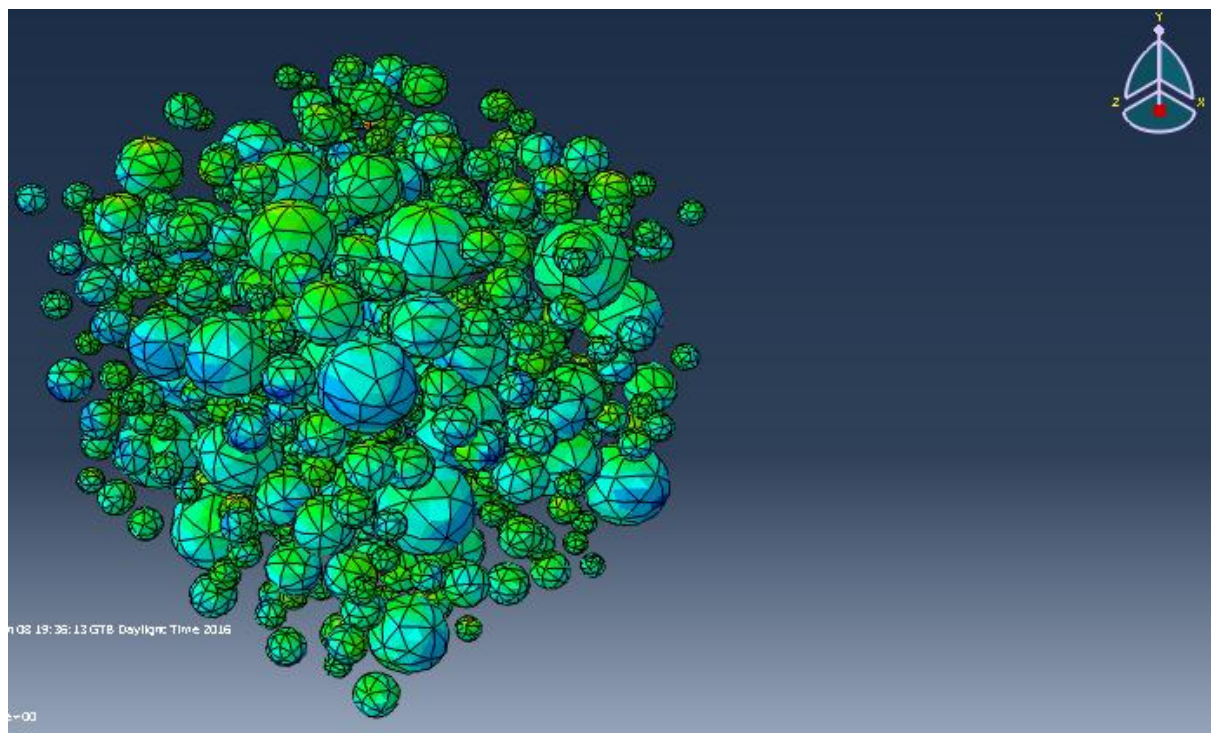
Σχήμα 3.7: Σχηματική απεικόνιση της διακτιροποίησης του δοκιμίου. Το πλήθος των πεπερασμένων στοιχείων κυμαίνεται από 400.000 έως 800.000. Χρησιμοποιήθηκαν τετραεδρικά στοιχεία για την μήτρα όπως και τις σφαίρες επίσης.



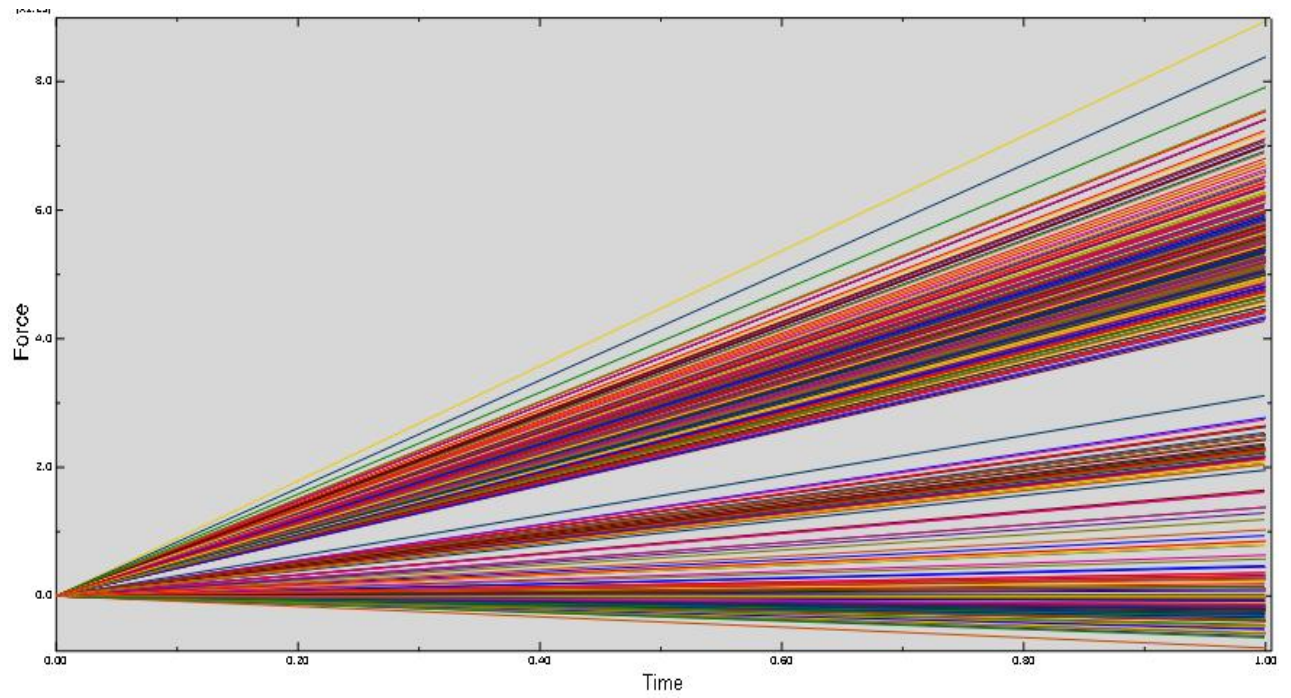
Σχήμα 3.8: Σχηματική απεικόνιση του δοκιμίου που υποβάλλεται εν τέλει σε ανάλυση στο λογισμικό πακέτο Abaqus.



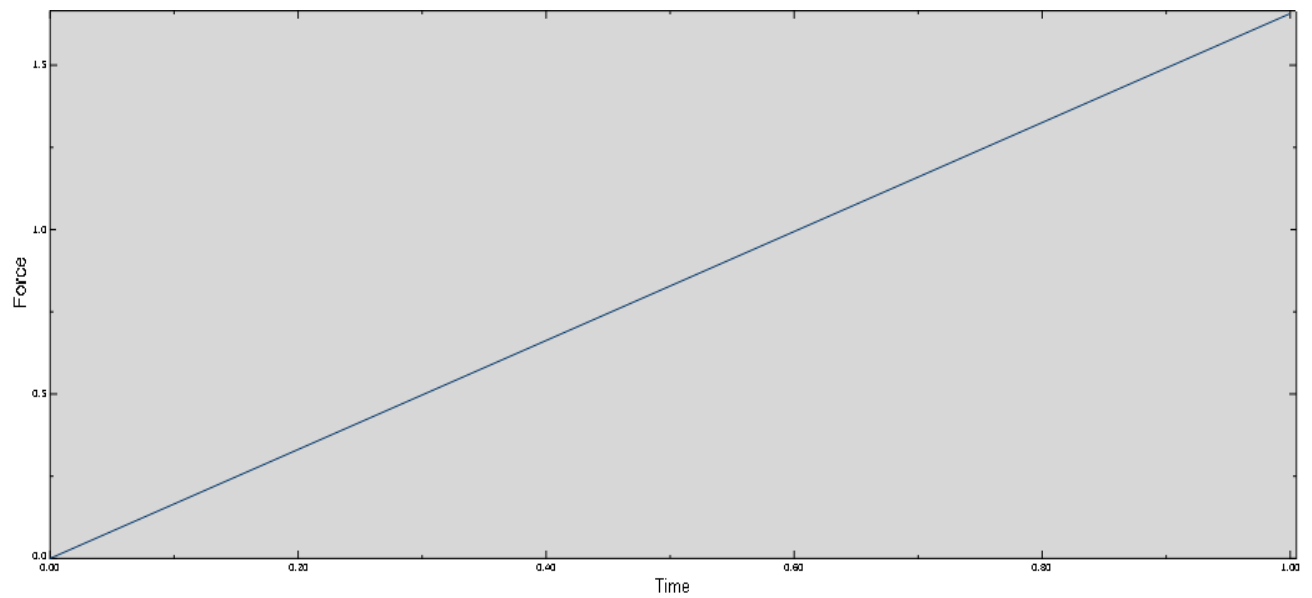
Σχήμα 3.9: Σχηματική απεικόνιση της παραμορφωμένης κατάστασης του δοκιμίου σε μονοαξονική θλίψη.



Σχήμα 3.10: Σχηματική απεικόνιση της παραμορφωμένης κατάστασης για τα αδρανή. Έχει αφαιρεθεί η μήτρα γραφικά ώστε να παρατηρηθεί η κατανομή των τάσεων μόνο στα αδρανή.



Σχήμα 3.11: Σχηματική απεικόνιση σε διάγραμμα χρόνου – αντίδρασης η κατανομή των αντιδράσεων της βάσης του δοκιμίου. Συγκεκριμένα, απεικονίζεται η αντίδραση κατά γ κάθε ενός από του 441 κόμβους πεπερασμένων στοιχείων της κάτω έδρας του δοκιμίου.



Σχήμα 3.12: Σχηματική απεικόνιση σε διάγραμμα χρόνου – αντίδρασης της άθροισης των επιμέρους αντιδράσεων των πεπερασμένων στοιχείων στην φόρτιση του δοκιμίου.

Wf = 0,1%						
Scale 1.2μm	U = 60%					
	F(N)	E (GPa)	v1	v2	v	G(Gpa)
Embedded	3,3004E-05	27,96	0,215033	0,214871	0,214952	12,62
Scale 10mm						
	U = 60%					
	F(N)	E (GPa)	v1	v2	v	G(Gpa)
Real Mesh	292400	29,24	0,21584	0,22017	0,218005	13,18
Scale 40mm						
	U = 60%					
	F(N)	E (GPa)	v1	v2	v	G(Gpa)
Real Mesh	1288684	32,22	0,21859	0,22311	0,22085	14,51
Scale 150mm						
	U = 60%					
	F(N)	E (GPa)	v1	v2	v	G(Gpa)
Real Mesh	5280427	35,20	0,22106	0,22549	0,223275	15,83

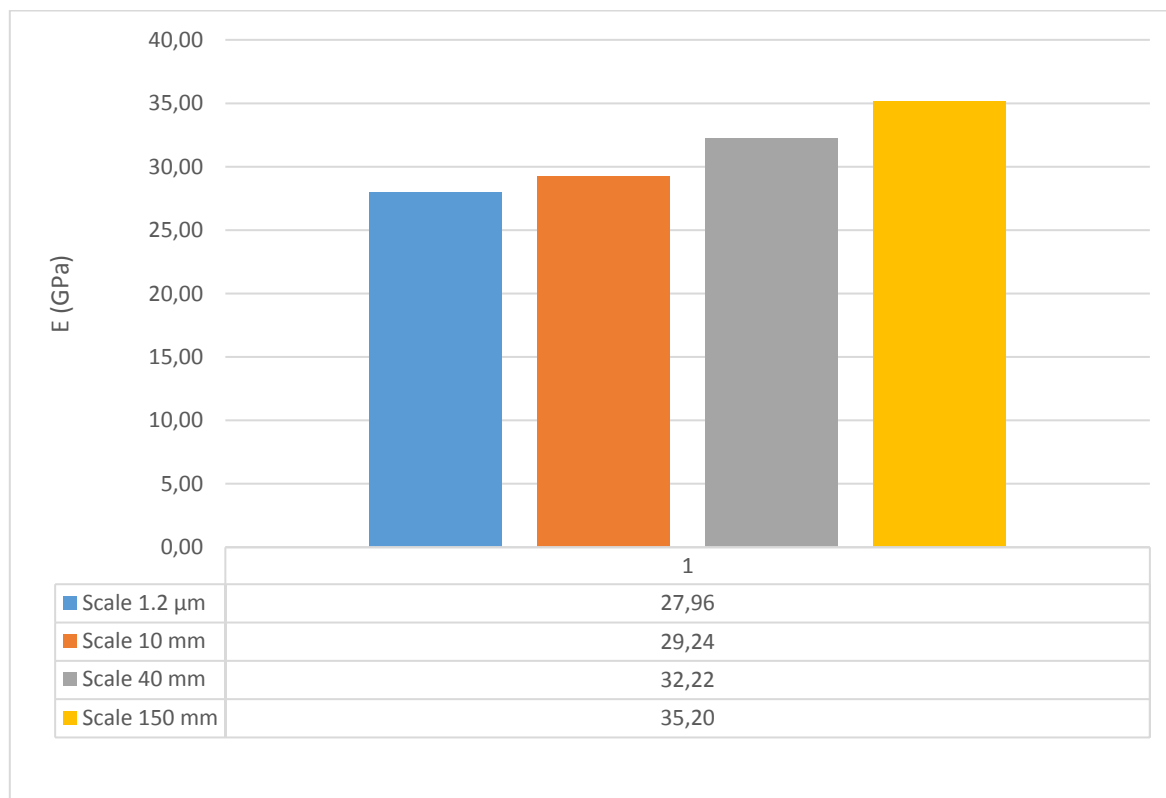
Σχήμα 3.13: Πίνακας αποτελεσμάτων ελαστικής ανάλυσης δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 0.10 % κατά βάρος ανά κλίμακα.

Wf = 2,00%						
Scale 1.2μm	U = 60%					
	F(N)	E (GPa)	v1	v2	v	G(Gpa)
Embedded	3,3094E-05	28,04	0,215816	0,211411	0,21361	12,67
Scale 10mm						
	U = 60%					
	F(N)	E (GPa)	v1	v2	v	G(Gpa)
Real Mesh	293327	29,33	0,216626	0,216623	0,21662	13,23
Scale 40mm						
	U = 60%					
	F(N)	E (GPa)	v1	v2	v	G(Gpa)
Real Mesh	1292770	32,32	0,219386	0,219649	0,21952	14,56
Scale 150mm						
	U = 60%					
	F(N)	E (GPa)	v1	v2	v	G(Gpa)
Real Mesh	5297170	35,31	0,221865	0,221991	0,22193	15,89

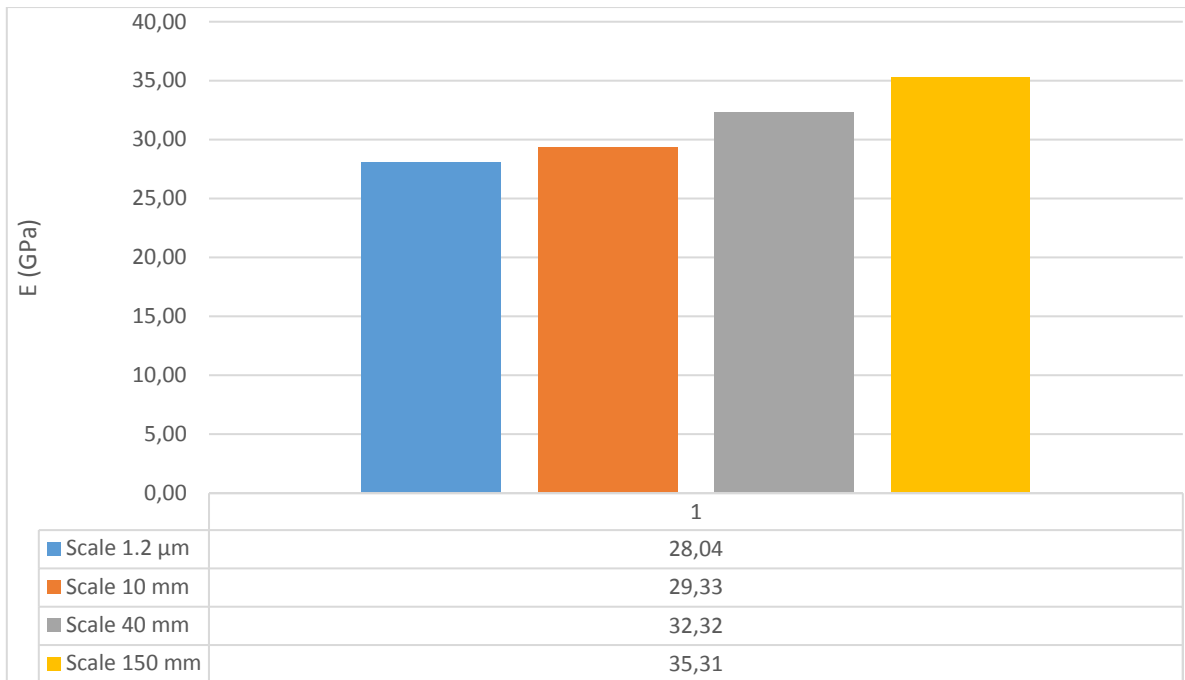
Σχήμα 3.14: Πίνακας αποτελεσμάτων ελαστικής ανάλυσης δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 2.00 % κατά βάρος ανά κλίμακα.

Wf = 10,00%						
Scale	U = 60%					
1.2μm	F(N)	E (GPa)	v1	v2	v	G(Gpa)
Embedded	3,3406E-05	28,30	0,218613	0,198737	0,208675	12,81
Scale	U = 60%					
10mm	F(N)	E (GPa)	v1	v2	v	G(Gpa)
Real Mesh	300040	30,00	0,219433	0,20364	0,2115365	13,57
Scale	U = 60%					
40mm	F(N)	E (GPa)	v1	v2	v	G(Gpa)
Real Mesh	1344356	33,61	0,222222	0,20636	0,214291	15,18
Scale	U = 60%					
150mm	F(N)	E (GPa)	v1	v2	v	G(Gpa)
Real Mesh	5508545	36,72	0,224733	0,20856	0,2166465	16,57

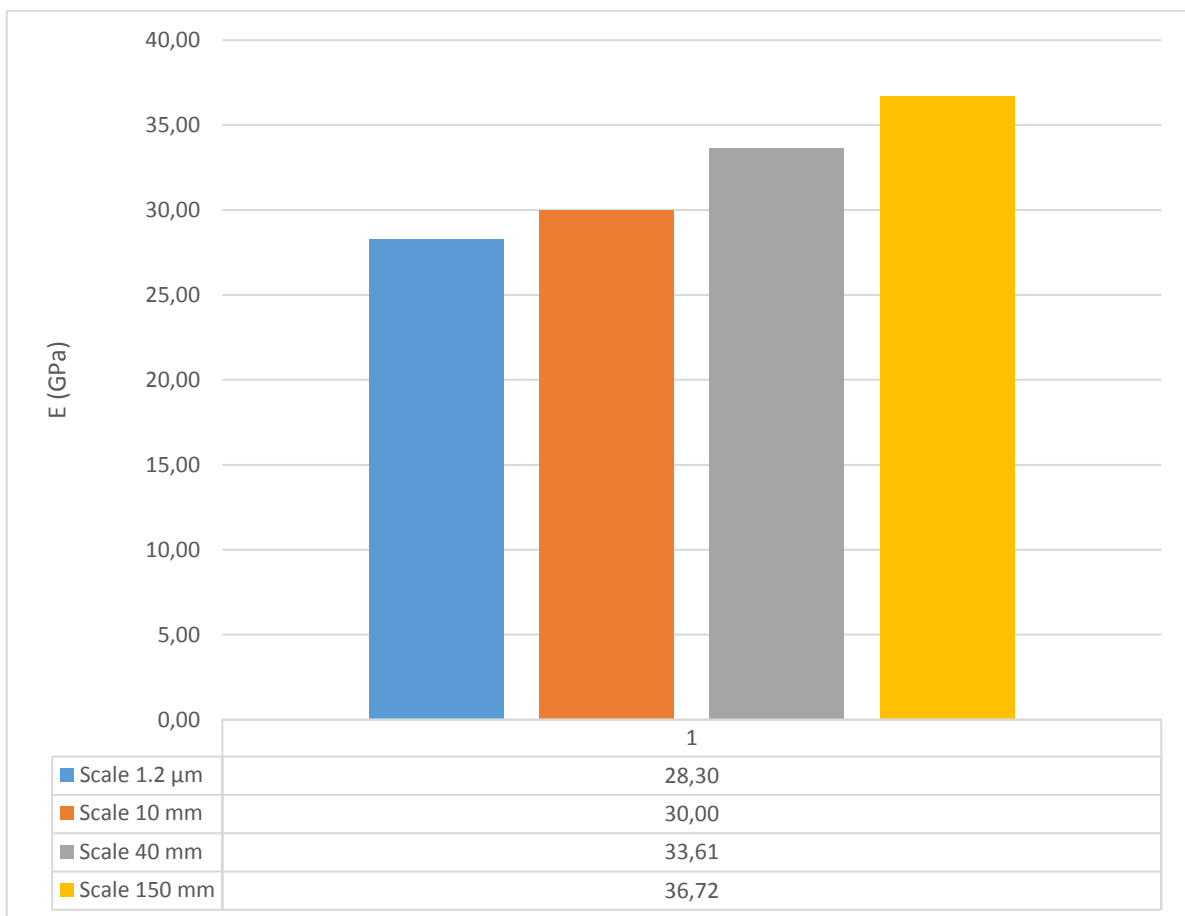
Σχήμα 3.15: Πίνακας αποτελεσμάτων ελαστικής ανάλυσης δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 10.00 % κατά βάρος ανά κλίμακα.



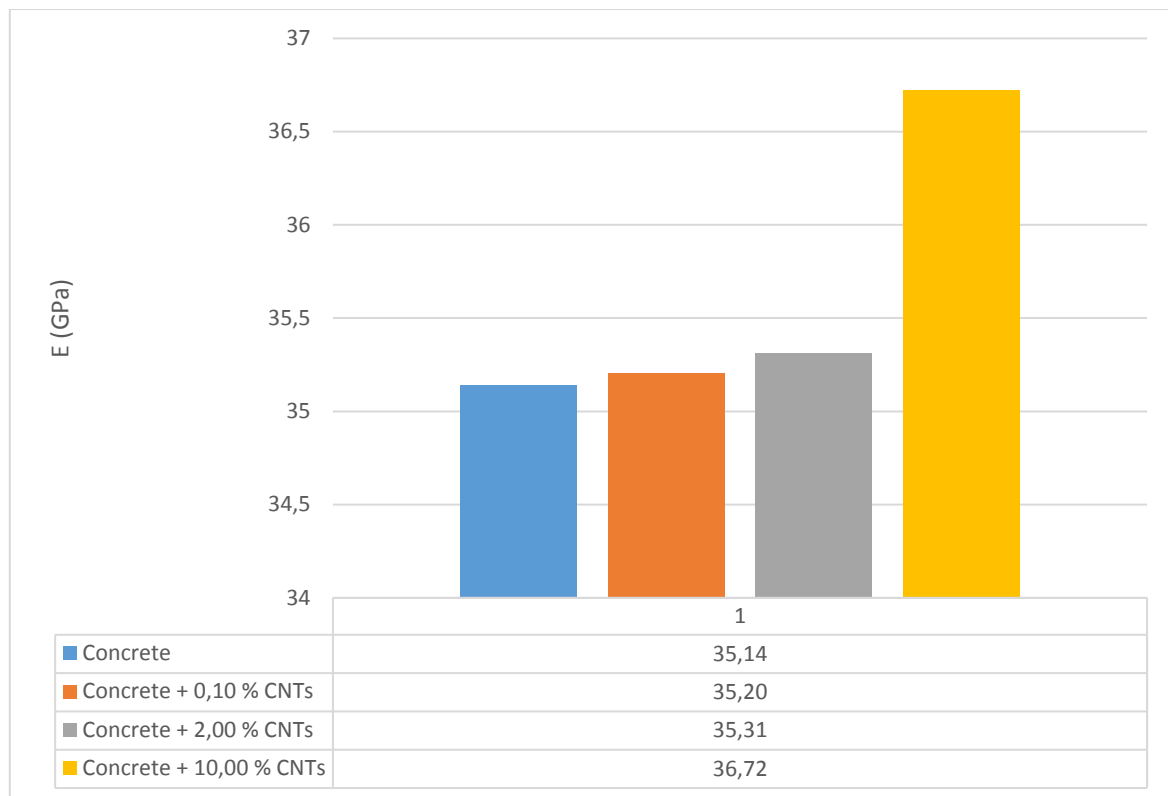
Σχήμα 3.16: Ραβδόγραμμα αποτελεσμάτων ελαστικής ανάλυσης δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 0.10 % κατά βάρος ανά κλίμακα.



Σχήμα 3.17: Ραβδόγραμμα αποτελεσμάτων ελαστικής ανάλυσης δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 2.00 % κατά βάρος ανά κλίμακα.



Σχήμα 3.18: Ραβδόγραμμα αποτελεσμάτων ελαστικής ανάλυσης δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 10.00 % κατά βάρος ανά κλίμακα.



Σχήμα 3.19: Ραβδόγραμμα αποτελεσμάτων ελαστικής ανάλυσης δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 0.00 %, 0.10 %, 2.00 % & 10.00 % κατά βάρος στην πραγματική κλίμακα του δοκιμίου των 150 mm.

3.3 Μεθοδολογία Μετάβασης Μη Ελαστικής Ανάλυσης από Κλίμακα σε Κλίμακα και Αριθμητική Εφαρμογή.

Οι μέχρι τώρα αναλύσεις αναφέρονται σε αποκλειστικά ελαστικές – γραμμικές αναλύσεις. Για την επίλυση του μη γραμμικού προβλήματος, που αντιστοιχεί στο πραγματικό ενδιαφέρον για την έρευνα των νανοσωλήνων άνθρακα, έχει γίνει αναφορά στην παράγραφο (1.6) όπου δόθηκε το πρώτο έναυσμα στο τι σημαίνει μη γραμμική ανάλυση και πως μαθηματικοποιείται, όπως και στην παράγραφο (2.6) όπου αναλύθηκε εκτενώς το μοντέλο θραύσης (damage model) του Wriggers [24]. Η τελική λύση που δόθηκε είναι ένας συνδυασμός των πάνω δύο. Δηλαδή, χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο θραύσης επί της τσιμεντόπαστας σε συνεργασία με ένα συνεχώς μειούμενο μέτρο ελαστικότητας E . Η διαδικασία έγινε σταδιακά με συνεχόμενες ελαστικές αναλύσεις. Συγκεκριμένα, σε κάθε νέα ανηγμένη παραμόρφωση της τσιμεντόπαστας αντιστοιχείται ένα μέτρο ελαστικότητας E κατά Wriggers. Στην συνέχεια αφού εισάγουμε CNTs ή αδρανή κατά περίπτωση αυτό το μέτρο ελαστικότητας αυξάνεται. Συνεπώς, το μέτρο ελαστικότητας για κάθε ανηγμένη παραμόρφωση μεγαλώνει. Στην συνέχεια προσθέτουμε επιπλέον αδρανή και ξεκινάμε την διαδικασία από την αρχή έχοντας ως αρχικά μέτρα ελαστικότητας τα βελτιωμένα του προηγούμενου βήματος. Συνεχίζεται αυτή η διαδικασία έως ότου τοποθετηθούν τα αδρανή και τα CNTs όλων των κλιμάκων. Είναι εύλογο απορίας, το πως καταλήγουμε σε μια ελαστο-πλαστικο-θραυστική καμπύλη αφού το υλικό έχει δεχθεί μόνο ελαστικές παραμορφώσεις. Αυτό στην πραγματικότητα δε θα ήταν σωστό, καθώς όπως είναι γνωστό οι πλαστικές παραμορφώσεις διαφέρουν πολύ ως προς την παραμόρφωση αλλά και ενέργεια που χάνει το υλικό κατά την φόρτιση. Συνεπώς δεν μπορούμε να

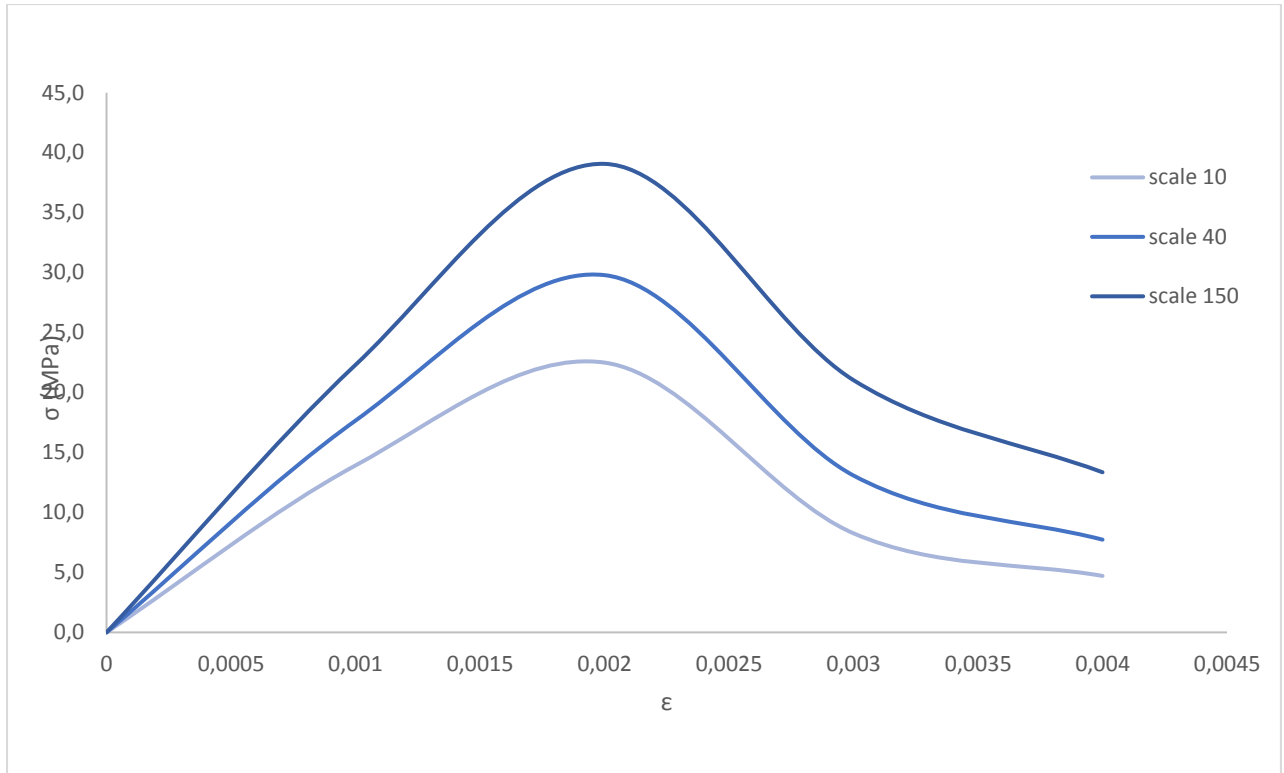
προσομοιάσουμε κανένα πρόβλημα με επιμέρους ελαστικές αναλύσεις. Η διαφορά σε αυτήν την περίπτωση είναι ότι το μοντέλο θραύσης του Wriggers έχει κτιστεί με αυτήν την μεθοδολογία. Δηλαδή, το μοντέλο λειτουργεί υπό συνεχόμενες ελαστικές αναλύσεις και έχει προσαρμοσθεί κατάλληλα ώστε να αποτελέσματα να ταιριάζουν με πραγματικά, δηλαδή με πειραματικά. Συνεπώς, η μεθοδολογία επίλυσης της μη γραμμικής ανάλυσης ανταποκρίνεται στην πραγματικότητα και έχει καταφέρει να αιχμαλωτίσει τα φυσικά φαινόμενα της μηχανικής που λαμβάνουν χώρα. Τα παραπάνω αποδεικνύονται και επιβεβαιώνονται και από τα τελικά αποτελέσματα που συμφωνούν με τα πειραματικά δεδομένα.

Η παραπάνω μεθοδολογία εφαρμόστηκε σε δοκίμια από σκυροδέμα ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 0,00 %, σκυροδέματα ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 2,00 %, σκυροδέματα ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 10,00 %. Η ανάλυση έγινε για φορτίσεις μονοαξονικής θλίψης και μονοαξονικού εφελκυσμού με ακριβώς ίδιες συννοριακές συνθήκες της παράγραφου (3.2). Στο σχήμα (3.20) παρατηρείται η ανά κλίμακα μετάβαση της μη γραμμικής συμπεριφοράς του δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 0,00 % σε μονοαξονική θλίψη. Η βελτίωση της μέγιστης τάση του δοκιμίου πριν την έναρξη των διαδικασιών ρωγμάτωσης και θραύσης ξεπέρασε το 73 %. Ακόμα, στο σχήμα (3.21) παρατηρείται η ανά κλίμακα μετάβαση της μη γραμμικής συμπεριφοράς του δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 2,00 % σε μονοαξονική θλίψη. Η βελτίωση της μέγιστης τάση του δοκιμίου πριν την έναρξη των διαδικασιών ρωγμάτωσης και θραύσης ξεπέρασε το 78 %. Στο σχήμα (3.22) παρατηρείται η ανά κλίμακα μετάβαση της μη γραμμικής συμπεριφοράς του δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 10,00 % σε μονοαξονική θλίψη. Η βελτίωση της μέγιστης τάση του δοκιμίου πριν την έναρξη των διαδικασιών ρωγμάτωσης και θραύσης ξεπέρασε το 95 %. Τα παραπάνω αποτελέσματα οφείλονται ταυτόχρονα σε τρεις παράγοντες:

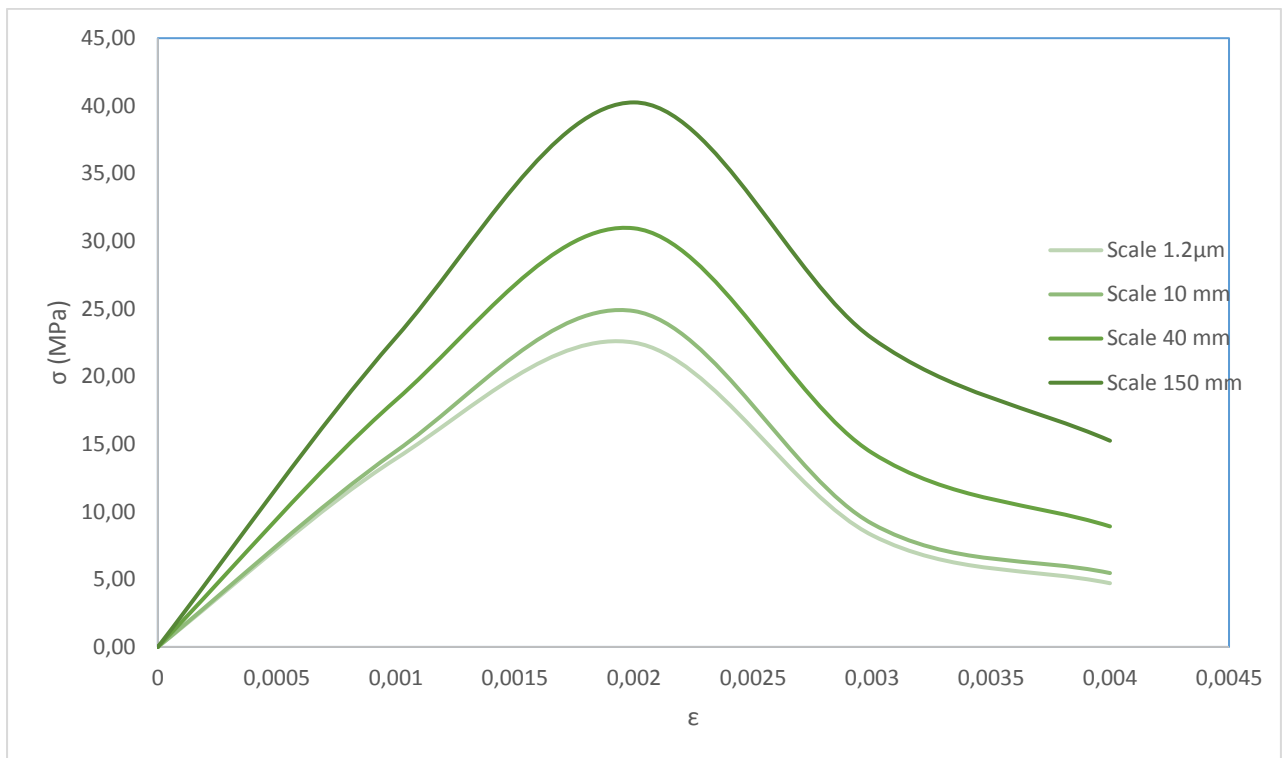
- Αύξηση γεωμετρίας διαστάσεων δοκιμίου
- Προσθήκη περισσότερων και μεγαλύτερων αδρανών
- Προσθήκη νανοσωλήνων άνθρακα CNTs.

Αντίθετα, στο σχήμα (3.23) παρατηρείται η ανά κλίμακα μετάβαση της μη γραμμικής συμπεριφοράς του δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 0,00 % σε μονοαξονικό εφελκυσμό. Η βελτίωση της μέγιστης τάσης του δοκιμίου πριν την έναρξη των διαδικασιών ρωγμάτωσης και θραύσης ξεπέρασε το 41 %. Ήδη γίνεται ορατό, όπως θα φανεί και στην συνέχεια ότι στον εφελκυσμό δεν υπάρχουν τόσο εντυπωσιακά αποτελέσματα τόσο ανά κλίμακα και κυρίως όσο αφορά στους νανοσωλήνες άνθρακα που η συνεισφορά τους είναι σχεδόν αμελητέα. Αυτό οφείλεται στο ότι η δομή του σκυροδέματος καταρρέει άμεσα σε εφελκυσμό και δεν δίνει την δυνατότητα στους νανοσωλήνες να παραλάβουν οποιοδήποτε φορτίο. Αν χρειαζόταν να επιτευχθεί αυτό, έπρεπε να πακτώνονται ή να αγκυρώνονται εξωτερικά τα CNTs ώστε να μπορούν να μεταφέρουν φορτίο, κάτι που προφανώς δεν γίνεται. Παρόμοια λογικά έχει το οπλισμένο σκυρόδεμα όπου χάλυβας πρέπει οπωσδήποτε να αγκυρωθεί ώστε να συμβάλλει κατά τις

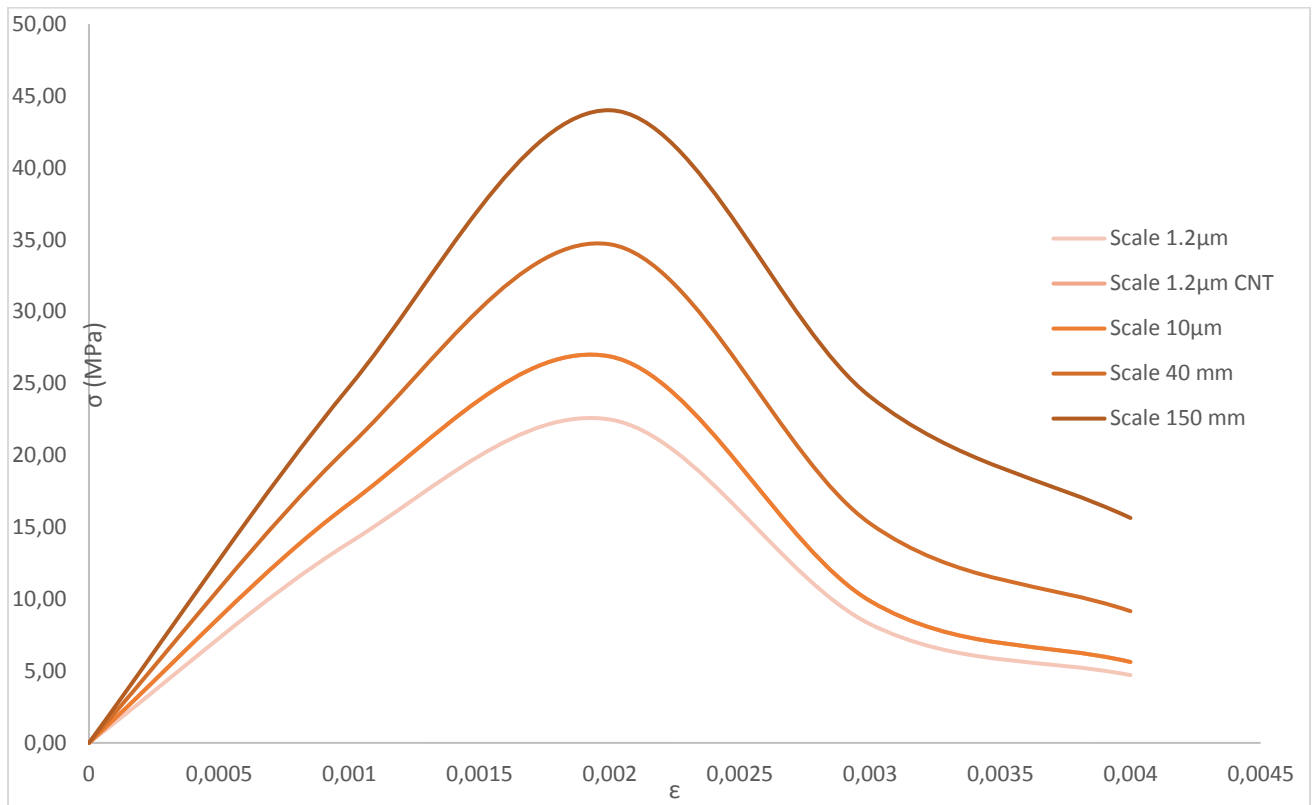
εφελκυστικές τάσεις. Στο σχήμα (3,24) παρατηρείται η ανά κλίμακα μετάβαση της μη γραμμικής συμπεριφοράς του δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 2,00 % σε μονοαξονικό εφελκυσμό. Η βελτίωση της μέγιστης τάση του δοκιμίου πριν την έναρξη των διαδικασιών ρωγμάτωσης και θραύσης ξεπέρασε το 42 %. Με βάση αυτό το αποτέλεσμα, επιβεβαιώνονται οι παραπάνω παρατηρήσεις. Σημαντική λεπτομέρεια είναι ότι οι νανοσωλήνες άνθρακα κατά 2,00 % προσέδωσαν μόνο 1 % διαφορά στην βελτίωση ανά κλίμακα σε μονοαξονικό εφελκυσμό. Τέλος, στο σχήμα (3.25) παρατηρείται η ανά κλίμακα μετάβαση της μη γραμμικής συμπεριφοράς του δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 10,00 % σε μονοαξονικό εφελκυσμό. Η βελτίωση της μέγιστης τάση του δοκιμίου πριν την έναρξη των διαδικασιών ρωγμάτωσης και θραύσης ξεπέρασε το 44 %. Πάλι, οι νανοσωλήνες άνθρακα κατά 10,00 % προσέδωσαν μόνο 3 % διαφορά στην βελτίωση ανά κλίμακα σε μονοαξονικό εφελκυσμό. Με βάση τα παραπάνω γίνεται αντιληπτό ότι αμελείτε ολοσχερώς η συμβολή των νανοσωλήνων άνθρακα CNTs στην βελτίωση της εφελκυστικής ικανότητας του σκυροδέματος, όχι όμως και της θλιπτικής ικανότητας. Βέβαια, στον σχεδιαστή πολιτικό μηχανικό η εφελκυστική ικανότητα του σκυροδέματος έχει ήδη γίνει αδιάφορη καθώς ο μελετητής θεωρεί ότι οι εφελκυστικές τάσεις σε κατασκευές πολιτικού μηχανικού από οπλισμένο σκυρόδεμα παραλαμβάνουν από κατάλληλα διαμορφωμένους χαλύβδινες ράβδους. Συνεπώς, και σε περίπτωση σημαντικής βελτίωσης στο πείραμα μονοαξονικού εφελκυσμού, δεν θα γινόταν να γίνει ο ισχυρισμός των αισιόδοξων ερευνητικών αποτελεσμάτων. Με μεγαλύτερη ακρίβεια και ειδικά, με σύγκριση του σκυροδέματος όλων των ενισχύσεων στην τελική κλίμακα των 150 mm θα φανούν τα αποτελέσματα στην επόμενη παράγραφο.



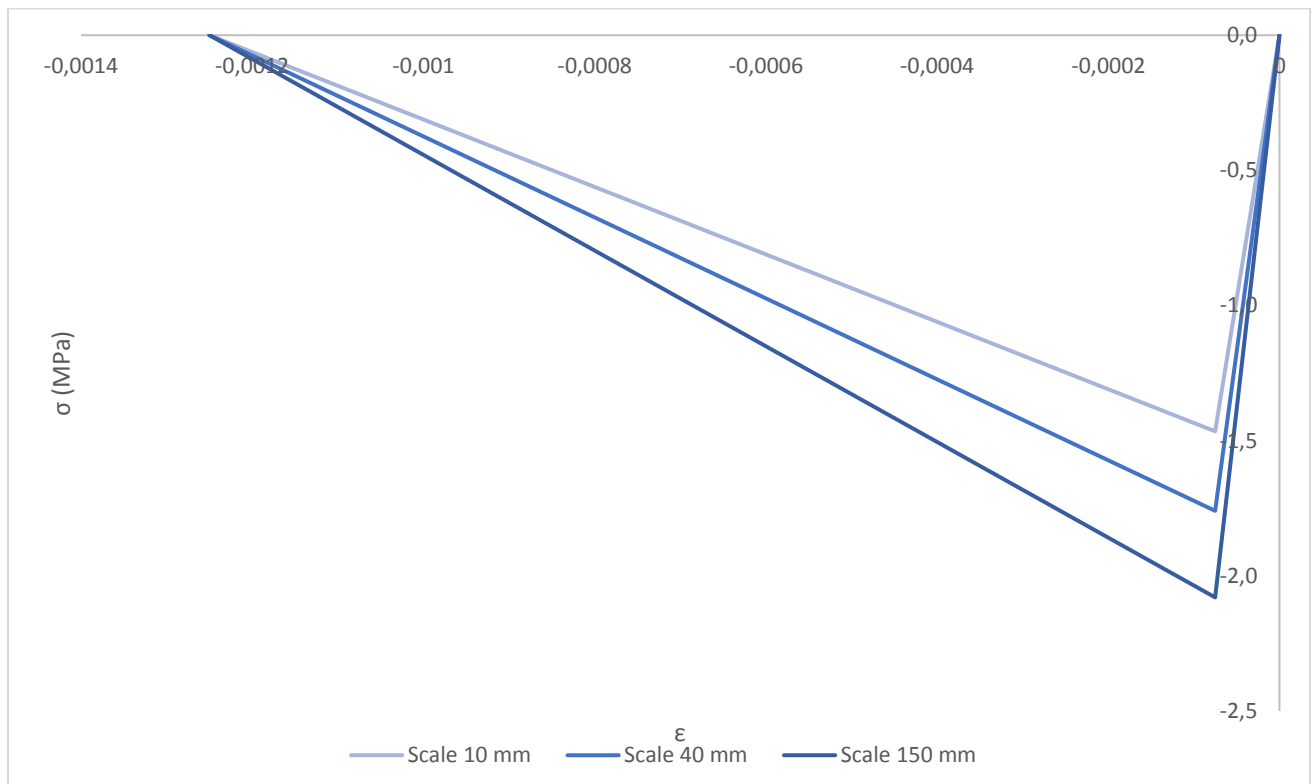
Σχήμα 3.20: Ανά κλίμακα μετάβαση της μη γραμμικής συμπεριφοράς του δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 0,00 % σε μονοαξονική θλίψη.



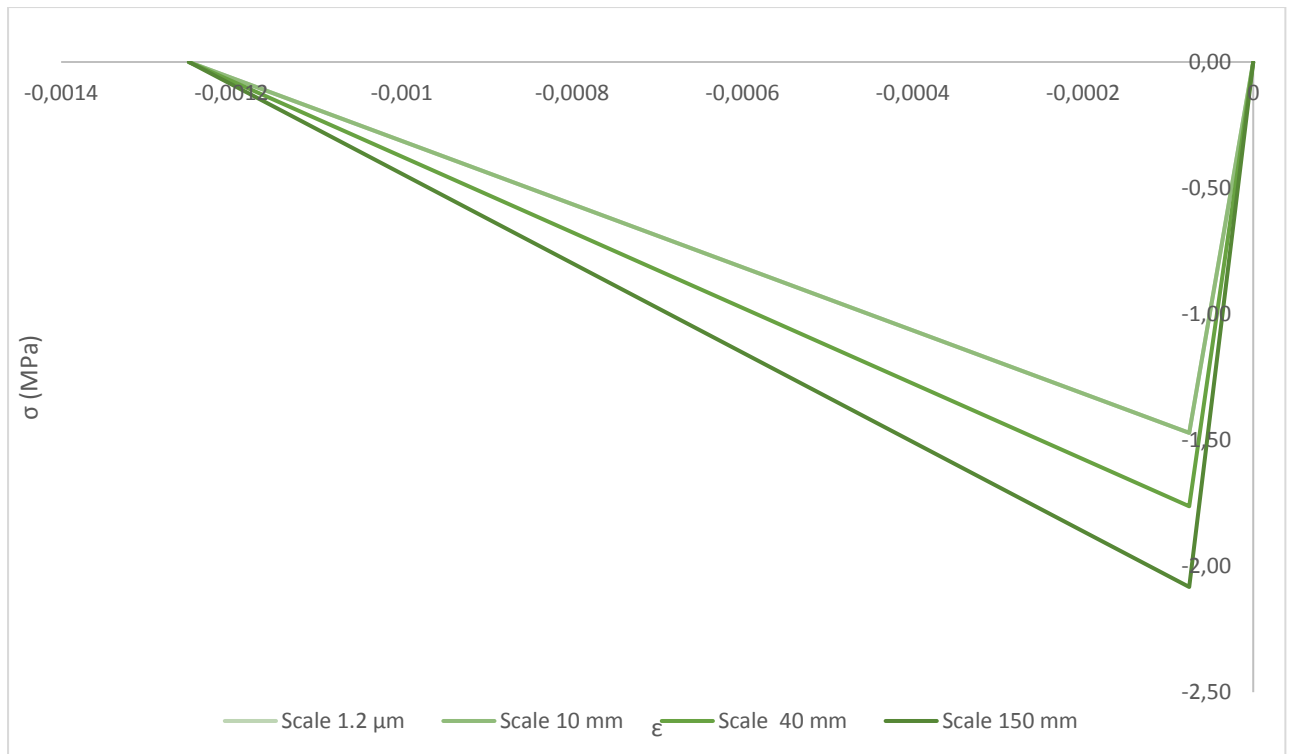
Σχήμα 3.21: Ανά κλίμακα μετάβαση της μη γραμμικής συμπεριφοράς του δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 2,00 % σε μονοαξονική θλίψη.



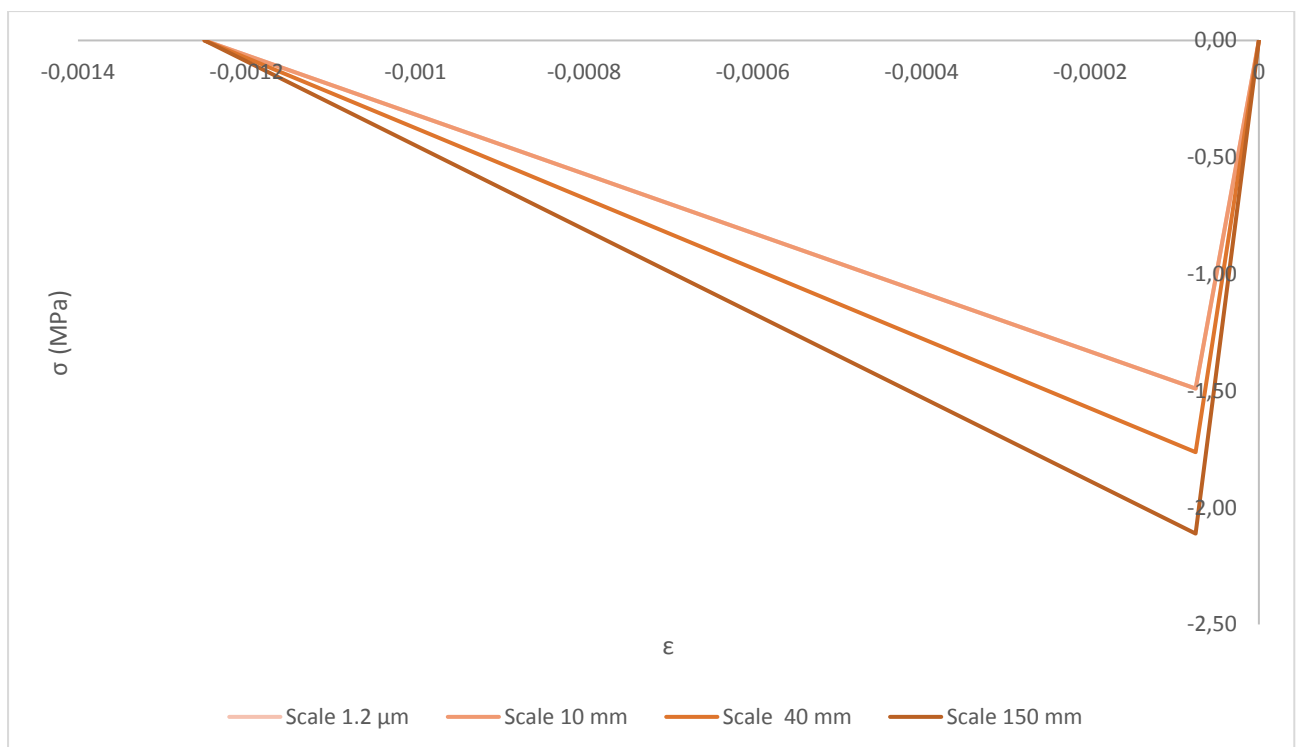
Σχήμα 3.22: Ανά κλίμακα μετάβαση της μη γραμμικής συμπεριφοράς του δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 10,00 % σε μονοαξονική θλίψη



Σχήμα 3.23: Ανά κλίμακα μετάβαση της μη γραμμικής συμπεριφοράς του δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 0,00 % σε μονοαξονικό εφελκυσμό.



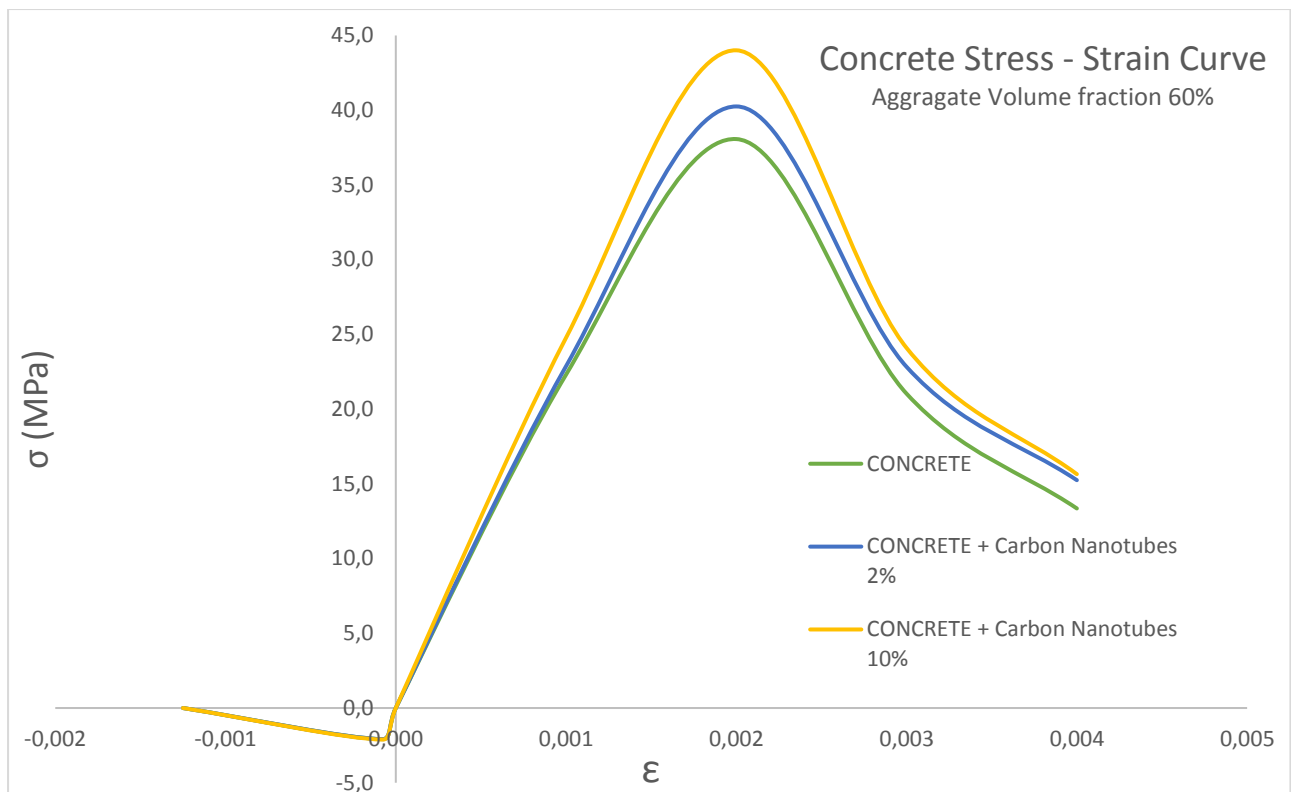
Σχήμα 3.24: Ανά κλίμακα μετάβαση της μη γραμμικής συμπεριφοράς του δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 2,00 % σε μονοαξονικό εφελκυσμό.



Σχήμα 3.25: Ανά κλίμακα μετάβαση της μη γραμμικής συμπεριφοράς του δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 10,00 % σε μονοαξονικό εφελκυσμό

3.4 Αριθμητικά Αποτελέσματα Μη Ελαστικής Ανάλυσης

Στην προηγούμενη παράγραφο έγινε εκτενής ανάλυση σε ό,τι αφορά το πως καταστρώνεται η τελική καμπύλη τάσεως - σ - παραμόρφωσης - ϵ -. Στην πράξη βεβαίως, μόνο η τελική καμπύλη των πραγματικών διαστάσεων του δοκιμίου ενδιαφέρει το μηχανικό. Οι υπόλοιπες καμπύλες των πολλαπλών κλιμάκων αναλύσεων χρησιμεύουν μόνο ως στάδια της υπολογιστικής προσομοίωσης του δοκιμίου. Ήταν αρκετά καλό σημάδι ότι αυτές οι καμπύλες επιβεβαιώναν την φύση του προβλήματος και συνεπώς είχαν τεθεί τα κατάλληλα θεμέλια για να στηριχθεί η πραγματική προσομοίωση, ώστε να είναι εφικτή η ρεαλιστική έρευνα. Τα τελικά αποτελέσματα αναφέρονται σε κυβικό δοκίμιο σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα διαστάσεων 150 mm σε κάθε πλευρά. Το τελικό διάγραμμα απεικονίζει τόσο την μηχανική συμπεριφορά του δοκιμίου σε θλίψη όσο και σε εφελκυσμό (σχήμα 3.26). Με πράσινο χρώμα αναπαριστάτε η μηχανική συμπεριφορά του σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 0,00 % κατά βάρος, δηλαδή το κοινό σκυρόδεμα που χρησιμοποιείται. Θα μπορούσε να υποτεθεί ότι αυτό το σκυρόδεμα πλησιάζει το εμπορικό προϊόν σκυρόδεμα C 30/37. Με μπλε χρώμα αναπαριστάτε η μηχανική συμπεριφορά του σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 2,00 % κατά βάρος και, τέλος, με κίτρινο χρώμα αναπαριστάτε η μηχανική συμπεριφορά του σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 10,00 % κατά βάρος. Υπενθυμίζεται ότι η υπολογιστική επίλυση του δοκιμίου σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs έγινε μόνο για αριθμητικούς λόγους. Ακόμα, υπενθυμίζεται ότι σε ό,τι αφορά στον λόγο αδρανών του δοκιμίου, σε όλα αντιστοιχείται σε 60 % κατά όγκο. Η τιμή 60 % κατά όγκο συνδυάζει ικανής αντοχής και οικονομικό σκυρόδεμα. Η βελτίωση της μέγιστης αντοχής του σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 2,00 % σε σύγκριση με το κοινό σκυρόδεμα κυμαίνεται 6 %. Η τιμή συμφωνεί με τους ερευνητές που ακολούθησαν πειραματικές μεθόδους για να ερευνήσουν το ίδιο πεδίο. Παρότι, δεν φαίνεται εντυπωσιακό το αποτέλεσμα, εν τούτης, αποτελεί αρκετά αξιοσημείωτη βελτίωση του σκυροδέματος δεδομένου του χαμηλού κόστους της ενίσχυσης. Στο κόστος της ενίσχυσης, βεβαίως, δεν έχει υπολογιστεί η οικονομία του χάλυβα λόγω της αύξησης της αντοχής του σκυροδέματος που θα μπορούσε να έχει ως αποτέλεσμα της κατασκευής, εν τέλει, και ενός οικονομικότερο και ενισχυμένου σύνθετου υλικού σε σύγκριση με το κοινό σκυρόδεμα. Η βελτίωση της μέγιστης αντοχής του σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 10,00 % σε σύγκριση με το κοινό σκυρόδεμα ξεπέρασε 15 %. Το αποτέλεσμα αυτό είναι τρομερά εντυπωσιακό για το σκυρόδεμα. Όταν βρεθεί ο χημικός ή μη τρόπος αποφυγής την συσσωμάτωσης και εν τέλει βλάβης της ικανότητας των νανοσωλήνων άνθρακα σε μεγάλες ποσότητες, τότε αυτό θα αποτελέσει επανάσταση στην επιστήμη των υλικών, τόσο στο σκυρόδεμα, σε πολυμερή ή οποιοδήποτε άλλο νανოსύνθετο υλικό. Και στις δύο περιπτώσεις των ενισχυμένων δοκιμίων παρατηρείται ότι στον ελαστικό κλάδο δεν υπάρχει σχεδόν καθόλου βελτίωση της μηχανικής συμπεριφοράς. Αυτό οφείλεται, σχεδόν αποκλειστικά, στο ότι όσον αφορά σε μικρές παραμορφώσεις της ελαστικής περιοχής τα δύο υλικά έχουν παρόμοιες μηχανικές ικανότητες και συνεπώς δεν διαφαίνεται η συμβολή των CNTs. Αντίθετα όσο μεγαλώνουν οι παραμορφώσεις τόσο γίνεται σημαντικότερη η συμβολή των νανοσωλήνων άνθρακα. Αντίθετα, όσον αφορά, στην μηχανική βελτίωση του σκυροδέματος σε

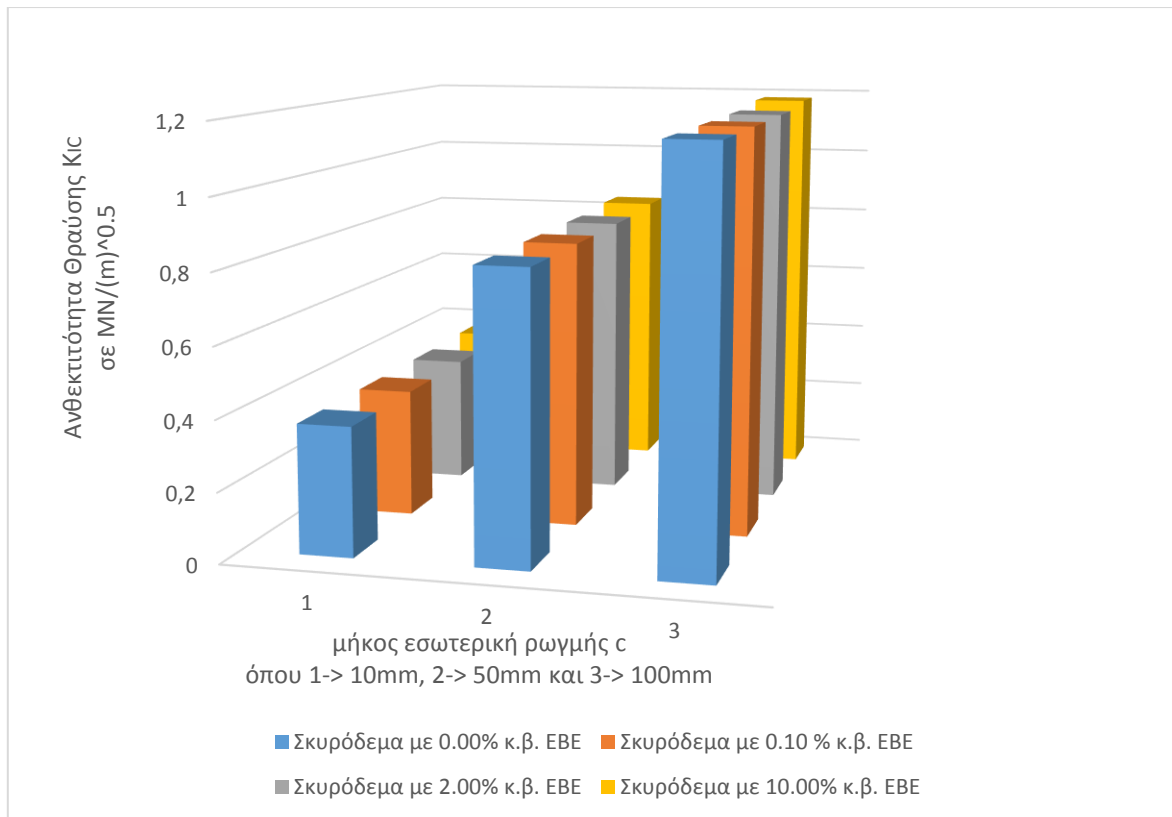


Σχήμα 3.27: Διάγραμμα τάσεων παραμορφώσεων δοκιμών σκυροδέματος διαστάσεων 15 cm κάθε πλευράς, ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs κατά πάχος 0,00 %, 2,00 % και 10,00 %, αντίστοιχα.

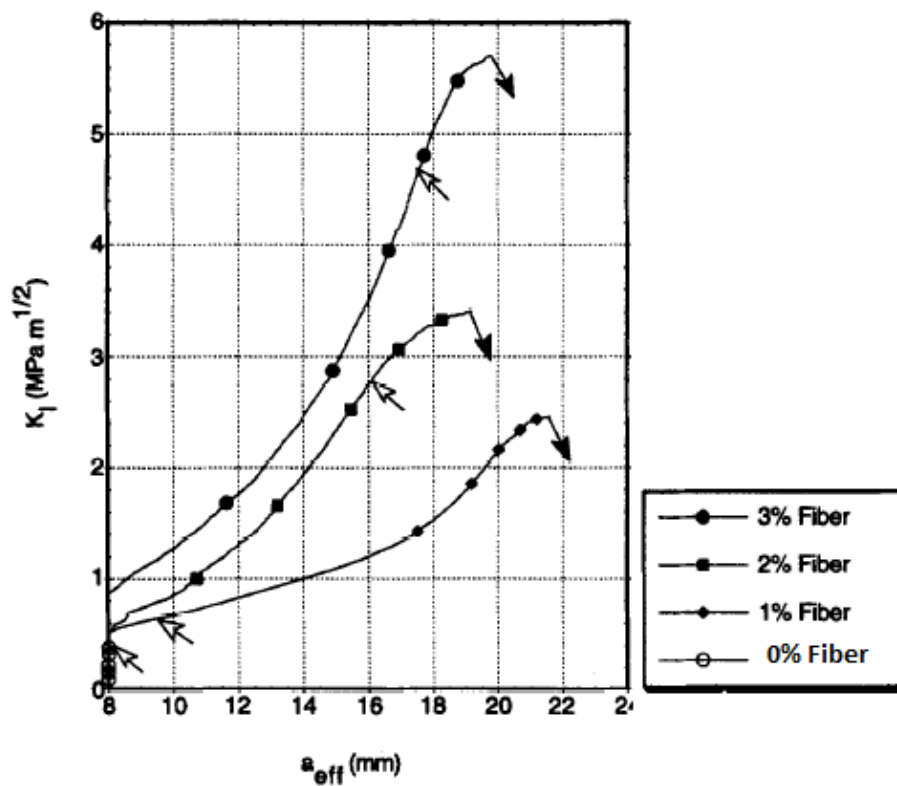
εφελκυστική ικανότητα, τα αποτελέσματα δεν είναι καθόλου ενθαρρυντικά. Αυτό οφείλεται σε μεγάλο βαθμό στο ότι η δομή του σκυροδέματος καταρρέει άμεσα σε εφελκυσμό και δεν δίνει την δυνατότητα στους νανοσωλήνες να παραλάβουν οποιοδήποτε φορτίο. Αν χρειαζόταν να επιτευχθεί αυτό, έπρεπε να πακτώνονται ή να αγκυρώνονται εξωτερικά τα CNTs ώστε να μπορούν να μεταφέρουν φορτίο, κάτι που προφανώς δεν γίνεται. Παρόμοια λογικά έχει το οπλισμένο σκυρόδεμα όπου χάλυβας πρέπει οπωσδήποτε να αγκυρωθεί ώστε να συμβάλλει κατά τις εφελκυστικές τάσεις. Όσον αφορά, στην κατά περίπτωση βελτίωση, το σκυρόδεμα ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 2,00 %, προσδίδει αύξηση της εφελκυστικής μέγιστης τάσης κατά 2,1 %, ενώ το σκυρόδεμα ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα 10,00 %, προσδίδει αύξηση της εφελκυστικής μέγιστης τάσης κατά 2,9 %. Αυτές οι ελάχιστες βελτιώσεις θεωρούνται αμελητέες και σίγουρα αδιάφορες στην ήδη τρομερά κακή εφελκυστική συμπεριφορά του σκυροδέματος. Το συμπέρασμα από αυτή την προσομοίωση του δοκιμίου σε μονοαξονικό εφελκυσμό είναι ότι οι μελετητές δομοστατικοί μηχανικοί θα συνεχίσουν να θεωρούν μηδενική την μέγιστη εφελκυστική τάση του σκυροδέματος, γεγονός που δεν υπάρχει καμία ελπίδα ερευνητικής προσπάθειας, παγκοσμίως, ώστε να αλλάξει. Αυτός είναι και ο λόγος που όλα τα σημαντικά αλλά κοινά έργα του πολιτικού μηχανικού χρησιμοποιούν οπλισμένο σκυρόδεμα (σκυρόδεμα ενισχυμένο με χαλύβδινες ράβδους), όπως και η έρευνα επί σειρά δεκαετιών έχει επικεντρωθεί στην μελέτη και κατανόηση της μηχανικής συμπεριφοράς του οπλισμένου σκυροδέματος.

3.6 Αριθμητικά Αποτελέσματα Ανθεκτικότητας Θραύσης

Η ανθεκτικότητα θραύσης (fracture toughness) ορίζεται ως η ιδιότητα που περιγράφει την ικανότητα ενός υλικού με ρωγμή να αντισταθεί σε θραύση, και αποτελεί μία από τις πιο σημαντικές παραμέτρους για πολλές εφαρμογές σχεδιασμού. Εάν ένα υλικό έχει υψηλή τιμή ανθεκτικότητας θραύσης τότε θα υποστεί πιθανώς όλκιμη αστοχία (ductile fracture). Αντίθετα, η ψαθυρή θραύση (brittle fracture) είναι χαρακτηριστικό των υλικών με χαμηλή τιμή της παραμέτρου αυτής. Όπως αναφέρθηκε στο πρώτο κεφάλαιο η ποσοτικοποίηση του φαινομένου γίνεται ως: $K_{Ic} = Y \cdot \sigma \cdot \sqrt{\pi c}$. Η διερεύνηση στην παρούσα μελέτη έγινε θεωρώντας εσωτερικά αρχική ρωγμάτωση το υλικού. Για αυτόν τον λόγο η τιμή του Y γίνεται μονάδα. Παράλληλα, στη θέση της τάσης σ αντικαθίσταται η μέγιστη εκάστοτε εφελκυστική τάση του σκυρόδεματος. Όσον αφορά στο κοινό σκυρόδεμα, αυτή προσδιορίστηκε από τις αναλύσεις των παραγράφων ως 2,079 MPa. Για το σκυρόδεμα ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 0,10 % κατά βάρος προσδιορίστηκε ως 2,080 MPa, για το σκυρόδεμα ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 2,00 % κατά βάρος προσδιορίστηκε ως 2,083 MPa ενώ, τέλος, για το σκυρόδεμα ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 10,00 % κατά βάρος προσδιορίστηκε ως 2,110 MPa. Στο σχήμα (3.28) παρατηρείται η βελτίωση της ποσότητας ανθεκτικότητας θραύσης. Στις τρεις σειρές ραβδογραμμάτων φαίνονται οι αναλύσεις κατά μήκος αρχικής εσωτερικής ρωγμάτωσης. Στην πρώτη σειρά, η αρχική ρωγμάτωση είναι 10 mm, στην δεύτερη 50 mm και στην τελευταία ανάλυση η αρχική ρωγμάτωση τέθηκε ως 100 mm από τα 150 mm της συνολικής διάστασης του δοκιμίου. Με μπλε ράβδους απεικονίζεται το σκυρόδεμα ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 0,00 % κατά βάρος, δηλαδή το κοινό σκυρόδεμα, με πορτοκαλί ράβδους απεικονίζεται το σκυρόδεμα ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 0,10 %, με γκρι ράβδους απεικονίζεται το σκυρόδεμα ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 2,00 % και τέλος με κίτρινους ράβδους απεικονίζεται το σκυρόδεμα ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 10,00 %. Οι μέγιστες βελτιώσεις της ποσότητας παρατηρήθηκαν, όπως είναι λογικό, στις τελευταίες αναλύσεις ανά αρχική ρωγμάτωση, δηλαδή στο σκυρόδεμα ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα κατά 10,00 %. Οι τιμές αυτές προσδιορίστηκαν ως 1,45 % για σκυρόδεμα με αρχική ρωγμάτωση 10 mm, 1.49 % για σκυρόδεμα με αρχική ρωγμάτωση 50 mm και τέλος 1,70 % για σκυρόδεμα με αρχική ρωγμάτωση 100 mm. Αυτό έχει αποτέλεσμα το υλικό να γίνεται πιο όλκιμο και συνεπώς ασφαλέστερο ως προς τις ψαθυρές αστοχίες ή την ικανότητα απορρόφησης μεγαλύτερης μηχανικής ενέργειας σε σημαντικά φορτία όπως ο σεισμός. Τα συγκεκριμένα αποτελέσματα προσδιορίζονται $0,374 \frac{MN}{\sqrt{m}}$ για σκυρόδεμα ενισχυμένο με CNTs 10,00 % με αρχική ρωγμάτωση 10 mm, $0,836 \frac{MN}{\sqrt{m}}$ για σκυρόδεμα ενισχυμένο με CNTs 10,00 % με αρχική ρωγμάτωση 50 mm και τέλος, $1,182 \frac{MN}{\sqrt{m}}$ για σκυρόδεμα ενισχυμένο με CNTs 10,00 % με αρχική ρωγμάτωση 100 mm. Παρόμοια έρευνα έχει γίνει από τους N. Banthia, J. Shengb [44] σε πειραματικό στάδιο (Σχήμα 3.29). Η διαφορά έγκειται ότι υπολογίστηκαν τα παραπάνω αποτελέσματα απευθείας στην τσιμεντόπαστα. Δηλαδή, εισήχθησαν ίνες άνθρακα μέσα στο υλικό της τσιμεντόπαστας και υπολογίστηκε η ανθεκτικότητα θραύσης. Η σύγκριση έγινε στο ότι η τάξης μεγέθους των αποτελεσμάτων είναι απολύτως σύμφωνη με αυτά της υπολογιστικής προσομοίωσης.



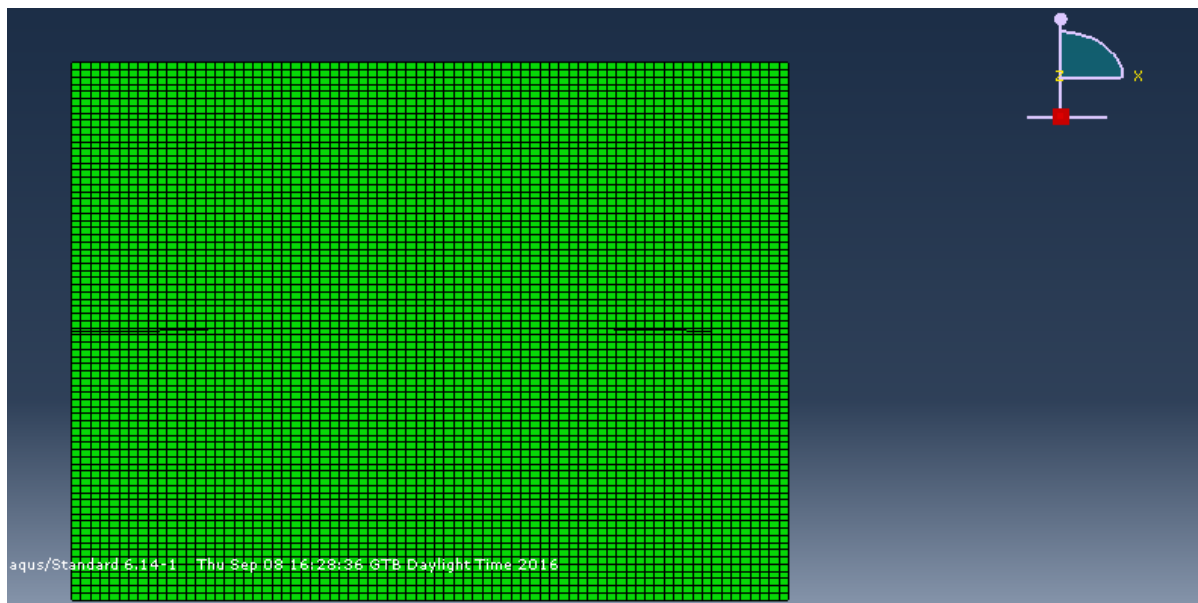
Σχήμα 3.28: Τρισδιάστατη σχηματική απεικόνιση με ραβδογράμματα της ποσότητας K_{Ιc} της ανθεκτικότητας θραύσης συναρτήσει του μήκους της αρχικής εσωτερικής ρωγμάτωσης και του ποσοστού κατά βάρος ενίσχυσης του σκυροδέματος.



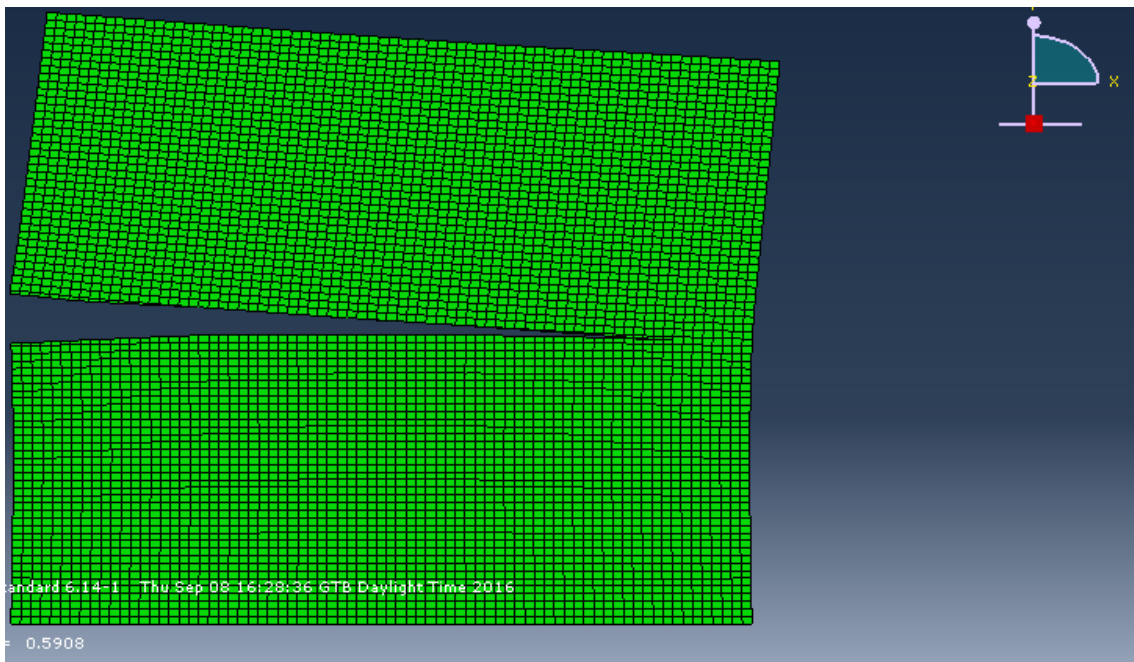
Σχήμα 3.29: Πειραματικά αποτελέσματα ποσότητας K_{Ιc} της ανθεκτικότητας θραύσης για τσιμεντόπαστα από τους N. Bantia, J. Shengb [44].

Για παράδειγμα, για αρχική ρωγμάτωση υλικού 10 mm τα πειράματα προέβλεψαν 0,80 όπως και η υπολογιστική προσομοίωση για ενίσχυση 2,00 CNTs κατά βάρος.. Η βελτίωση της ανθεκτικότητας θραύσης είναι από τις σημαντικές βελτιώσεις των νανοσωλήνων άνθρακα και επεκτείνει την σημαντικότητα τους και σε άλλα πεδία, όχι μόνο της μέγιστης αντοχής.

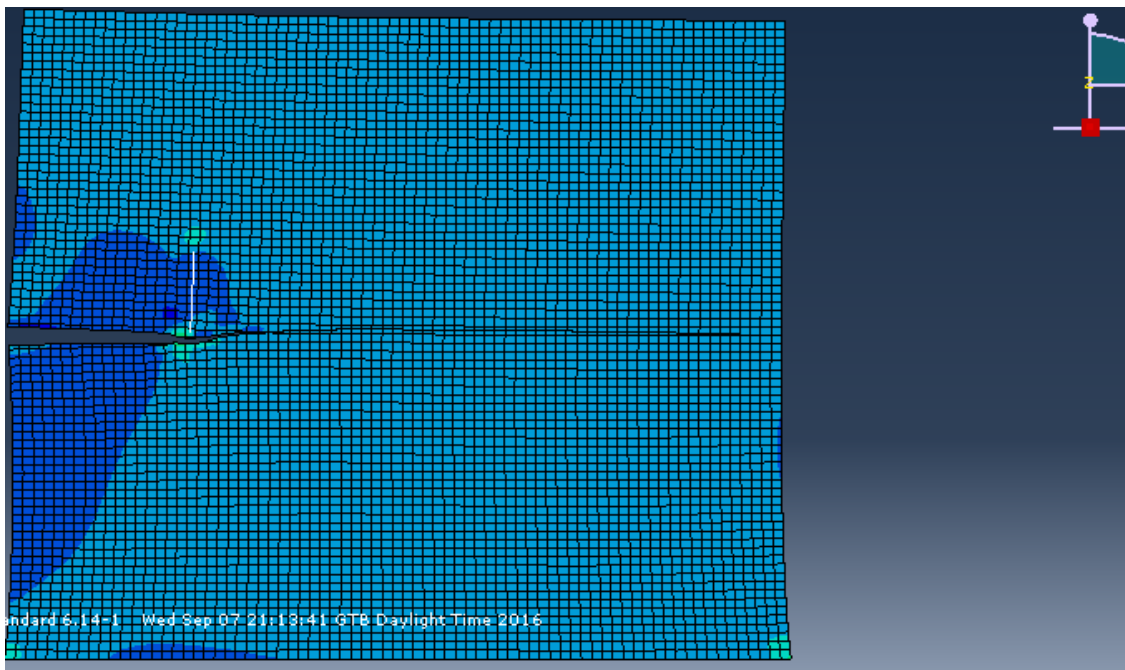
Εάν επιθυμείται καλύτερη ακρίβεια των αποτελεσμάτων της ανθεκτικότητας θραύσης τότε μπορεί και πρέπει να γίνει μια πιο λεπτομερής ανάλυση του πως διαμορφώνεται η ρωγμή εξ' αιτίας των CNTs. Για το τον λόγο αυτό έγιναν αναλύσεις σε 2D δοκίμια προσομοιώνοντας την μορφή και το μήκος της ρωγμής μέσω XFEM. Όπως είναι εύλογο μια τρισδιάστατη ανάλυση θα έδινε πιο ακριβή αποτελέσματα, για αυτό επιτεύχθηκε κυρίως η παρατήρηση του φυσικού φαινομένου και μια πρώτη ματιά στα αποτελέσματα αυτής. Στα παρακάτω σχήματα φαίνονται οι αναλύσεις στο λογισμικό πακέτο abaqus καθώς και τα συναφή αποτελέσματα κωδικοποιημένα σε διαγράμματα στο excel. Τα τελικά αποτελέσματα ήταν αύξηση 8 % στο μήκος της ρωγμής και 13 % αύξηση στην ανθεκτικότητα θραύσης για σκυρόδεμα με και χωρίς CNTs 10.00 % κ.β.



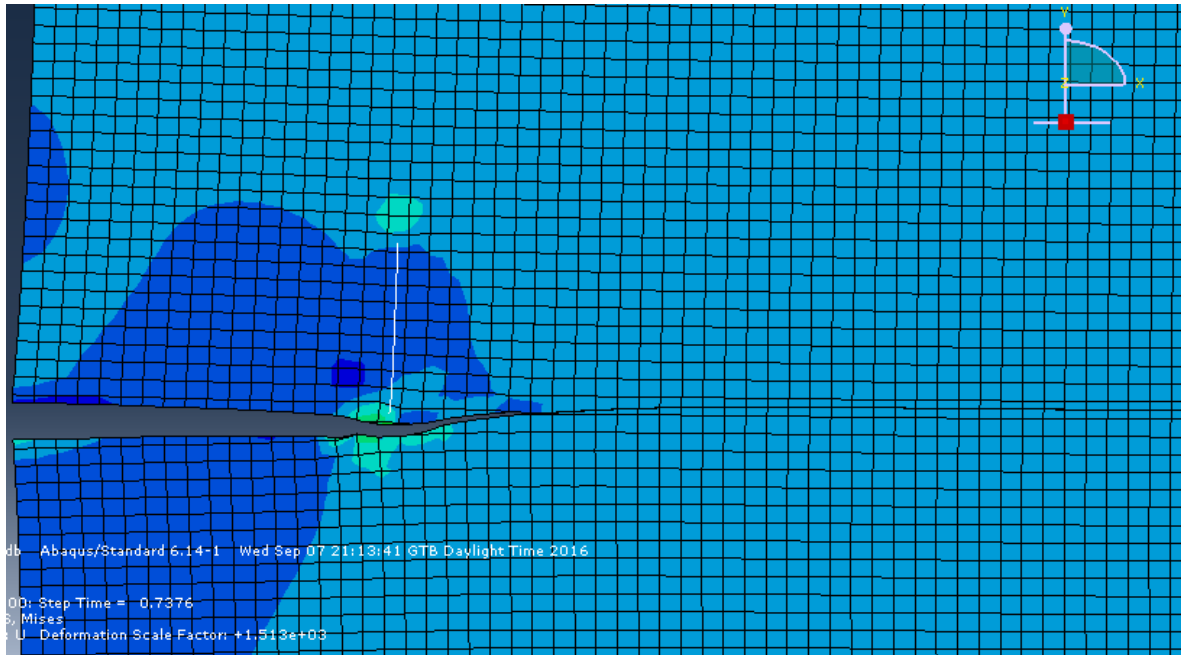
Σχήμα 3.30: 2D Δοκίμιο Σκυροδέματος στη μικροκλίμακα



Σχήμα 3.31: 2Δ Δοκίμιο Σκυροδέματος στη μικροκλίμακα καθώς διαδίδει την αρχική ρωγμή του μέσω XFEM.



Σχήμα 3.32: 2Δ Δοκίμιο Σκυροδέματος με ένα ΕΒΕ στη μικροκλίμακα καθώς διαδίδει την αρχική ρωγμή του μέσω XFEM.

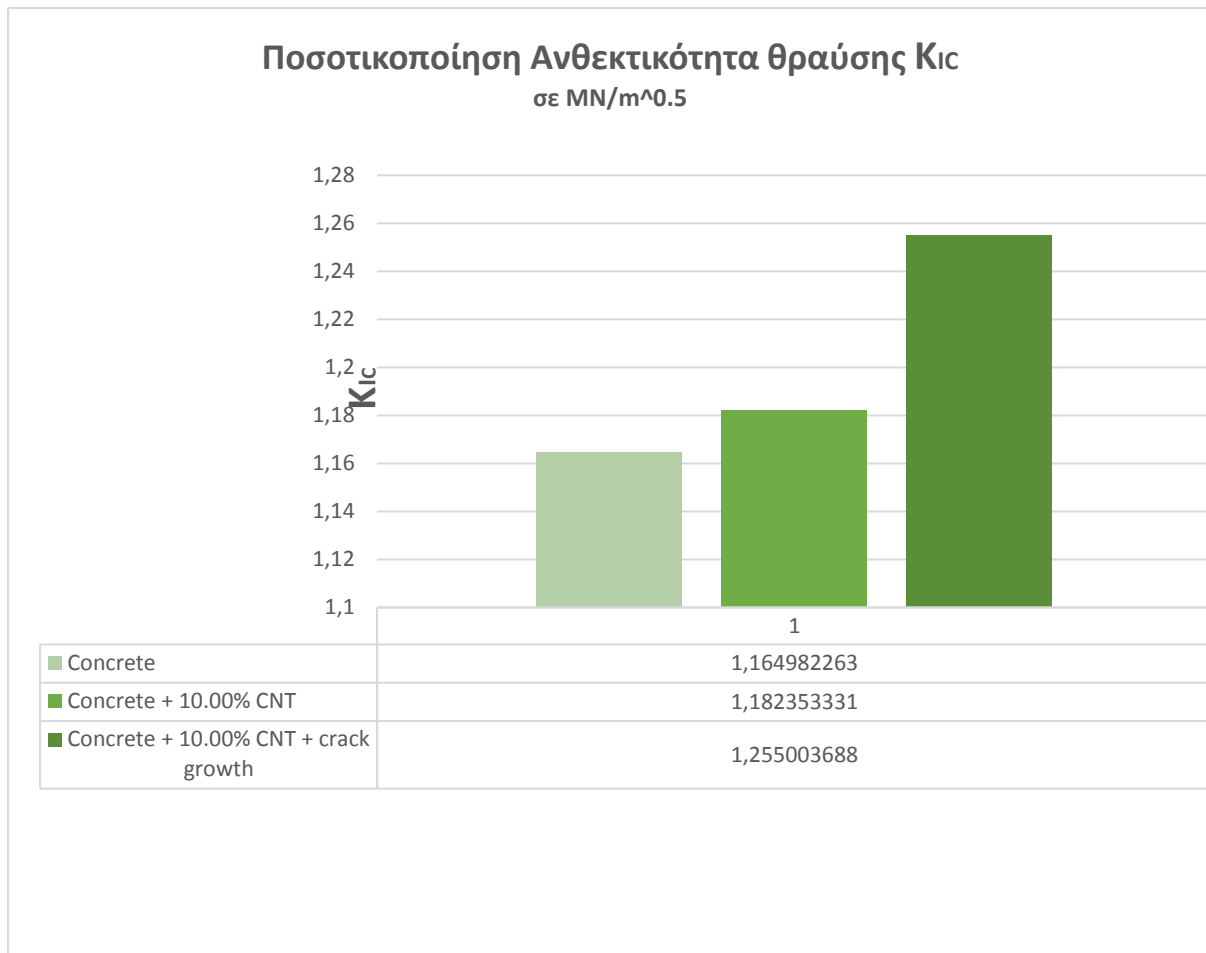


Σχήμα 3.33: 2D Δοκίμιο Σκυροδέματος με ένα ΕΒΕ στη μικροκλίμακα καθώς διαδίδει την αρχική ρωγμή του μέσω XFEM.

(ZOOM)



Σχήμα 3.34: Ραβδόγραμμα σύγκρισης διάδοσης ρωγμής σε δοκίμιο με και χωρίς CNTs σε μικρο και μακροκλίμακα.



Σχήμα 3.35: Ραβδόγραμμα σύγκρισης ποσότητα ανθεκτικότητας θραύσης λόγω διάδοσης ρωγμής σε δοκίμιο με και χωρίς CNTs σε μικρο και μακροκλίμακα.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4^ο

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ- ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΟΙ ΣΤΟΙΧΟΙ

4.1 Συμπεράσματα

Η παρούσα εργασία χρησιμοποίησε τα εργαλεία της υπολογιστικής μηχανικής για να μελετήσει την μη γραμμική συμπεριφορά σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs. Επειδή, όμως, η τάξη μεγέθους των διαστάσεων των νανοσωληνων και του δοκιμίου σκυροδέματος είναι χαώδης, χρησιμοποιήθηκαν μέθοδοι ανάλυσης πολλαπλών κλιμάκων. Οι κλίμακες ήταν κύβος διαστάσεων πλευράς 1,2 nm για το δοκίμιο μόνο με νανοσωλήνες άνθρακα και 10 nm, 40 nm και 150 nm για κάθε τάξη μεγέθους αδρανών αντίστοιχα, όπως περιγράφεται αναλυτικά στην εργασία. Οι νανοσωλήνες άνθρακα και τα αδρανή ομογενοποιήθηκαν στο υπόλοιπο υλικό ώστε να θεωρηθεί εν τέλει ομογενές και συμπαγές. Η διερεύνηση έγινε για λόγο όγκου αδρανών 60 % και ποσότητα νανοσωληνων άνθρακα κατά βάρος 0,00 %, 0,10 %, 2,00% και 10,00%, όπου η τελευταία ανάλυση δεν ανταποκρίνεται σε εφικτό πρόβλημα σε πραγματικά δεδομένα. Τα CNTs εισήχθησαν με την τεχνική του ενσωματωμένου στοιχείου ενώ τα αδρανή ως πραγματικά μέρη του δοκιμίου. Πραγματοποιήθηκαν ελαστικές και ανελαστικές αναλύσεις επί όλων των κλιμάκων, όπως και του τελικού δοκιμίου των 150 nm που είναι η ουσία της έρευνας σε αυτήν την εργασία. Τέλος, πριν βγει το τελικό πόρισμα για την ικανότητα αυτού του νέου νανοςύνθετου υλικού, έγινε διερεύνηση της ανθεκτικότητας θραύσης του σκυροδέματος με ή χωρίς την ενίσχυση των CNTs. Τα υπολογιστικά αποτελέσματα συγκρίθηκαν με πειραματικά. Αυτά αφορούν στα αδρανή, στην τσιμεντόπαστα ή και στο ίδιο το σκυρόδεμα με ή χωρίς ενίσχυση με νανοσωλήνες άνθρακα. Τα αδρανή έχουν μη γραμμική συμπεριφορά σε διάγραμμα τάσεων - σ - παραμορφώσεων - ϵ -. Αντίθετα, όμως όταν βρίσκονται σε συνεργασία με την τσιμεντόπαστα συμπεριφέρονται απολύτως ελαστικά καθώς οι μεγάλες παραμορφώσεις λαμβάνουν χώρα σε αυτήν και όχι στα αδρανή. Το μέτρο ελαστικότητας E των αδρανών προσδιορίζεται πειραματικά από 38.0 έως 54.0 GPa [26,29] ενώ ο λόγος Poisson ν τους περίπου στην τιμή 0.23 [26,29]. Η τσιμεντόπαστα παρόλο αυτά συμπεριφέρεται εντελώς μη γραμμικά σε διάγραμμα τάσεων παραμορφώσεων. Στην βιβλιογραφία βρίσκουμε, αρχικώς, το μέτρο ελαστικότητας E της τσιμεντόπαστας στην τιμή 20.0 έως 35.0 GPa [26, 27, 29] ενώ ο λόγος Poisson κυμαίνεται στην τιμή 0.20 έως 0.23 [26, 27, 29, 34]. Τα παραπάνω δεδομένα χρησιμοποιήθηκαν ως δεδομένα στις αναλύσεις στο πρόγραμμα πεπερασμένων στοιχείων Abaqus, αφού πρώτα δημιουργήθηκε το μοντέλο στο λογισμικό πακέτο MATLAB. Έγιναν, τέλος, ξεχωριστές αναλύσεις ελαστικής και ανελαστικής μορφής.

Όσον αφορά στις ελαστικές αναλύσεις, στο δοκίμιο σκυροδέματος ενισχυμένο 0,10 % CNTs κατά βάρος παρατηρείται συνολική αύξηση του μέτρου ελαστικότητας κατά 0,20 %, στο δοκίμιο σκυροδέματος ενισχυμένο 2,00 % CNTs κατά βάρος παρατηρείται συνολική αύξηση του μέτρου ελαστικότητας κατά 0,50 %, ενώ τέλος, στο δοκίμιο σκυροδέματος ενισχυμένο 10,00 % CNTs κατά βάρος παρατηρείται συνολική αύξηση του μέτρου ελαστικότητας κατά 4,50 %. Αυτή η πολύ μικρή αύξηση του μέτρου ελαστικότητας ήταν αναμενόμενα μη αισιόδοξη καθώς όσον αφορά στον ελαστικό κλάδο, τα δύο υλικά (τσιμεντόπαστα και ισοδύναμοι δοκοί νανοσωληνων άνθρακα) έχουν παραπλήσιες μηχανικές ιδιότητες. Συνεπώς το αποτέλεσμα μπορεί να χαρακτηριστεί λογικό και αναμενόμενο. Εντυπωσιακή, αντίθετα, είναι η αύξηση του μέτρου ελαστικότητας από κλίμακα σε κλίμακα που κυμαίνεται σε 25,5 % για σκυρόδεμα ενισχυμένο με 0,10 % CNTs,

26 % για σκυρόδεμα ενισχυμένο με 2,00 % CNTs και τέλος 30 % για σκυρόδεμα ενισχυμένο με 10,00 % CNTs. Η αύξηση του μέτρου ελαστικότητας από κλίμακα σε κλίμακα οφείλεται στην προσθήκη ανά κλίμακα περισσότερων και μεγαλύτερων αδρανών που παράλληλα έχουν μεγαλύτερο μέτρο ελαστικότητας από την υπόλοιπη μήτρα. Όσον αφορά στις μη γραμμικές αναλύσεις, πρώτα έγινε σύγκριση ανά κλίμακα σε κάθε δοκίμιο με διαφορετική ενίσχυση νανοσωλήνων άνθρακα. Η βελτίωση της μέγιστης τάσης του δοκιμίου πριν την έναρξη των διαδικασιών ρωγμάτωσης και θραύσης ξεπέρασε το 73 %. Ακόμα, η βελτίωση της μέγιστης τάσης του δοκιμίου πριν την έναρξη των διαδικασιών ρωγμάτωσης και θραύσης ξεπέρασε το 78 %. Τέλος, η βελτίωση της μέγιστης τάσης του δοκιμίου πριν την έναρξη των διαδικασιών ρωγμάτωσης και θραύσης ξεπέρασε το 95 %. Όσον αφορά, στην σύγκριση των τελικών κλιμάκων ενισχυμένου ή μη σκυροδέματος, η βελτίωση της μέγιστης αντοχής του σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 2,00 % σε σύγκριση με το κοινό σκυρόδεμα κυμαίνεται 6 %. Η βελτίωση της μέγιστης αντοχής του σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα CNTs 10,00 % σε σύγκριση με το κοινό σκυρόδεμα ξεπέρασε 15 %. Όλα τα παραπάνω αποτελέσματα αναφέρονται σε δοκιμές μονοαξονικής θλίψης. Όσον αφορά στις προσομοιώσεις μονοαξονικού εφελκυσμού, το σκυρόδεμα ενισχυμένο να νανοσωλήνες άνθρακα 2,00 %, προσδίδει αύξηση της εφελκυστικής μέγιστης τάσης κατά 2,1 %, ενώ το σκυρόδεμα ενισχυμένο να νανοσωλήνες άνθρακα 10,00 %, προσδίδει αύξηση της εφελκυστικής μέγιστης τάσης κατά 2,9 %. Αυτές οι ελάχιστες βελτιώσεις θεωρούνται αμελητέες και σίγουρα αδιάφορες στην ήδη τρομερά κακή εφελκυστική συμπεριφορά του σκυροδέματος.

Οι τελευταίες αναλύσεις που έγιναν αφορούν στην διερεύνηση της ανθεκτικότητας θραύσης. Οι μέγιστες βελτιώσεις της ποσότητας παρατηρήθηκαν, όπως είναι λογικό, στις τελευταίες αναλύσεις ανά αρχική ρωγμάτωση, δηλαδή στο σκυρόδεμα ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα κατά 10,00 %. Οι τιμές αυτές προσδιορίστηκαν ως 1,45 % για σκυρόδεμα με αρχική ρωγμάτωση 10 mm, 1.49 % για σκυρόδεμα με αρχική ρωγμάτωση 50 mm και τέλος 1,70 % για σκυρόδεμα με αρχική ρωγμάτωση 100 mm. Αυτό έχει αποτέλεσμα το υλικό να γίνεται πιο όλκιμο και συνεπώς ασφαλέστερο ως προς τις ψαθυρές αστοχίες ή την ικανότητα απορρόφησης μεγαλύτερης μηχανικής ενέργειας σε σημαντικά φορτία όπως ο σεισμός. Τα συγκεκριμένα αποτελέσματα προσδιορίζονται $0,374 \frac{MN}{\sqrt{m}}$ για σκυρόδεμα ενισχυμένο με CNTs 10,00 % με αρχική ρωγμάτωση 10 mm, $0,836 \frac{MN}{\sqrt{m}}$ για σκυρόδεμα ενισχυμένο με CNTs 10,00 % με αρχική ρωγμάτωση 50 mm και τέλος, $1,182 \frac{MN}{\sqrt{m}}$ για σκυρόδεμα ενισχυμένο με CNTs 10,00 % με αρχική ρωγμάτωση 100 mm. Τέλος προκύπτει αύξηση 13 % αν θεωρήσουμε αναλυτικά την διάδοση της ρωγμής. Από όλα τα παραπάνω, συμπεραίνουμε ότι οι νανοσωλήνες άνθρακα CNTs, αποτελούν ένα σύγχρονο και υποσχόμενο ερευνητικό πεδίο επί του σκυροδέματος. Οι αυξήσεις σε μηχανική χαρακτηριστικά του σκυροδέματος αφήνουν μεγάλα περιθώρια, δεδομένου ότι η τεχνική πρόσφατα ανακαλύφθηκε και έχει ακόμα πολύ μεγάλο δρόμο προόδου, στο να δοθεί το έναυσμα για περαιτέρω έρευνα. Αυτή θα έχει ως αποτέλεσμα την κατασκευή δομών με μεγαλύτερη αντοχή ή και σε κατασκευαστικές δομές με οικονομία υλικού. Παράλληλα, σε ένα ακόμα πιο προχωρημένο στάδιο θα κατασκευαστούν δομές πολιτικού

μηχανικού που δεν είναι καν εφικτές δομικά στις μέρες μας, χάρη σε αυτό το νέο και τρομερά ανθεκτικά υλικό.

4.2 Προτάσεις για Περαιτέρω Μελλοντική Έρευνα

Όπως είναι προφανές και απολύτως αναμενόμενο η εργασία αυτή δεν μπορεί να καλύψει όλες τις ερευνητικές πτυχές της μη γραμμικής διερεύνησης σκυροδέματος ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα. Έγινε μια σημαντική προσπάθεια και δόθηκε αρκετή αγάπη και μεράκι για τις αναλύσεις. Παρόλο αυτά, αν υπήρχε περισσότερος χρόνος θα ήταν προτιμότερο, καθώς θα γινόντουσαν και οι παρακάτω διερευνήσεις:

- Πειραματική επαλήθευση των αποτελεσμάτων. Αυτή είναι η πρώτη και κύρια ανάγκη αυτής της εργασίας ώστε να αποκτήσουν πραγματική υπόσταση τα αριθμητικά αποτελέσματα. Βέβαια, αυτή η επέκταση εκτός από περισσότερο χρόνο απαιτεί και χρηματική επένδυση σε υλικά και κυρίως ύπαρξη εξοπλισμού και υποδομών. Τα επιμέρους εργαστήρια του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου έχουν με το παραπάνω τέτοιου επιπέδου υποδομές.
- Ανάλυση του δοκιμίου σε Υπερ – υπολογιστή. Συνεπώς, θα μπορούσε να παρατηρηθεί το σφάλμα που μεταφέρεται από κλίμακα σε κλίμακα και πόσο τελικά ήταν επιτυχής η ομογενοποίηση. Οι δύο πρώτες επεκτάσεις αναφέρονται σε μη εφικτές προτάσεις όσον αφορά τις δυνατότητες της ερευνητικής ομάδας. Οι παρακάτω επεκτάσεις, όμως, είναι εφικτές ακόμα και σήμερα, δεδομένου του ότι θα υπήρχε πληθώρα χρόνου.
- Όσον αφορά στα εργαλεία που υπάρχουν τώρα στα χέρια μας, σημαντικό θα ήταν να μελετηθεί το φαινόμενο bond slip στους νανοσωλήνες άνθρακα.
- Ακόμα, θα ήταν χρήσιμο να μελετηθούν όλοι οι τύποι των νανοσωλήνων άνθρακα όπως προκύπτουν από τις διαφορές τους στην χημική σύσταση τους.
- Επιπλέον, μια πάλι εύκολη αλλά χρονοβόρα διαδικασία, θα ήταν να μελετηθούν πάρα πολλά δοκίμια διαφορετικών λόγων όγκων αδρανών, και όχι μόνο αυτά με λόγο 60 %.
- Παράλληλα με την παραπάνω διαδικασία θα ήταν καλό να μελετηθούν δοκίμια ίσων λόγων όγκων αδρανών αλλά με διαφορετική διάταξη τους, γεωμετρική, μέσα στο δοκίμιο.
- Σημαντική θα ήταν και η συμβολή της κατασκευής ή της χρήσης ενός νέου μοντέλου θραύσης. Θα ήταν ευκόλως παρατηρούμενο το πόσο επηρεάζει αυτό το μοντέλο της τελικής μη γραμμική καμπύλη τάσεων - σ - παραμορφώσεων - ε - του νανοσύνθετου υλικού.
- Ακόμα μια πολύ σημαντική επέκταση ως προς την εργασία, στο ίδιο μήκος κύματος με τη παραπάνω κουκίδα, θα ήταν η εισαγωγή ως αλγορίθμου UMAT πλέον στο λογισμικό πακέτο Abaqus του μοντέλου θραύσης. Συνεπώς, δεν θα λυνόταν το πρόβλημα με επαναλαμβανόμενες ελαστικές αναλύσεις αλλά όχι ακολουθία αναλύσεων δίνοντας μεγαλύτερη ακρίβεια σε πυκνότερα σημεία της καμπύλης.
- Τέλος, μια από τις σημαντικότερες επεκτάσεις της εργασίας, αφενός επειδή με αυτό πρόκειται να κατασκευαστούν έργα πολιτικού μηχανικού όπως κτίρια, γέφυρες, φράγματα κ.τ.λ. και αφετέρου επειδή γίνεται η έρευνα στην Ελλάδα που είναι μία

από τις πιο σεισμογενείς χώρες ανά τον κόσμο, θα ήταν να μελετηθεί η μηχανική απόκριση του δοκιμίου σε ανακυκλιζόμενη φόρτιση. Αυτό θα είχε σαν αποτέλεσμα να μελετηθεί η ικανότητα του υλικού να απορροφά ενέργεια πριν την πλήρη αστοχία του.

Η λίστα αυτή, προφανώς, δεν έχει τερματισμό. Πολλές επεκτάσεις αναμένουν να υπάρξουν σε αυτό το καινούριο και υποσχόμενο υλικό από διάφορους μελετητές ανά τον κόσμο και με διαφορετικές προσεγγίσεις.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5^ο ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] United States National Committee on Theoretical and Applied Mechanics, "RESEARCH DIRECTIONS IN COMPUTATIONAL AND COMPOSITE MECHANICS", <http://www.usnctam.org>, 2007.
- [2] M. Papadrakakis, "Finite Element Analysis of Structures", Papasotiriou, Athens, Greece, 2001.
- [3] Feyel, F., "A multilevel finite element method (FE2) to describe the response of highly non-linear structures using generalized continua.", *Multiscale Computational Mechanics for Materials and Structures* Volume 192, Issues 28–30, Pages 3233–3244, 2003
- [4] Kouznetsova, V. G., "Computational homogenization for the multi-scale analysis of multi-phase materials.", Technische Universiteit Eindhoven, 2002.
- [5] AN Moysidis, "Multiscale Analysis on 2D structures", National Technical University of Athens, Master thesis, Greece, 2012.
- [6] Iijima S., "Helical microtubules of graphitic carbon." *Letters to Nature*, Vol. 354, pp. 56–58, London, 1991.
- [7] Salvétat J.P., Bonard J.M., Thomson N.B., Kulik A.J., Forro L., Benoit W., Zuppiroli L., "Mechanical properties of carbon nanotubes." *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, Vol. 69, pp. 255-260, 1999.
- [8] Demczyk B.G., Wang Y.M., Cumings J., Hetman M., Han W., Zettl A., Ritchie R.O., "Direct mechanical measurement of the tensile strength and elastic modulus of multiwalled carbon nanotubes." *Materials Science and Engineering A*, Vol. 334, pp. 173-178, 2002.
- [9] Yu M.-F., Lourie O., Dyer M.J., Moloni K., Kelly T.F., and Ruoff R.S. "Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load." , *Science*, Volume 287, pp. 637-640, 2000.
- [10] Treacy M.M.J., Ebbesen T.W., Gibson J.M. "Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes." *Nature*, Vol. 381, pp. 678-680, 1996.
- [11] Arroyo M., Belytschko T. , "Finite crystal elasticity of carbon nanotubes based on the exponential Cauchy-Born rule.", *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, Vol. 69, pp. 1154151-11541511, 2004.
- [12] Chang T., Gao H. 6 , "Size-dependent elastic properties of a single-walled carbon nanotube via a molecular mechanics model.", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 51, pp. 1059-1074, 2003.
- [13] Jin Y., Yuan F.G., "Simulation of elastic properties of single-walled carbon nanotubes." , , *Composites Science and Technology*, Vol. 63, pp. 1507-1515, 2003.

- [14] Thostenson E.T., Chou T.-W. , “On the elastic properties of carbon nanotube-based composites: Modelling and characterization.” , Journal of Physics D: Applied Physics, Vol. 36, pp. 573-582, 2005.
- [15] D.N. Savvas, “Multiscale Analysis to investigate the mechanical behavior of viscoelastic sample material reinforced with carbon nanotubes under cyclic loading.”, National Technical University of Athens, Greece, Master thesis, 2012.
- [16] D.N. Savvas, “Multiscale analysis of CNT and GnP-reinforced composites using FEM/XFEM”, National Technical University of Athens, Greece, Phd thesis, 2014.
- [17] D.N. Savvas, V. Papadopoulos, “Nonlinear multiscale homogenization of carbon nanotube reinforced composites with interfacial slippage” , Journal for Multiscale Computational Engineering, 12 (4): 271–289, 2014.
- [18] D.N. Savvas, V. Papadopoulos, M. Papadrakakis, “The effect of interfacial shear strength on damping behavior of carbon nanotube reinforced composites”, International Journal of Solids and Structures 49 3823–3837, 2012.
- [19] V. Papadopoulos, “Stochastic finite elements”, Lecture Notes, National Technical University of Athens, Greece, 2012.
- [20] Machida, K. “Principles of Molecular Mechanics”, Kodansha and John Wiley & Sons Co-publication, Tokyo: 1999.
- [21] Rappe A.K., Casewit C.J., Colwell K.S., et al. “A full periodic-table force-field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations.” Journal of American Chemical Society, Vol. 114, pp. 10024–10035, 1992.
- [22] Brenner D.W. “Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films.”, Physical Review B, Vol. 42, p. 9458, 1990.
- [23] Griffith, A. A. “The Phenomena of Rupture and Flow in Solids”, Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 221 (582–593), 1921.
- [24] P. Wriggers, S.O. Mofteh “Mesoscale models for concrete Homogenization and damage behavior”, Finite Elements in Analysis and Design 42 623 – 636, 2006.
- [25] M. Tavlaki, “Multiscale Finite Element Analysis”, National Technical University of Athens, Master thesis, Greece, 2013.
- [26] R. Huang, W. Yeih, I.C. Sue, “Aggregate effect on elastic moduli of cement - based composite materials”, Journal of marine science and technology, vol.3 No.1 pp. 5-10, 1995.
- [27] Julien Sanahujam, Luc Dormieux, Gilles Chanvillard “Modelling elasticity of a hydrating cement paste”, Cement and Concrete Research 37 1427–1439, 2007.
- [28] Farid Debieb, Said Kenai, “The use of coarse and fine crushed bricks as aggregate in concrete”, Construction and Building Materials 22 886–893, 2008.

- [29] D.L. Grote, S.W. Park¹, M. Zhou, “Dynamic behavior of concrete at high strain rates and pressures: I. experimental characterization”, *International Journal of Impact Engineering* 25 869–886, 2001.
- [30] K.Anbuvelan, Dr.K.Subramanian, “Experimental investigations on Elastic Properties of Concrete containing Steel fiber”, *International Journal of Engineering and Technology (IJET)* Vol 6 No 1 171 - 177, 2014
- [31] James M. Gere, Stephen P. Timoshenko, “Mechanics of materials”, London: Chapman & Hall, 1994.
- [32] M .A .Tasdemir, B .L.Karihaloo, “Effect of Type and Volume Fraction of Aggregate on the Fracture Properties of Concrete”, *Fracture Mechanics of Concrete Structures* 123 – 129, 2001.
- [33] Jeffrey J. Thomas, Hamlin M. Jennings, Andrew J. Allen, “THE SURFACE AREA OF CEMENT PASTE AS MEASURED BY NEUTRON SCATTERING - EVIDENCE FOR TWO C-S-H MORPHOLOGIES”, *Cement and Concrete Research* Volume 28, Issue 6, Pages 897–905, 1998.
- [34] Shraddhakar Harsh, Zhenjia Shen, David Darwin, “Strain-Rate Sensitive Behavior of Cement Paste and Mortar in Compression.”, *ACI Materials Journal*, Volume. 87, No. 5, September-October 1990.
- [35] Gintaris Kaklauskas, Viktor Gribniak, Darius Bacinskas, Povilas Vainiunas, “Shrinkage influence on tension stiffening in concrete members” *Engineering Structures* 31 1305 – 1312, 2009.
- [36] A. Carpinteri, M.H. Aliabadi, “Computational Fracture Mechanics in Concrete Technology” , WIT Press, Southampton, 1999.
- [37] J. Lemaitre, “Handbook of Materials Behavior Models: Failures of Materials”, vol. 2, Academic Press, San Diego, 2001.
- [38] J. Lemaitre, J.P. Sermage, “One damage law for different mechanisms” *Computational Mechanics* 20, 84–88, 1997.
- [39] P. Fanning, O. Kelly, “Smearred crack models of rc beams with externally bonded cfrp plates”, *Computational Mechanics* 26, 325–332, 2000.
- [40] J.G. Rots, “Computational modeling of concrete fracture.” PhD thesis, Technische Universiteit Delft, 1988.
- [41] Simone Musso, Jean-Marc Tulliani, Giuseppe Ferro, Alberto Tagliaferro, “Influence of carbon nanotubes structure on the mechanical behavior of cement composites”, *Composites Science and Technology* 69, 1985–1990, 2009.
- [42] Makar J., Margeson J., Luh, J., “Carbon nanotube/cement composites – early results and potential applications”, 3rd International Conference on Construction Materials:

Performance, Innovations and Structural Implications, Vancouver, B.C., Aug. 22-24 pp. 1-10, 2005.

[43] Anastasia Sobolkina, Viktor Mechtcherine, Vyacheslav Khavrus, Diana Maier, Mandy Mende, Manfred Ritschel, Albrecht Leonhardt, "Dispersion of carbon nanotubes and its influence on the mechanical properties of the cement matrix", *Cement & Concrete Composites* 34, 1104–1113, 2012.

[44] N. Banthia, J. Shengb, "Fracture Toughness of Micro-Fiber Reinforced Cement Composites", *Cement & Concrete Composites* 18, 251-269, 1996.

