



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
«ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ»

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

με τίτλο

**ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΕΦΑΡΜΟΓΗΣ-ΔΙΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ ΓΙΑ ΤΗΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΥΛΙΚΩΝ ΣΕ
ΠΟΛΛΑΠΛΕΣ ΚΛΙΜΑΚΕΣ**

ΑΛΕΞΙΟΣ ΠΑΣΧΟΥ

Αριθμός μητρώου: 52120020

Επιβλέπων: Βησσαρίων Παπαδόπουλος, Καθηγητής

Πρόλογος

Η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία εκπονήθηκε κατά τη χειμερινή περίοδο του ακαδημαϊκού έτους 2021-2022 στα πλαίσια του Διατμηματικού Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών «Υπολογιστική Μηχανική» του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Το αντικείμενο της εργασίας ήταν η ανάπτυξη κατάλληλου προγράμματος για την παραγωγή της μικροδομής σύνθετων υλικών σε πολλαπλές κλίμακες. Η ολοκλήρωσή της απαιτούσε γνώσεις προγραμματισμού, ικανότητα εφαρμογής της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων, καθώς και λεπτομερή βιβλιογραφική ανασκόπηση για την πραγματοποίηση του εγχειρήματός της.

Στο σημείο αυτό, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα Καθηγητή κ. Βησσαρίωνα Παπαδόπουλο για την εμπιστοσύνη του στο πρόσωπό μου με την ανάθεση της συγκεκριμένης εργασίας, την ευκαιρία που μου έδωσε να μελετήσω το ενδιαφέρον θέμα της, καθώς επίσης και την αδιάλειπτη καθοδήγηση του καθ' όλη τη διάρκεια εκπόνησής της. Ταυτόχρονα, οφείλω να εκφράσω την ευγνωμοσύνη μου στο Μεταδιδάκτορα κ. Δημήτριο Σάββα για την άριστη συνεργασία και τη συνεχή βοήθεια που παρείχε κατά τη σύνταξη του προγράμματος της εργασίας.

Αθήνα, Φεβρουάριος 2022

Περίληψη

Η μεταπτυχιακή εργασία ασχολείται με την ανάπτυξη προγράμματος για την προσομοίωση της μικροδομής υλικών. Επικεντρώνεται στα σύνθετα υλικά, τα οποία συγκεντρώνουν το ενδιαφέρον λόγω της ετερογένειας της μικροδομής τους. Η χρησιμότητα του εγχειρήματος έγκειται στον υπολογισμό των μηχανικών ιδιοτήτων των υλικών μέσω της ομογενοποίησης.

Η εργασία απαρτίζεται από δύο τμήματα. Το πρώτο αποτελεί τη βιβλιογραφική ανασκόπηση. Δίνονται οι απαραίτητοι ορισμοί σχετικά με την ομογενοποίηση και τον αντιπροσωπευτικό όγκο υλικού, η δημιουργία του τελευταίου αποτελεί το βασικό στόχο της διατριβής. Γίνεται ανάλυση των διαφορετικών μεθόδων ομογενοποίησης, με μεγαλύτερη επικέντρωση στην αριθμητική ομογενοποίηση. Στη συνέχεια, ακολουθεί η περιγραφή των διαφορετικών μεθόδων ανάπτυξης του αντιπροσωπευτικού όγκου υλικού, καθώς επίσης και του αλγορίθμου *GJK* που πρόκειται να εφαρμοστεί για την ορθή τοποθέτηση των ετερογενειών.

Το δεύτερο τμήμα αποτελεί τη μεθοδολογία που εφαρμόστηκε. Επεξηγείται η αρχιτεκτονική του αναπτυγμένου προγράμματος και αναλύονται τα βήματα που ακολουθεί. Παρουσιάζονται αποτελέσματα από προκύπτοντες αντιπροσωπευτικούς όγκους υλικού και στη συνέχεια γίνεται μια εφαρμογή αριθμητικής ομογενοποίησης για ένα ετερογενές υλικό. Η εργασία ολοκληρώνεται εξηγώντας την επίτευξη των στόχων της και αναφέροντας παρατηρήσεις για περαιτέρω βελτίωση του προγράμματος.

Λέξεις-κλειδιά: Αντιπροσωπευτικός όγκος υλικού, Αλγόριθμος *GJK*, Αριθμητική ομογενοποίηση, Σύνθετα υλικά, Μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων

Abstract

The master thesis approaches the development of a programme for the simulation of materials' microstructure. It focuses on composite materials, which captivate the interest due to the heterogeneity of their microstructure. The usefulness of the project lies on the calculation of the mechanical properties of materials through homogenization.

The thesis consists of two parts. The first part refers to the literature review. The necessary definitions are given regarding homogenization and representative volume element, the development of the latter is the main goal of the dissertation. The different homogenization methods are analysed, with greater focus on numerical homogenization. Afterwards, the different methods for the development of a representative volume element are described, as well as the *GJK* algorithm which is to be applied for the correct placement of the heterogeneities.

The second part is the methodology that has been followed. The architecture of the developed programme is explained and its steps are further analysed. The results of indicative representative volume elements are presented and then a numerical homogenization problem is solved for a heterogeneous material. The thesis concludes indicating the accomplishment of its goals and making remarks for further improvement of the programme.

Keywords: Representative volume element, *GJK* algorithm, Numerical homogenization, Composite materials, Finite element method

Περιεχόμενα

Βιβλιογραφική ανασκόπηση	5
1. Εισαγωγή.....	5
2. Μέθοδοι ομογενοποίησης σύνθετων υλικών.....	8
2.1. Αναλυτική ομογενοποίηση.....	8
2.1.1. «Αραιωμένη» επίλυση (Dilute solution).....	10
2.1.2. Μοντέλο Mori-Tanaka	10
2.1.3. Αυτοσυνεπές σχήμα (Self-consistent scheme)	11
2.2. Αριθμητική ομογενοποίηση	11
2.2.1. Συνοριακές συνθήκες	12
2.2.2. Υπολογισμός φαινομενικών ιδιοτήτων	14
3. Μέθοδοι ανάπτυξης <i>RVE</i>	17
3.1. Παραγωγή μικροδομής	17
3.1.1. Αλγόριθμος τυχαίας διαδοχικής προσρόφησης (<i>RSA</i> algorithm)	17
3.1.2. Τροποποιημένος αλγόριθμος <i>RSA</i> με μεταβολή του όγκου του <i>RVE</i>	18
3.1.3. Αλγόριθμος Lubachevsky–Stillinger	19
3.1.4. Αλγόριθμος «τυχαίου περιπάτου».....	20
3.2. Ευρετικός αλγόριθμος συμπίεσης	21
4. Αλγόριθμος <i>GJK</i>	23
4.1. Άθροισμα/Διαφορά <i>Minkowski</i>	23
4.2. Στηρικτική συνάρτηση χαρτογράφησης.....	23
4.3. Δομή του Αλγορίθμου <i>GJK</i>	25
Μεθοδολογία.....	30
5. Ανάπτυξη μικροδομής	30
5.1. Τροποποίηση του ελέγχου επικάλυψης	34
6. Αποτελέσματα	38
6.1. Παραγόμενη μικροδομή.....	38
6.2. Απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος	44
6.3. Εφαρμογή αριθμητικής ομογενοποίησης	46
7. Συμπεράσματα	50
Βιβλιογραφία	52

Βιβλιογραφική ανασκόπηση

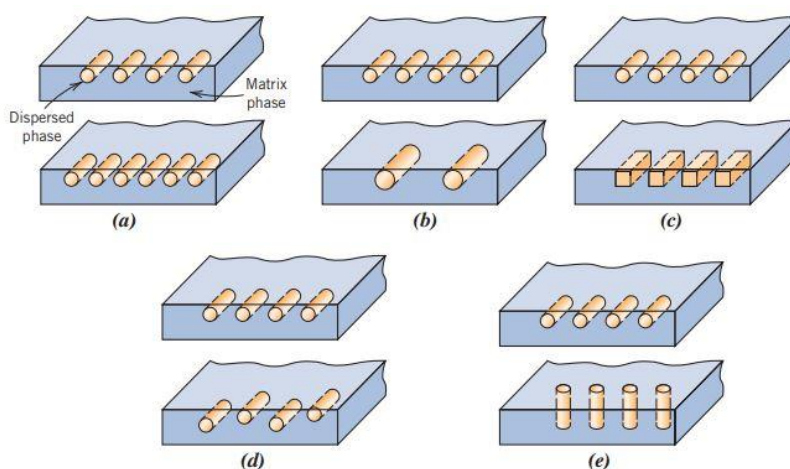
1. Εισαγωγή

Τα σύνθετα υλικά ορίζονται ως «ο μακροσκοπικός συνδυασμός δύο ή περισσότερων διακριτών υλικών, τα οποία έχουν ανάμεσά τους μια πεπερασμένη διεπιφάνεια» (Kabbari, 2007). Η ταξινόμησή τους ως τέταρτη κατηγορία υλικών, μετά τα μεταλλικά, τα κεραμικά και τα πολυμερή, εντοπίζεται στα μέσα του 20^{ου} αιώνα, αν και πολυφασικά υλικά, όπως το ξύλο και το τούβλο, ήταν ήδη γνωστά.

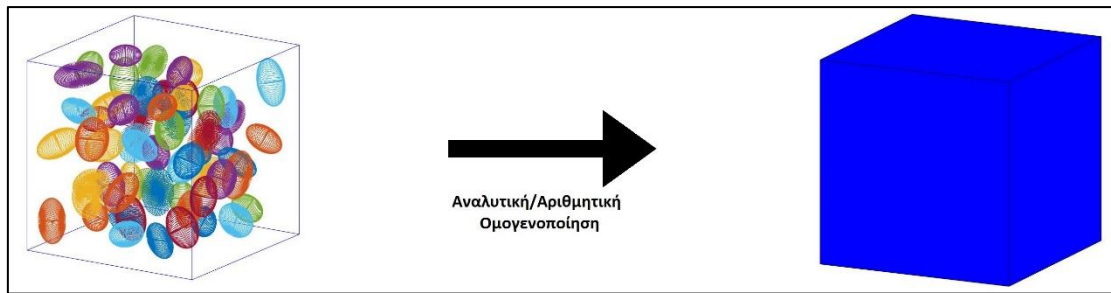
Ένα σύνθετο υλικό είναι, επομένως, ένα πολυφασικό υλικό, το οποίο είναι τεχνητά κατασκευασμένο. Αποτελείται από το μητρικό υλικό, το οποίο είναι συνεχές, και από μία ή περισσότερες ενισχυτικές φάσεις, οι οποίες είναι σε μορφή εγκλεισμάτων και περιβάλλονται από τη μητρική φάση. Ο σκοπός της παραγωγής των σύνθετων υλικών έγκειται στην απόκτηση βελτιωμένων ιδιοτήτων σε σχέση με τις αντίστοιχες που διαθέτει η κάθε διακριτή φάση του σύνθετου υλικού. Βέβαια, ενδέχεται να επιβάλλεται συμβιβασμός ως προς το αποτέλεσμα, με την έννοια της βελτίωσης ορισμένων ιδιοτήτων και της επιδείνωσης κάποιων άλλων (Callister Jr. & Rethwisch, 2018).

Ο συνδυασμός μηχανικών ιδιοτήτων αποτελεί αντικείμενο μελέτης για την ανάπτυξη σύνθετων υλικών. Τα περισσότερα δημιουργούνται για την επίτευξη ενισχυμένων μηχανικών χαρακτηριστικών, όπως η ακαμψία, η σκληρότητα και η αντοχή σε υψηλές θερμοκρασίες. Οι ιδιότητες των σύνθετων υλικών εξαρτώνται από τις ιδιότητες των φάσεών τους, του κατά όγκο ποσοστού τους και της γεωμετρίας των εγκλεισμάτων. Στο τελευταίο συγκαταλέγονται το σχήμα και το μέγεθος των εγκλεισμάτων, η κατανομή και ο προσανατολισμός. Στην **Εικόνα 1.1** φαίνονται τυπικά ορισμένες διαφοροποιήσεις ως προς αυτά τα χαρακτηριστικά (Callister Jr. & Rethwisch, 2018).

Ο ορισμός των ιδιοτήτων ενός σύνθετου υλικού στη μακροσκοπική κλίμακα εξαρτάται από την ορθή ομογενοποίηση των ιδιοτήτων στη μικροσκοπική κλίμακα, η οποία βασίζεται στη γνώση των καταστατικών νόμων και της μικροδομής. Έχουν διατυπωθεί ποικίλες μέθοδοι ομογενοποίησης, οι οποίες διακρίνονται σε αναλυτικές και αριθμητικές (Moussaddy, 2013). Στην **Εικόνα 1.2** απεικονίζεται σχηματικά η προαναφερθείσα μετάβαση από τη μικροσκοπική στη μακροσκοπική κλίμακα.



Εικόνα 1.1: Σχηματική αναπαράσταση διαφοροποίησης των γεωμετρικών και χωρικών χαρακτηριστικών των εγκλεισμάτων: α) Ποσοστό κατά όγκο, β) Μέγεθος, γ) Σχήμα, δ) Κατανομή, ε) Προσανατολισμός (Callister Jr. & Rethwisch, 2018).



Εικόνα 1.2: Γεφύρωση μικροσκοπικής και μακροσκοπικής κλίμακας μέσω της ομογενοποίησης.

Η αριθμητική ομογενοποίηση απαιτεί την τρισδιάστατη αναπαράσταση του ετερογενούς υλικού και την εκτέλεση προσομοιώσεων άσκησης φορτίσεων για τον υπολογισμό των ιδιοτήτων του σύνθετου υλικού. Η απόκριση του όγκου υπολογίζεται μέσω αριθμητικών μεθόδων, όπως η Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων (*FEM*) και ο Γρήγορος Μετασχηματισμός *Fourier* (*FFT*). Η αναπαράσταση βασίζεται στη έννοια του αντιπροσωπευτικού όγκου υλικού (*Representative Volume Element*) (Moussaddy, 2013). Παρακάτω παρατίθενται ορισμοί που έχουν δοθεί για το *RVE* στην επιστημονική βιβλιογραφία:

- Το *RVE* αναφέρεται σε ένα «δείγμα, το οποίο α) είναι κατά μέσο όρο δομικά πλήρως τυπικό του συνολικού μείγματος και β) περιέχει έναν επαρκή αριθμό εγκλεισμάτων ώστε οι συνολικοί φαινομενικοί συντελεστές να είναι αποτελεσματικά ανεξάρτητοι από τις τιμές των δυνάμεων έλξης και μετατόπισης στην επιφάνεια, εφόσον αυτές οι τιμές είναι “μακροσκοπικά ομοιόμορφες”» (Hill, *Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles*, 1963).
- Το *RVE* είναι το «μικρότερο στοιχείο όγκου υλικού του σύνθετου υλικού, για το οποίο η μακροσκοπική καταστατική αναπαράσταση του συνήθους χωρικά σταθερού συνολικού συντελεστή είναι ένα επαρκώς ακριβές μοντέλο για να αντιπροσωπεύει τη μέση καταστατική απόκριση» (Drugan & Willis, 1996).
- Το *RVE* ορίζεται «αποκλειστικά σε δύο περιπτώσεις: *i*) ως μοναδιαία κυψελίδα σε περιοδική μικροδομή και *ii*) ως όγκος που περιέχει ένα πολύ μεγάλο (μαθηματικά άπειρο) σύνολο των στοιχείων της μικροκλίμακας (λ.χ. κόκκοι), κατέχοντας στατιστικά ομογενείς και εργοδικές ιδιότητες» (Ostoja & Starzewski, 2006).

Οι παραπάνω ορισμοί καθορίζουν είτε τη μορφολογία της μικροδομής, είτε τη φυσική συμπεριφορά του *RVE*, είτε και τα δύο. Σε γενικές γραμμές, το *RVE* γίνεται αντιληπτό ως ένας όγκος του ετερογενούς υλικού αρκετά μεγάλου για να είναι στατιστικά αντιπροσωπευτικό του σύνθετου υλικού. Επομένως, απαιτείται να εμπεριέχει ένα δείγμα από όλες τις ετερογένειες που εντοπίζονται στο σύνθετο υλικό (λ.χ. εγκλείσματα και πόροι). Βέβαια, το μέγεθός του πρέπει να είναι σχετικά μικρό, ώστε να θεωρείται όγκος υλικού της μηχανικής συνεχούς μέσου (Kanit, Forest, Galliet, Mounoury, & Jeulin, 2003). Επιπλέον, ένας πολύ μεγάλος όγκος υλικού καθιστά τη διαδικασία υπολογιστικά κοστοβόρα.

Κατά τη δημιουργία του *RVE*, λαμβάνονται υπόψη μια σειρά παραμέτρων εκτός από το συνολικό όγκο του. Η μοντελοποίηση απαιτεί να είναι γνωστά το ποσοστό της ενισχυτικής φάσης (εγκλείσματα) κατά όγκο, το σχήμα και ο προσανατολισμός των εγκλεισμάτων, το ελάχιστο και μέγιστο μέγεθός τους, καθώς επίσης η τυχόν ελάχιστη απόσταση μεταξύ των εγκλεισμάτων και των εγκλεισμάτων με τα όρια του *RVE*. Αντίστοιχες παράμετροι απαιτούνται και στην περίπτωση ύπαρξης πόρων ή εγκλεισμάτων διαφορετικής ενισχυτικής φάσης στο σύνθετο υλικό.

Κατά την τοποθέτηση των εγκλεισμάτων στον όγκο υλικού πρέπει να αποφεύγεται η επικάλυψη μεταξύ τους. Για την επίτευξη αυτού του στόχου έχουν αναπτυχθεί μεθοδολογίες, οι οποίες αναλύονται παρακάτω. Η παρούσα μεταπτυχιακή διατριβή ασχολείται με την ανάπτυξη και αξιοποίηση του αλγορίθμου *GJK* για την παραγωγή του *RVE* (Gilbert, Johnson, & Keerthi, 1988).

Παρακάτω ακολουθεί περαιτέρω ανάλυση των μεθόδων ομογενοποίησης των ετερογενών υλικών και του τρόπου ανάπτυξης *RVE*. Στη συνέχεια εξετάζονται λεπτομερώς τα βήματα του αλγορίθμου *GJK*. Τέλος, ακολουθεί η ανάπτυξη του σχετικού προγράμματος, η παράθεση και αξιολόγηση των αποτελεσμάτων.

2. Μέθοδοι ομογενοποίησης σύνθετων υλικών

2.1. Αναλυτική ομογενοποίηση

Η αναλυτική ομογενοποίηση βασίζεται σε εξιδανικευμένες αναπαραστάσεις σύνθετων υλικών και παράγουν γρήγορες εκτιμήσεις και αυστηρά όρια για τις ιδιότητες του εκάστοτε υλικού. Πέρα από συγκεκριμένες μικροδομές, η ακρίβειά τους δεν έχει αξιολογηθεί ενδελεχώς, με αποτέλεσμα η εφαρμογή τους να είναι περιορισμένη (Moussaddy, 2013).

Παρακάτω ακολουθούν οι μαθηματικές εκφράσεις για την αναλυτική ομογενοποίηση. Θεωρείται ότι το σύνθετο υλικό αποτελείται από δύο φάσεις και τόσο το μητρικό υλικό όσο και η ενισχυτική φάση είναι ιστροπικά ελαστικά υλικά. Τα εγκλείσματα είναι ιδανικά συνδεδεμένα με τη μήτρα, ενώ ταυτόχρονα είναι τοποθετημένα με τυχαίο προσανατολισμό.

Κατά την ομογενοποίηση υπολογίζεται ο τανυστής ελαστικότητας του σύνθετου υλικού C^* , έτσι ώστε:

$$\Sigma = C^* \cdot E, \quad (2.1)$$

όπου Σ και E είναι οι μακροσκοπικές αποκρίσεις της τάσης και της παραμόρφωσης για το σύνθετο υλικό. Στη συνέχεια, γίνεται η συσχέτιση μεταξύ της μακροσκοπικής και μικροσκοπικής κλίμακας ως εξής:

$$\langle \varepsilon(x) \rangle = E \quad (2.2)$$

$$\langle \sigma(x) \rangle = \Sigma \quad (2.3)$$

Τα $\sigma(x)$ και $\varepsilon(x)$ είναι τα τοπικά πεδία τάσης και παραμόρφωσης, αντίστοιχα. Ο συμβολισμός $\langle \cdot \rangle$ αφορά τον υπολογισμό του εκάστοτε μεγέθους κατά μέσο όρο στον όγκο V του σύνθετου υλικού προς ομογενοποίηση, δηλαδή:

$$\langle f(x) \rangle = \frac{1}{V} \int_V f(x) dV \quad (2.4)$$

Τα μικροσκοπικά πεδία δύναται να υπολογιστούν μέσω μητρώων τοπικοποίησης. Επομένως, για την παραμόρφωση και την τάση στη μικροσκοπική κλίμακα προκύπτει:

$$\varepsilon(x) = A(x) \cdot \langle \varepsilon \rangle \quad (2.5)$$

$$\sigma(x) = B(x) \cdot \langle \sigma \rangle \quad (2.6)$$

Οι παραμορφώσεις και οι τάσεις ορίζονται κατά τμήματα στις διαφορετικές φάσεις του υλικού, βάσει των ποσοστών του μητρικού υλικού και της ενισχυτικής φάσης. Δηλαδή, για τις παραμορφώσεις προκύπτει:

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_m = \mathbf{A}_m \cdot \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle \quad (2.7)$$

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_i = \mathbf{A}_i \cdot \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle \quad (2.8)$$

και για τις τάσεις:

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_m = \mathbf{B}_m \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \quad (2.9)$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_i = \mathbf{B}_i \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle, \quad (2.10)$$

όπου οι δείκτες « m » και « i » αναφέρονται στη μητρική και ενισχυτική φάση, αντίστοιχα. Επιπλέον, αποδεικνύεται ότι τα μητρώα τοπικοποίησης της παραμόρφωσης και της τάσης ικανοποιούν τις σχέσεις (Hill, A self-consistent mechanics of composite materials, 1965):

$$c_m \mathbf{A}_m + c_i \mathbf{A}_i = \mathbf{I}, \quad (2.11)$$

$$c_m \mathbf{B}_m + c_i \mathbf{B}_i = \mathbf{I}, \quad (2.12)$$

όπου c_m, c_i κατά αντιστοιχία τα κλάσματα όγκου της μητρικής και ενισχυτικής φάσης και \mathbf{I} ο ταυτοτικός πίνακας. Υπό συνοριακές συνθήκες *Dirichlet* και *Neumann* στο σύνορο του όγκου V , για το σύνθετο υλικό δύο φάσεων ισχύει:

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = c_m \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_m + c_i \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_i \quad (2.13)$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = c_m \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_m + c_i \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_i \quad (2.14)$$

Συνδυάζοντας τις εξ.2.7-2.14:

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle &= c_m \mathbf{C}_m \cdot \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_m + c_i \mathbf{C}_i \cdot \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_i \\ \Rightarrow \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle &= c_m \mathbf{C}_m \cdot \mathbf{A}_m \cdot \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle + c_i \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{A}_i \cdot \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle \\ \Rightarrow \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle &= \mathbf{C}_m \cdot (\mathbf{I} - c_i \mathbf{A}_i) \cdot \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle + c_i \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{A}_i \cdot \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle \\ \Rightarrow \mathbf{C}^* \cdot \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle &= [\mathbf{C}_m + c_i (\mathbf{C}_i - \mathbf{C}_m) \cdot \mathbf{A}_i] \cdot \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle \\ \mathbf{C}^* &= \mathbf{C}_m + c_i (\mathbf{C}_i - \mathbf{C}_m) \cdot \mathbf{A}_i, \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned} c_m \mathbf{C}_m \cdot \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_m &= c_m \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_m \\ \Rightarrow c_m \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_m &= c_m \mathbf{C}_m^{-1} \cdot \mathbf{B}_m \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \quad \textcircled{1} \\ c_i \mathbf{C}_i \cdot \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_i &= c_i \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_i \end{aligned}$$

$$\Rightarrow c_i \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_i = c_i \mathbf{C}_i^{-1} \cdot \mathbf{B}_i \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \quad (2)$$

Από ① και ②:

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle &= c_m \mathbf{C}_m^{-1} \cdot \mathbf{B}_m \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle + c_i \mathbf{C}_i^{-1} \cdot \mathbf{B}_i \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \\ \Rightarrow \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle &= \mathbf{C}_m^{-1} (\mathbf{I} - c_i \mathbf{B}_i) \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle + c_i \mathbf{C}_i^{-1} \cdot \mathbf{B}_i \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \\ \Rightarrow \mathbf{C}^{*-1} \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle &= [\mathbf{C}_m^{-1} + c_i (\mathbf{C}_i^{-1} - \mathbf{C}_m^{-1}) \cdot \mathbf{B}_i] \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \\ \mathbf{C}^{*-1} &= \mathbf{C}_m^{-1} + c_i (\mathbf{C}_i^{-1} - \mathbf{C}_m^{-1}) \cdot \mathbf{B}_i, \end{aligned}$$

(2.16)

προκύπτει ο τανυστής ελαστικότητας του σύνθετου υλικού και ο αντίστροφός του. Επομένως, δύναται να υπολογιστεί ο τανυστής ελαστικότητας του σύνθετου υλικού, εφόσον είναι γνωστό το μητρώο τοπικοποίησης \mathbf{A}_i ή \mathbf{B}_i .

2.1.1. «Αραιωμένη» επίλυση (Dilute solution)

Κατά την «αραιωμένη» επίλυση ή επίλυση Dilute θεωρείται ότι το κάθε έγκλεισμα βρίσκεται σε ένα περιβάλλον άπειρων διαστάσεων, το οποίο διαθέτει τις ιδιότητες του μητρικού υλικού, και δεν υπάρχει αλληλεπίδραση μεταξύ των εγκλεισμάτων. Εφαρμόζεται και σε ετερογενή υλικά με χαμηλό κλάσμα όγκου v_f .

Ο J.D. Eshelby μελέτησε την περίπτωση ενός ομογενούς ελλειψοειδούς εγκλείσματος το οποίο βρίσκεται εντός μιας άπειρης μήτρας (Eshelby, 1957). Τόσο η μήτρα όσο και το έγκλεισμα αποτελούνται από το ίδιο υλικό. Θεωρώντας ότι, απουσία τασικού πεδίου, το έγκλεισμα υπόκειται σε ομοιόμορφη παραμόρφωση, κατέληξε ότι το πεδίο παραμόρφωσης εντός του εγκλείσματος ορίζεται ως:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_i = \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_t, \quad (2.17)$$

όπου \mathbf{S} είναι το μητρώο Eshelby, $\boldsymbol{\varepsilon}_t$ η ομοιόμορφη παραμόρφωση απουσία τασικού πεδίου και $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ η ομοιόμορφη παραμόρφωση στο έγκλεισμα. Από την επίλυση Dilute προκύπτει ότι το μητρώο τοπικότητας του εγκλείσματος \mathbf{A}_i δίνεται από (Benveniste, 1987):

$$\mathbf{A}_i^{Dil} = [\mathbf{I} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{C}_m^{-1} \cdot (\mathbf{C}_i - \mathbf{C}_m)]^{-1}, \quad (2.18)$$

και ο τανυστής ελαστικότητας:

$$\mathbf{C}^{Dil} = \mathbf{C}_m + c_i \{ (\mathbf{C}_i - \mathbf{C}_m) \cdot [\mathbf{I} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{C}_m^{-1} \cdot (\mathbf{C}_i - \mathbf{C}_m)]^{-1} \} \quad (2.19)$$

2.1.2. Μοντέλο Mori-Tanaka

Το μοντέλο Mori-Tanaka λαμβάνει υπόψη τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των εγκλεισμάτων. Είναι κατάλληλο για ετερογενή υλικά με κλάσμα όγκου εγκλεισμάτων 25 – 30%. Ο μέσος όρος των

μεγεθών στο τοπικό πεδίο των εγκλεισμάτων εκφράζονται σε συνάρτηση με το μέσο όρο των μεγεθών στο τοπικό πεδίο του μητρικού υλικού (Mori & Tanaka, 1973). Δηλαδή:

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_i = \mathbf{A}_i^{Dil} \cdot \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_m \quad (2.20)$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_i = \mathbf{B}_i^{Dil} \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_m \quad (2.21)$$

Σε αυτή την περίπτωση, το μητρώο τοπικοποίησης εκφράζεται από (Benveniste, 1987):

$$\mathbf{A}_i^{M-T} = \mathbf{A}_i^{Dil} \cdot [\mathbf{c}_m \mathbf{I} + c_i \mathbf{A}_i^{Dil}]^{-1}, \quad (2.22)$$

και ο τανυστής ελαστικότητας:

$$\mathbf{C}^{M-T} = \mathbf{C}_m + c_i \{ (\mathbf{C}_i - \mathbf{C}_m) \cdot \mathbf{A}_i^{Dil} \} \cdot [\mathbf{c}_m \mathbf{I} + c_i \mathbf{A}_i^{Dil}]^{-1} \quad (2.23)$$

2.1.3. Αυτοσυνεπές σχήμα (Self-consistent scheme)

Το αυτοσυνεπές σχήμα διατυπώθηκε αρχικά από τον A.V. Hershey και αφορούσε μονοφασικά πολυκρυσταλλικά υλικά (Hershey, 1954). Στη συνέχεια, η εφαρμογή του επεκτάθηκε και στα σύνθετα υλικά (Mori & Tanaka, 1973). Βασίζεται στο γεγονός ότι υπάρχει επαρκής απόσταση μεταξύ των εγκλεισμάτων και εξετάζεται παράλληλα η αλληλεπίδραση μεταξύ των διαφορετικών φάσεων (Ortolano, Hernández, & Oliver, 2013). Σύμφωνα με αυτή τη θεωρία, το έγκλεισμα είτε ενσωματώνεται απευθείας σε μια πλασματική ομοιογενή μήτρα, της οποίας αναζητείται ο τανυστής ελαστικότητας, είτε «καλύπτεται» πρώτα από το μητρικό υλικό και στη συνέχεια γίνεται η προαναφερθείσα ενσωμάτωση.

Το μητρώο τοπικοποίησης για το αυτοσυνεπές σχήμα δίνεται από τη σχέση:

$$\mathbf{A}_i^{SC} = [\mathbf{I} + \mathbf{S}^{SC} \cdot (\mathbf{C}^{SC})^{-1} \cdot (\mathbf{C}_i - \mathbf{C}^{SC})]^{-1}, \quad (2.24)$$

και ο τανυστής ελαστικότητας του σύνθετου υλικού:

$$\mathbf{C}^{SC} = \mathbf{C}_m + c_i \{ (\mathbf{C}_i - \mathbf{C}_m) \cdot [\mathbf{I} + \mathbf{S}^{SC} \cdot (\mathbf{C}^{SC})^{-1} \cdot (\mathbf{C}_i - \mathbf{C}^{SC})]^{-1} \}, \quad (2.25)$$

όπου \mathbf{S}^{SC} είναι το μητρώο Eshelby. Η παραπάνω εξίσωση είναι πεπλεγμένη και επιλύεται επαναληπτικά.

2.2. Αριθμητική ομογενοποίηση

Όπως προαναφέρθηκε στο Κεφάλαιο 1, η αριθμητική ομογενοποίηση βασίζεται στην ύπαρξη ενός *RVE*. Σε αντίθεση με τις αναλυτικές μεθόδους, κατά τις οποίες τα τοπικά πεδία των μεγεθών υπολογίζονται κατά προσέγγιση σε ένα θεωρητικά άπειρων διαστάσεων σώμα, οι αριθμητικές

μέθοδοι υπολογίζουν με ακρίβεια τα τοπικά πεδία των μεγεθών σε ένα πεπερασμένο όγκο αναπαράστασης της μικροδομής.

Οι αριθμητικές μέθοδοι *FEM* και *FFT* απαιτούν τη διακριτοποίηση του *RVE*. Είναι αναμενόμενο ότι απαιτείται αυτή η διακριτοποίηση να είναι σε τέτοιο βαθμό, ώστε τα στοιχεία να κατέχουν μέγεθος μικρότερο από τα εσωτερικά χαρακτηριστικά της μικροδομής, δηλαδή από τα εγκλείσματα των ενισχυτικών φάσεων ή τους πόρους. Η διακριτοποίηση οφείλει να είναι ακόμα υψηλότερη σε περιπτώσεις που υπάρχουν μεγάλες αντιθέσεις στα γεωμετρικά μεγέθη της μικροδομής, όπως για παράδειγμα στην περίπτωση εγκλεισμάτων σε σχήμα ινών με μεγάλο μήκος (Moussaddy, 2013).

Η επίλυση με *FFT* απαιτεί την ομοιόμορφη διακριτοποίηση του *RVE* σε στοιχεία κυβικού σχήματος. Αυτός ο περιορισμός ωθεί στην αύξηση του απαιτούμενου αριθμού στοιχείων για την εξαγωγή αξιόλογων αποτελεσμάτων, γεγονός που δρα αρνητικά στο υπολογιστικό κόστος. Αντιθέτως, η επίλυση με *FEM* επιτρέπει τη διαφοροποίηση στο βαθμό διακριτοποίησης ανά περιοχές του *RVE*, ενώ υπάρχει η δυνατότητα επιλογής στοιχείων διαφορετικού σχήματος (Moussaddy, 2013).

2.2.1. Συνοριακές συνθήκες

Οι υποβαλλόμενες συνοριακές συνθήκες σε συνάρτηση με το μέγεθος του *RVE* μεταβάλλουν τις ιδιότητες που προκύπτουν από την ομογενοποίηση. Επιπλέον, καθώς ενδέχεται να υπάρχει ο περιορισμός να γίνει προσομοίωση σε όγκο υλικού μικρότερο από του *RVE*, σε αυτή την περίπτωση οι ιδιότητες που προκύπτουν ονομάζονται *φαινομενικές (apparent properties)*.

Η επιλογή διαφορετικών συνοριακών συνθηκών για δεδομένο μέγεθος του υπό μελέτη όγκου μεταβάλλει τις φαινομενικές ιδιότητες, θέτοντας όρια ως προς τις μέγιστες και ελάχιστες τιμές τους (Huet, 1990). Η επιβολή συνοριακών συνθηκών Dirichlet

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{E} \cdot \mathbf{x}, \quad \forall \mathbf{x} \in V^S, \quad (2.26)$$

όπου \mathbf{u} το διάνυσμα μετατοπίσεων και V^S η επιφάνεια του στοιχείου του όγκου, προσφέρουν το άνω όριο των φαινομενικών ιδιοτήτων. Αντίστοιχα, η επιβολή συνοριακών συνθηκών Neumann

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} = \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n}, \quad \forall \mathbf{x} \in V^S. \quad (2.27)$$

όπου \mathbf{n} το κάθετο διάνυσμα στο σημείο \mathbf{x} στην επιφάνεια V^S , θέτουν το κάτω όριο των φαινομενικών ιδιοτήτων. Στην περίπτωση μικρών αντιθέσεων στις ιδιότητες μεταξύ των διαφορετικών φάσεων του σύνθετου υλικού, τα προαναφερθέντα όρια «στενεύουν» με παράλληλη αύξηση του όγκου του προς μελέτη υλικού. Στο διάγραμμα της **Εικόνας 2.1** γίνεται μια γραφική αναπαράσταση της σύγκλισης.

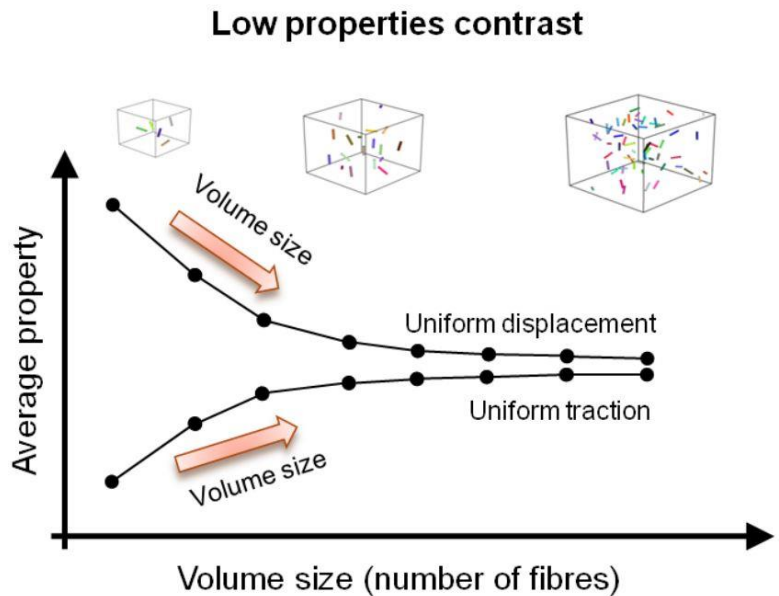
Στην περίπτωση μεγάλων αντιθέσεων στις ιδιότητες μεταξύ των διαφορετικών φάσεων του σύνθετου υλικού, ο ρυθμός σύγκλισης επιβραδύνεται σημαντικά, με αποτέλεσμα να απαιτείται να μελετηθεί πολύ μεγάλος όγκος υλικού. Το τελευταίο δεν ενδείκνυται πάντα, καθώς αυξάνεται ραγδαία το υπολογιστικό κόστος.

Η λύση στο παραπάνω πρόβλημα βρίσκεται στη χρήση περιοδικών συνοριακών συνθηκών (Kanit, Forest, Galliet, Mounoury, & Jeulin, 2003). Μετά την εφαρμογή τους, το πεδίο των μετατοπίσεων παίρνει τη μορφή:

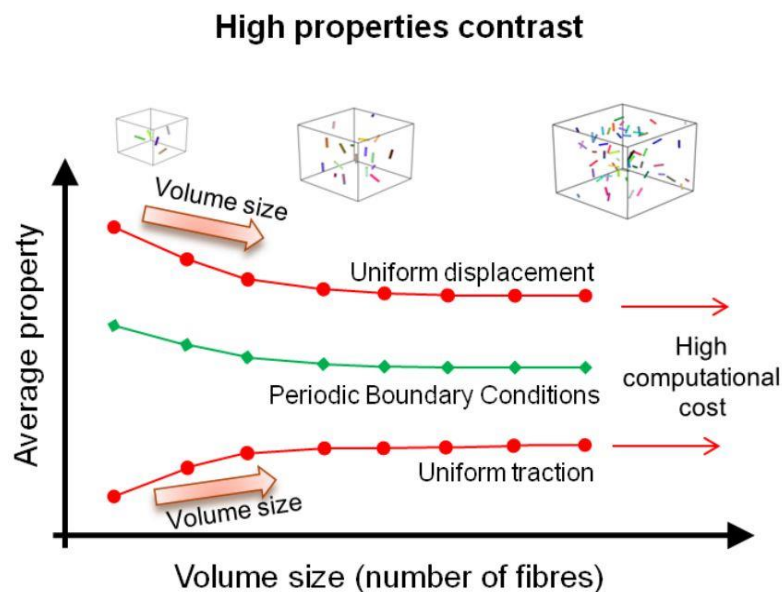
$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{E} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{u}^*(\mathbf{x}),$$

(2.28)

όπου το μέγεθος $\mathbf{u}^*(\mathbf{x})$ αποτελεί μια περιοδική διακύμανση. Η τιμή του είναι ίδια σε δύο ομόλογα σημεία στις αντίθετες όψεις του όγκου V . Η περιοδική διακύμανση για το διάνυσμα έλξης $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}$ λαμβάνει, αντίστοιχα, αντίθετες τιμές σε δύο ομόλογα σημεία στις αντίθετες όψεις του όγκου V . Στο διάγραμμα της **Εικόνας 2.2** γίνεται μια γραφική αναπαράσταση της σύγκλισης των ορίων της ιδιότητας κατά τη χρήση περιοδικών συνοριακών συνθηκών.



Εικόνα 2.1: Εξέλιξη ορίων της τιμής της ιδιότητας για την περίπτωση μικρής διαφοράς ως προς την ιδιότητα μεταξύ των διαφορετικών φάσεων (Moussaddy, 2013).



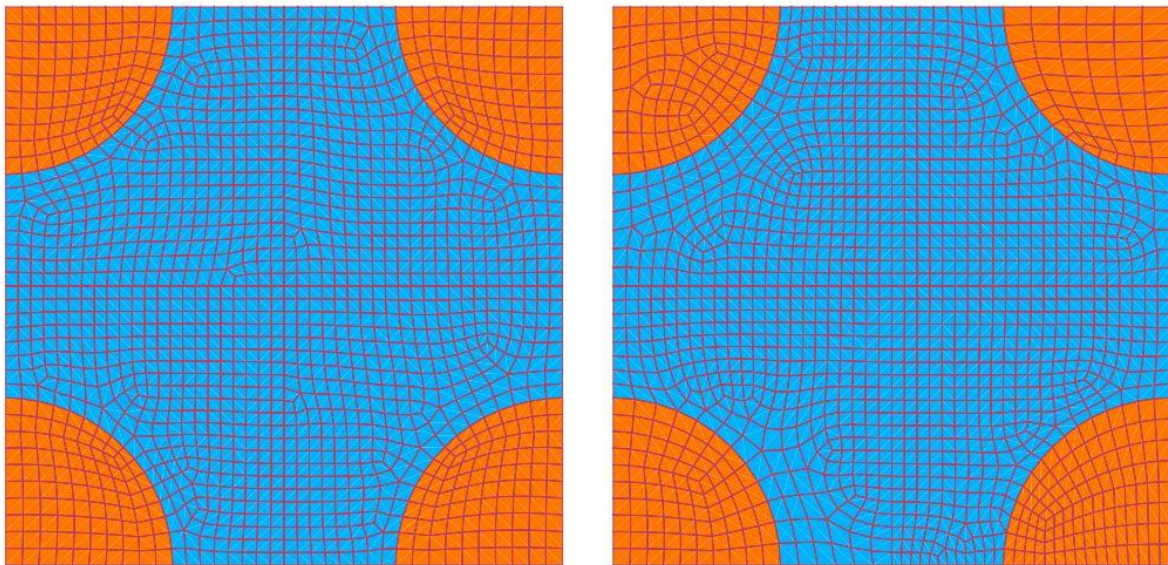
Εικόνα 2.2: Εξέλιξη ορίων της τιμής της ιδιότητας για την περίπτωση μεγάλης διαφοράς ως προς την ιδιότητα μεταξύ των διαφορετικών φάσεων (Moussaddy, 2013).

Για την εφαρμογή περιοδικών συνοριακών συνθηκών στη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων, υπάρχουν ορισμένα προαπαιτούμενα. Συγκεκριμένα, πρέπει να υπάρχει περιοδική μικροδομή και περιοδικό πλέγμα. Περιοδική μικροδομή σημαίνει ότι όταν μια ετερογένεια τέμνει μια επιφάνεια του όγκου V , πρέπει το τμήμα που προεξέχει από αυτόν να συνεχίζει από την απέναντι επιφάνεια. Αντίστοιχα, περιοδικό πλέγμα σημαίνει ότι τα πλέγματα στις απέναντι επιφάνειες του όγκου ταυτίζονται (Moussaddy, 2013). Στην **Εικόνα 2.3** απεικονίζονται δύο περιοδικές μικροδομές, όπου μόνο η μία διαθέτει και περιοδικό πλέγμα. Οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες επιβάλλονται, τελικά, μέσω της διαφοράς των μετατοπίσεων και του αθροίσματος των διανυσμάτων έλξης των συμμετρικών κόμβων. Δηλαδή:

$$\mathbf{u}(x_1) - \mathbf{u}(x_2) = \mathbf{E} \cdot \mathbf{x}, \quad (2.29)$$

$$\boldsymbol{\sigma}(x_1) \cdot \mathbf{n}_1 + \boldsymbol{\sigma}(x_2) \cdot \mathbf{n}_2 = 0, \quad (2.30)$$

όπου x_1 και x_2 οι συντεταγμένες των συμμετρικών κόμβων.



Εικόνα 2.3: Περιοδικές μικροδομές RVE. Το αριστερό RVE διαθέτει περιοδικό πλέγμα, ενώ το δεξιό έχει μη περιοδικό πλέγμα (Tyrus, Gosz, & DeSantiago, 2007).

2.2.2. Υπολογισμός φαινομενικών ιδιοτήτων

Στον τρισδιάστατο χώρο, ο τανυστής ελαστικότητας είναι ένας τανυστής 4^{ης} τάξης C_{ijkl} , δηλαδή περιέχει συνολικά 81 συντελεστές. Λόγω, όμως, της συμμετρικότητας των τανυστών της τάσης και της παραμόρφωσης, ο τανυστής ελαστικότητας διαθέτει τις παρακάτω ιδιότητες (Sadd, 2009):

$$\begin{aligned} C_{ijkl} &= C_{jikl} \\ C_{ijkl} &= C_{jilk} \end{aligned} \quad (2.31)$$

Βάσει των παραπάνω ιδιοτήτων ο αριθμός των συντελεστών μειώνεται σε 36. Από τις σχέσεις για την ενέργεια παραμόρφωσης, προκύπτει η συμμετρικότητα του τανυστή ελαστικότητας και οι συντελεστές του περιορίζονται σε 21. Επομένως, έχοντας υπολογίσει το φαινομενικό τανυστή ελαστικότητας $\bar{\mathbf{C}}$, η μακροσκοπική καταστατική σχέση για ένα ανισότροπο υλικό παίρνει τη μορφή:

$$\bar{\mathbf{\Sigma}} = \bar{\mathbf{C}} \cdot \bar{\mathbf{E}} \Rightarrow \begin{bmatrix} \bar{\sigma}_{11} \\ \bar{\sigma}_{22} \\ \bar{\sigma}_{33} \\ \bar{\sigma}_{12} \\ \bar{\sigma}_{23} \\ \bar{\sigma}_{31} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{C}_{1111} & & & & & & \\ \bar{C}_{2211} & \bar{C}_{2222} & & & & & \\ \bar{C}_{3311} & \bar{C}_{3322} & \bar{C}_{3333} & & & & \\ \bar{C}_{1211} & \bar{C}_{1222} & \bar{C}_{1233} & \bar{C}_{1212} & & & \\ \bar{C}_{2311} & \bar{C}_{2322} & \bar{C}_{2333} & \bar{C}_{2312} & \bar{C}_{2323} & & \\ \bar{C}_{3111} & \bar{C}_{3122} & \bar{C}_{3133} & \bar{C}_{3112} & \bar{C}_{3123} & \bar{C}_{3131} & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\epsilon}_{11} \\ \bar{\epsilon}_{22} \\ \bar{\epsilon}_{33} \\ 2\bar{\epsilon}_{12} \\ 2\bar{\epsilon}_{23} \\ 2\bar{\epsilon}_{31} \end{bmatrix} \quad (2.32)$$

Οι συντελεστές του τανυστή $\bar{\mathbf{C}}$ υπολογίζονται με έξι προσομοιώσεις στο *RVE*, επιβάλλοντας σε κάθε περίπτωση ένα διαφορετικό πεδίο παραμορφώσεων (συνοριακές συνθήκες *Dirichlet*) στους συνοριακούς κόμβους του όγκου, όπως φαίνονται στην εξ. 2.33 (Stefanou, Dimitrios, & Metsis, 2021).

$$\bar{\mathbf{\epsilon}} = \left\{ \begin{bmatrix} \bar{\epsilon}_{11} = 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ \bar{\epsilon}_{22} = 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \bar{\epsilon}_{33} = 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \bar{\epsilon}_{12} = 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \bar{\epsilon}_{23} = 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \bar{\epsilon}_{31} = 1 \end{bmatrix} \right\} \quad (2.33)$$

Οι πρώτες τρεις προσομοιώσεις αφορούν, δηλαδή, τις περιπτώσεις ορθής παραμόρφωσης και οι επόμενες τρεις τις περιπτώσεις της διατμητικής παραμόρφωσης. Το διάνυσμα μετατόπισης σε ένα συνοριακό κόμβο, στον οποίο επιβάλλεται ένας προαναφερθέν τανυστής παραμόρφωσης, υπολογίζεται από:

$$\mathbf{u}_b = \mathbf{D}_b^T \cdot \bar{\mathbf{\epsilon}}, \quad (2.34)$$

όπου

$$\mathbf{D}_b = \begin{bmatrix} 2x_b & 0 & 0 \\ 0 & 2y_b & 0 \\ 0 & 0 & 2z_b \\ y_b & x_b & 0 \\ 0 & z_b & y_b \\ z_b & 0 & x_b \end{bmatrix} \quad (2.35)$$

Το όριο συμπιεστότητας \bar{k} και το μέτρο διάτμησης \bar{G} για τα ισότροπα ελαστικά υλικά υπολογίζονται, επιβάλλοντας κατά αντιστοιχία τους παρακάτω τανυστές παραμόρφωσης στους συνοριακούς κόμβους.

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \left\{ \begin{array}{l} \left[\begin{array}{l} \bar{\varepsilon}_{11} = 1/3 \\ \bar{\varepsilon}_{22} = 1/3 \\ \bar{\varepsilon}_{33} = 1/3 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] , \left[\begin{array}{l} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \bar{\varepsilon}_{12} = 1/2 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \end{array} \right\}$$

(2.36)

Αντίστοιχα, οι συντελεστές του τανυστή $\bar{\boldsymbol{C}}$ υπολογίζονται και με επιβολή κατάλληλων φορτίσεων στους συνοριακούς κόμβους του *RVE* (συνοριακές συνθήκες *Neumann*). Στην ουσία, με συνοριακές συνθήκες *Dirichlet* θεωρείται μια δεδομένη μακροσκοπική παραμόρφωση $\bar{\boldsymbol{E}}$, ενώ με συνοριακές συνθήκες *Neumann* γίνεται επίλυση για μια δεδομένη μακροσκοπική τάση $\bar{\boldsymbol{\Sigma}}$. Σε κάθε περίπτωση, το άγνωστο μακροσκοπικό μέγεθος υπολογίζεται ύστερα από την επίλυση σύμφωνα με την εξ. 2.4, δηλαδή:

$$\bar{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{V} \int_V \bar{\boldsymbol{\sigma}}(\boldsymbol{x}) dV$$

$$\bar{\boldsymbol{E}} = \frac{1}{V} \int_V \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{x}) dV,$$

(2.37)

όπου V ο όγκος του *RVE*. Με γνωστή τη μακροσκοπική τάση και παραμόρφωση, ο τανυστής ελαστικότητας $\bar{\boldsymbol{C}}$ προκύπτει από την εξ. 2.32.

3. Μέθοδοι ανάπτυξης *RVE*

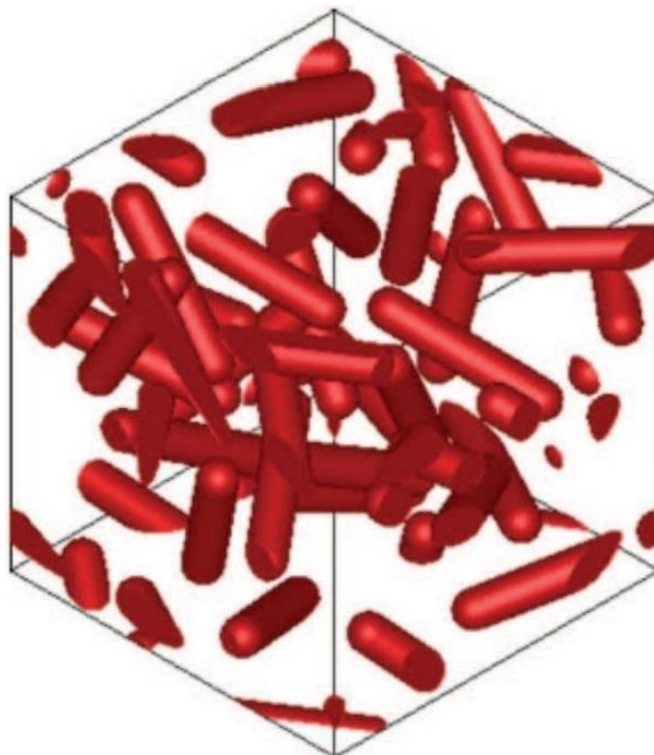
3.1. Παραγωγή μικροδομής

Η παραγωγή της μικροδομής ενός σύνθετου υλικού δύναται να πραγματοποιηθεί με δύο τρόπους. Ο πρώτος απαιτεί την ύπαρξη ενός πραγματικού ή εικονικού δείγματος της μικροδομής και αποτύπωσής της μέσω πειραματικών τεχνικών ανακατασκευής εικόνων. Οι τελευταίες, όμως, απαιτούν εξειδικευμένο εξοπλισμό. Ο δεύτερος τρόπος βασίζεται σε προσομοίωση της μικροδομής παραγόμενη από Η/Υ αξιοποιώντας αλγόριθμους τυχαίας παραγωγής (Moussaddy, 2013). Παρακάτω, αναλύονται ορισμένοι αλγόριθμοι που χρησιμοποιούνται για αυτό το σκοπό.

3.1.1. Αλγόριθμος τυχαίας διαδοχικής προσρόφησης (*RSA algorithm*)

Ο αλγόριθμος τυχαίας διαδοχικής προσρόφησης (*Random Sequential Adsorption algorithm*) ακολουθεί σταδιακή τοποθέτηση των ετερογενειών στον όγκο του *RVE*. Συγκεκριμένα, τοποθετείται το κάθε έγκλεισμα μεμονωμένα σε τυχαία θέση και ελέγχεται αν υπάρχει τομή με προηγούμενο τοποθετημένο έγκλεισμα. Στην περίπτωση επικάλυψης, το έγκλεισμα επανατοποθετείται σε καινούρια θέση μέχρι να μην καταλαμβάνει κοινό χώρο με άλλο έγκλεισμα. Η διαδικασία ολοκληρώνεται όταν επιτευχθεί το απαιτούμενο κλάσμα όγκου v_f της ετερογένειας (Feder, 1980).

Ο αλγόριθμος *RSA* είναι ο πλέον ευρέως εφαρμοσμένος για την αναπαράσταση *RVE*. Παρόλα αυτά, η αξιοποίηση του χώρου εκ μέρους του δεν είναι ικανοποιητική, ενώ η εκτέλεσή του γίνεται ιδιαίτερα αργή σε υψηλά κλάσματα όγκου (Pathan, Tagarielli, Patsias, & Baiz-Villafranca, 2017). Ο S. Torquato και λοιποί διατύπωσαν ότι υπάρχει στο κλάσμα όγκου ένα άνω όριο εμπλοκής $v_f = 0.54$ για τον αλγόριθμο *RSA* (Torquato, Uche, & Stillinger, 2006). Παρακάτω γίνεται αναφορά σε μια μεθοδολογία, η οποία δύναται να αντιμετωπίσει τον τελευταίο περιορισμό.



Εικόνα 3.1: *RVE* με κλάσμα όγκου ετερογενειών 10%, το οποίο είναι αποτέλεσμα του αλγορίθμου τυχαίας διαδοχικής προσρόφησης (Hua & Gu, 2013).

3.1.2. Τροποποιημένος αλγόριθμος RSA με μεταβολή του όγκου του RVE

Οι J. Segurado και J. Llorca διατύπωσαν μια τροποποίηση του αλγορίθμου RSA για ευκολότερη επίτευξη υψηλού κλάσματος όγκου (Segurado & Llorca, 2002). Αρχικά, ακολούθησαν την τυποποιημένη μεθοδολογία RSA και τοποθέτησαν 30 σφαιρικά εγκλείσματα σε ένα RVE. Σε αυτό το σημείο, το κλάσμα όγκου ήταν χαμηλότερο από το στόχο για το επιθυμητό v_f που είχε τεθεί.

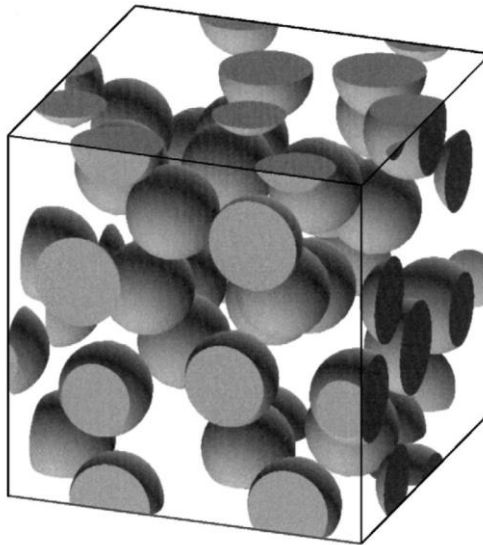
Στη συνέχεια, εκτελέστηκε μια επαναληπτική διαδικασία, κατά την οποία το RVE συμπιεζόταν, μειώνοντας το συνολικό του όγκο V και ταυτόχρονα αυξάνοντας το κλάσμα όγκου των ετερογενειών. Σε κάθε επανάληψη, οι συντεταγμένες του κέντρου των εγκλεισμάτων μεταβάλλονταν βάσει ενός συντελεστή συμπίεσης s_c . Επομένως, αν κατά την $N - 1$ επανάληψη οι συντεταγμένες ενός εγκλείσματος ήταν \mathbf{x}_{N-1} , τότε κατά την N επανάληψη μεταβλήθηκαν σε:

$$\mathbf{x}_N = \mathbf{x}_{N-1} s_c \quad (3.1)$$

Μόλις ολοκληρώθηκε η μετακίνηση των εγκλεισμάτων, ακολούθησε ο έλεγχος για την περίπτωση επικάλυψης μεταξύ τους. Στην περίπτωση τομής δύο εγκλεισμάτων, το ένα μετακινούταν σε μια τυχαία κατεύθυνση \mathbf{u} κατά μία απόσταση καθορισμένη από την ακτίνα r του εγκλείσματος και ενός νέου συντελεστή συμπίεσης s_c^* (εξ. 3.2). Η νέα του θέση γινόταν δεκτή όταν δεν υπήρχε καινούρια επικάλυψη. Σε αντίθετη περίπτωση, το εγκλείσμα επέστρεφε στην αρχική θέση \mathbf{x}_N που προέκυψε από την εξ. 3.1 και μετακινούταν εκ νέου σε τυχαία κατεύθυνση.

$$\mathbf{x}'_N = \mathbf{x}_N + s_c^* r \mathbf{u} \quad (3.2)$$

Η συγκεκριμένη επανάληψη ολοκληρωνόταν μόλις δεν υπήρχε καμία επικάλυψη. Η διαδικασία τερματιζόταν όταν επιτυγχανόταν το επιθυμητό κλάσμα όγκου. Για αποφυγή κωλύματος εκτέλεσης του αλγορίθμου, ο συντελεστής s_c^* μειωνόταν σταδιακά για να περιορίζεται η μετατόπιση των εγκλεισμάτων. Επιπροσθέτως, στην περίπτωση πολλαπλών αποτυχιών τοποθέτησης κάποιου εγκλείσματος κατά την επανάληψη N , τα εγκλείσματα επανατοποθετούνταν στις θέσεις της προηγούμενης επανάληψης $N - 1$. Ο όγκος του RVE ανακτούσε το προηγούμενο μέγεθος και η συμπύκνωσή του επαναλαμβανόταν με υψηλότερο συντελεστή s_c .



Εικόνα 3.2: Παράδειγμα RVE με $v_f = 0.25$ που δημιουργήθηκε με τον τροποποιημένο αλγόριθμο RSA (Segurado & Llorca, 2002).

3.1.3. Αλγόριθμος Lubachevsky–Stillinger

Οι B.D. Lubachevsky και F.H. Stillinger επινόησαν μία μέθοδο βασισμένη στη μοριακή δυναμική (Lubachevsky & Stillinger, 1990). Σύμφωνα με το μοντέλο που ανέπτυξαν, τοποθετούνται στο RVE ένας προεπιλεγμένος αριθμός εγκλεισμάτων N . Τα εγκλείσματα είναι σε αυτό το στάδιο σημειακά και έχουν μηδενικό όγκο. Στο κάθε έγκλεισμα δίνεται μια αρχική ταχύτητα σε τυχαία κατεύθυνση. Επιπλέον, αποκτούν ένα κοινό ρυθμό ανάπτυξης, ο οποίος εκφράζεται από μια συνάρτηση $\alpha(t)$, όπου $t \geq 0$ ο χρόνος. Σχετικά με την τελευταία, υπάρχει η απαίτηση:

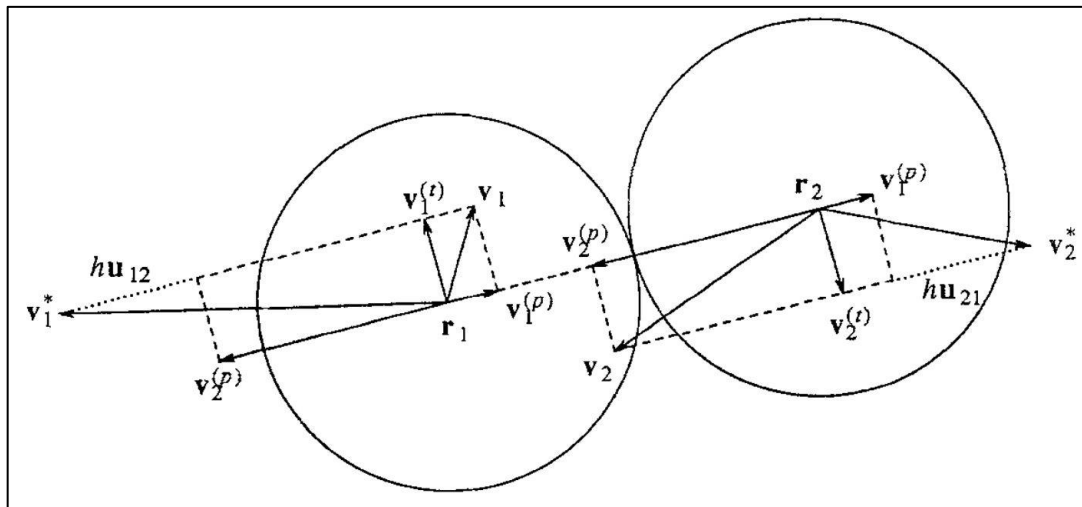
1. $\alpha(0) = 0$.
2. Να είναι αύξουσα συνάρτηση.
3. $\lim_{t \rightarrow +\infty} \alpha(t) = +\infty$.

Καθώς ο αλγόριθμος εκτελείται, σε κάθε βήμα του χρόνου τα εγκλείσματα μετακινούνται και ταυτόχρονα διογκώνονται. Προφανώς, σε κάθε καινούριο βήμα αυξάνεται η πιθανότητα να υπάρξει επικάλυψη μεταξύ των εγκλεισμάτων. Στην **Εικόνα 3.3** απεικονίζονται δύο κυκλικά εγκλείσματα 1 και 2, τα οποία πριν τη μεταξύ τους επικάλυψη διαθέτουν ταχύτητες \mathbf{v}_1 και \mathbf{v}_2 , αντίστοιχα. Στο τοπικό σύστημα συντεταγμένων οι ταχύτητες μπορούν να γραφούν σε μία παράλληλη συνιστώσα (p) και σε μία κάθετη (t) σε σχέση με τη γραμμή που συνδέει τα κέντρα των δύο εγκλεισμάτων. Δηλαδή:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1 &= \mathbf{v}_1^p + \mathbf{v}_1^t \\ \mathbf{v}_2 &= \mathbf{v}_2^p + \mathbf{v}_2^t \end{aligned} \tag{3.3}$$

Η σύγκρουση των εγκλεισμάτων δεν οφείλεται στην κάθετη συνιστώσα των ταχυτήτων τους, επομένως αυτές παραμένουν απaráλλαχτες. Αντιθέτως, η παράλληλη συνιστώσα τους ευθύνεται για την εν δυνάμει επικάλυψη, οι οποία μεταβάλλεται για το κάθε έγκλεισμα με τον παρακάτω τρόπο:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1^{p'} &= \mathbf{v}_2^p + h\mathbf{u}_{12} \\ \mathbf{v}_2^{p'} &= \mathbf{v}_1^p + h\mathbf{u}_{21}, \end{aligned} \tag{3.4}$$



Εικόνα 3.3: Κυκλικά εγκλείσματα πριν τη μεταξύ τους επικάλυψη (Lubachevsky & Stillinger, 1990).

όπου $h > 0$ και \mathbf{u} το μοναδιαίο διάνυσμα:

$$\mathbf{u}_{12} = \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = -\mathbf{u}_{21},$$

(3.5)

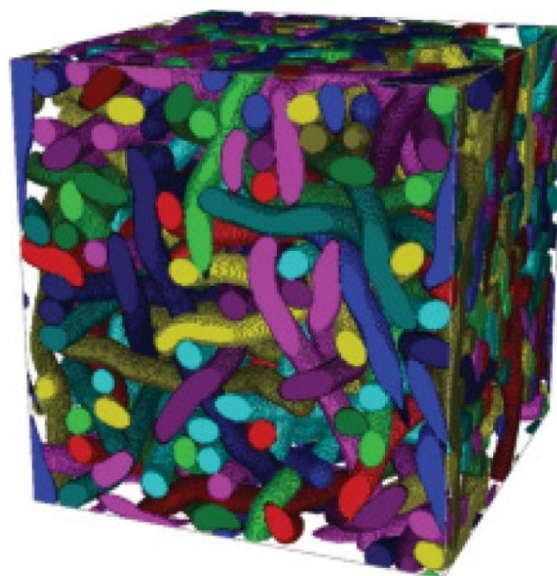
όπου $\mathbf{r}_{1,2}$ τα διανύσματα με μέτρο την ακτίνα του εκάστοτε εγκλείσματος, όπως απεικονίζονται στην Εικόνα 3.3.

Οι V. Salnikov, D. Choï και P. Karamian-Surville έχουν διατυπώσει δύο διαφορετικές ποιοτικές τεχνικές σχετικά με την παραπάνω μεθοδολογία (Salnikov, Choï, & Karamian-Surville, 2015). Συγκεκριμένα, έχουν διακρίνει την τεχνική καθοδηγούμενη από γεγονότα (data-driven event) και την τεχνική καθοδηγούμενη από το χρόνο (time-driven event).

Στη μοριακή δυναμική καθοδηγούμενη από γεγονότα δε δίνεται σημασία στη δυναμική αυτή καθαυτή, αλλά στη διαμόρφωση που θα ακολουθήσει ύστερα από ένα γεγονός. Στην προκειμένη περίπτωση, αυτό το γεγονός είναι η επικάλυψη δύο εγκλεισμάτων ή η τομή μεταξύ ενός εγκλείσματος και του ορίου του RVE. Όποτε ένα γεγονός λαμβάνει χώρα, μεταβάλλονται ορισμένοι παράμετροι του αλγορίθμου. Ο τρόπος αντιμετώπισης των συγκρούσεων μεταξύ των εγκλεισμάτων στη μεθοδολογία των Lubachevsky και Stillinger την καθιστούν καθοδηγούμενη από γεγονότα. Στη μοριακή δυναμική καθοδηγούμενη από το χρόνο μεταβάλλονται οι παράμετροι σε κάθε βήμα. Η τεχνική αυτή είναι πιο αποδοτική, δεδομένου ότι υπάρχει εύκολος τρόπος υπολογισμού του χρόνου του επόμενου γεγονότος.

3.1.4. Αλγόριθμος «τυχαίου περιπάτου»

Οι H. Altendorf και D. Jeulin έχουν προτείνει έναν αλγόριθμο βασισμένο στη μέθοδο του «τυχαίου περιπάτου» (Altendorf & Jeulin, 2011). Συγκεκριμένα, προσομοίωσαν έναν όγκο που περιείχε ετερογένειες σχήματος καμπτόμενων ινών. Για την αναπαράσταση του κάθε εγκλείσματος,



Εικόνα 3.4: RVE με κλάσμα όγκου $v_f=0.5$ και ετερογένειες καμπτόμενων ινών, το οποίο δημιουργήθηκε με τη μέθοδο «τυχαίου περιπάτου» (Altendorf & Jeulin, 2011).

τοποθετούσαν σφαίρες, οι θέσεις των οποίων ορίζονταν με τη μέθοδο «τυχαίου περιπάτου». Η αλυσίδα που προέκυπτε από τις σφαίρες κάθε εγκλείσματος όριζε τη διαμόρφωση της κάθε ίνας. Οι σφαίρες υποβάλλονταν σε «απωστικές δυνάμεις» για να αποχωρίζονται τεμνόμενες σφαίρες και σε «δυνάμεις ανάκτησης», ώστε να μην αλλοιώνεται η δομή της ίνας. Στην **Εικόνα 3.4** απεικονίζεται η μικροδομή που επιτεύχθηκε με αυτή τη διαδικασία.

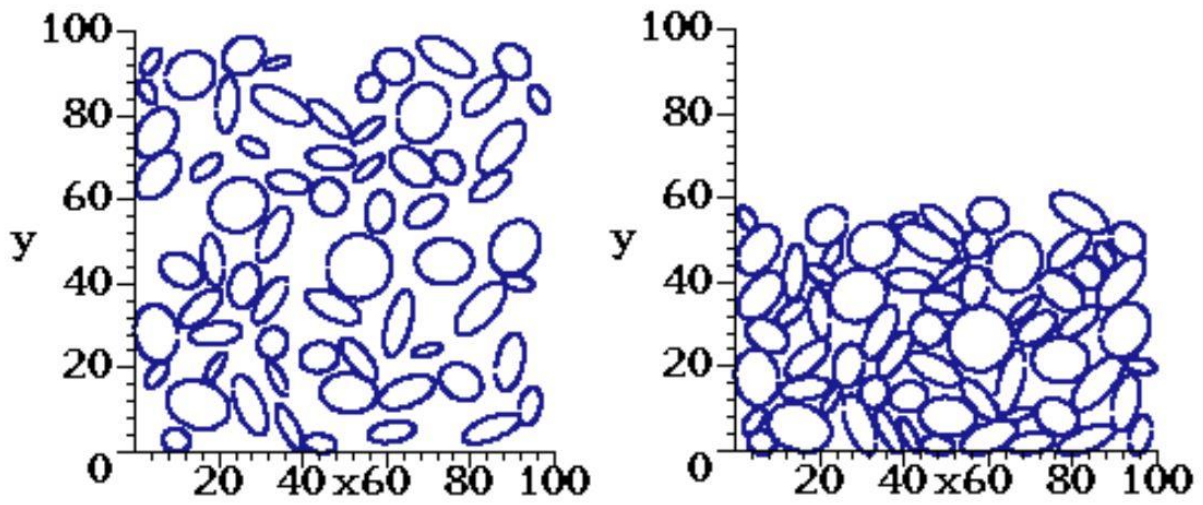
3.2. Ευρετικός αλγόριθμος συμπίεσης

Παραπάνω αναλύθηκαν οι βασικοί αλγόριθμοι αναπαράστασης της μικροδομής ενός *RVE* που εντοπίζονται στη βιβλιογραφία. Η κάθε μέθοδος διαθέτει τρόπους αποφυγής των επικαλύψεων και επίτευξης του επιθυμητού κλάσματος όγκου. Παρόλα αυτά, ο απαιτούμενος χρόνος ολοκλήρωσης της διαδικασίας εξαρτάται από την τυχαιότητα με την οποία τοποθετούνται τα εγκλείσματα στο χώρο. Αυτό ενδέχεται να προκαλεί μεγάλες χρονικές αποκλίσεις στην περάτωση του αλγορίθμου για υψηλά κλάσματα όγκου ή ακόμα και τη μη περάτωσή του.

Ο αλγόριθμος συμπίεσης δύναται να βοηθήσει στο παραπάνω πρόβλημα. Στην ουσία, ο σκοπός του είναι να συμπιέσει τις ετερογένειες μεταξύ τους, συγκεντρώνοντας τον κενό χώρο του *RVE* και θέτοντάς τον ικανό να δεχτεί ένα καινούριο έγκλεισμα. Αρχικά, ορίζεται το μέγεθος της απόστασης, με την οποία θα γίνει δοκιμή να μετακινηθούν τα ήδη τοποθετημένα εγκλείσματα. Στη συνέχεια, τα εγκλείσματα μετακινούνται προς ένα σύνορο του *RVE* (για παράδειγμα στο δισδιάστατο χώρο θα κινηθούν προς τα πάνω, κάτω, δεξιά ή αριστερά). Κατά τη μετακίνησή του, η κατεύθυνση του κάθε εγκλείσματος προς το σύνορο έχει μια διακύμανση $\pm 45^\circ$. Αν δεν υπάρχει επικάλυψη ή τομή με το σύνορο του *RVE*, η καινούρια θέση ενός εγκλείσματος γίνεται δεκτή. Διαφορετικά, επανατοποθετείται στην προηγούμενη θέση του (Häfner, Eckardt, & Könke, 2003).

Έχει σημασία η σειρά με την οποία θα κληθεί το κάθε έγκλεισμα για να αποπειραθεί η μετατόπισή του και αυτό εξαρτάται από τη γενική κατεύθυνση στην οποία θα κινηθούν όλα τα εγκλείσματα και από τις συντεταγμένες του εκάστοτε εγκλείσματος. Για παράδειγμα, αν σε ένα δισδιάστατο χώρο επιλεγεί το κάτω σύνορο ως γενική κατεύθυνση, είναι ευνοϊκό να επιχειρηθεί να μετακινηθούν εκείνα τα εγκλείσματα που βρίσκονται εγγύτερα σε αυτό. Επομένως, η ταξινόμησή τους γίνεται με αύξουσα σειρά ως προς την απόσταση από το συγκεκριμένο σύνορο του όγκου.

Με την ολοκλήρωση του αλγορίθμου συμπίεσης, επαναυπολογίζεται η απόσταση μετατόπισης για την επόμενη εκτέλεσή του. Αν το ποσοστό των εγκλεισμάτων που μετακινήθηκαν επιτυχώς υπερέβησαν ένα άνω όριο (π.χ. 80%), η απόσταση μετατόπισης αυξάνεται. Διαφορετικά μειώνεται, αν δεν υπερέβησαν ένα κάτω όριο (π.χ. 20%) (Häfner, Eckardt, & Könke, 2003). Στην **Εικόνα 3.5** απεικονίζεται η ίδια μικροδομή πριν και μετά από 60 επαναλήψεις του αλγορίθμου συμπίεσης.



Εικόνα 3.5: Μικροδομή με 65 εγκλείσματα πριν και μετά την εκτέλεση 60 επαναλήψεων του αλγόριθμου συμπίεσης (Häfner, Eckardt, & Könke, 2003).

4. Αλγόριθμος GJK

Ο αλγόριθμος *GJK* αναπτύχθηκε από τους Elmer G. Gilbert, Daniel W. Johnson και S. Sathiya Keerthi (Gilbert, Johnson, & Keerthi, 1988). Ο σκοπός του είναι να ελέγχει αν δύο σχήματα τέμνονται και κατ' επέκταση να υπολογίζει την απόσταση μεταξύ τους στην περίπτωση μη τομής τους. Ο αλγόριθμος λειτουργεί για κυρτά σχήματα, ενώ στην περίπτωση μη κυρτών σχημάτων μπορεί να εφαρμοστεί με διαίρεση του κάθε σχήματος σε επιμέρους κυρτά σχήματα. Για την κατανόηση της δομής του απαιτείται η γνώση σχετικά με το άθροισμα (και διαφορά) *Minkowski* και τη στηρικτική συνάρτηση χαρτογράφησης. Οι δύο έννοιες αναλύονται παρακάτω.

4.1. Άθροισμα/Διαφορά *Minkowski*

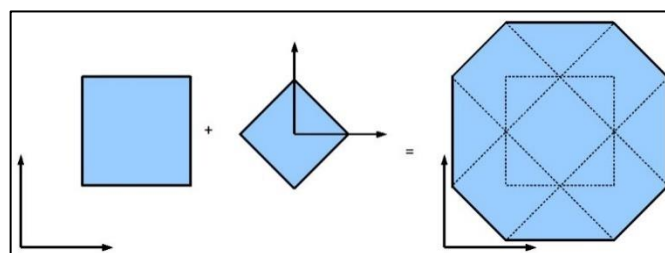
Η έννοια του αθροίσματος (και διαφοράς) *Minkowski* προκύπτει από τη θεωρία συνόλων. Στην **Εικόνα 4.1** απεικονίζεται ένα παράδειγμα του αθροίσματος *Minkowski*. Έστω ότι αθροίζονται το σύνολο A με σημεία $\alpha \in A$ και το σύνολο B με σημεία $\beta \in B$, τότε το άθροισμα *Minkowski* ορίζεται ως εξής:

$$C = A + B = \{\alpha + \beta : \alpha \in A, \beta \in B\} \quad (4.1)$$

Η παραπάνω εξίσωση σημαίνει ότι το σύνολο C ορίζεται όταν κάθε σημείο α του συνόλου A αθροίζεται με κάθε σημείο β του συνόλου B . Με αντίστοιχο τρόπο ορίζεται η διαφορά *Minkowski*, δηλαδή:

$$C = A - B = \{\alpha - \beta : \alpha \in A, \beta \in B\} \quad (4.2)$$

Επομένως το σύνολο C ορίζεται όταν από κάθε σημείο α του συνόλου A αφαιρείται κάθε σημείο β του συνόλου B . Στην περίπτωση που τα σύνολα A και B τέμνονται, θα έχουν τουλάχιστον ένα κοινό σημείο. Ως αποτέλεσμα, το σύνολο C θα περιέχει το σημείο $O(0,0)$, δηλαδή την αρχή των αξόνων. Σε αντίθετη περίπτωση, η απόσταση του συνόλου C από την αρχή των αξόνων ισούται με την απόσταση μεταξύ των συνόλων A και B .



Εικόνα 4.1: Άθροισμα *Minkowski* δύο πολυγώνων (*Lindemann*).

4.2. Στηρικτική συνάρτηση χαρτογράφησης

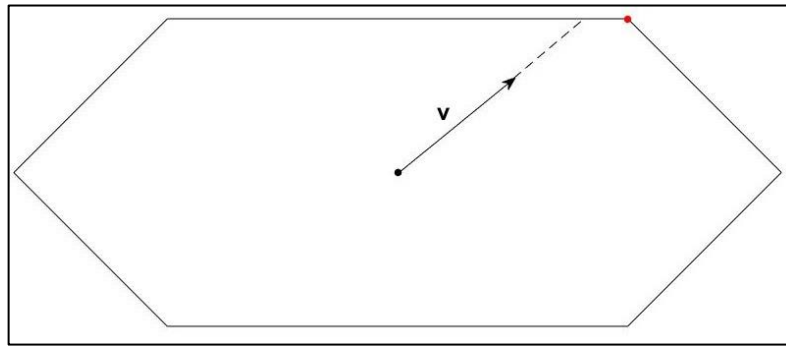
Η χρήση της στηρικτικής συνάρτησης χαρτογράφησης (*support mapping function*) επιδρά σημαντικά στην ταχύτερη εκτέλεση του αλγορίθμου, καθώς εξετάζονται αποκλειστικά τα σημεία των συνόρων των δύο σχημάτων. Συγκεκριμένα, η στηρικτική συνάρτηση χαρτογράφησης $s_A(\mathbf{v})$ του συνόλου A υπολογίζει το πιο απομακρυσμένο σημείο $\alpha \in A$ στη διεύθυνση ενός μοναδιαίου διανύσματος \mathbf{v} . Το σημείο αυτό ονομάζεται στηρικτικό σημείο (*support point*). Συνεπώς, το

εσωτερικό γινόμενο του διανύσματος \mathbf{v} και της στηρικτικής συνάρτησης χαρτογράφησης $s_A(\mathbf{v})$ πρέπει να ισούται με το μέγιστο εσωτερικό γινόμενο μεταξύ του διανύσματος \mathbf{v} και του συνόλου των σημείων $\alpha \in A$ (Lindemann). Δηλαδή:

$$\mathbf{v} \cdot s_A(\mathbf{v}) = \max\{\mathbf{v} \cdot \alpha : \alpha \in A\} \quad (4.3)$$

Στην **Εικόνα 4.2** απεικονίζεται ένα εξάγωνο και ένα διάνυσμα \mathbf{v} . Η κορυφή με το κόκκινο χρώμα έχει το μέγιστο εσωτερικό γινόμενο με το διάνυσμα \mathbf{v} , επομένως, οι συντεταγμένες του προκύπτουν κατά τον υπολογισμό της στηρικτικής συνάρτησης. Είναι προφανές ότι το στηρικτικό σημείο στα κυρτά πολύγωνα θα βρίσκεται πάντα σε μία από τις κορυφές του. Για τον εντοπισμό του αρκεί ο υπολογισμός των εσωτερικών γινομένων του διανύσματος \mathbf{v} με όλες τις κορυφές του, έτσι ώστε να βρεθεί εκείνη για την οποία μεγιστοποιείται το εσωτερικό γινόμενο.

Ο υπολογισμός του στηρικτικού σημείου διαφοροποιείται για κάθε σχήμα. Στον **πίνακα 4.1** καταγράφεται ο τελευταίος για ορισμένα σχήματα στο δισδιάστατο και τρισδιάστατο χώρο.



Εικόνα 4.2: Στηρικτικό σημείο στο εξάγωνο κατά το διάνυσμα \mathbf{v} .

Χώρος	Σχήμα	Παράμετροι	Στηρικτική συνάρτηση χαρτογράφησης $s_A(\mathbf{v})$
2D	Πολύγωνο	Συντεταγμένες κορυφών $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\}$	\mathbf{a}_i για το οποίο $\max\{\mathbf{a} \cdot \mathbf{v} \mathbf{a} \in \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n\}\}$
	Κύκλος	Ακτίνα R	$R \cdot \mathbf{v}$
	Έλλειψη	Μήκη ημιαξόνων a, b	$\frac{1}{\sqrt{a^2 v_x^2 + b^2 v_y^2}} (a^2 v_x, b^2 v_y)$
3D	Πολύεδρο	Συντεταγμένες κορυφών $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n\}$	\mathbf{a}_i για το οποίο $\max\{\mathbf{a} \cdot \mathbf{v} \mathbf{a} \in \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n\}\}$
	Σφαίρα	Ακτίνα R	$R \cdot \mathbf{v}$
	Ελλειψοειδές	Μήκη ημιαξόνων a, b, c	$\frac{1}{\sqrt{a^2 v_x^2 + b^2 v_y^2 + c^2 v_z^2}} (a^2 v_x, b^2 v_y, c^2 v_z)$
	Κύλινδρος	Ακτίνα R και ύψος h	$\sigma = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ Αν $\sigma > 0$, $(\frac{R}{\sigma} v_x, \frac{R}{\sigma} v_y, \text{sgn}(v_z) \frac{h}{2})$ Αλλιώς, $(0, 0, \text{sgn}(v_z) \frac{h}{2})$

Πίνακας 4.1: Εξισώσεις υπολογισμού στηρικτικών συναρτήσεων χαρτογράφησης ορισμένων σχημάτων.

Ο υπολογισμός ενός στηρικτικού σημείου σε ένα σύνολο C , το οποίο προκύπτει από το άθροισμα ή τη διαφορά *Minkowski* των συνόλων A και B , υπολογίζεται κατά αντιστοιχία σύμφωνα με τις παρακάτω σχέσεις:

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_{A+B}(\mathbf{v}) &= \mathbf{s}_A(\mathbf{v}) + \mathbf{s}_B(\mathbf{v}) \\ \mathbf{s}_{A-B}(\mathbf{v}) &= \mathbf{s}_A(\mathbf{v}) - \mathbf{s}_B(-\mathbf{v}) \end{aligned}$$

(4.4)

4.3. Δομή του Αλγορίθμου *GJK*

Ο αλγόριθμος *GJK* είναι μια επαναληπτική διαδικασία, η οποία υπολογίζει σε κάθε επανάληψη στηρικτικά σημεία του συνόλου C , το οποίο προκύπτει από τη διαφορά *Minkowski* των συνόλων A και B . Ο σκοπός είναι να υπολογιστούν τόσα σημεία, έτσι ώστε να σχηματιστεί ένα *Simplex*. Ένα $n - Simplex$ ορίζεται ως «ένα πολύτοπο $n + 1$ κορυφών στο χώρο n διαστάσεων» (Lindemann). Επομένως, στο δισδιάστατο χώρο απαιτούνται τρία σημεία για το σχηματισμό ενός τριγώνου και στον τρισδιάστατο χώρο αναμένονται τέσσερα σημεία για το σχηματισμό ενός τετραέδρου. Η επιλογή του διάνυσματος \mathbf{v} κατά τον υπολογισμό του κάθε στηρικτικού σημείου γίνεται με προδιαγεγραμμένο τρόπο. Παρακάτω περιγράφεται η διαδικασία που ακολουθεί ο αλγόριθμος στην περίπτωση δισδιάστατων σχημάτων.

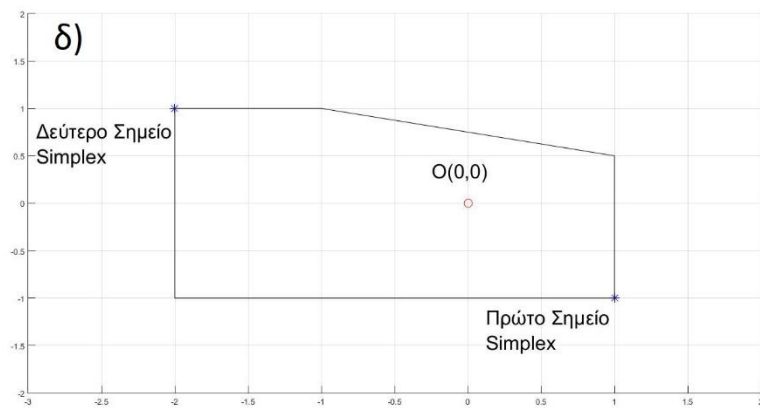
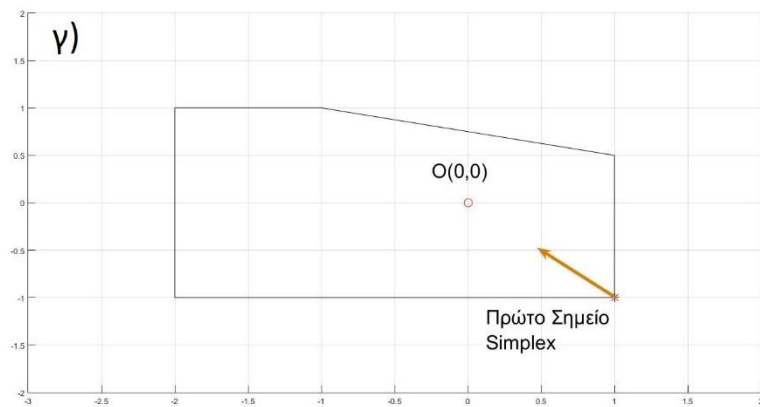
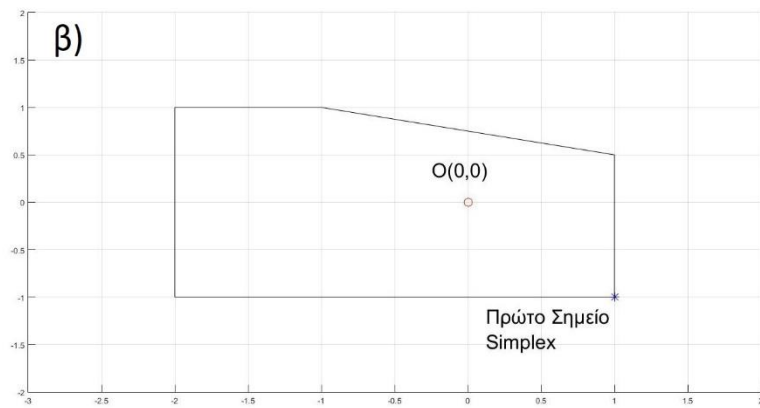
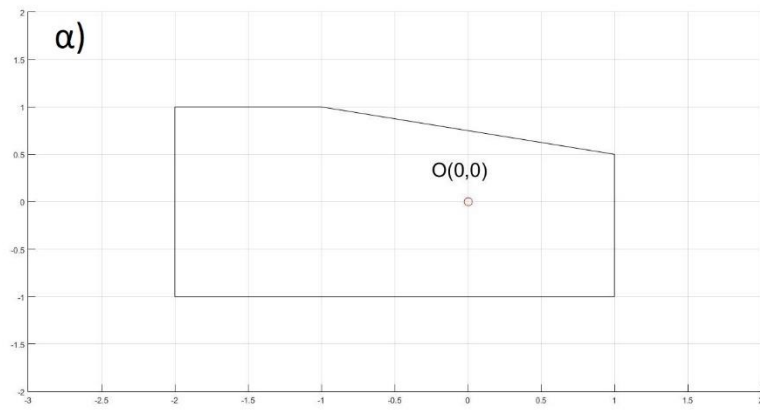
Τα γνωστά δεδομένα του προβλήματος είναι τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των δύο συνόλων. Στις **Εικόνες 4.3, 4.4** απεικονίζεται το σύνολο C , το οποίο προκύπτει θεωρητικά από τη διαφορά *Minkowski* των A και B (Εικόνα 4.3α). Αν και δεν είναι εκ των προτέρων γνωστό, η γραφική απεικόνιση πάνω σε αυτό των βημάτων του αλγορίθμου καθιστά πιο εύκολη την κατανόησή του.

Κατά το πρώτο βήμα, επιλέγεται ένα αυθαίρετο διάνυσμα κατεύθυνσης \mathbf{v} και υπολογίζεται η στηρικτική συνάρτηση χαρτογράφησης για την περίπτωση της διαφοράς *Minkowski* (Εικόνα 4.3β). Το σημείο, που προκύπτει, είναι το πρώτο σημείο του *Simplex*.

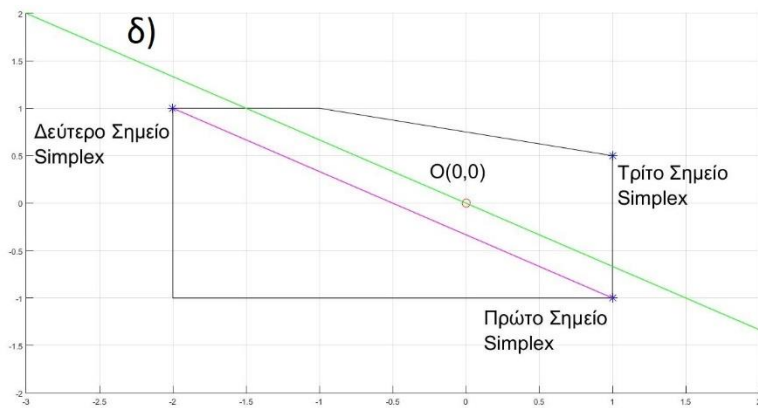
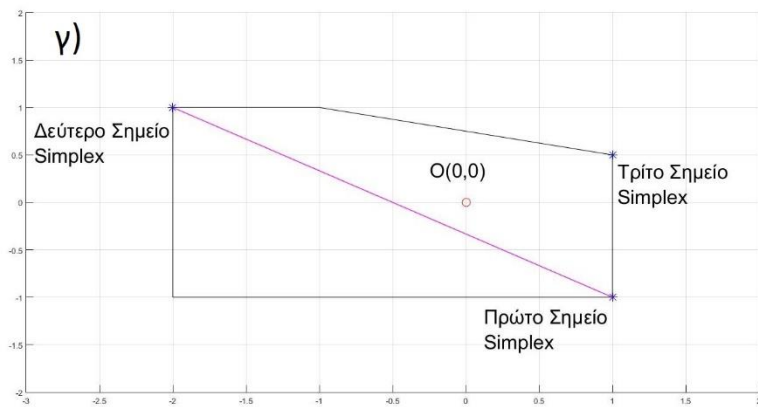
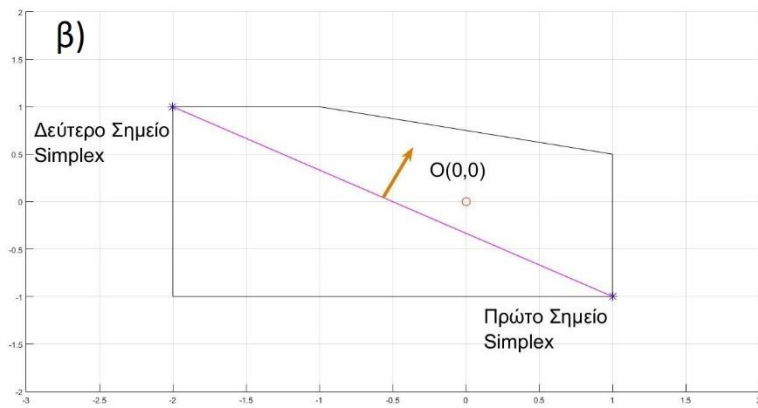
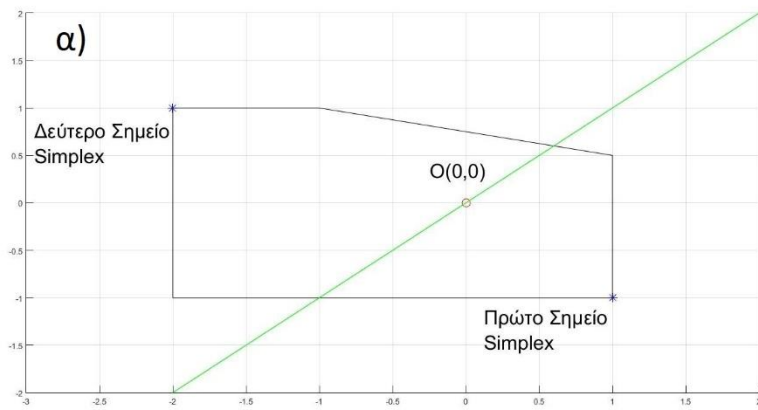
Στο δεύτερο βήμα, υπολογίζεται το δεύτερο διάνυσμα κατεύθυνσης \mathbf{v} , το οποίο έχει κατεύθυνση την αρχή των αξόνων από το πρώτο σημείο του *Simplex* (Εικόνα 4.3γ). Όπως προηγουμένως, υπολογίζεται το σημείο του *Simplex* για το δεύτερο διάνυσμα κατεύθυνσης (Εικόνα 4.3δ).

Σε αυτό το στάδιο, ελέγχεται αν το τελευταίο σημείο του *Simplex* υπερβαίνει την αρχή των αξόνων, δηλαδή αν βρίσκεται στην άνω επιφάνεια από την πράσινη γραμμή (Εικόνα 4.4α). Η συγκεκριμένη γραμμή εκφράζει το κάθετο διάνυσμα στο διάνυσμα \mathbf{v} , το οποίο περνάει από την αρχή των αξόνων. Στην περίπτωση που δε βρισκόταν το τελευταίο σημείο του *Simplex* στην άνω επιφάνεια, θα αποκλειόταν η πιθανότητα η διαφορά *Minkowski* να περιλαμβάνει την αρχή των αξόνων και κατ' επέκταση να τέμνονται τα δύο σύνολα. Ως αποτέλεσμα, ο αλγόριθμος θα τερματιζόταν σε αυτό στο βήμα.

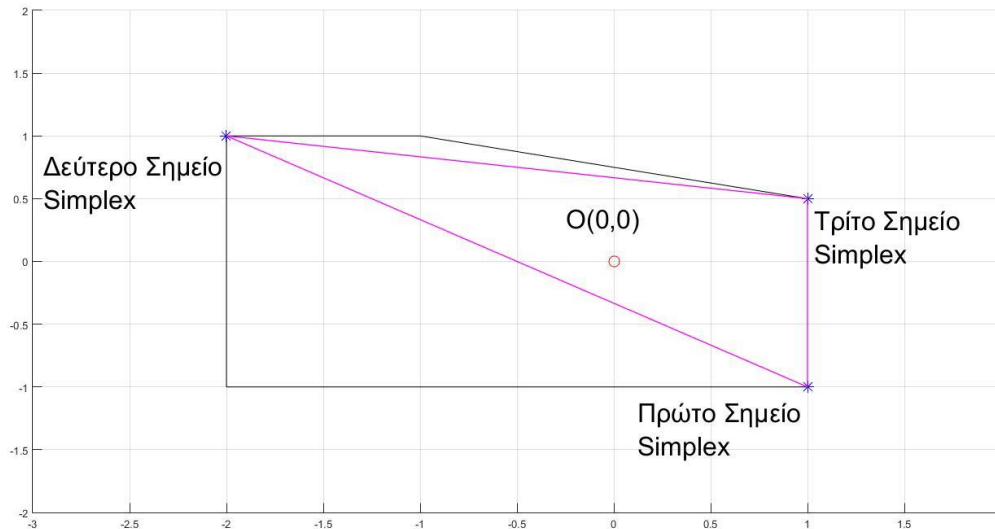
Εφόσον το δεύτερο σημείο *Simplex* υπερβαίνει την αρχή των αξόνων, ακολουθεί ο υπολογισμός του τρίτου σημείου. Το τρίτο διάνυσμα κατεύθυνσης \mathbf{v} είναι το κάθετο διάνυσμα στο διάνυσμα που συνδέει τα δύο προηγούμενα σημεία *Simplex* και η φορά του είναι προς την αρχή των αξόνων (Εικόνα 4.4β). Υπολογίζεται το τρίτο σημείο του *Simplex* (Εικόνα 4.4γ) και γίνεται εκ νέου ο έλεγχος για την υπέρβαση της αρχής των αξόνων (Εικόνα 4.4δ). Στην **Εικόνα 4.5** απεικονίζεται το *Simplex* που προκύπτει από τα τρία σημεία, στο εσωτερικό του οποίου βρίσκεται η αρχή των αξόνων. Αυτό αποδεικνύει, τελικά, ότι τα δύο σύνολα A και B τέμνονται.



Εικόνα 4.3: α) Σύνολο C. β) Υπολογισμός πρώτου σημείου Simplex. γ) Υπολογισμός δεύτερου διανύσματος κατεύθυνσης. δ) Εντοπισμός δεύτερου σημείου Simplex.



Εικόνα 4.4: α) Έλεγχος υπέρβασης του δεύτερου σημείου Simplex της αρχής των αξόνων. β) Υπολογισμός τρίτου διανύσματος κατεύθυνσης. γ) Εντοπισμός τρίτου σημείου Simplex. δ) Έλεγχος υπέρβασης του τρίτου σημείου Simplex της αρχής των αξόνων.

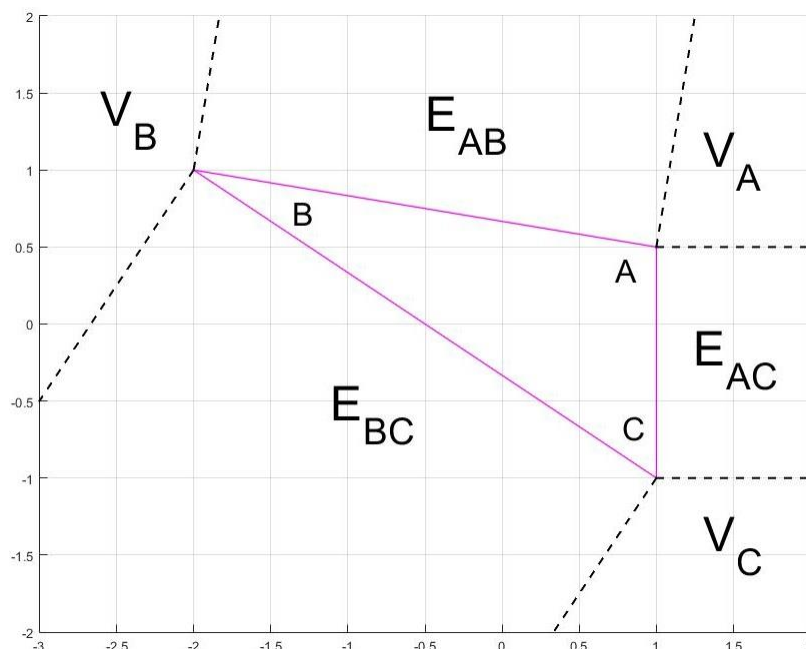


Εικόνα 4.5: Τελικό Simplex.

Στην περίπτωση που η αρχή των αξόνων δεν έχει εντοπιστεί εντός του τριγώνου, η διαδικασία επαναλαμβάνεται για τη δημιουργία καινούριου τριγώνου *Simplex*. Το διάνυσμα κατεύθυνσης ν για τον υπολογισμό του πρώτου σημείου του δεύτερου *Simplex* είναι το κάθετο διάνυσμα στην πλευρά του προηγούμενου *Simplex*, η οποία βρίσκεται εγγύτερα στην αρχή των αξόνων. Αν το καινούριο σημείο *Simplex* έχει ήδη υπολογιστεί κατά την προηγούμενη επανάληψη, τότε προκύπτει ότι τα δύο σύνολα δεν τέμνονται και η διαδικασία τερματίζεται.

Έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον ο τρόπος με τον οποίο εντοπίζεται η θέση της αρχής των αξόνων σε σχέση με το τρίγωνο *Simplex*. Όπως διακρίνεται στην Εικόνα 4.6, το *Simplex* περιβάλλεται από 6 περιοχές, οι οποίες ονομάζονται περιοχές *Voronoi* και κατατάσσονται σε δύο κατηγορίες (V_A, V_B, V_C και E_{AB}, E_{BC}, E_{AC}) (Lindemann). Από αυτές τις περιοχές, η αρχή των αξόνων μπορεί να βρίσκεται μόνο στις E_{AB} και E_{AC} . Παρακάτω εξηγούνται οι λόγοι απόρριψης των υπόλοιπων περιοχών. Να σημειωθεί ότι οι κορυφές C, B, A είναι το πρώτο, το δεύτερο και το τρίτο σημείο του *Simplex*, αντίστοιχα.

- V_C : Αν η αρχή των αξόνων βρισκόταν εντός της περιοχής V_C , το διάνυσμα κατεύθυνσης ν κατά τον υπολογισμό της κορυφής B θα ήταν εντός αυτής της περιοχής. Η φορά του διανύσματος κατεύθυνσης ήταν, ωστόσο, η αντίθετη.
- V_B : Στην περίπτωση που η αρχή των αξόνων βρισκόταν εντός της περιοχής V_B , ο έλεγχος για τη διαπίστωση ότι η κορυφή B υπερβαίνει το $O(0,0)$ θα είχε αποτύχει.
- V_A : Αντίστοιχα, αν $O \in V_A$, ο προαναφερθέν έλεγχος θα είχε αποτύχει για το τρίτο σημείο *Simplex*.
- E_{BC} : Κατά τον υπολογισμό του τρίτου διανύσματος κατεύθυνσης ν για τον εντοπισμό της κορυφής A , επιλέχθηκε το διάνυσμα κάθετο στην πλευρά BC , με φορά προς την αρχή των αξόνων. Η φορά, όμως, του τρίτου διανύσματος κατεύθυνσης βρισκόταν στην αντίθετη πλευρά από την περιοχή E_{BC} , γεγονός που την αποκλείει ως υποψήφια να περιέχει την αρχή των αξόνων.



Εικόνα 4.6: Περιοχές Voronoi.

Ύστερα από την παραπάνω ανάλυση, εξετάζονται οι περιοχές E_{AB} και E_{AC} για την ύπαρξη του $O(0,0)$ σε μία από αυτές. Επομένως, αν:

- $AB_{\perp} \cdot AO < 0 \rightarrow O \notin E_{AB}$ και
- $AC_{\perp} \cdot AO < 0 \rightarrow O \notin E_{AC}$,

η αρχή των αξόνων δε βρίσκεται στις περιοχές E_{AB} και E_{AC} . Τα διανύσματα AB_{\perp} και AC_{\perp} είναι τα κάθετα διανύσματα κατά αντιστοιχία στις πλευρές AB και AC και με φορά εντός των περιοχών E_{AB} και E_{AC} . Εφόσον οι τελευταίες περιοχές αποκλείονται, η αρχή των αξόνων βρίσκεται εντός του *Simplex* και προκύπτει ότι τα δύο σχήματα τέμνονται. Αν ένα από τα δύο εσωτερικά γινόμενα είναι ίσο ή μεγαλύτερο του μηδενός, τότε το $O(0,0)$ βρίσκεται εντός αυτής της περιοχής (λ.χ. στην E_{AB}) και, δεδομένου του παρόντος *Simplex*, τα σχήματα δεν τέμνονται. Σε αυτή την περίπτωση, η απόσταση του σημείου $O(0,0)$ από την πλευρά του *Simplex* που ορίζει την περιοχή του (λ.χ. AB), ισούται με την απόσταση των δύο σχημάτων.

Πρέπει να σημειωθεί ότι με παρόμοιο τρόπο γίνεται, επίσης, ο έλεγχος υπέρβασης του εκάστοτε υπολογιζόμενου σημείου του *Simplex* της αρχής των αξόνων. Έστω το σημείο του *Simplex* A , το οποίο εντοπίστηκε από τη στηρικτική συνάρτηση κατά το διάνυσμα v , τότε:

- Αν $OA \cdot v \geq 0$, το σημείο A υπερβαίνει την αρχή των αξόνων. Διαφορετικά, αν $OA \cdot v < 0$, δεν την υπερβαίνει και η διαφορά *Minkowski* δεν την περιλαμβάνει.

Η ανάλυση του αλγορίθμου *GJK* για έλεγχο τομής μεταξύ σχημάτων στον τρισδιάστατο χώρο αντιστοιχίζεται πλήρως με την περίπτωση στο δισδιάστατο χώρο. Σε αυτή την περίπτωση το *Simplex* είναι τετραεδρικού σχήματος και το διάνυσμα κατεύθυνσης για τον υπολογισμό του τέταρτου σημείου του *Simplex* είναι κάθετο στην επιφάνεια που σχηματίζεται από τα υπόλοιπα τρία σημεία και έχει φορά προς την αρχή των αξόνων.

Μεθοδολογία

5. Ανάπτυξη μικροδομής

Η ανάπτυξη της μικροδομής του *RVE* γίνεται με αλγόριθμο της κατηγορίας *RSA*, ενώ χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος *GJK* για τον έλεγχο των επικαλύψεων. Η σύνταξη του προγράμματος πραγματοποιείται στο προγραμματιστικό περιβάλλον του *MATLAB*. Η εκτέλεση του προγράμματος απαιτεί μια σειρά μεταβλητών εισόδου. Η πρώτη κατηγορία αυτών αφορά μεταβλητές σχετικές με το *RVE*. Αυτές είναι οι διαστάσεις του *RVE* και το απαιτούμενο κλάσμα όγκου της ενισχυτικής φάσης. Το *RVE* είναι πάντοτε τετραγωνικό στο δισδιάστατο χώρο και κυβικό στον τρισδιάστατο χώρο. Η δεύτερη κατηγορία μεταβλητών σχετίζεται με τα εγκλείσματα, δηλαδή το σχήμα τους και την ελάχιστη/μέγιστη επιφάνεια (*2D*) ή τον ελάχιστο/μέγιστο όγκο (*3D*) που καταλαμβάνουν. Η τρίτη κατηγορία αφορά μεταβλητές για το εκάστοτε σχήμα εγκλεισμάτων.

Τα σχήματα εγκλεισμάτων που διαθέτει το πρόγραμμα είναι τα παρακάτω:

- Στο δισδιάστατο χώρο:
 1. Κύκλος.
 2. Έλλειψη.
 3. Πολύγωνο.
- Στον τρισδιάστατο χώρο:
 4. Σφαίρα.
 5. Ελλειψοειδές.
 6. Κύλινδρος.
 7. Πρίσμα.
 8. Πολύεδρο.

Για το πολύγωνο υπάρχουν επιπρόσθετες μεταβλητές σχετικά με τον αριθμό των κορυφών των εγκλεισμάτων. Επιπλέον, ορίζονται στοχαστικές παράμετροι ως προς τις σχηματιζόμενες γωνίες και μήκη των πολυγώνων. Τέλος, ο χρήστης μπορεί να επιλέξει τα πολύγωνα να είναι κανονικά. Στην αντίθετη περίπτωση, ενδέχεται ορισμένα πολύγωνα να είναι μη κυρτά.

Για τον κύλινδρο και το πρίσμα ο χρήστης επιλέγει αν τα εγκλείσματα έχουν κοινή κατεύθυνση (στην προκειμένη περίπτωση θα είναι παράλληλα στον άξονα x). Επιπροσθέτως, για τα πρίσματα ισχύουν αντίστοιχες μεταβλητές εισόδου με τα πολύγωνα, δηλαδή αριθμός κορυφών, ορισμένες στοχαστικές παράμετροι και αν οι δύο παράλληλες πλευρές τους είναι κανονικά πολύγωνα ή όχι.

Στην περίπτωση των πολυέδρων, το πρόγραμμα δέχεται ως μεταβλητή εισόδου έναν μέγιστο αριθμό κορυφών. Η δημιουργία εγκλεισμάτων σχήματος πολυέδρου διαμορφώνεται με τέτοιο τρόπο, ώστε το πολύεδρο να είναι πάντοτε κυρτό. Ταυτόχρονα, ο ορισμός των συντεταγμένων των αρχικών κορυφών είναι τυχαίος και δεν ικανοποιεί την τελική κυρτότητα του σχήματος. Επομένως, ο τελικός αριθμός κορυφών του σχήματος ενδέχεται να είναι μικρότερος από τον αριθμό που όρισε ο χρήστης.

Μετά τον ορισμό των παραπάνω μεταβλητών εισόδου, ακολουθεί η δημιουργία των εγκλεισμάτων. Ο αριθμός των τελευταίων εξαρτάται από τη συνολική έκτασή τους και το επιθυμητό κλάσμα όγκου. Δεν απαιτείται να καλυφθεί το επιθυμητό κλάσμα όγκου με απόλυτη ακρίβεια. Το τελικό κλάσμα όγκου πρέπει να βρίσκεται εντός ενός διαστήματος που συγκλίνει στο επιθυμητό. Για παράδειγμα, αν το επιθυμητό κλάσμα όγκου είναι $v_f^{goal} = 0.4$, τότε το τελικό κλάσμα όγκου μπορεί

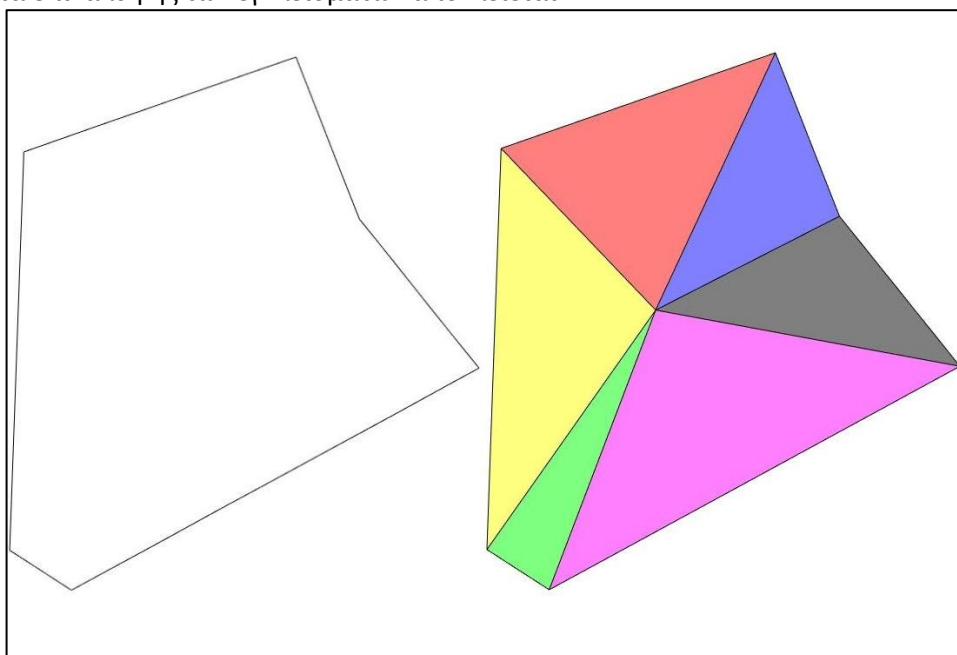
να ορίζεται ως $v_f^{final} \in [0.38, 0.42]$. Μόλις ικανοποιηθεί η παραπάνω συνθήκη, ολοκληρώνεται η δημιουργία εγκλεισμάτων.

Στη συνέχεια, αρχίζει η τοποθέτηση των εγκλεισμάτων στον όγκο. Έχει προηγηθεί ταξινόμηση των εγκλεισμάτων σε φθίνουσα σειρά ως προς το μέγεθός τους. Με αυτό τον τρόπο τοποθετούνται πρώτα τα μεγαλύτερα σε επιφάνεια/όγκο εγκλείσματα, καθιστώντας πιο εύκολη τη διαδικασία.

Αρχικά, επιλέγονται τυχαίες συντεταγμένες για το κέντρο του εγκλείσματος. Ακολουθεί ο έλεγχος για τομή του εγκλείσματος με τα όρια του όγκου. Αν το τελευταίο αληθεύει τότε επαναυπολογίζονται οι συντεταγμένες και επαναλαμβάνεται ο έλεγχος. Η απόρριψη των εγκλεισμάτων σε περίπτωση τομής του με τα όρια του όγκου καθιστά σε κάθε περίπτωση το *RVE* να μη διαθέτει περιοδική μικροδομή.

Εφόσον βρεθούν συντεταγμένες, για τις οποίες δεν τέμνεται το έγκλεισμα με τα όρια του όγκου, γίνεται ο έλεγχος επικάλυψής του με τα ήδη τοποθετημένα εγκλείσματα. Αυτό γίνεται με χρήση του αλγορίθμου *GJK*. Στην περίπτωση ύπαρξης εγκλείσματος μη κυρτού σχήματος, το έγκλεισμα διαιρείται σε επιμέρους κυρτά σχήματα. Επομένως, το μη κυρτό έγκλεισμα χωρίζεται στο δισδιάστατο χώρο σε τρίγωνα και στον τρισδιάστατο χώρο σε τετράεδρα, τα οποία είναι πάντοτε κυρτά. Ο αλγόριθμος *GJK* εκτελείται, στη συνέχεια, για όλα τα επιμέρους κυρτά σχήματα. Προφανώς, στην περίπτωση ελέγχου επικάλυψης δύο μη κυρτών εγκλεισμάτων, ο αλγόριθμος εκτελείται για όλους τους συνδυασμούς μεταξύ των δύο υποσυνόλων τους. Στην **Εικόνα 5.1** απεικονίζεται ο τρόπος διαίρεσης ενός κοίλου εξαγώνου.

Ο έλεγχος επικάλυψης ενός εγκλείσματος με το σύνολο των ήδη τοποθετημένων εγκλεισμάτων είναι υπολογιστικά επιζήμιος, ειδικά στις περιπτώσεις που απαιτείται υψηλό κλάσμα όγκου. Συνεπώς, πριν τον έλεγχο εκτελείται μια υπορουτίνα, η οποία επιλέγει ποια ήδη τοποθετημένα εγκλείσματα είναι πιθανό να συγκρούονται με το προς τοποθέτηση έγκλεισμα στις επιλεγμένες συντεταγμένες. Η τελευταία συγκρίνει τους περιγεγραμμένους κύκλους των προηγούμενων εγκλεισμάτων με τον περιγεγραμμένο κύκλο του τελευταίου. Μέσω των κέντρων και των ακτινών τους ελέγχεται κάθε φορά αν οι δύο κύκλοι τέμνονται. Αν υπάρχει τομή μεταξύ τους, τότε υπάρχει πιθανότητα τα δύο εγκλείσματα να επικαλύπτονται. Σε αντίθετη περίπτωση, η πιθανότητα επικάλυψης των εγκλεισμάτων αποκλείεται.



Εικόνα 5.1: Διαίρεση κοίλου εξαγώνου σε επιμέρους κυρτά τρίγωνα.

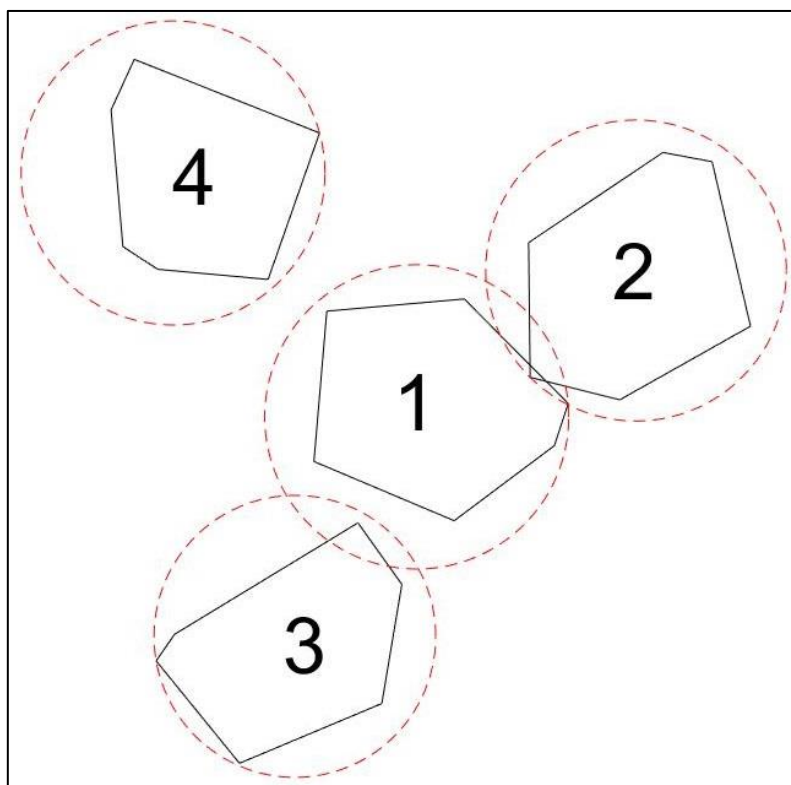
Στην **Εικόνα 5.2** απεικονίζεται ένα ενδεικτικό παράδειγμα για τον τρόπο με τον οποίο επιλέγονται τα τοποθετημένα εγκλείσματα για έλεγχο. Τα εγκλείσματα 2,3,4 είναι ήδη τοποθετημένα και γίνεται απόπειρα να τοποθετηθεί το εγκλείσμα 1. Τα εγκλείσματα 2 και 3 θα επιλεγούν να ελεγχθούν από τον αλγόριθμο *GJK*, καθώς οι περιγεγραμμένοι κύκλοι τους τέμνονται με τον αντίστοιχο του 1. Κατά τον έλεγχο των 1 – 2 θα βρεθεί ότι υπάρχει επικάλυψη, ενώ το αντίθετο θα προκύψει από τον έλεγχο 1 – 3. Το εγκλείσμα 4 δε θα επιλεγεί για έλεγχο, καθώς ο περιγεγραμμένος κύκλος του δεν τέμνεται με τον αντίστοιχο του 1, επομένως, αποκλείεται να επικαλύπτονται τα δύο εγκλείσματα. Με αυτή τη μέθοδο μειώνεται δραστικά η κλήση του αλγορίθμου *GJK*, καθώς εκτελείται για κάθε απόπειρα τοποθέτησης μόνο για τα «γειτονικά» εγκλείσματα και όχι για το σύνολό τους.

Τέλος, εκτελείται ο ευρετικός αλγόριθμος συμπίεσης. Οι συνθήκες για να κληθεί ο τελευταίος είναι:

- Έχει επιτευχθεί ένας αριθμός αποτυχημένων αποπειρών για την τοποθέτηση του εγκλείσματος.
- Με την τοποθέτηση του τελευταίου εγκλείσματος καλύπτεται ένα τμήμα του επιθυμητού κλάσματος όγκου.

Σύμφωνα με τα παραπάνω, ο αλγόριθμος συμπίεσης εκτελείται όταν λ.χ. υπάρχουν 500 αποτυχημένες προσπάθειες τοποθέτησης του τελευταίου εγκλείσματος. Επιπλέον, ο αλγόριθμος καλείται όταν, για παράδειγμα, έχει καλυφθεί ένα περαιτέρω 10% επί της επιφάνειας ή του όγκου του *RVE* από την τελευταία φορά που κλήθηκε υπό αυτή τη συνθήκη.

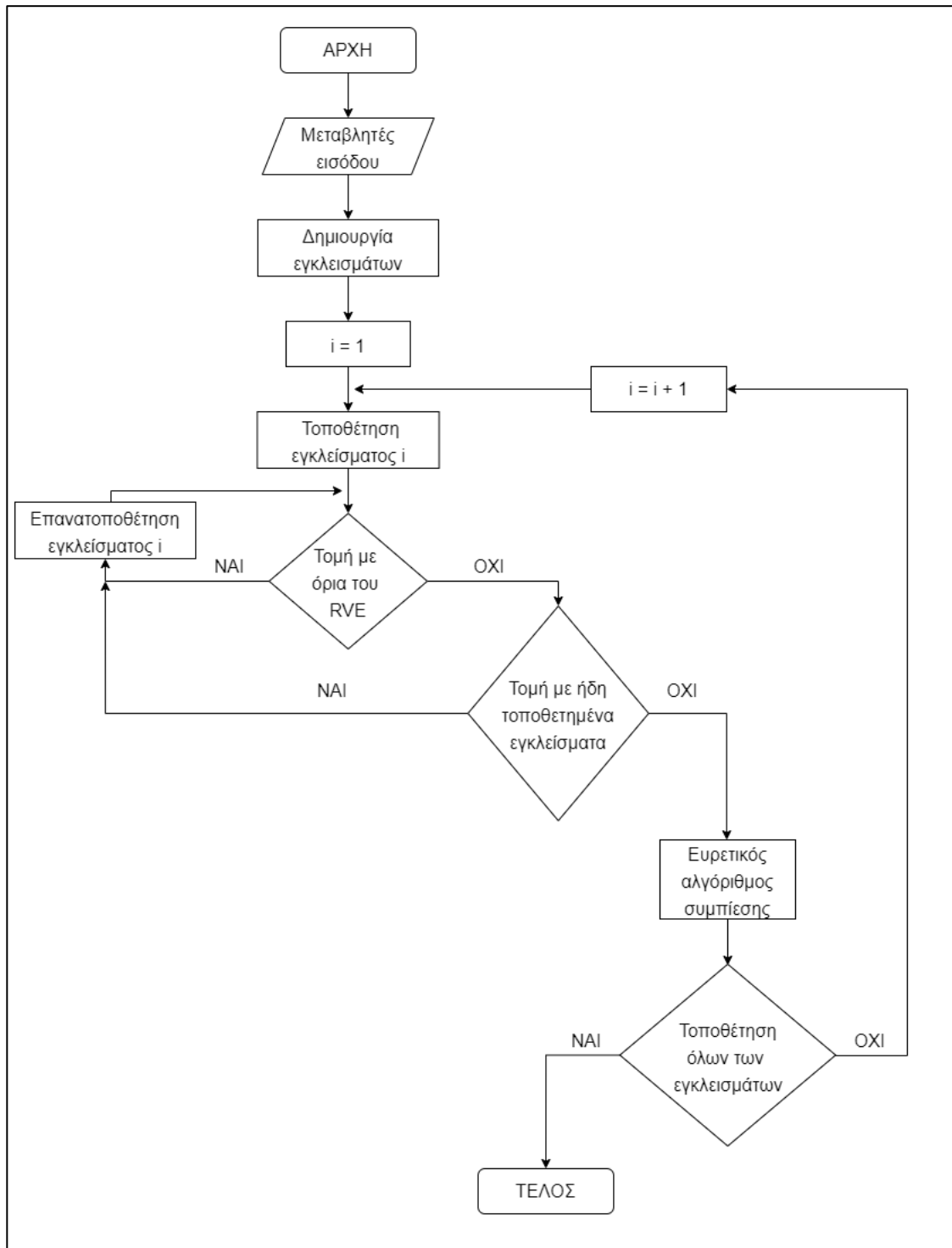
Η συμπίεση γίνεται με μετακίνηση των εγκλεισμάτων σε δύο κατευθύνσεις με βάση τη συντεταγμένη του κέντρου τους στον κατακόρυφο άξονα. Αν η τελευταία βρίσκεται εγγύτερα στην



Εικόνα 5.2: Ενδεικτικός τρόπος επιλογής εγκλεισμάτων για έλεγχο επικάλυψης.

άνω συνοριακή επιφάνεια του *RVE*, τότε το έγκλεισμα μετατοπίζεται προς αυτή την κατεύθυνση. Αντίστοιχα, αν έχει μικρότερη απόσταση από την κάτω συνοριακή επιφάνεια, κινείται προς αυτή.

Η δημιουργία της μικροδομής ολοκληρώνεται όταν τοποθετηθούν όλα τα εγκλείσματα επιτυχώς, ακολουθώντας την παραπάνω διαδικασία. Στην **Εικόνα 5.3** απεικονίζεται το διάγραμμα ροής του προγράμματος που μόλις αναλύθηκε.



Εικόνα 5.3: Διάγραμμα ροής προγράμματος ανάπτυξης μικροδομής.

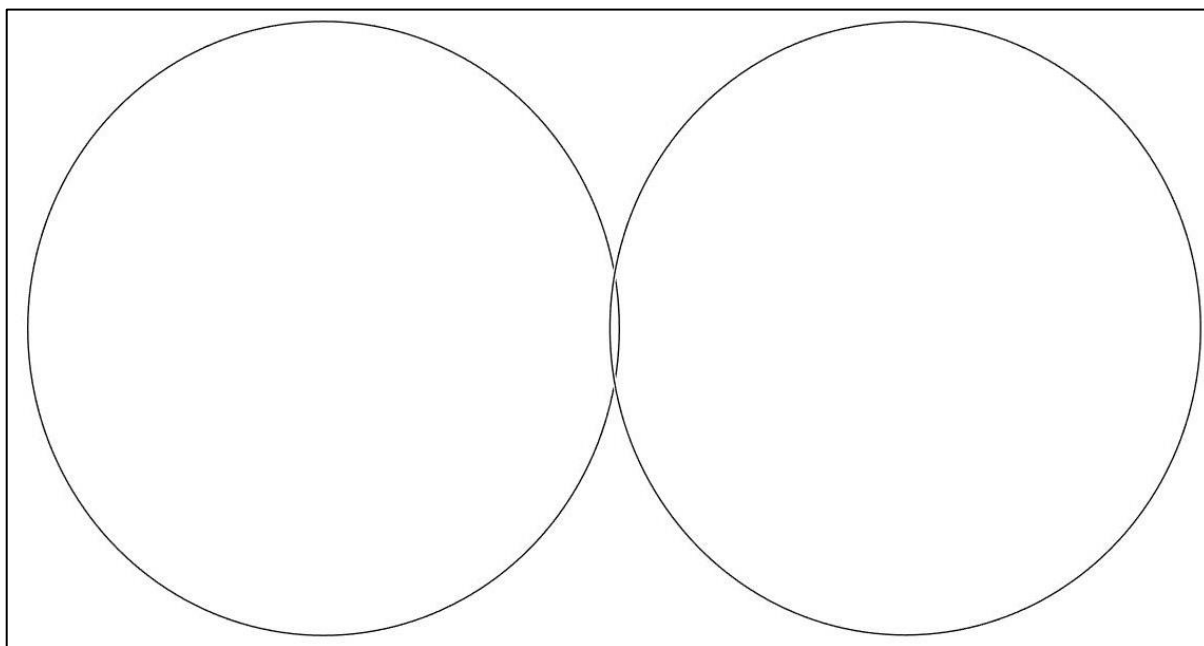
5.1. Τροποποίηση του ελέγχου επικάλυψης

Όπως προαναφέρθηκε, ο έλεγχος για την επικάλυψη μεταξύ των εγκλεισμάτων γίνεται με τον αλγόριθμο *GJK*. Ο τελευταίος αποτελεί μια επαναληπτική διαδικασία, μέχρι να καταλήξει στο αποτέλεσμα, δηλαδή αν υπάρχει τομή μεταξύ των σχημάτων. Συνήθως, δεν απαιτεί πάνω από τρεις επαναλήψεις, δηλαδή μέχρι το τρίτο *Simplex* έχει εντοπίσει την ύπαρξη ή μη της τομής. Στην περίπτωση, όμως, κατά την οποία η τομή είναι ιδιαίτερα οριακή, είναι ελάχιστα τα σημεία από το σύνολο $C = A - B$ που είναι ικανά να «δείξουν» την τομή. Για να εντοπιστούν τα συγκεκριμένα σημεία του C και να σχηματιστεί το κατάλληλο *Simplex* που να αποδεικνύει την επικάλυψη, απαιτεί υψηλό αριθμό επαναλήψεων. Το τελευταίο είναι υπολογιστικά κοστοβόρο και αυξάνει ραγδαία το χρόνο ολοκλήρωσης του προγράμματος. Μια αυθαίρετη επιλογή μέγιστου ορίου επαναλήψεων θα οδηγούσε σε εξαγωγή λανθασμένου συμπεράσματος, με αποτέλεσμα την ύπαρξη επικάλυψης.

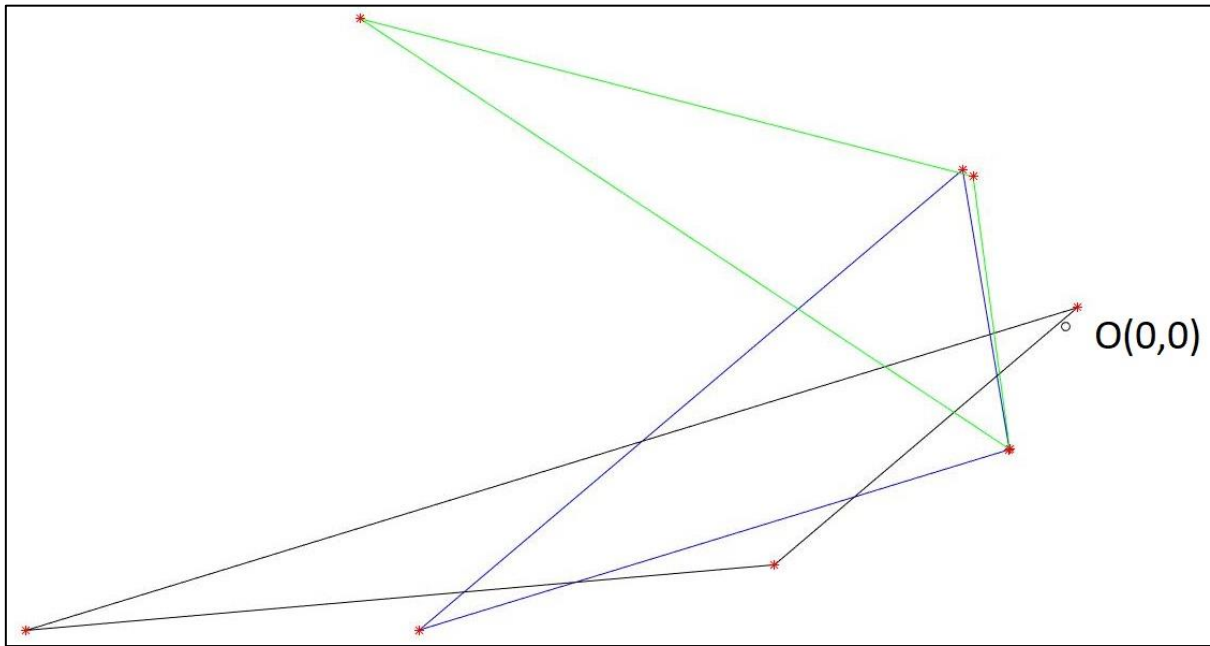
Για τον παραπάνω λόγο, ο έλεγχος σύγκρουσης μεταξύ των εγκλεισμάτων επεκτείνεται. Σε κάθε επανάληψη του *GJK*, εξετάζεται η ύπαρξη του σημείου της αρχής των αξόνων στο συγκεκριμένο *Simplex*. Υπάρχει, όμως, η πιθανότητα η αρχή των αξόνων να εντοπίζεται σε *Simplex* αποτελούμενο από σημεία διαφορετικών επαναλήψεων.

Στην **Εικόνα 5.4** απεικονίζονται δύο εγκλείσματα με οριακή επικάλυψη. Με την εκτέλεση του αλγορίθμου *GJK* προκύπτουν τα *Simplex* της **Εικόνας 5.5** και ο έλεγχος τερματίζεται. Όπως γίνεται αντιληπτό, κανένα από τα τρία *Simplex* δε συμπεριλαμβάνει το $O(0,0)$, παρά την ύπαρξη της επικάλυψης. Ο συνδυασμός σημείων από τις διαφορετικές επαναλήψεις και δημιουργία καινούριου *Simplex* δύναται να εξάγει το ορθό συμπέρασμα. Επομένως, ελέγχονται όλοι οι πιθανοί συνδυασμοί των εννιά σημείων για το σχηματισμό *Simplex*.

Στην **Εικόνα 5.6** απεικονίζεται το *Simplex* που προκύπτει από ένα συγκεκριμένο σημείο του πρώτου *Simplex* (χρώματος μπλε στην Εικόνα 5.5), ένα συγκεκριμένο σημείο του δεύτερου *Simplex* (χρώματος μαύρου στην Εικόνα 5.5) και ενός ακόμα σημείου από τα εναπομείναντα επτά. Όπως φαίνεται ο συγκεκριμένος συνδυασμός σημείων σχηματίζει τρίγωνο που περιλαμβάνει το $O(0,0)$ και εξάγει το ορθό αποτέλεσμα της ύπαρξης επικάλυψης.



Εικόνα 5.4: Οριακή τομή εγκλεισμάτων.

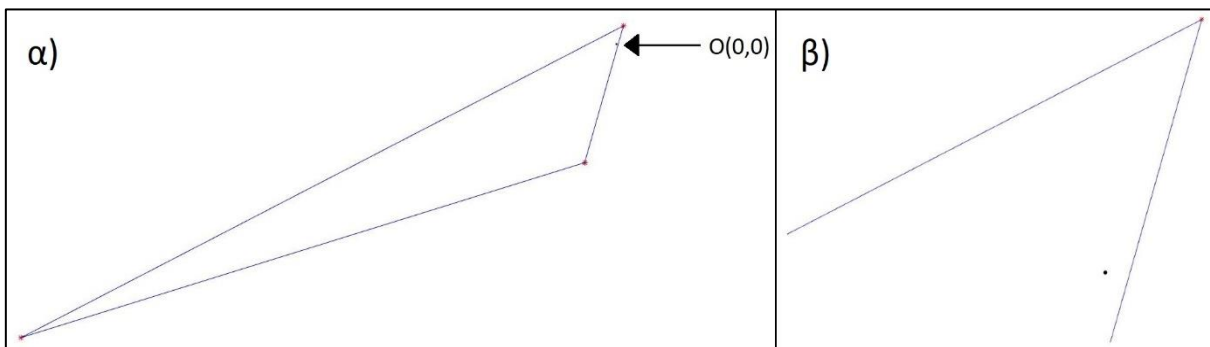


Εικόνα 5.5: Simplex ύστερα από τρεις επαναλήψεις του αλγορίθμου GJK.

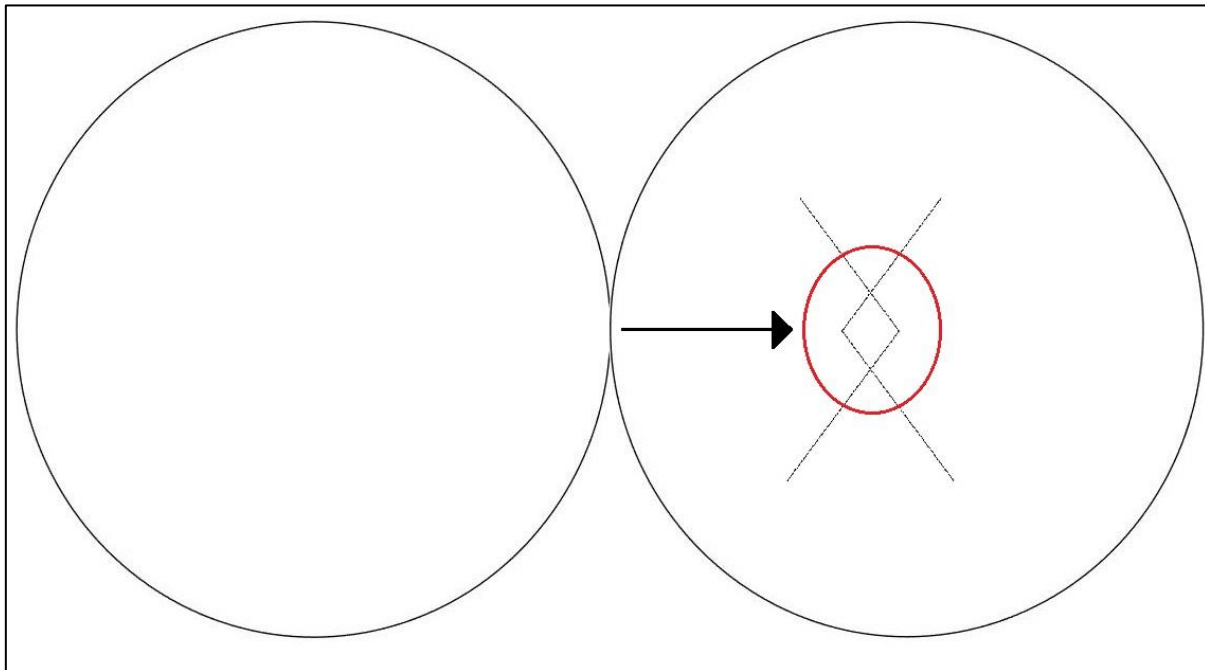
Πρέπει να σημειωθεί ότι σε αυτή την περίπτωση δεν αποκλείονται περιοχές *Voronoi*, στις οποίες ενδέχεται να βρίσκεται το $O(0,0)$, καθώς τα συγκεκριμένα σημεία *Simplex* δεν προκύπτουν από την ίδια επανάληψη. Επομένως, απαιτείται να εξεταστούν όλες οι περιοχές *Voronoi* για να είναι γνωστό που βρίσκεται το $O(0,0)$ σε σχέση με το *Simplex*.

Η παραπάνω μέθοδος βοηθά στην αποφυγή εσφαλμένων συμπερασμάτων για την επικάλυψη. Παρόλα αυτά, υπάρχουν περιπτώσεις, κατά τις οποίες η επικάλυψη είναι υπερβολικά οριακή, με αποτέλεσμα κανένας συνδυασμός σημείων από τις τρεις πρώτες επαναλήψεις του αλγορίθμου *GJK* να μην εξάγει σωστό αποτέλεσμα. Συνεπώς, κρίνεται εσφαλμένα ότι δεν υπάρχει τομή. Μια τέτοια περίπτωση φαίνεται στην **Εικόνα 5.7**.

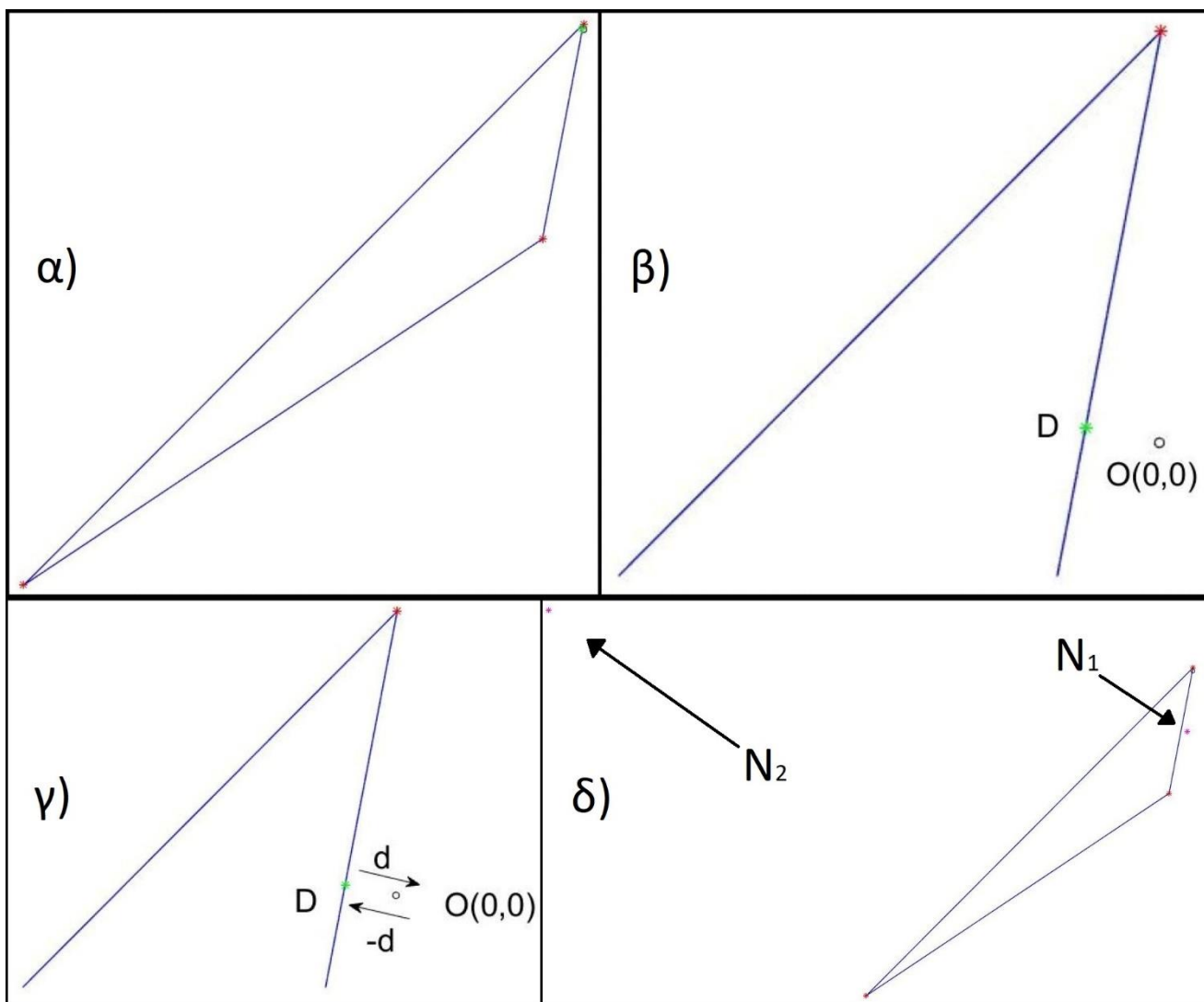
Για την αντιμετώπιση αυτού του προβλήματος, η προαναφερθείσα τροποποίηση του ελέγχου επικάλυψης επεκτείνεται περαιτέρω. Στην **Εικόνα 5.8** φαίνονται τα διαδοχικά βήματα που εισάγονται. Έστω ότι $\mathbf{d} = [d_1, d_2, d_3]$ οι αποστάσεις των αρχικών τριών *Simplex* από την αρχή των αξόνων και $d_{max} = \max(\mathbf{d})$ η μέγιστη απόσταση. Σε κάθε εξέταση καινούριου *Simplex*, δημιουργούμενου από συνδυασμό σημείων από διαφορετικές επαναλήψεις, συγκρίνεται η απόστασή του από το $O(0,0)$ σε σχέση με το d_{max} . Αν είναι μικρότερη, εντοπίζεται το σημείο D του συγκεκριμένου *Simplex*, που βρίσκεται εγγύτερα στο $O(0,0)$ (Εικόνες 5.8α), 5.8β)). Από αυτό το σημείο υπολογίζονται δύο καινούρια σημεία του συνόλου $C = A - B$: το πρώτο με κατεύθυνση την αρχή των αξόνων (\mathbf{d}) και το δεύτερο με την αντίθετη κατεύθυνση ($-\mathbf{d}$) (Εικόνες 5.8γ), 5.8δ)). Τα δύο καινούρια σημεία του συνόλου C είναι τα N_1 και N_2 , αντίστοιχα.



Εικόνα 5.6: α) Σχηματισμός Simplex από συνδυασμό σημείων από διαφορετικές επαναλήψεις. β) Μεγέθυνση στο σημείο της αρχής των αξόνων.



Εικόνα 5.7: Ιδιαίτερα οριακή επικάλυψη.



Εικόνα 5.8: Επέκταση της τροποποίησης του ελέγχου τομής των εγκλεισμάτων για ιδιαίτερα οριακή επικάλυψη.

Τέλος, υπολογίζεται το εσωτερικό γινόμενο των διανυσμάτων $\mathbf{v}_1 = \overrightarrow{ON_1}$ και $\mathbf{v}_2 = \overrightarrow{N_2O}$. Επομένως, αν:

- $\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 \geq 0$, τότε η αρχή των αξόνων βρίσκεται ανάμεσα στα σημεία N_1 και N_2 . Ως συμπέρασμα, το $O(0,0)$ βρίσκεται εντός του συνόλου C και τα δύο εγκλείσματα τέμνονται.
- $\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 < 0$, τότε η αρχή των αξόνων δε βρίσκεται ανάμεσα στα σημεία N_1 και N_2 . Επομένως, το $O(0,0)$ δε βρίσκεται εντός του συνόλου C και τα δύο εγκλείσματα δεν τέμνονται.

Οι δύο παραπάνω συνθήκες ορίζουν με ακρίβεια τη θέση του $O(0,0)$ ανάμεσα στα δύο σημεία. Παρόλα αυτά, υπάρχει η πιθανότητα τα N_1, N_2 να μην είναι τα κατάλληλα για να εντοπίσουν την επικάλυψη και να οδηγούν εκ νέου σε εσφαλμένο αποτέλεσμα. Για αυτό το λόγο, οι παραπάνω συνθήκες τροποποιούνται ως εξής:

$$\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 \geq e$$

$$\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 < e,$$

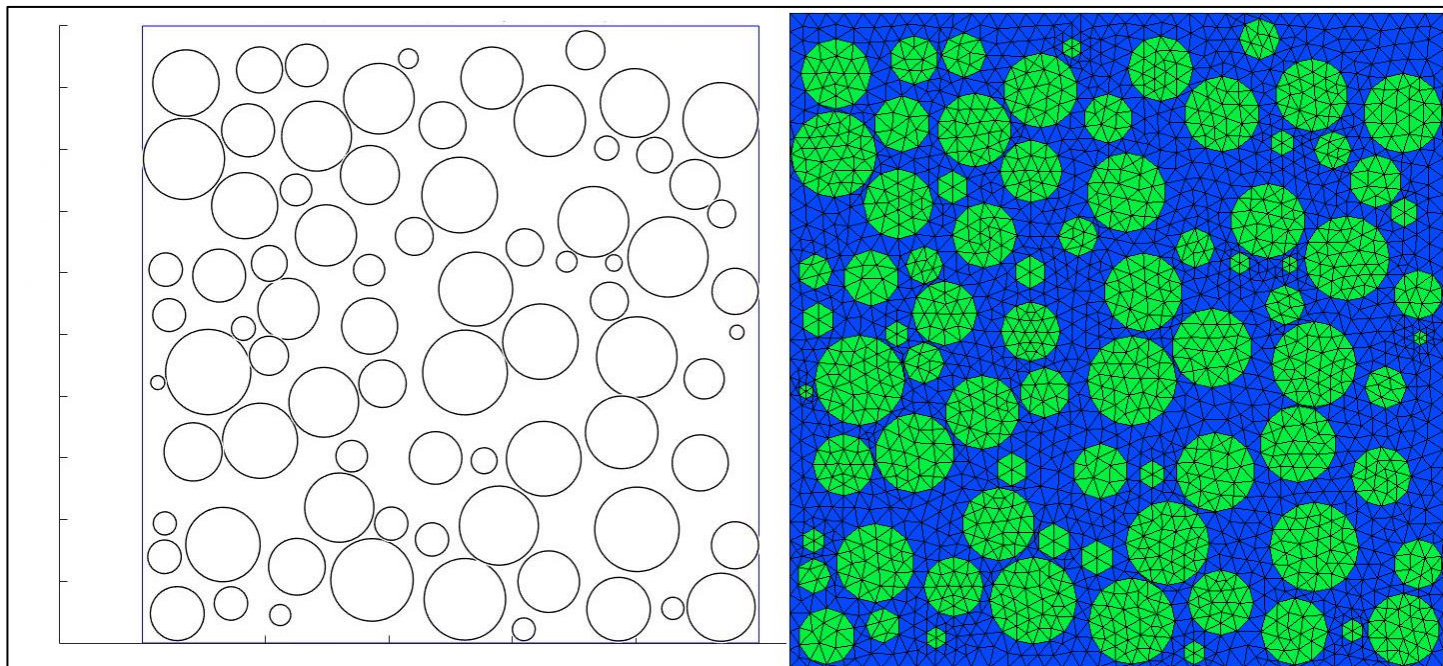
(5.1)

όπου e ένα μικρός αρνητικός αριθμός. Συνεπώς, με αυτή τη σύμβαση υπάρχει η πιθανότητα να κριθεί ότι δύο εγκλείσματα επικαλύπτονται, ενώ δε συμβαίνει στην πραγματικότητα. Ταυτόχρονα, όμως, αποκλείεται η πιθανότητα να συμβεί το αντίθετο, αποφεύγοντας σε κάθε περίπτωση την τομή των εγκλεισμάτων. Οι παραπάνω δύο πρακτικές για την αντιμετώπιση της οριακής επικάλυψης εφαρμόζονται με ανάλογο τρόπο και σε τρισδιάστατα RVE .

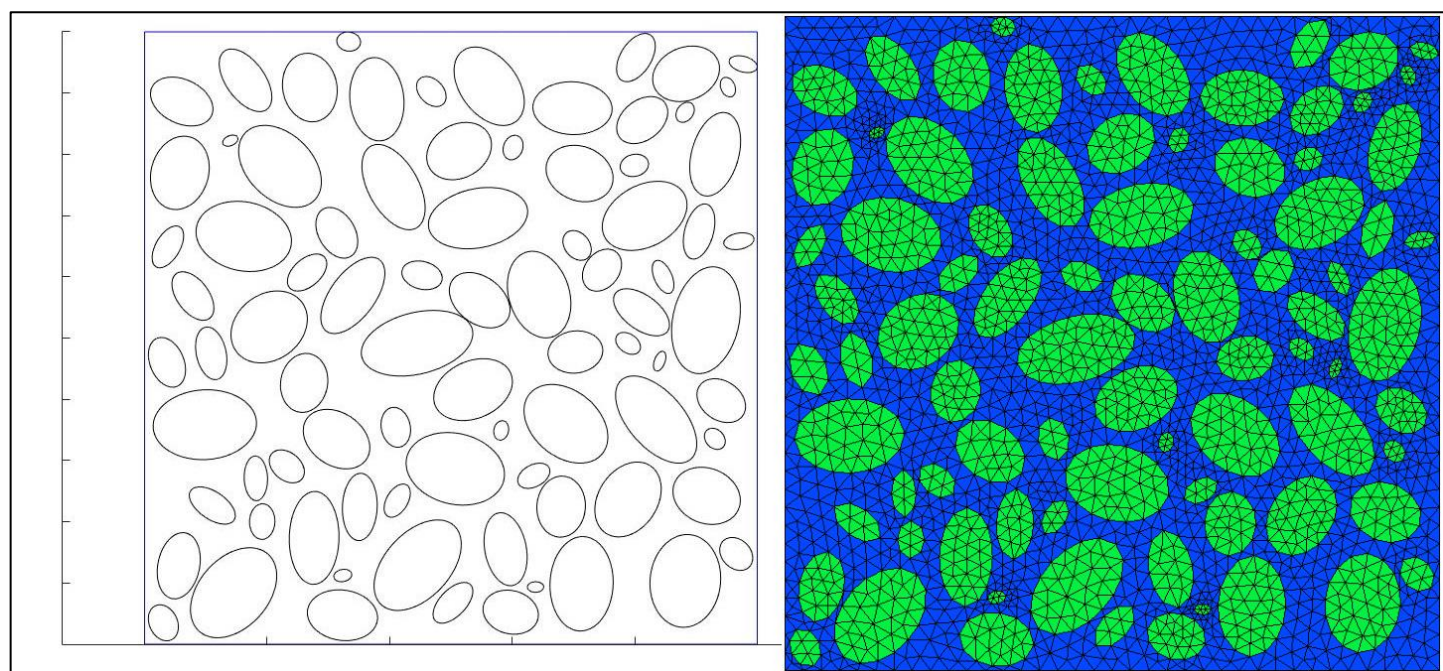
6. Αποτελέσματα

6.1. Παραγόμενη μικροδομή

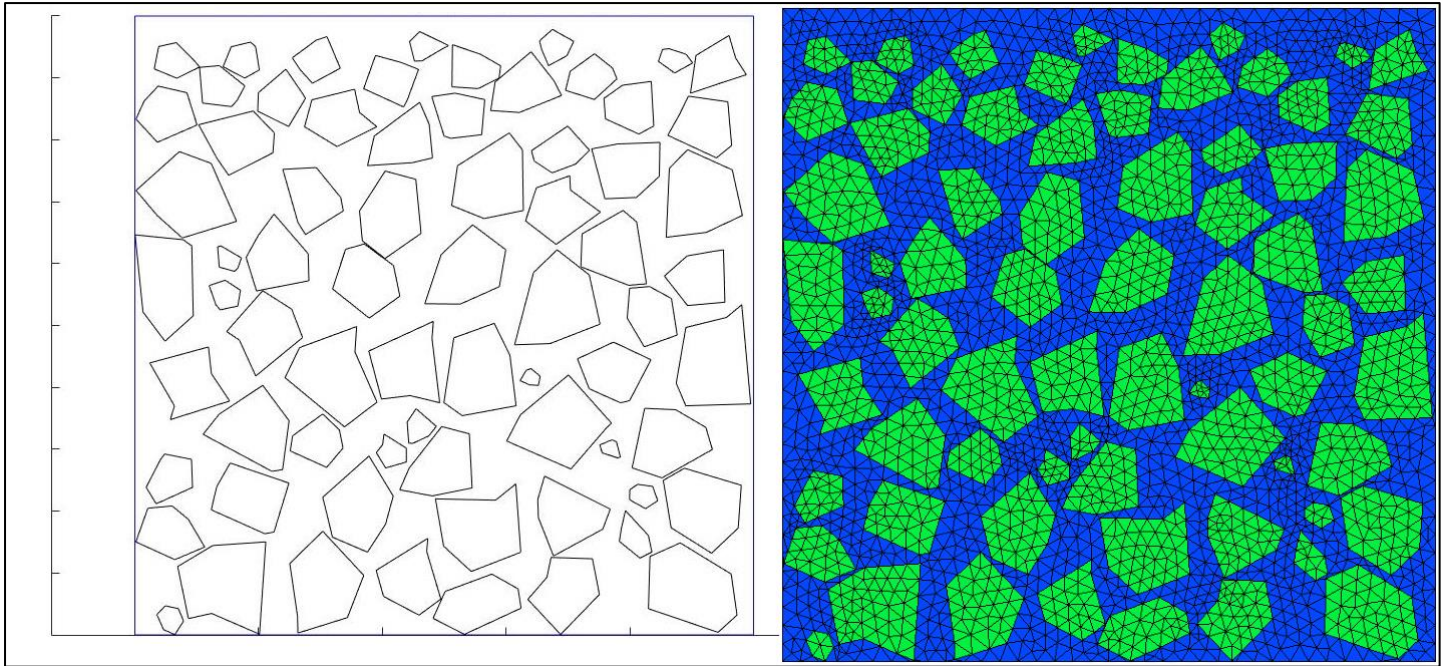
Για τη διακριτοποίηση γίνεται χρήση του λογισμικού *GMSH*. Στις **Εικόνες 6.1, 6.2** και **6.3** απεικονίζονται η μικροδομή και η διακριτοποίηση για ενδεικτικά δισδιάστατα *RVE* με εγκλείσματα διαφορετικών σχημάτων. Αντίστοιχα, στις **Εικόνες 6.4-6.12** φαίνονται τρισδιάστατα *RVE* με διαφορετικές γεωμετρίες εγκλεισμάτων.



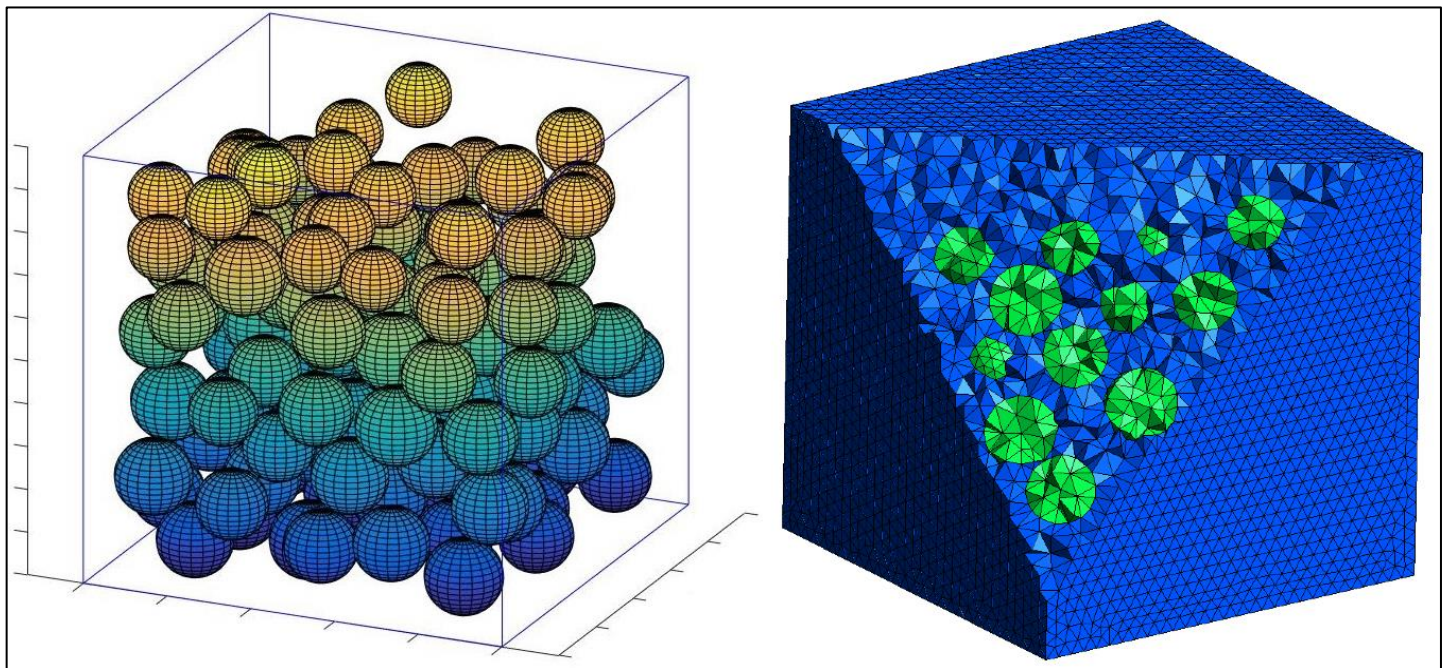
Εικόνα 6.1: RVE με κυκλικά εγκλείσματα, $v_f = 0.4$.



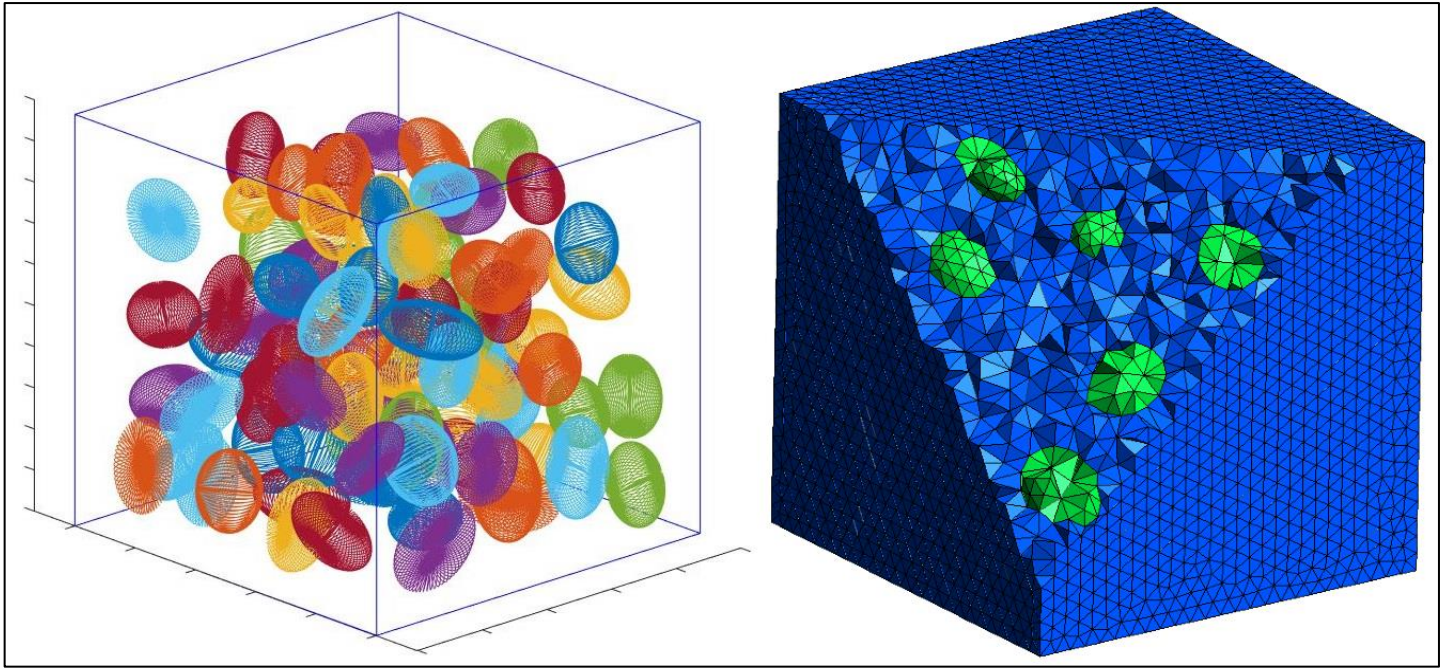
Εικόνα 6.2: RVE με ελλειπτικά εγκλείσματα, $v_f = 0.4$.



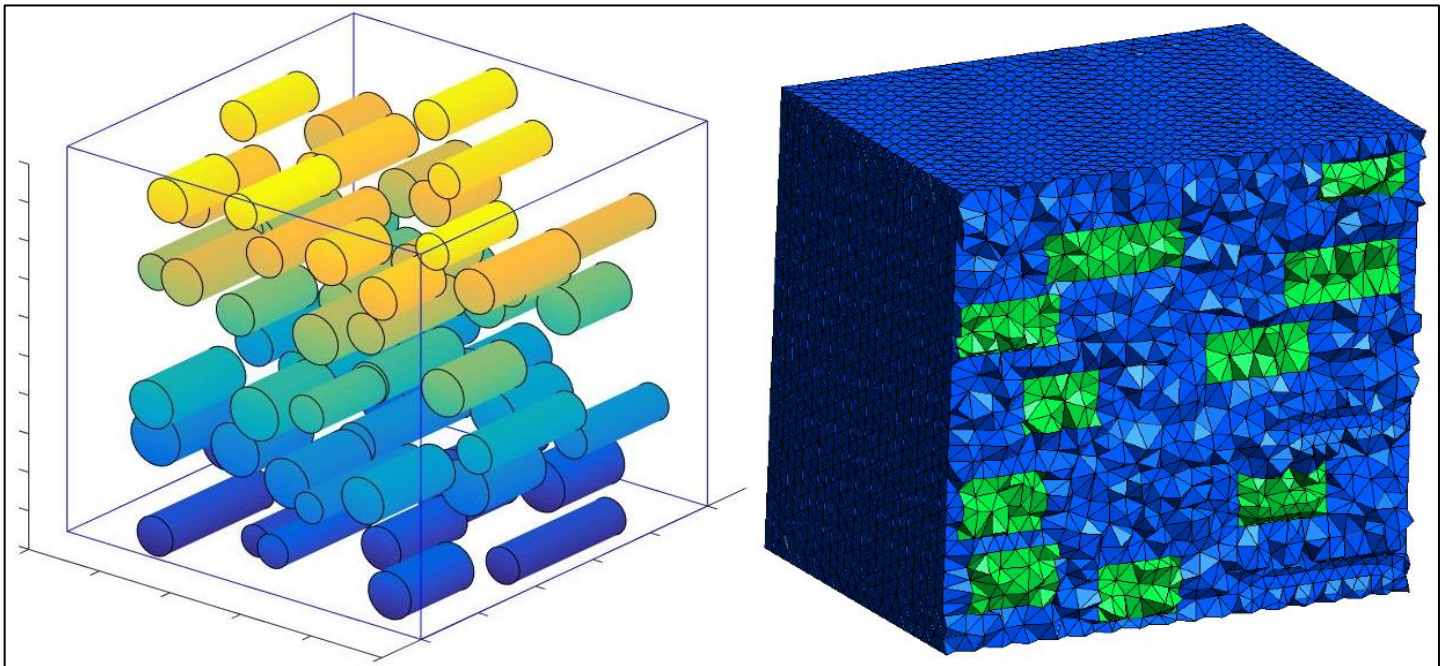
Εικόνα 6.3: RVE με εξαγωνικά εγκλείσματα, $v_f = 0.4$.



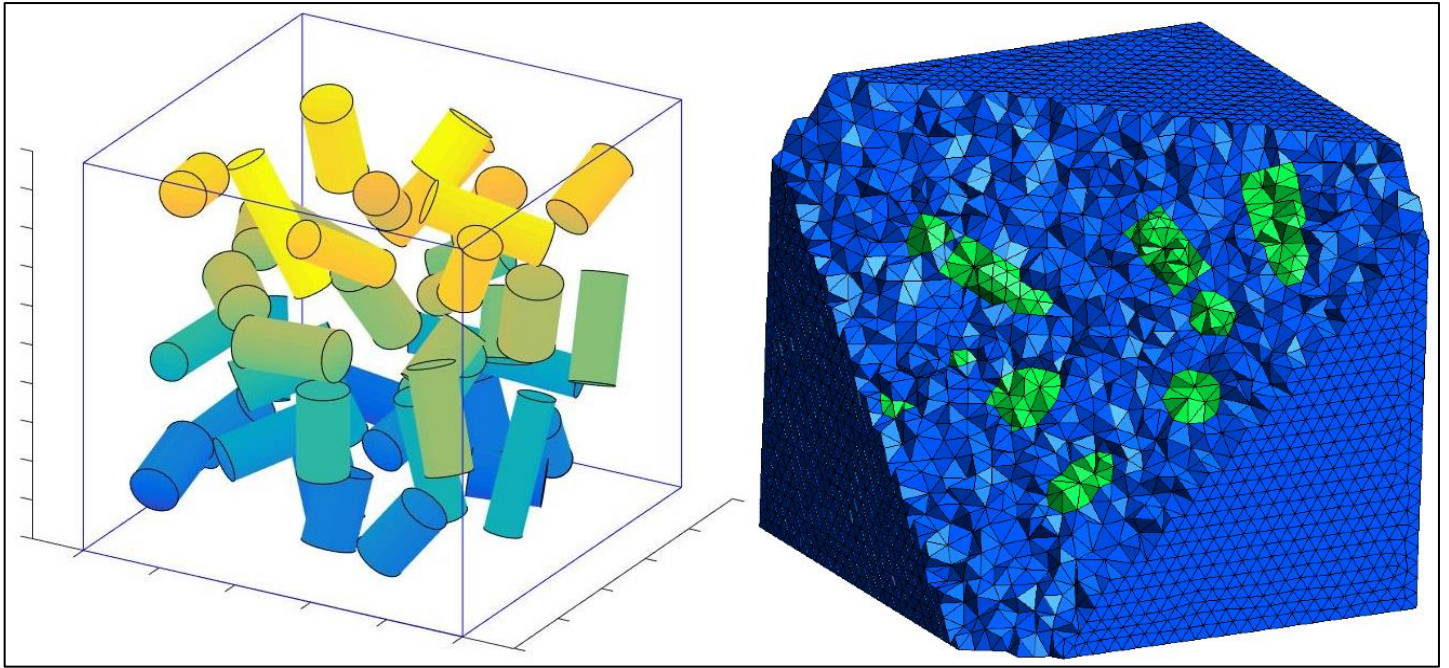
Εικόνα 6.4: RVE με σφαιρικά εγκλείσματα, $v_f = 0.3$.



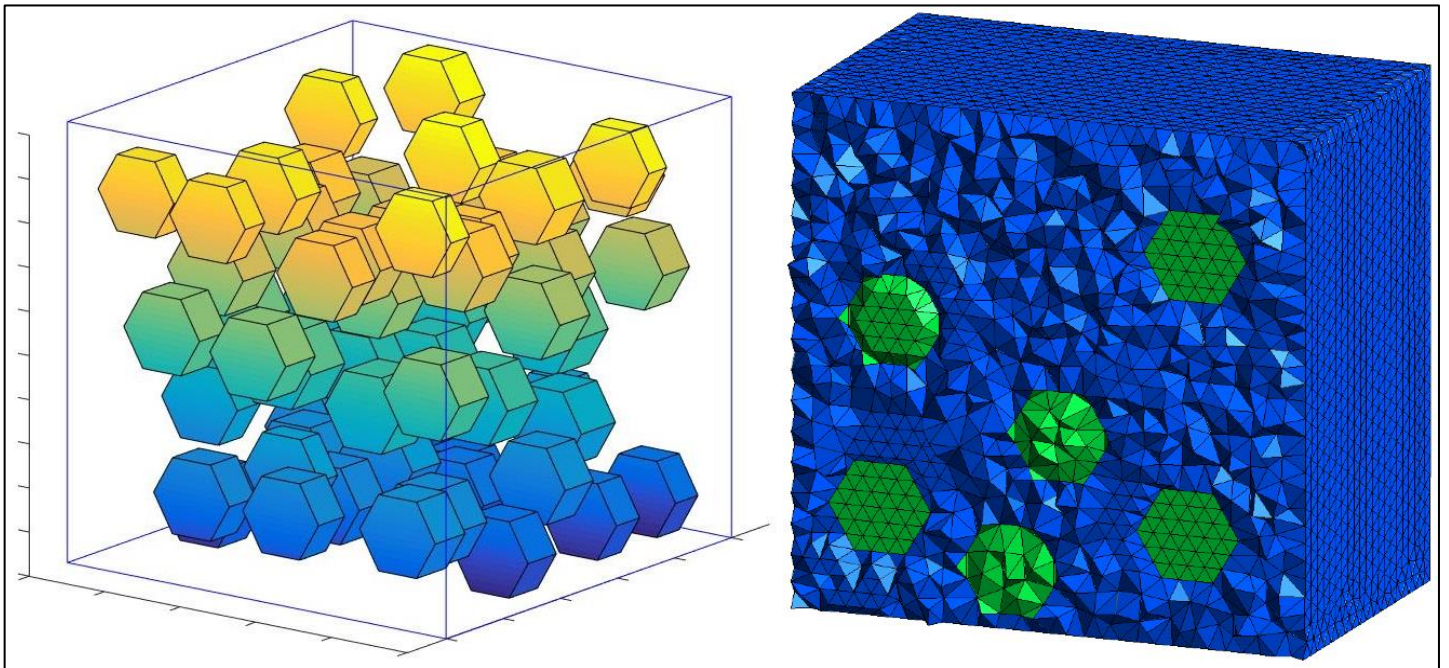
Εικόνα 6.5: RVE με ελλειψοειδή εγκλείσματα, $v_f = 0.2$.



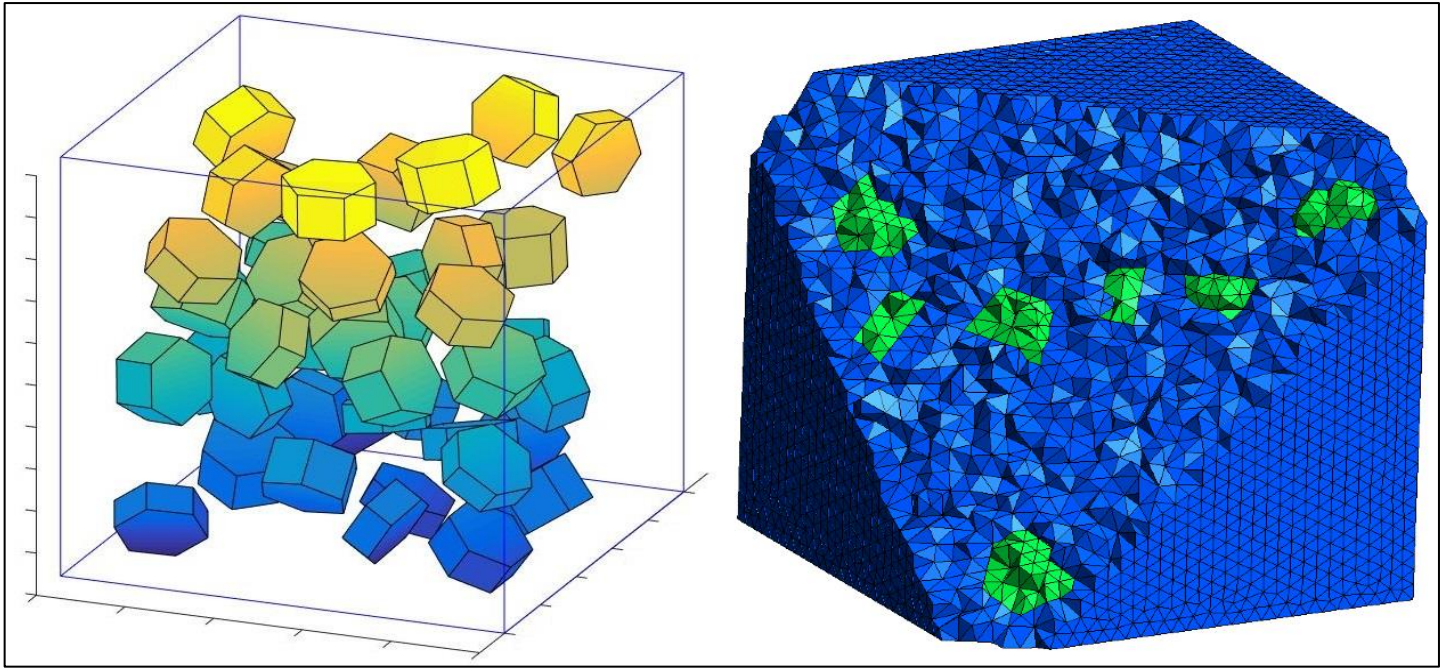
Εικόνα 6.6: RVE με κυλινδρικά εγκλείσματα μόνης κατεύθυνσης, $v_f = 0.15$.



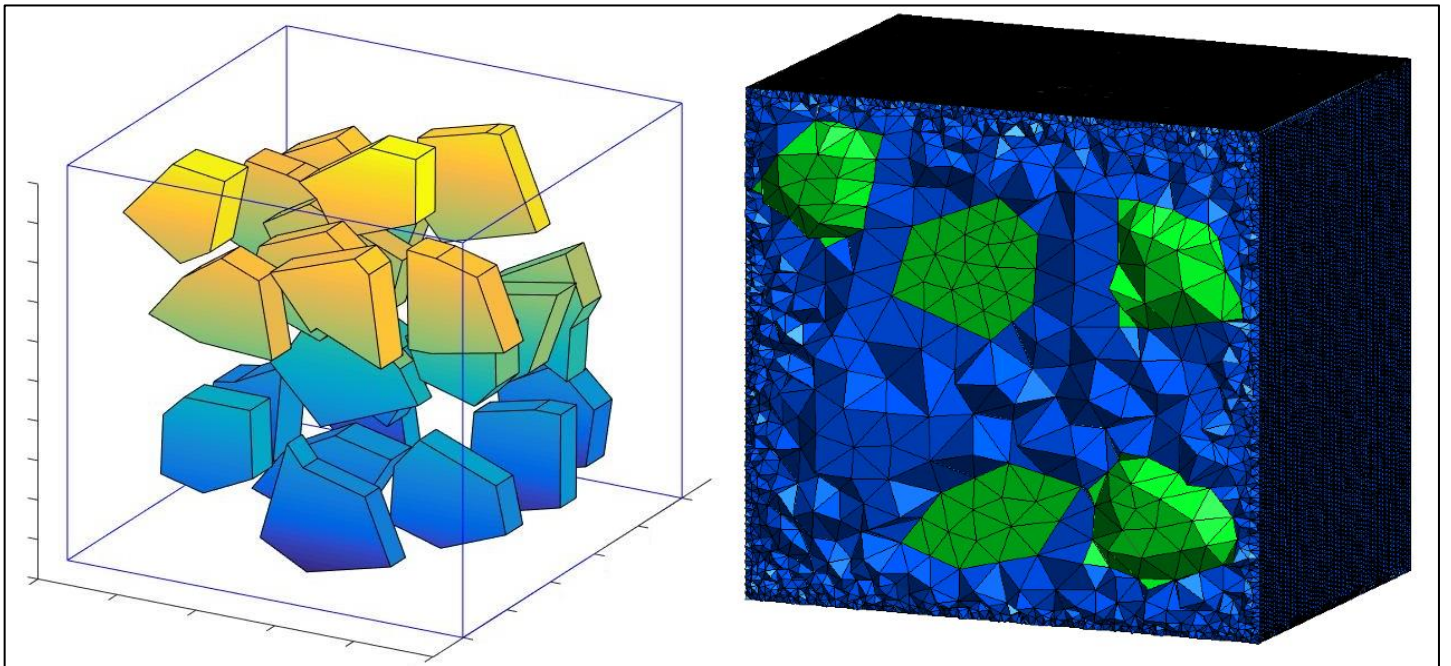
Εικόνα 6.7: RVE με κυλινδρικά εγκλείσματα τυχαίας κατεύθυνσης, $v_f = 0.1$.



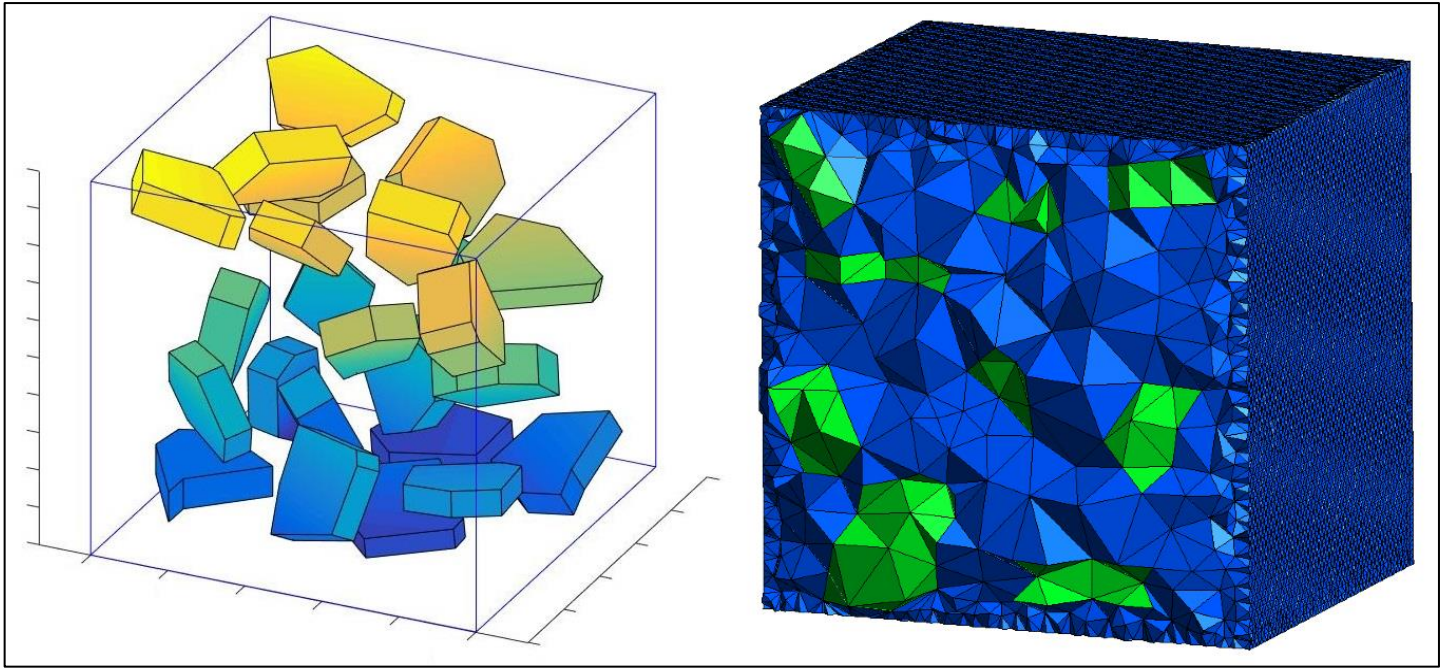
Εικόνα 6.8: RVE με κανονικά πρισματικά εγκλείσματα μόνης κατεύθυνσης, $v_f = 0.1$.



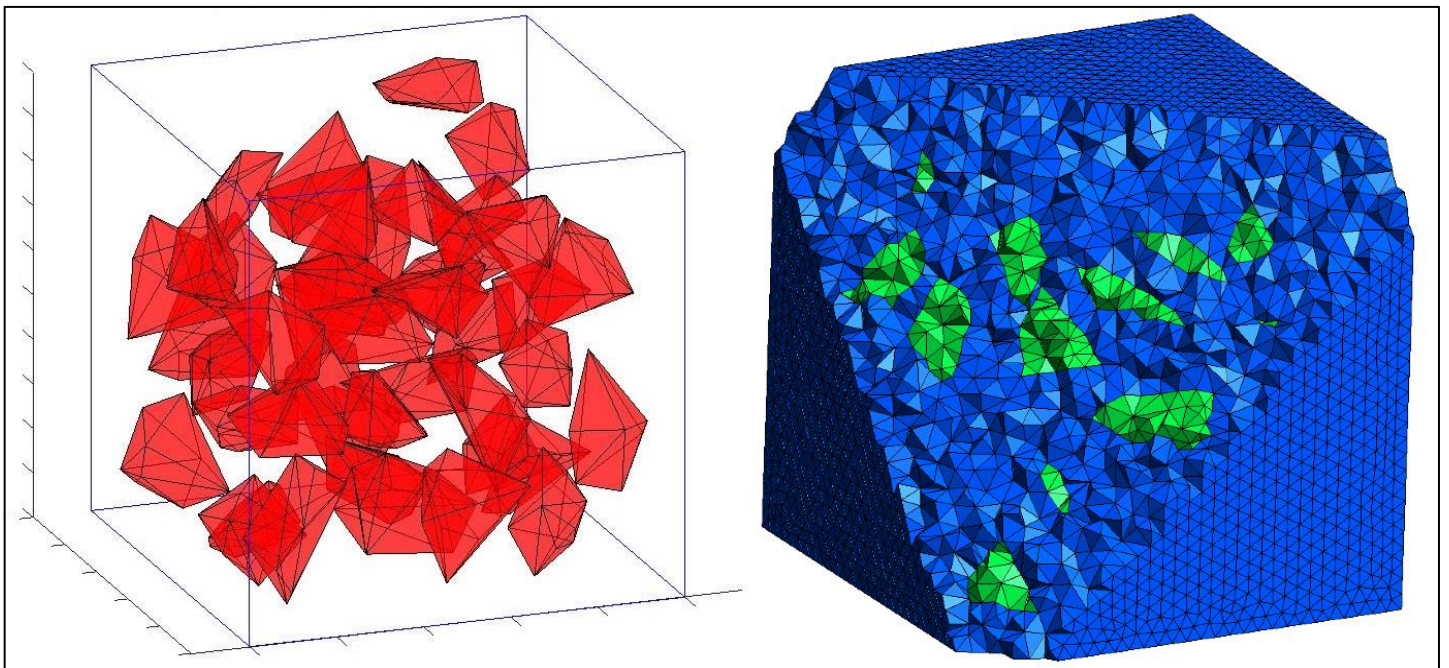
Εικόνα 6.9: RVE με κανονικά πρισματικά εγκλείσματα τυχαίας κατεύθυνσης, $v_f = 0.1$.



Εικόνα 6.10: RVE με μη κανονικά πρισματικά εγκλείσματα μονής κατεύθυνσης, $v_f = 0.1$.



Εικόνα 6.11: RVE με μη κανονικά πρισματικά εγκλείσματα τυχαίας κατεύθυνσης, $v_f = 0.1$.



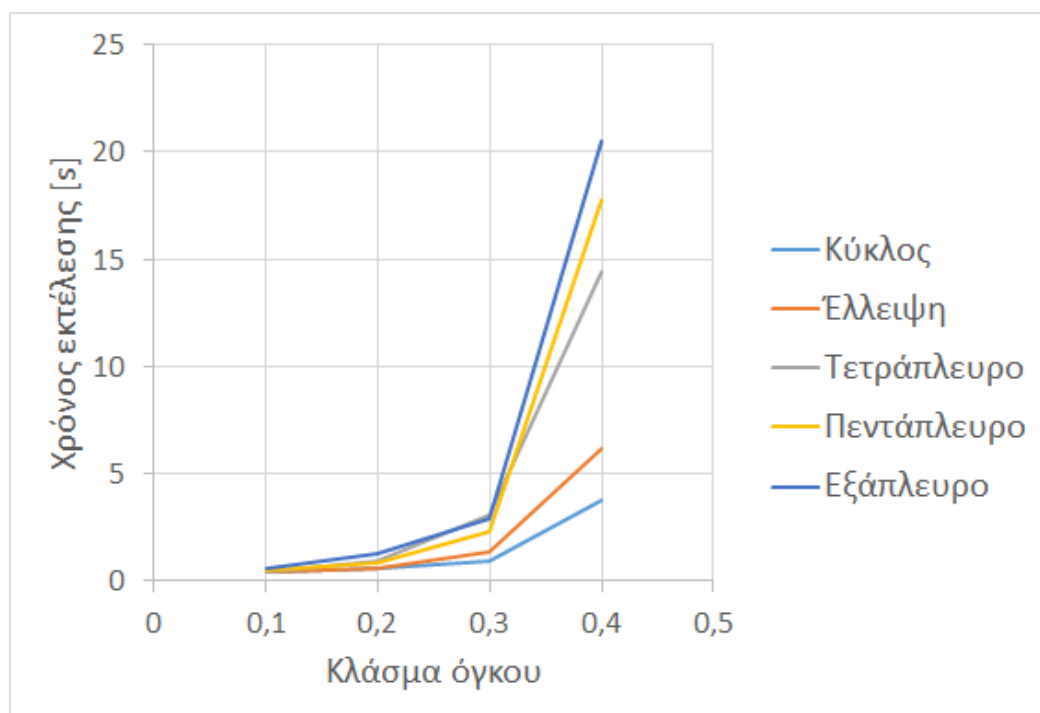
Εικόνα 6.12: RVE με πολυεδρικά εγκλείσματα, $v_f = 0.1$.

6.2. Απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος

Παρακάτω ακολουθούν τα αποτελέσματα αναφορικά με τον απαιτούμενο χρόνο εκτέλεσης του προγράμματος δημιουργίας της μικροδομής του *RVE* ανάλογα με το σχήμα των εγκλεισμάτων. Τα εγκλείσματα έχουν σε κάθε περίπτωση ίδια επιφάνεια ή όγκο. Το μέγεθος του *RVE* ορίζεται από την αναλογία $\delta = \frac{L}{d} = 10$, όπου L είναι το μήκος των ακμών του *RVE* και d η ακτίνα ενός κυκλικού/σφαιρικού εγκλείσματος με την επιθυμητή επιφάνεια ή τον επιθυμητό όγκο. Για κάθε μέτρηση συλλέγονται τρία δείγματα, από τα οποία υπολογίζεται ο μέσος όρος.

Στην **Εικόνα 6.13** απεικονίζεται το διάγραμμα χρόνου εκτέλεσης συναρτήσεως του κλάσματος όγκου για τα δισδιάστατα *RVE*. Οι μετρήσεις αφορούν τις μεμονωμένες τιμές κλάσματος όγκου $v_f = \{0.1, 0.2, 0.3, 0.4\}$. Στην περίπτωση των κυκλικών και ελλειπτικών εγκλεισμάτων η εξάρτηση του χρόνου εκτέλεσης από το κλάσμα όγκου είναι σχεδόν γραμμική μέχρι $v_f = 0.3$. Για $v_f = 0.4$ ο απαιτούμενος χρόνος δεν ακολουθεί την προηγούμενη γραμμικότητα, αλλά σημειώνει μια εκθετικότητα σε σχέση με την προηγούμενη πορεία των δύο καμπυλών. Κάτι ανάλογο παρατηρείται για τα πολύγωνα, όπου η εκθετικότητα των καμπυλών είναι πιο έντονη και εκκινεί από χαμηλότερα κλάσματα όγκου. Επιπλέον, αποτυπώνεται ότι ο ρυθμός αύξησης του χρόνου εκτέλεσης αυξάνεται με παράλληλη αύξηση των κορυφών του πολυγώνου.

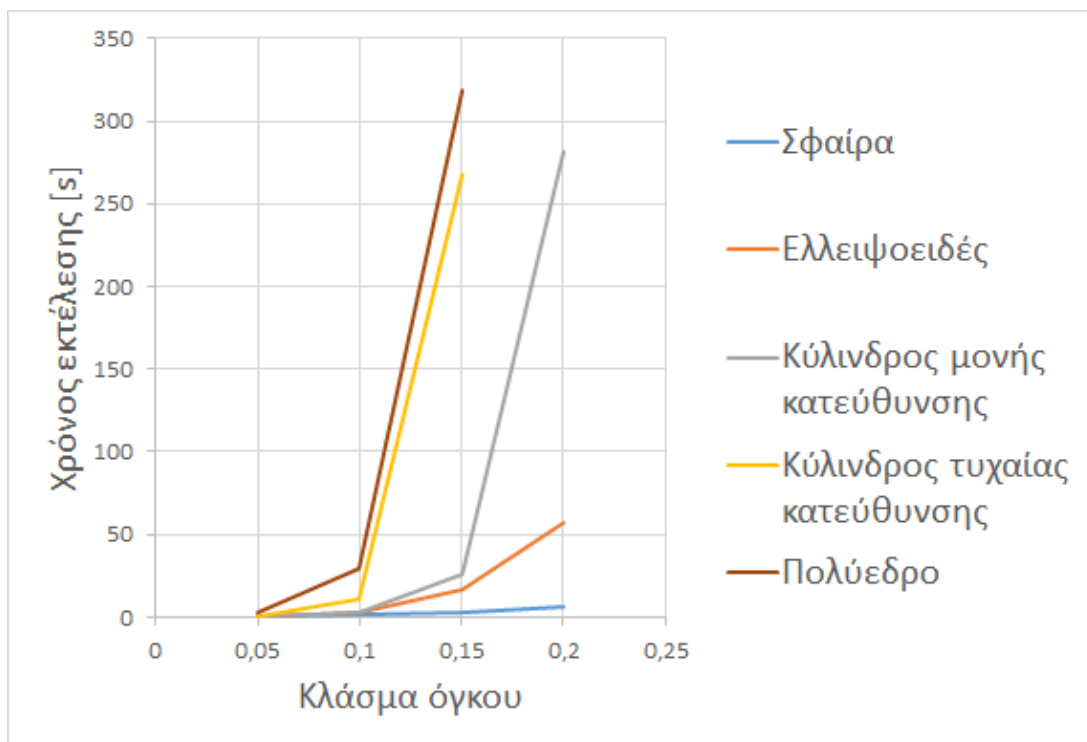
Στις **Εικόνες 6.14, 6.15** απεικονίζονται τα αντίστοιχα διαγράμματα για τρισδιάστατα *RVE*. Οι μετρήσεις αφορούν τις μεμονωμένες τιμές κλάσματος όγκου $v_f = \{0.05, 0.1, 0.15, 0.2\}$. Το πρώτο συμπέρασμα έγκειται στους αρκετά υψηλότερους χρόνους που απαιτούνται σε ένα τρισδιάστατο *RVE* σε σχέση με ένα δισδιάστατο. Η ταχύτερη εκτέλεση του προγράμματος λαμβάνει χώρα κατά τη χρήση σφαιρικών ή ελλειψοειδών εγκλεισμάτων. Ο προσανατολισμός των κυλινδρικών εγκλεισμάτων επηρεάζει σημαντικά την ολοκλήρωση της διαδικασίας. Για παράδειγμα, το *RVE* με κυλινδρικά εγκλείσματα μονής κατεύθυνσης και $v_f = 0.2$ παράγεται σε περίπου ίδιο χρόνο με εκείνο που απαιτείται για *RVE* με κυλινδρικά εγκλείσματα τυχαίας κατεύθυνσης και $v_f = 0.15$. Και στις δύο περιπτώσεις, όμως, η περάτωση της διαδικασίας είναι υπολογιστικά πιο κοστοβόρα σε σχέση με τα δύο προηγούμενα σχήματα εγκλεισμάτων, με πολλαπλάσιο απαιτούμενο χρόνο εκτέλεσης. Για τα



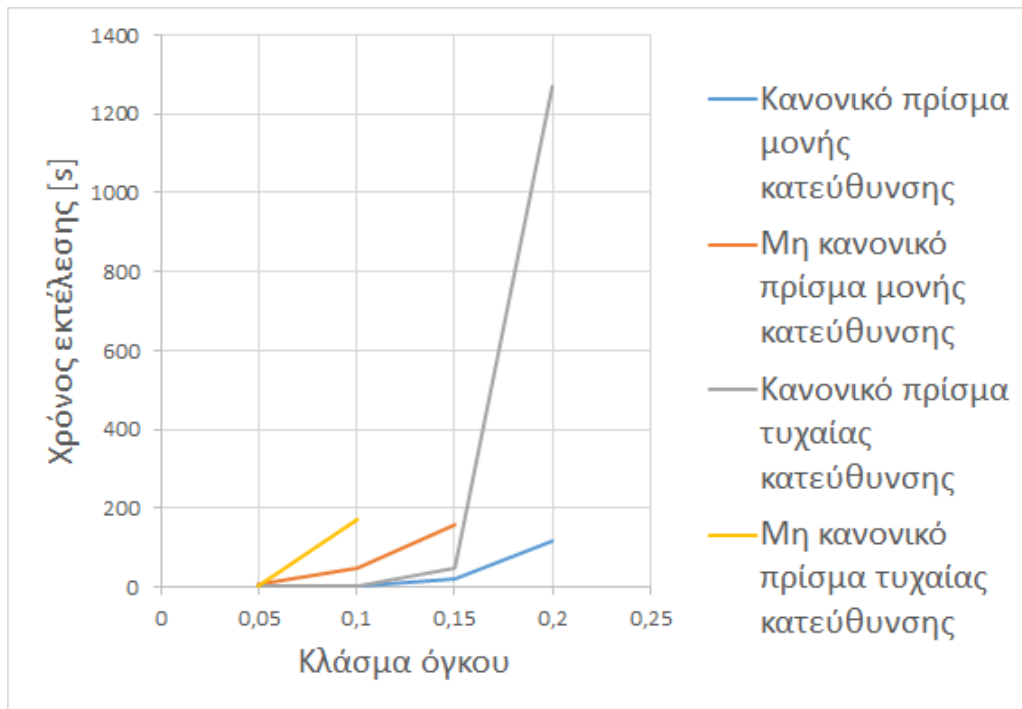
Εικόνα 6.13: Υπολογισμός χρόνου εκτέλεσης συναρτήσεως του κλάσματος όγκου για δισδιάστατα *RVE*.

πολυεδρικά εγκλείσματα διατίθενται δεδομένα μέχρι $v_f = 0.15$. Παρατηρείται ότι σε αυτή την κατηγορία οι χρόνοι περάτωσης της διαδικασίας είναι υψηλότεροι από οποιοδήποτε άλλο σχήμα του διαγράμματος.

Στην περίπτωση των πρισματικών εγκλεισμάτων, εξετάζεται πέρα από την κατεύθυνση και η ύπαρξη ή μη της κανονικότητας του σχήματος. Όπως παρατηρείται στην Εικόνα 6.15, υπάρχουν δεδομένα και για τις τέσσερις τιμές του κλάσματος όγκου μόνο για τα πρίσματα μονής κατεύθυνσης. Για τις υπόλοιπες περιπτώσεις, προκύπτει ότι ο χρόνος περάτωσης είναι ιδιαίτερα υψηλός για ορισμένα κλάσματα όγκου, χωρίς να είναι δυνατό να συλλεγεί. Για τη μονή κατεύθυνση, τα κανονικά πρισματικά εγκλείσματα τοποθετούνται επιτυχώς σε 115sec για $v_f = 0.2$. Αντίστοιχα, τα μη κανονικά τοποθετούνται σε 160sec για $v_f = 0.15$, επιδεικνύοντας την επιρροή και της γεωμετρίας του πρίσματος. Για την τυχαία κατεύθυνση, τα κανονικά πρίσματα τοποθετούνται σε παρόμοιο χρονικό διάστημα με τα αντίστοιχα της μονής κατεύθυνσης σε χαμηλά κλάσματα όγκου. Ο απαιτούμενος χρόνος είναι ελαφρά υψηλότερος για $v_f = 0.15$, ενώ για $v_f = 0.2$ υπερβαίνει τα 20 λεπτά. Τέλος, τα μη κανονικά πρίσματα τυχαίας κατεύθυνσης εμφανίζουν συγκριτικά τους υψηλότερους χρόνους τοποθέτησης.



Εικόνα 6.14: Υπολογισμός χρόνου εκτέλεσης συναρτήσει του κλάσματος όγκου για τρισδιάστατα RVE.



Εικόνα 6.15: Υπολογισμός χρόνου εκτέλεσης συναρτήσει του κλάσματος όγκου για τρισδιάστατα RVE.

6.3.Εφαρμογή αριθμητικής ομογενοποίησης

Ακολουθεί η μελέτη ενός σύνθετου υλικού με στόχο τον υπολογισμό του μακροσκοπικού μέτρου ελαστικότητας. Οι ιδιότητες της μητρικής φάσης είναι $E_m = 1GPa$ για το μέτρο ελαστικότητας και $\nu_m = 0.3$ για το λόγο Poisson και, αντίστοιχα, της ενισχυτικής φάσης $E_i = 10GPa$ και $\nu_i = 0.3$. Το κλάσμα όγκου επιλέγεται $\nu_f = 0.4$. Η επίλυση λαμβάνει χώρα στο πρόγραμμα ANSYS Workbench.

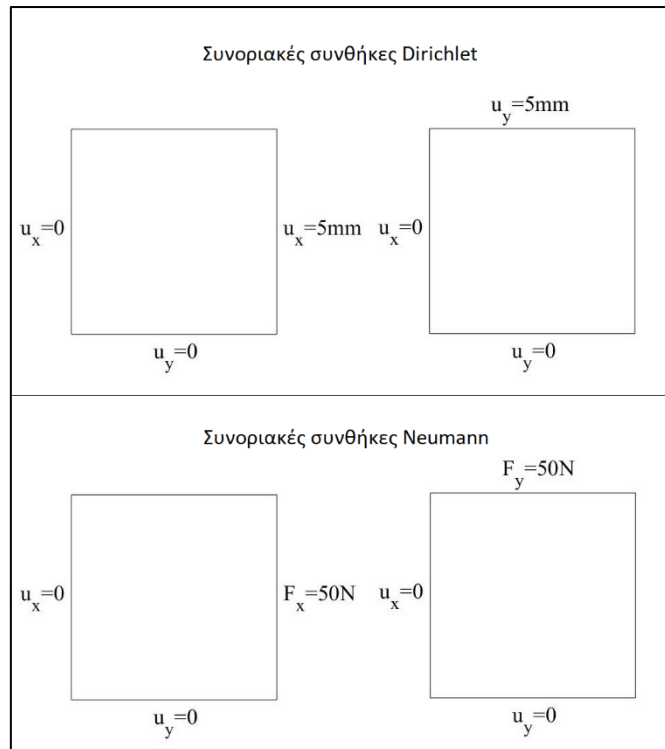
Η μελέτη εκτελείται για δισδιάστατα RVE με κυκλικά, ελλειπτικά και εξαγωνικά εγκλείσματα ίδιας επιφάνειας. Δημιουργούνται RVE διαφορετικών μεγεθών ορισμένων από την αναλογία $\delta = \frac{L}{d}$, όπου L το μήκος των ακμών της επιφάνειας του RVE και d η διάμετρος κύκλικου εγκλείσματος με την επιθυμητή επιφάνεια. Το μέγεθος d διατηρείται σταθερό, ενώ το L μεταβάλλεται.

Το κάθε RVE εξετάζεται σε φόρτιση καθαρού εφελκυσμού τόσο κατά τον οριζόντιο όσο και κατά τον κατακόρυφο άξονα. Επιπλέον, κάθε φόρτιση επιβάλλεται στην πρώτη περίπτωση με συνοριακές συνθήκες Dirichlet και στη δεύτερη με συνοριακές συνθήκες Neumann. Τελικά για κάθε RVE προκύπτει ο μέσος όρος του μέτρου ελαστικότητας κατά τις φορτίσεις στους δύο άξονες για τις εκάστοτε συνοριακές συνθήκες. Δηλαδή:

$$E_{Dirichlet} = \frac{(E_x + E_y)_{Dirichlet}}{2}$$

$$E_{Neumann} = \frac{(E_x + E_y)_{Neumann}}{2}$$

(6.1)



Εικόνα 6.16: Συνοριακές συνθήκες για τις τέσσερις προσομοιώσεις που εκτελούνται σε κάθε RVE.

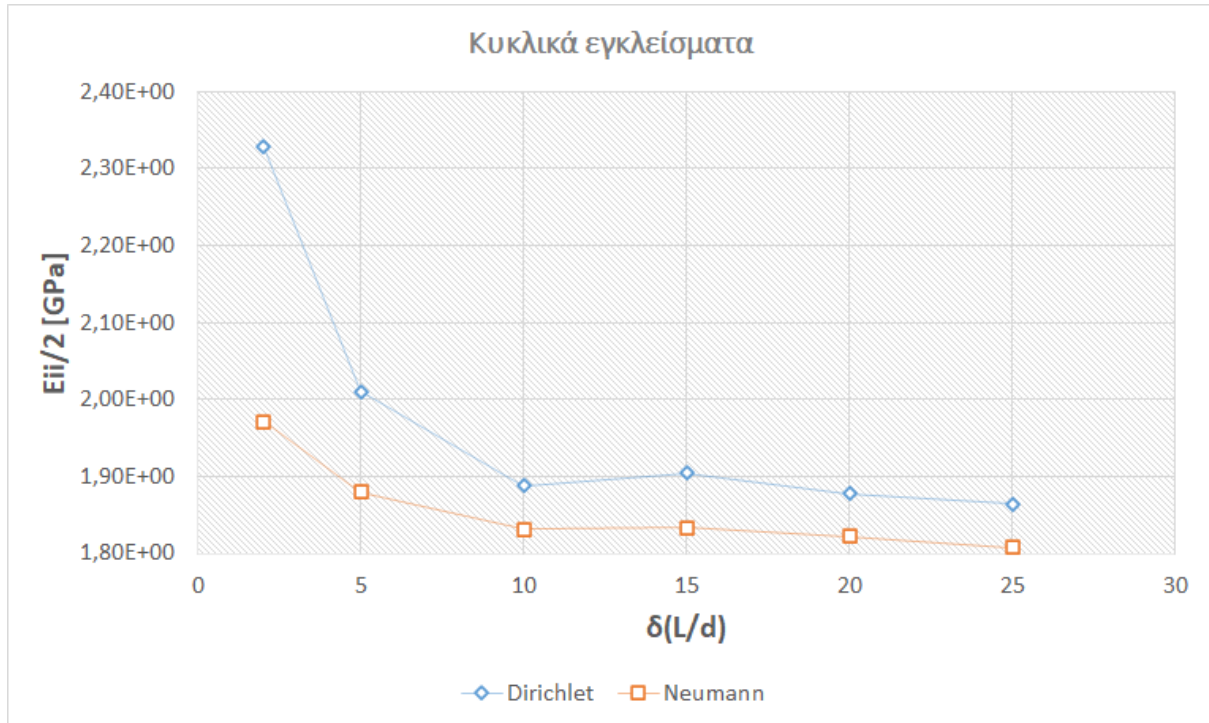
Ύστερα από την επίλυση με τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων, υπολογίζονται η μακροσκοπική τάση και η μακροσκοπική παραμόρφωση στην κατεύθυνση της καταπόνησης σύμφωνα με τους τύπους της εξ. 2.37. Ο λόγος του πρώτου μεγέθους προς το δεύτερο δίνει το μέτρο ελαστικότητας.

Στις **Εικόνες 6.17-6.19** παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τα εκάστοτε σχήματα εγκλεισμάτων. Στην περίπτωση των κυκλικών εγκλεισμάτων, οι καμπύλες από τις προσομοιώσεις με συνοριακές συνθήκες *Dirichlet* και *Neumann* σταθεροποιούνται και συγκλίνουν σε μια τιμή για το μέτρο ελαστικότητας $E \approx 1.835GPa$. Αντίστοιχα, το RVE ελλειπτικών εγκλεισμάτων καταλήγει σε παρόμοια τιμή σύγκλισης, συγκεκριμένα $E \approx 1.87GPa$. Το μοντέλο με τα εξαγωνικά εγκλείσματα εξάγει ένα μέτρο ελαστικότητας $E \approx 1.98GPa$, το οποίο είναι ελαφρώς υψηλότερο σε σχέση με τα προηγούμενα αποτελέσματα.

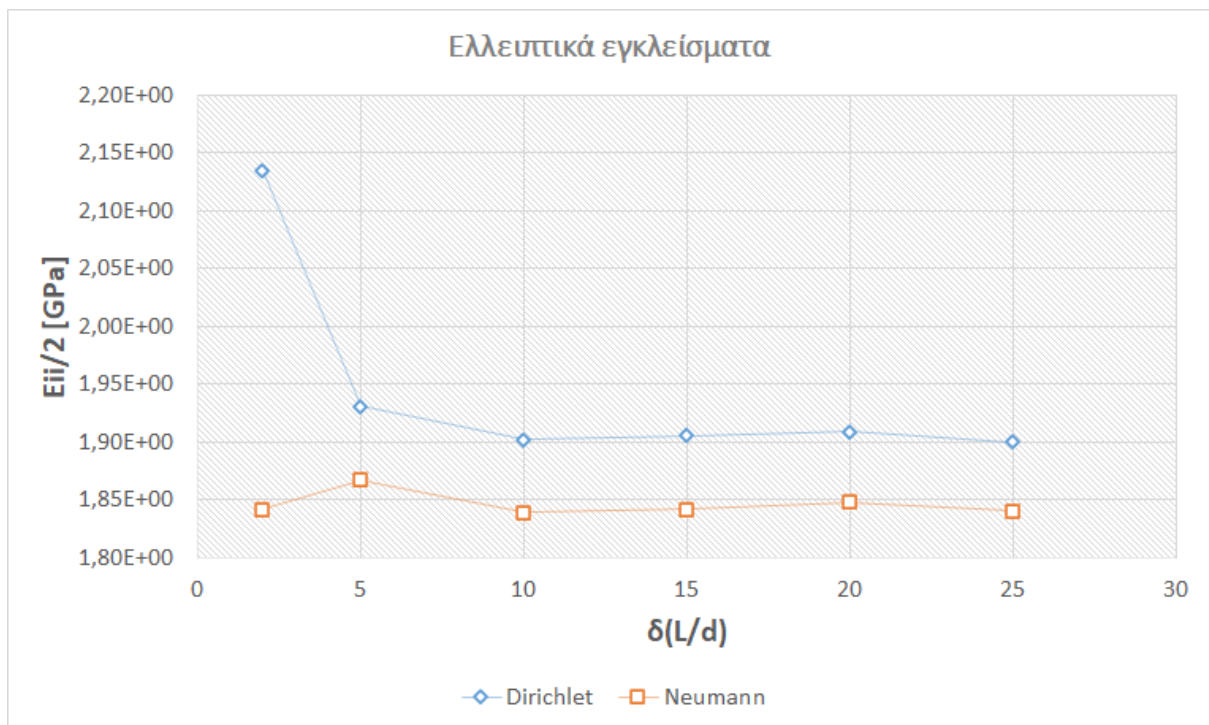
Η σχετική πορεία μεταξύ των καμπυλών *Dirichlet* και *Neumann* επιβεβαιώνεται από τη βιβλιογραφία. Δηλαδή, η τιμή του μέτρου ελαστικότητας έχει σε κάθε προσομοίωση ως άνω όριο το αποτέλεσμα από τις συνοριακές συνθήκες *Dirichlet* και ως κάτω όριο το αποτέλεσμα από τις συνοριακές συνθήκες *Neumann*.

Επιπλέον, η επιρροή του σχήματος των εγκλεισμάτων στην τιμή του μέτρου ελαστικότητας είναι ποιοτικά η αναμενόμενη. Οι προσομοιώσεις με κυκλικά εγκλείσματα καταλήγουν στη χαμηλότερη τιμή, ενώ οι προσομοιώσεις με εξαγωνικά εγκλείσματα στην υψηλότερη. Ο P.-L. Bian και λοιποί μελέτησαν ένα μοντέλο υαλώδους μετάλλου ενισχυμένο με εγκλείσματα τανταλίου (Bian, Liu, Qing, & Gao, 2018). Παρατήρησαν ότι τα κυκλικά εγκλείσματα προκαλούσαν υψηλότερη ολκιμότητα σε σχέση με τα ελλειπτικά. Αντίστοιχα, ο A. Paknia και λοιποί μελέτησαν σύνθετα υλικά αλουμινίου ενισχυμένα με εγκλείσματα καρβιδίου του πυριτίου (Paknia, Pramanik, Dixit, & Chattopadhyaya, 2016). Κατέληξαν ότι σε υψηλά κλάσματα όγκου τα μοντέλα με πολυγωνικά εγκλείσματα διέθεταν υψηλότερη ακαμψία συγκριτικά με τα μοντέλα με κυκλικά εγκλείσματα. Επομένως, η κατάταξη των

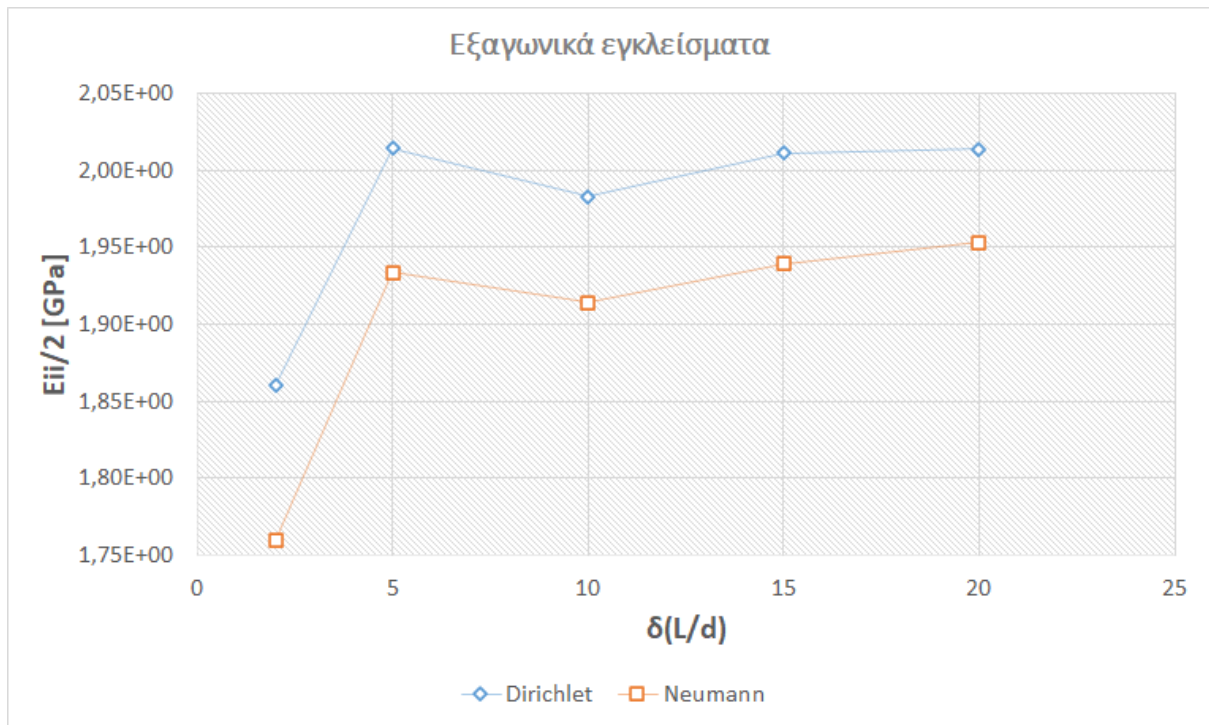
τιμών του μέτρου ελαστικότητας αναφορικά με το σχήμα των εγκλεισμάτων είναι σύμφωνη με τις παραπάνω μελέτες.



Εικόνα 6.17: Διακύμανση της τιμής του μέτρου ελαστικότητας για RVE με κυκλικά εγκλείσματα.



Εικόνα 6.18: Διακύμανση της τιμής του μέτρου ελαστικότητας για RVE με ελλειπτικά εγκλείσματα.



Εικόνα 6.19: Διακύμανση της τιμής του μέτρου ελαστικότητας για RVE με εξαγωνικά εγκλείσματα.

7. Συμπεράσματα

Το πρόγραμμα που αναπτύχθηκε δημιουργεί επιτυχώς δισδιάστατα και τρισδιάστατα *RVE*. Διαθέτει μια περιεκτική βιβλιοθήκη αντικειμένων για τα διαφορετικά σχήματα των εγκλεισμάτων, το καθένα από τα οποία συγκαταλέγει παραμέτρους αναφορικά με τη γεωμετρία του εκάστοτε σχήματος. Ζητείται άμεσα από το χρήστη να οριστούν μεταβλητές που αφορούν βασικά χαρακτηριστικά του *RVE*, όπως η διαστατικότητα και η γεωμετρία των εγκλεισμάτων. Επιπλέον, καθίσταται εύκολος ο ορισμός του κλάσματος όγκου, καθώς επίσης και η επιλογή του μεγέθους των εγκλεισμάτων, παρέχοντας τη δυνατότητα να παραχθούν *RVE* σε διαφορετικές κλίμακες.

Ο αλγόριθμος *GJK* λειτουργεί ικανοποιητικά για τον εντοπισμό επικαλύψεων. Οι τροποποιήσεις που συμπεριλήφθηκαν, όπως περιεγράφηκαν στο Κεφάλαιο 5, συνεισφέρουν σημαντικά στη μείωση των απαιτούμενων επαναλήψεων για την εξακρίβωση του αποτελέσματος στις περιπτώσεις οριακής ύπαρξης ή μη επικάλυψης. Η ιδιαίτερα οριακή περίπτωση κρίνεται από την εξ. 5.1, η οποία επιδέχεται το συμβιβασμό να καταλήξει εσφαλμένα στην ύπαρξη επικάλυψης. Η συγκεκριμένη επιλογή ενδέχεται να αυξάνει σε ορισμένες περιπτώσεις το χρόνο περάτωσης του προγράμματος, εξαλείφει δε την πιθανότητα να γίνει δεκτό ένα εσφαλμένο συμπέρασμα μη ύπαρξης επικάλυψης. Επιπλέον, η υπορουτίνα εντοπισμού των εγκλεισμάτων, που δύναται να επικαλύπτονται και ο έλεγχος μόνο αυτών, μειώνει σημαντικά την επαναληπτικότητα εκτέλεσης του *GJK*. Στις προσομοιώσεις που εκτελέστηκαν, για κάθε έγκλεισμα γινόταν έλεγχος επικάλυψης με λιγότερα από 10 από τα υπόλοιπα εγκλείσματα. Δίχως αυτή την υπορουτίνα, ο αριθμός εκτελέσεων του *GJK* θα αυξανόταν με κάθε καινούριο τοποθετημένο έγκλεισμα, γεγονός που σημαίνει ότι για υψηλά κλάσματα όγκου και σε όγκους με υψηλό λόγο $\delta = \frac{L}{a}$ ο *GJK* θα έπρεπε να κληθεί εκατοντάδες ή και χιλιάδες φορές.

Ο ευρετικός αλγόριθμος συμπίεσης δύο κατευθύνσεων συγκεντρώνει τον μη κατειλημμένο χώρο του όγκου γύρω από το επίπεδο στη μέση του *RVE* κατά τον κατακόρυφο άξονα. Η εναλλαγή στην κατεύθυνση μετατόπισης των εγκλεισμάτων ανάλογα με τις συντεταγμένες τους συνέδραμε ώστε να μην αλλοιώνεται ιδιαίτερα η ομοιομορφία της μικροδομής. Κρίνεται ότι η επέκταση των πιθανών κατευθύνσεων μετατόπισης θα βοηθούσε περισσότερο στην εύρεση σημείου τοποθέτησης των επόμενων εγκλεισμάτων, ειδικά στην περίπτωση των τρισδιάστατων *RVE*.

Η παραπάνω περίπτωση παρουσιάζει εξαιρετικά υψηλότερους χρόνους περάτωσης του προγράμματος σε σύγκριση με εκείνη των δισδιάστατων *RVE*. Εκτός από την επέκταση των κατευθύνσεων μετατόπισης κατά τον αλγόριθμο συμπίεσης, κατάλληλη μεταβολή του προσανατολισμού ενός εγκλείσματος συνδράμει ενδεχομένως στην ταχύτερη τοποθέτηση. Για παράδειγμα, κατά τον εντοπισμό μια επικάλυψης, το προς τοποθέτηση έγκλεισμα θα μπορούσε να περιστρέφεται υπό μικρές γωνίες και να διερευνάται εκ νέου αν αποφεύγεται η σύγκρουση με τα «γειτονικά» εγκλείσματα.

Το πρόγραμμα δεν επιτρέπει στην παρούσα μορφή του τη δυνατότητα τομής μεταξύ ενός συνόρου του *RVE* και ενός εγκλείσματος. Αυτό θα μπορούσε να τροποποιηθεί και το τμήμα του εγκλείσματος που βρίσκεται εκτός ορίων του όγκου να τοποθετείται στην απέναντι ακμή/επιφάνεια του *RVE*, τεμνόμενο με το αντίστοιχο σύνορο. Συνεπώς, αίρεται σε αυτή την περίπτωση ο παραπάνω περιορισμός και η καταλληλότητα μιας θέσης για ένα έγκλεισμα εξαρτάται αποκλειστικά από την τομή του με τα υπόλοιπα. Αυτή η τροποποίηση διευκολύνει τη δυνατότητα δημιουργίας περιοδικής μικροδομής, η οποία δεν παρέχεται αυτή τη στιγμή από το πρόγραμμα. Αυτή θα ήταν ιδιαίτερα χρήσιμη για το επόμενο στάδιο της ομογενοποίησης του ετερογενούς υλικού και τον πιο αξιόλογο υπολογισμό των ιδιοτήτων του, ειδικά στις περιπτώσεις μεγάλων διαφορών των ιδιοτήτων μεταξύ της μητρικής και της ενισχυτικής φάσης.

Η χρήση του αλγορίθμου *RSA* παρέχει αξιόπιστα αποτελέσματα για την παραγωγή της μικροδομής. Ωστόσο, είναι ωφέλιμη η ανάπτυξη και εφαρμογή των υπόλοιπων αλγορίθμων που αναφέρθηκαν στο Κεφάλαιο 3. Η δημιουργία μικροδομών και με αυτές τις μεθόδους θα παρείχαν μια πρώτη αξιολόγηση του παρόντος προγράμματος και την εξαγωγή συμπερασμάτων ως προς το βέλτιστο αλγόριθμο. Βέβαια, το τελευταίο ενδέχεται να αλλάζει κατά περίπτωση. Για παράδειγμα, ένας αλγόριθμος ενδέχεται να ολοκληρώνεται ταχύτερα για συγκεκριμένα σχήματα εγκλεισμάτων, ενώ να εμφανίζει δυσχέρεια για τα υπόλοιπα σχήματα. Σε παρόμοια κατεύθυνση, ενδείκνυται η έρευνα για εύρεση ενός εναλλακτικού αλγορίθμου για το *GJK*. Αν και η λειτουργία του είναι αξιόπιστη, είναι κατάλληλος μόνο για κυρτά σχήματα, ενώ ενδεχομένως να υπάρχουν σημαντικές δυσκολίες εφαρμογής για πιο ακανόνιστα σχήματα ετερογενειών, όπως για παράδειγμα καμπτόμενες ίνες μεταβαλλόμενης ακτίνας.

Εν κατακλείδι, το πρόγραμμα καθιστά εφικτή τη δημιουργία της μικροδομής ετερογενών υλικών με μία ενισχυτική φάση. Δίνοντας στο χρήστη τη δυνατότητα ορισμού των βασικών χαρακτηριστικών που πλαισιώνουν ένα *RVE*, εξάγονται μικροδομές πολλαπλών κλιμάκων, οι οποίες δύναται να αξιοποιηθούν για την εξαγωγή αποτελεσμάτων για τις ιδιότητες του εκάστοτε σύνθετου υλικού. Οι προαναφερθείσες παρατηρήσεις θα μπορούσαν να βελτιώσουν το παρόν πρόγραμμα ως προς το χρόνο περάτωσης, την επίτευξη υψηλών κλασμάτων όγκου, τη δημιουργία μικροδομών σε υψηλότερες τιμές του λόγου δ και τον εμπλουτισμό της βιβλιοθήκης των σχημάτων για τα εγκλείσματα.

Βιβλιογραφία

- Altendorf, H., & Jeulin, D. (2011, Απρίλιος 28). Random-walk based stochastic modeling of three-dimensional fiber systems. *Physical Review E*, 83(4). Ανάκτηση από <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.83.041804>
- Benveniste, Y. (1987). A new approach to the application of Mori-Tanaka's theory in composite materials. *Mechanics of Materials*, 6(2), 147-157.
- Bian, P.-L., Liu, T.-L., Qing, H., & Gao, C.-F. (2018). 2D Micromechanical Modeling and Simulation of Ta-Particles Reinforced Bulk Metallic Glass Matrix Composite. *Applied Sciences*, 8(11). Ανάκτηση από <https://doi.org/10.3390/app8112192>
- Callister Jr., W. D., & Rethwisch, D. G. (2018). *Materials Science and Engineering: An Introduction, 10th Edition*. Wiley.
- Drugan, W. J., & Willis, J. R. (1996, Απρίλιος). A micromechanics-based nonlocal constitutive equation and estimates of representative volume element size for elastic composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 44(4), 497-524.
- Eshelby, J. D. (1957, Αύγουστος). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 241(1226), 376-396.
- Feder, J. (1980, Νοέμβριος 21). Random Sequential adsorption. *Journal of Theoretical Biology*, 87(2), 237-254.
- Gilbert, E. G., Johnson, D. W., & Keerthi, S. S. (1988, Απρίλιος). A fast procedure for computing the distance between complex objects in three-dimensional space. *IEEE Journal of Robotics and Automation*, 4(2), 193-203.
- Häfner, S., Eckardt, S., & Könke, C. (2003). A geometrical inclusion-matrix model for the finite element analysis of concrete at multiple scales. *IKM, 16th International Conference on the Applications of Computer Science and Mathematics in Architecture and Civil Engineering*. Βαϊμάρη, Γερμανία.
- Hershey, A. V. (1954). The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystals. *Journal of Applied Mechanics*, 21(3), 236-240.
- Hill, R. (1963, Σεπτέμβριος). Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11(5), 357-372.
- Hill, R. (1965, Αύγουστος). A self-consistent mechanics of composite materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 13(4), 213-222.
- Hua, Y., & Gu, L. (2013, Φεβρουάριος). Prediction of the thermomechanical behavior of particle-reinforced metal matrix composites. *Composites Part B: Engineering*, 45(1), 1464-1470. Ανάκτηση από <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2012.09.056>
- Huet, C. (1990). Application of variational concepts to size effects in elastic heterogeneous bodies. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 38(6), 813-841.
- Kabhari, V. M. (2007). Fabrication, quality and service-life issues for composites in civil engineering. Στο V. M. Kabhari, *Durability of Composites for Civil Structural Applications* (σσ. 13-30). Woodhead Publishing Series.

- Kanit, T., Forest, S., Galliet, I., Mounoury, V., & Jeulin, D. (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach. *International Journal of Solids and Structures*, 40, 3647-3679.
- Lindemann, P. (χ.χ.). *The Gilbert-Johnson-Keerthi Distance Algorithm*. Ανάκτηση από https://www.researchgate.net/publication/265635286_The_Gilbert-Johnson-Keerthi_Distance_Algorithm
- Lubachevsky, B. D., & Stillinger, F. H. (1990). Geometric Properties of Random Disk Packings. *Journal of Statistical Physics*, 60(5), 561-583.
- Mori, T., & Tanaka, K. (1973, Μάιος). Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metallurgica*, 21(5), 571-574.
- Moussaddy, H. (2013, April). A NEW DEFINITION OF THE REPRESENTATIVE VOLUME ELEMENT IN NUMERICAL HOMOGENIZATION PROBLEMS AND ITS APPLICATION TO THE PERFORMANCE EVALUATION OF ANALYTICAL HOMOGENIZATION MODELS. [Doctoral dissertation, ECOLE POLYTECHNIQUE DE MONTREAL].
- Ortolano, J. M., Hernández, J. A., & Oliver, J. (2013). *A Comparative Study on Homogenization Strategies for Multi-Scale Analysis of Materials*. Barcelona: CIMNE.
- Ostoja, M., & Starzewski. (2006). Material spatial randomness: From statistical to representative volume element. *Probabilistic Engineering Mechanics*, 21, 112-132.
- Paknia, A., Pramanik, A., Dixit, A., & Chattopadhyaya, S. (2016). Effect of size, content and shape of reinforcements on the behaviour of Metal Matrix Composites (MMCs) under tension. *Journal of Materials Engineering and Performance*. doi:10.1007/s11665-016-2307-x
- Pathan, M. V., Tagarielli, V. L., Patsias, S., & Baiz-Villafranca, P. M. (2017, Φεβρουάριος 1). A new algorithm to generate representative volume elements of composites with cylindrical or spherical fillers. *Composites Part B: Engineering*, 110, 267-278. Ανάκτηση από <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2016.10.078>
- Sadd, M. H. (2009). *Elasticity: Theory, Applications, and Numerics*. Academic Press.
- Salnikov, V., Choï, D., & Karamian-Surville, P. (2015). On efficient and reliable stochastic generation of RVEs for analysis of composites within the framework of homogenization. *Computational Mechanics*, 55(1), 127-144. Ανάκτηση από <https://doi.org/10.1007/s00466-014-1086-1>
- Segurado, J., & Llorca, J. (2002, Οκτώβριος). A numerical approximation to the elastic properties of sphere-reinforced composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50(10), 2107-2121. Ανάκτηση από [https://doi.org/10.1016/S0022-5096\(02\)00021-2](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(02)00021-2)
- Stefanou, G., Dimitrios, S., & Metsis, P. (2021). Random Material Property Fields of 3D Concrete Microstructures Based on CT Image Reconstruction. *Materials*, 14(6). Ανάκτηση από <https://doi.org/10.3390/ma14061423>
- Torquato, S., Uche, U., & Stillinger, F. H. (2006, Δεκέμβριος). Random sequential addition of hard spheres in high Euclidean dimensions. *Physical Review E*, 74(6). doi:10.1103/PhysRevE.74.061308

Tyrus, J. M., Gosz, M., & DeSantiago, E. (2007). A local finite element implementation for imposing periodic boundary conditions on composite micromechanical models. *International Journal of Solids and Structures*, 44, 2972-2989.

