



ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΥΛΙΚΩΝ

*Ανάπτυξη μαθηματικών και υπολογιστικών μοντέλων για τη μελέτη
συνθέτων και θερμοηλεκτρικών υλικών – δομών*

ΛΑΜΠΡΟΥ ΕΛΕΥΘΕΡΙΟΣ
ΜΗΧΑΝΙΚΟΣ ΟΡΥΚΤΩΝ ΠΟΡΩΝ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΙΩΑΝΝΙΝΑ 2024



ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΥΛΙΚΩΝ

*Ανάπτυξη μαθηματικών και υπολογιστικών μοντέλων για τη μελέτη
συνθέτων και θερμοηλεκτρικών υλικών – δομών*

ΛΑΜΠΡΟΥ ΕΛΕΥΘΕΡΙΟΣ
ΜΗΧΑΝΙΚΟΣ ΟΡΥΚΤΩΝ ΠΟΡΩΝ

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΙΩΑΝΝΙΝΑ 2024

«Η έγκριση της διδακτορικής διατριβής από το Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων δεν υποδηλώνει αποδοχή των γνωμών του συγγραφέα Ν. 5343/32, άρθρο 202, παράγραφος 2».

Ημερομηνία αίτησης του κ. Λάμπρου Ελευθέριου: 14-12-2017

Ημερομηνία ορισμού Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής: 20-12-2017

Μέλη Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής:

Επιβλέπων:

Λεωνίδας Ν. Γεργίδης, Αναπληρωτής Καθηγητής του τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

Μέλη:

Αλκιβιάδης Παϊπέτης, Καθηγητής του τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

Αντώνιος Χαραλαμπίδης, Καθηγητής Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Ημερομηνία ορισμού θέματος: 20-12-2017

Ημερομηνία τροποποίησης θέματος: 16-2-2022

Θέμα: Ανάπτυξη μαθηματικών και υπολογιστικών μοντέλων για τη μελέτη συνθέτων και θερμοηλεκτρικών υλικών –δομών.

Διορισμός επταμελούς εξεταστικής επιτροπής: 23-3-2022

1. Λεωνίδας Γεργίδης, Αναπληρωτής Καθηγητής του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

2. Αλκιβιάδης Παϊπέτης, Καθηγητής του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

3. Αντώνιος Χαραλαμπίδης, Καθηγητής της Σχολής ΣΕΜΦΕ του Ε.Μ.Π..

4. Δημήτριος Φωτιάδης, Καθηγητής του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

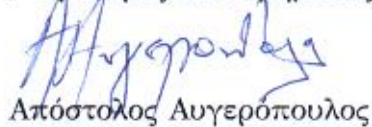
5. Νεκταρία-Μαριάνθη Μπάρκουλα, Καθηγήτρια του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

6. Θεόδωρος Ματίκας, Καθηγητής του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

7. Μιχαήλ Καρακασίδης, Καθηγητής του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

Έγκριση Διδακτορικής Διατριβής με βαθμό «Άριστα» στις 5-6-2024

Ο Πρόεδρος του Τμήματος



Απόστολος Αυγερόπουλος

Καθηγητής



Η Γραμματέας του Τμήματος



Μαρία Κόντου

Περίληψη

Στην παρούσα εργασία μελετάται αρχικά το θερμοηλεκτρικό φαινόμενο και στην συνέχεια αναπτύσσονται αριθμητικές μέθοδοι - μοντέλα για τον υπολογισμό θερμικών - ηλεκτρικών αγωγιμοτήτων συνθέτων υλικών αφού επιλυθεί το πρόβλημα της διήθησης σε τυχαίο υλικό.

Αναλυτικά, στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται μια εισαγωγή του θερμοηλεκτρικού φαινομένου όπου παρουσιάζονται οι απαραίτητες έννοιες για την αξιολόγηση των θερμοηλεκτρικών υλικών και αναλύεται το πρόβλημα σε μικρο κλίμακα και μακροκλίμακα.

Στο δεύτερο κεφάλαιο μελετάται εν περιλήψει το θερμοηλεκτρικό φαινόμενο σε επίπεδο συνεχούς, παρουσιάζονται οι διαφορικές εξισώσεις που διέπουν το φαινόμενο και στην συνέχεια περιγράφονται οι εξισώσεις σε στα πεπερασμένα στοιχεία. Στην συνέχεια παρουσιάζονται κάποιες πολύ βασικές έννοιες των τεχνητών νευρωνικών δικτύων και γίνεται ανασκόπηση της σύγχρονης βιβλιογραφίας και τεχνολογιών αιχμής τόσο για το θερμοηλεκτρικό φαινόμενο και την μοντελοποίηση θερμοηλεκτρικών ηλεκτρικών συσκευών.

Στο τρίτο κεφάλαιο μοντελοποιείται μία (1) εκ των τεσσάρων συνολικά θερμοηλεκτρικές γεννήτριες - συσκευές η οποία είναι βασισμένη σε ίνες άνθρακα και έχουν κατασκευαστεί όλες στο εργαστήριο Μηχανικής Συνθέτων και Ευφυών Υλικών του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης των Υλικών (ΤΜΕΥ) είναι ακριβή αντίγραφα τους, με στόχο να μελετηθεί η θερμοηλεκτρική τους απόδοση. Μελετήθηκε ως προς τα χαρακτηριστικά σχεδιασμού προκειμένου να μεγιστοποιηθεί η απόδοσή της ηλεκτρική και ισχύς. Στην συνέχεια του κεφαλαίου αναλύεται μεθοδολογία παραμετρικής ανάλυσης της συσκευής όπου το η προσομοίωση της συσκευής επιλύεται για διάφορες παραμέτρους σχεδιασμού όπως η θερμική αγωγιμότητα της ρητίνης, το μήκος των θερμοστοιχείων κ.α και γίνεται προσαρμογή της απόδοσης σε

σχέση με τις παραμέτρους σχεδιασμού με την βοήθεια νευρωνικών δικτύων.

Στο τέταρτο κεφάλαιο επιλύονται άλλες τρεις (3) συσκευές οι οποίες βασίζονται σε ημιαγώγιμα μελάνια σε υάλους που επίσης είχαν κατασκευαστεί στο εργαστήριο Μηχανικής Συνθέτων και Ευφυών Υλικών του ΤΜΕΥ είναι ακριβή αντίγραφα τους και μελετήθηκε η θερμοηλεκτρική τους απόδοση.

Στο πέμπτο κεφάλαιο παρουσιάζεται το βασικό θεωρητικό υπόβαθρο της θεωρίας διήθησης δηλαδή διήθηση πλέγματος, διήθηση συνεχούς και παρουσιάζονται οι τεχνικές που χρησιμοποιούνται επί το πλείστον στην σύγχρονη βιβλιογραφία. Επίσης αναλύονται οι μέθοδοι για τον υπολογισμό θερμικών - ηλεκτρικών ιδιοτήτων ενός τυχαίου σύνθετου σε επίπεδο μικροδομής.

Στο έκτο κεφάλαιο κατασκευάζεται ένα νέο θεωρητικό μοντέλο καθώς και η υπολογιστική του υλοποίηση σε δύο διαστάσεις (2D) και χρησιμοποιείται για τη μελέτη φαινομένων διήθησης συνεχούς σε μικρο και μακροκλίμακα. Το μοντέλο μακροκλίμακας έχει εγγενή ομοιότητα με τη διήθηση πλέγματος. Το φυσικό μέσο δηλαδή προσομοιώνεται ως ένα (άπειρο) πλέγμα που αποτελείται από αντιπροσωπευτικό επιφανειακά στοιχεία (RSEs). Υποθέτοντας την ομοιογένεια του μέσου, η μέση διάδοση των RSEs που υπολογίζεται ως πιθανότητα διήθησης της μικροδομής μπορεί να ερμηνευθεί και να γενικευτεί ως η πιθανότητα κατοχής για το άπειρο μέσο. Οι RSE προκύπτουν από μια επαναληπτική διαδικασία Monte Carlo που περιλαμβάνει τη δημιουργία των σχετικά μικρών δειγμάτων και η διάδοσής τους ελέγχεται μεμονωμένα από την κορυφή προς τα κάτω.

Η διάδοση στο πραγματικό φυσικό μέσο λαμβάνει χώρα όταν η υπολογισμένη πιθανότητα (p) είναι μεγαλύτερη από την κρίσιμη ($p_c \approx 0.5927$). Η προτεινόμενη μέθοδος αντιμετωπίζει το σύνθετο υλικό σε επίπεδο μακροδομής ως (2D) άπειρο ομογενοποιημένο μέσο το οποίο έχει προκύψει από

το επίπεδο της μικροδομής χρησιμοποιώντας ένα τετράγωνο πλέγμα με κατάληψη τοποθεσίας. Ο προτεινόμενος αριθμητικός αλγόριθμος εξετάζει τα σωματίδια στο RSE όπως ψηφιοποιήθηκαν χρησιμοποιώντας τοποθεσίες - pixel χωρίς επαφές. Σε συνέχεια της διαδικασίας ψηφιοποίησης, παραδοσιακές υπολογιστικές μέθοδοι όπως η Depth First Search χρησιμοποιούνται στην ανίχνευση πιθανών μονοπατιών διάδοσης στο τυχαία επιλεγμένα τετράγωνα δείγματα. Για την επιβεβαίωση του θεωρητικού μοντέλου καθώς και του αλγορίθμου, χρησιμοποιήθηκαν γνωστά προβλήματα από τη βιβλιογραφία και διαπιστώθηκε ότι ανεξαρτήτως μικροδομής στην κρίσιμη συγκέντρωση Φ_c η μέση πιθανότητα διήθησης στο RSE συγκλίνει στην αναμενόμενη τιμή $p_c \approx 0.5927$. Επιπλέον, τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την προτεινόμενη μεθοδολογία είναι πολύ κοντά με τις διαθέσιμες προβλέψεις στη βιβλιογραφία. Νέα αποτελέσματα αναφέρονται όπου καλύπτουν ένα ευρύ φάσμα γεωμετρικών τύπων σωματιδίων (κυκλικά, ελλειπτικά, ορθογώνια) και επιφανειακά κλάσματα σε συστήματα πλήρωσης μήτρας που αποδεικνύουν την ευρωστία και τη γενικότητα της προτεινόμενης μεθοδολογίας.

Στο έβδομο κεφάλαιο γίνεται μια προσπάθεια συσχέτισης της ηλεκτρικής - θερμικής αγωγιμότητας ενός σύνθετου τυχαίου υλικού με τον αριθμό των αγώγιμων μονοπατιών που μετρήθηκαν σε ένα αντιπροσωπευτικό στοιχείο επιφάνειας (RSE) με δειγματοληψία Monte Carlo. Αρχικά αναπτύσσεται ο θεωρητικός υπολογισμός για τη συσχέτιση των αγώγιμων μονοπατιών με τις ιδιότητες υιοθετώντας τρεις προσεγγίσεις αυξανόμενης ακρίβειας και πολυπλοκότητας: ευθύγραμμες διαδρομές ενός συστατικού, τεθλασμένες διαδρομές ενός συστατικού και τέλος τεθλασμένες διαδρομές πολλαπλών συστατικών. Στην συνέχεια, παρουσιάζεται μια αριθμητική μεθοδολογία για τον υπολογισμό των αγώγιμων μονοπατιών για το γενικό μοντέλο πολλών συστατικών - τεθλασμένων μονοπατιών. Για τον έλεγχο

της, επαληθεύεται σε τυχαίο δυαδικό υλικό και στην συνέχεια εφαρμόζεται για την επίλυση συνθετικών προβλημάτων συνεχούς διήθησης σε δύο κλίμακες: μικροκλίμακα και μακροκλίμακα. Η ακρίβεια των υπολογισμών είναι πολύ κοντά στα υπάρχοντα μοντέλα. Η ταχύτητα υπολογισμών καθώς και η κατανάλωση μνήμης είναι πολύ καλύτερες από μεθόδους όπως πεπερασμένα στοιχεία - διαφορές.

Σε τυχαίο δυαδικό υλικό, οι προσομοιώσεις δείχνουν ότι η σχέση κλιμάκωσης ακολουθείται με έναν εκθέτη κοντά στο 1.3. Επιπλέον, ο αριθμός των αγώγιμων μονοπατιών, το μέσο μήκος των μονοπατιών και το ενεργό πλάτος της μονής διαδρομής ακολουθεί νόμο κλιμάκωσης του οποίου υπολογίζονται οι εκθέτες οι οποίοι είναι περίπου ίσοι με 1.44 ± 0.01 , -0.25 ± 0.01 και -0.39 ± 0.01 αντίστοιχα.

Τέλος στο όγδοο κεφάλαιο αποτυπώνονται τα συμπεράσματα καθώς και οι κατευθύνσεις για μελλοντική έρευνα.

Abstract

In the first chapter there is an introduction to the thermoelectric phenomenon where the necessary concepts for the evaluation of thermoelectric materials are presented and the problem is analyzed on a micro and macro scale.

In the second chapter, the thermoelectric effect at the continuum level is presented. The differential equations governing the phenomenon are given and then the finite element methodology and relative equations are described. In the following, some very basic concepts of artificial neural networks are presented and the modern literature and state-of-the-art for both the thermoelectric phenomenon and the modeling of thermoelectric electrical devices are reviewed.

In the third chapter, one out of a total of four thermoelectric generators is modeled - devices which are based on carbon fibers and have all been manufactured in the Composite and Smart Materials Laboratory (CSML) of the Materials Science Engineering Department (MSED) and are exact copies of them, with aim to study their thermoelectric efficiency. It has been studied in terms of design features in order to maximize its electrical and power efficiency. In addition, a parametric analysis of the device is conducted for various design parameters such as the thermal conductivity of the resin, the length of the thermocouples etc. and the performance is adjusted in relation to the design parameters with the help of neural networks.

In the fourth chapter, three devices (also manufactured in CSML) based on semiconducting inks on glass fibers were simulated and their thermoelectric performance was studied.

In the fifth chapter, the basic theoretical background of percolation theory is presented, i.e. mesh percolation, continuum percolation, and the techniques used mostly in modern literature are presented. The methods for calculating the thermal-electrical properties of a random composite at the

microstructure level are also analyzed.

In chapter six, a new theoretical model and its computational implementation in two dimensions (2D) for the study of continuum percolation phenomena is presented. The aim was the development of a model which has inherent similarity with lattice percolation. The physical medium is simulated as an (infinite) grid comprising of representative surface elements (RSEs). Assuming medium's homogeneity the RSEs average propagation probability can be interpreted and generalized as the occupation probability for the infinite medium. The RSE's resulting from a Monte Carlo iterative process involving the creation of the relative small samples and their propagation ability checked individually from their top to bottom. The propagation in the actual physical medium takes place when the calculated probability (p) is higher than the critical propagation probability ($p_c \approx 0.5927$). The proposed method treats the low dimensional material system as a 2D infinite homogenized medium which can be further reduced leading to a mapping on a square lattice with site occupation. The proposed numerical algorithm considers the particles in the RSE as digitized using sites-pixels without contacts. Following the digitization procedure, traditional computational methods like Depth First Search are involved for the detection of possible propagation paths in the randomly selected square samples. For the confirmation of the theoretical model as well as the algorithm, problems known from the literature were used and it was found that regardless of microstructure at the critical concentration Φ_c the percolation probability on the RSE converges to the anticipated $p_c \approx 0.5927$ value. In addition, the results obtained from the proposed methodology compare very well with available predictions in the literature. New results are reported covering a wide range of particle geometrical types (circular, elliptical, rectangular) and surface fractions in matrix-filler or matrix-fillers systems proving the

robustness and applicability of the proposed methodology.

In the seventh chapter, for the first time, the electrical-thermal conductivity of a composite random material is correlated with the number of conductive paths, the mean path length and the mean effective path width measured in a representative surface element (RSE) by Monte Carlo sampling. This work is organized in two parts. The theoretical calculation takes place in the first part for the correlation of conductive paths by adopting three approaches (incremental with respect to accuracy and complexity) based on: i) one-component straight paths, ii) multi-component straight paths and iii) multi - component non-straight paths. In the second part, a novel numerical methodology for the calculation of the conductance of the RSE through the conductive paths, mean path length and the mean effective path is developed for the general model of multi-component non-straight line paths based on Ohm's law. In addition, a methodology that reduces the calculated properties from the microscale to the macroscale is proposed, that takes into account the probability of percolation for finite sizes and the average value of the property from the samples in which percolation occurs. After the necessary consistency steps and verification of the method and its implementation on random binary material systems, it is further applied to solve synthetic continuous percolation problems at microscale and macroscale. The results and the accuracy of calculations are in close agreement with existing models. The computational speed and memory requirements of the newly proposed methodology are advantageous when compared to boundary value problem methods such as Finite Elements (FE) - Differences (FD) and Resistor Networks technique. The electrical (DC) and thermal conductivity follow the same scaling relation and the proposed methodology can be calculated at the same stage without additional cost. In a random binary medium the simulations showed that a scaling law is followed with an exponent value very

close to 1.3. In addition, the number of conductive paths, the average length of the paths, and the effective width follow scaling laws with exponents 1.44 ± 0.01 , -0.25 ± 0.01 and -0.39 ± 0.01 , respectively.

Finally, the eighth chapter presents the conclusions as well as possible directions for future research.

Ευχαριστίες

Κατά τη διάρκεια εκπόνησης της διδακτορικής μου διατριβής στο Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών, βοηθήθηκα από αρκετούς ανθρώπους που στάθηκαν στο πλάι μου.

Το πρώτο και μεγαλύτερο ευχαριστώ δικαιωματικά το οφείλω στον επιβλέποντά μου, Αναπληρωτή Καθηγητή του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών κ. Λεωνίδα Ν. Γεργίδη, για την πολύπλευρη συμπαράσταση σε όλα τα στάδια αυτού του εγχειρήματος καθώς και για τη διαρκή επιστημονική καθοδήγηση, βοήθεια και την πλήρη εμπιστοσύνη που μου έδειξε.

Οφείλω ένα ευχαριστώ στο μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής Καθηγητή του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών κ. Αλκιβιάδη Παϊπέτη για τη βοήθειά του, την άψογη συνεργασία στα πλαίσια της υπολογιστικής μοντελοποίησης θερμοηλεκτρικών συσκευών που κατασκευάστηκαν στο ερευνητικό του εργαστήριο στο Εργαστήριο Μηχανικής Σύνθετων και Ευφύων Υλικών.

Για την τιμή που μου έκανε να είναι μέλος της Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής θα ήθελα να ευχαριστήσω το έτερο μέλος της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής Καθηγητή της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών κ. Αντώνη Χαραλαμπόπουλο.

Θα ήθελα θερμά να ευχαριστήσω τα υπόλοιπα μέλη της Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής, για την τιμή που μου έκαναν να συμμετέχουν στην κρίση της διδακτορικής διατριβής μου και συγκεκριμένα τους Καθηγητές του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών κυρίους Δημήτριο Φωτιάδη, Θεόδωρο Ματίκα, Μιχαήλ Καρακασίδη καθώς και την Καθηγήτρια του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών κυρία Νεκταρία-Μαριάνθη Μπάγκουλα.

Συνεχίζοντας θέλω να πω ένα ευχαριστώ σε όλα τα μέλη της ερευνητικής ομάδας του κ. Γεργίδη Multiscale Multidisciplinary Multiphysics Simulation

Team [(MU)³ST].

Χωρίς την ηθική και έμπρακτη συμπαράσταση όμως της οικογένειάς μου η ολοκλήρωση της διατριβής μου θα ήταν αδύνατη. Τους ευχαριστώ από καρδιάς.

Αφιέρωση

Η παρούσα αφιερώνεται στον γιό μου τον Θέμη με όλη μου την αγάπη και την ελπίδα κάποτε να του φωτίσει το δρόμο.

Ρώτησαν κάποτε το Δαλάι Λάμα:

Τι σας προκαλεί τη μεγαλύτερη έκπληξη στην ανθρωπότητα

Η απάντησή του ήταν η εξής:

Ο άνθρωπος.

Γιατί θυσιάζει την υγεία του για να βγάλει λεφτά.

*Ύστερα θυσιάζει τα λεφτά του για να
ανακτήσει την υγεία του.*

*Και τότε είναι τόσο ανήσυχος για το μέλλον,
ώστε δεν απολαμβάνει το παρόν.*

*Και ως αποτέλεσμα αυτός δεν ζει ούτε στο παρόν,
ούτε στο μέλλον.*

Και ζει σαν να μη πρόκειται ποτέ να πεθάνει.

Και πεθαίνει χωρίς να έχει ζήσει ποτέ πραγματικά.

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	1
1.1	Συγκομιδή Ενέργειας: Θερμοηλεκτρικά Φαινόμενα και Υλικά	1
1.1.1	Το θερμοηλεκτρικό φαινόμενο	5
1.1.2	Φαινόμενο Seebeck	6
1.1.3	Απόδοση Θερμοηλεκτρικών Υλικών	9
1.1.4	Θερμοηλεκτρικά υλικά	10
1.1.5	Ιεραρχικά σύνθετα πολύστρωτα ως θερμοηλεκτρικά υλικά	13
1.1.6	Βασικές μεταφορικές ιδιότητες σχετιζόμενες με το Θερμοηλεκτρικό Φαινόμενο και η ανάγκη για υπολογισμούς σε πολλαπλές κλίμακες	14
1.2	Διάρθρωση Διδακτορικής Διατριβής	17
2	Μοντελοποίηση θερμοηλεκτρικών συσκευών για συγκομιδή ενέργειας σε επίπεδο συνεχούς	27
2.1	Ανάγκη για μοντελοποίηση θερμοηλεκτρικών συσκευών	27
2.2	Το θερμοηλεκτρικό πρόβλημα συζευγμένων πεδίων-Καταστατικές εξισώσεις	29
2.2.1	Η Μέθοδος Πεπερασμένων στοιχείων	30
2.2.2	Οι εξισώσεις του θερμοηλεκτρικού φαινομένου υπό το πλαίσιο των FEM	33

2.3	Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα	35
2.3.1	Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων	38
2.3.2	Είδη Νευρωνικών Δικτύων	39
2.3.3	Ο τεχνητός Νευρώνας	40
2.3.4	Αλγόριθμοι εκπαίδευσης	42
2.3.5	Βιβλιογραφική ανασκόπηση υπολογιστικών μελετών σχε- τιζόμενες με τη μοντελοποίηση θερμοηλεκτρικών συ- σκευών	42
3	Μοντελοποίηση θερμοηλεκτρικών συσκευών βασισμένες στις ίνες άνθρακα	53
3.1	Εισαγωγή	53
3.2	Μοντελοποίηση Θερμοηλεκτρικής συσκευής βασισμένης σε σύν- θετο εποξειδικό πολύστρωτο με ανθρακονήματα	54
3.3	Υλικά και οι ιδιότητές τους που χρησιμοποιούνται στη μοντε- λοποίηση TEG συσκευών	59
3.3.1	Γεωμετρία και συνοριακές συνθήκες	61
3.3.2	Αριθμητική επίλυση του μοντέλου	64
3.3.3	Τάση εξόδου και μέγιστη ηλεκτρική ισχύς εξόδου	65
3.4	Παραμετρική ανάλυση προσομοιωμένης συσκευής	69
3.4.1	Γεωμετρικά χαρακτηριστικά προσομοιωμένων συσκευών	69
3.5	Περασμένα στοιχεία Προσομοίωση:Γεωμετρία - Διακριτοπο- ίηση Συνοριακές συνθήκες - Διαδικασία επίλυσης - Σύγκλιση	72
3.5.1	Συνοριακές Συνθήκες	72
3.5.2	Διαδικασία Επίλυσης	73
3.6	Αποτελέσματα-Συγκρίσεις με Πειραματικές μετρήσεις	74
3.7	Αποτελέσματα - Επίδραση ιδιοτήτων υλικού	77
3.8	Μοντελοποίηση συσκευής TEG με χρήση τεχνητών νευρωνι- κών δικτύων (ANN)	81

4 Μοντελοποίηση θερμοηλεκτρικών συσκευών εκτυπωμένων ημιαγωγικών μελανιών σε υάλους	93
4.1 Εισαγωγή	93
4.1.1 Γεωμετρικά Χαρακτηριστικά - Μοντελοποίηση	94
4.1.2 Ανάλυση της θερμοηλεκτρικής συσκευής με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων	97
4.2 Ιεραρχικά τροποποιημένο σύνθετο πολυμερές ενισχυμένο με ίνες γυαλιού με επιστρώσεις νανοσωλήνων γραφενίου GFRP-GTEG	100
4.2.1 Περιγραφή της θερμοηλεκτρικής συσκευής	100
4.2.2 Γεωμετρικά χαρακτηριστικά - Μοντελοποίηση	102
4.2.3 Ανάλυση της Θερμοηλεκτρικής συσκευής με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων	107
4.3 Θερμοηλεκτρική συσκευή με εκτυπωμένο νανοδομημένο υλικό με βάση τον άνθρακα και 24 θερμοστοιχεία	112
4.3.1 Γεωμετρικά χαρακτηριστικά - Μοντελοποίηση	112
4.3.2 Ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων	114
5 Θεωρία Διήθησης - Υπολογισμός θερμικών και ηλεκτρικών αγωγιμοτήτων σε μέσο και μάκρο κλίμακα	121
5.1 Percolation Theory σε τυχαίο υλικό	121
5.2 Βασικές Έννοιες	124
5.2.1 Κρίσιμη Πιθανότητα	128
5.2.2 Ασυνεχές Μοντέλο	128
5.2.3 Μεταβάσεις Φάσεων	133
5.2.4 Νόμος Δύναμης - Power law	135
5.3 Εφαρμογές	136
5.4 Τεχνικές	137

5.4.1	Αλγόριθμοι αναζήτησης: Depth First Search Algorithm και Breath First Search	139
5.4.2	Monte Carlo	141
5.5	Percolation theory του συνεχούς	142
5.6	Εκτίμηση θερμικών - Ηλεκτρικών Ιδιοτήτων Υλικών	143
5.6.1	Το μοντέλο δικτύου αντιστάσεων	145
6	Υπολογιστική μέθοδος με βάση την ψηφιοποίηση σωματιδίων για τη μελέτη της διήθησης συνεχούς	155
6.1	Περίληψη	155
6.2	Εισαγωγή	156
6.3	Προτεινόμενος Αλγόριθμος	161
6.4	Ψηφιοποίηση των γεωμετρικών συστατικών στην αντιπροσω- πευτική επιφάνεια	167
6.5	Αποτελέσματα	170
6.5.1	Αριθμητικές προβλέψεις για συστήματα υλικών με ένα υλικό πλήρωσης	170
6.5.2	Διήθηση σε συστήματα με πολλαπλά υλικά πλήρωσης .	182
6.5.3	Το πρόβλημα των κενών (Swiss Cheese Problem - voids)	184
7	Μοντέλα επίλυσης θερμικής - ηλεκτρικής αγωγιμότητας	193
7.1	Εύρεση της ηλεκτρικής αγωγιμότητας σε ένα 3-διάστατο μο- ντέλο	193
7.2	Εισαγωγή	195
7.2.1	Έννοιες και θεωρητική μοντελοποίηση	199
7.2.2	Υπολογισμός της αγωγιμότητας RVE	204
7.2.3	Διόρθωση λόγω percolation (διόρθωση μακροκλίμακας)	205
7.3	Αριθμητικοί υπολογισμοί ηλεκτρικής - θερμικής αγωγιμότη- τας για δύο διαστάσεις	206

7.3.1	Παρουσίαση αλγόριθμου υπολογισμού	206
7.4	Αποτελέσματα	213
7.4.1	Υπολογισμός αριθμού και μέσου μήκους αγωγίμων διαδρομών σε ένα πλέγμα για διαφορετικές πιθανότητες κατάληψης.	215
7.4.2	Διφασικό σύστημα με κυκλικό υλικό πλήρωσης	218
7.4.3	Σύστημα δύο φάσεων με ελλειπτικό υλικό πλήρωσης	220
7.4.4	Σύστημα τριών φάσεων με κυκλικό και ελλειπτικό πληρωτικό	221
7.4.5	Τρεις διαστάσεις	223
8	Συμπεράσματα - Μελλοντικές Ερευνητικές Προτάσεις	229

Κατάλογος Σχημάτων

1.1	Χρήση και απώλεια ενέργειας. Η ανάγκη για συγκομιδή/ανάκτηση ενέργειας και το θερμοηλεκτρικό φαινόμενο.	3
1.2	Ενδεικτικά παραδείγματα ύπαρξης βαθμίδας θερμοκρασίας που οδηγεί σε απώλεια θερμορροής-θερμικής ενέργειας και δυνητικά μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την παραγωγή ηλεκτρικής ενέργειας.	4
1.3	Εκφάνσεις του θερμοηλεκτρικού φαινομένου: τα φαινόμενα Seebeck - Peltier)	7
1.4	Το φαινόμενο Seebeck.	8
1.5	Μοντελοποίηση σε πολλαπλές κλίμακες.	16
2.1	Δομή Τεχνητού Νευρωνικού Δικτύου	37
3.1	Απεικόνιση της μονάδας TEG που βασίζεται σε CF με δέκα (10) σειριακά διασυνδεδεμένα θερμοστοιχεία τύπου p	56
3.2	Γεωμετρικά χαρακτηριστικά και διαστάσεις της προσομοιωμένης θερμοηλεκτρικής γεννήτριας σε χιλιοστά (mm) που περιλαμβάνει δέκα (10) θερμοστοιχεία.	57
3.3	Πολυστρωματικό CFRP με δυνατότητα TEG οκτώ (8) στρώσεων	63
3.4	Συνοριακές συνθήκες για το 8 στρωμάτων TEG	64
3.5	Κατανομές θερμοκρασιών - ηλεκτρικού δυναμικού για το TEG-CFRP οκτώ (8) στρωμάτων	65

3.6	Τάση εξόδου (ΔV) ως συνάρτηση της διαφοράς θερμοκρασίας (ΔT) προσομοίωση και πειραματικά δεδομένα	67
3.7	Θερμοηλεκτρική ισχύς σε ΔT 35, 55 και 75 °C για μεταβαλλόμενες αντιστάσεις φορτίου	67
3.8	Μοντέλο γεωμετρίας της θερμοηλεκτρικής συσκευής με ποικίλο αριθμό θερμοζευγών που κυμαίνεται από 1 έως 40 . . .	70
3.9	Ανάλυση σύγκλισης FEM	73
3.10	V_{oc} για συσκευές σε σειριακή σύνδεση που η καθεμία αποτελείται από δέκα (10) θερμοστοιχεία.	76
3.11	ΔV ως συνάρτηση του ΔT για TEG με αέρα και διαφορετικές ρητίνες διάφορες θερμικές αγωγιμότητες	78
3.12	Διάγραμμα $V - I$ για TEG γεμάτο με αέρα καθώς και διαφορετικές ρητίνες με διάφορες θερμικές αγωγιμότητες	79
3.13	Ισχύς ως συνάρτηση της αντίστασης φορτίου για TEG γεμάτο με αέρα και διαφορετικές ρητίνες που έχουν ποικίλη θερμική αγωγιμότητα	80
3.14	Τάση ανοιχτού κυκλώματος (V_{oc}) σε Volt ως συνάρτηση της θερμικής αγωγιμότητας της ρητίνης (k) σε $W/(m^{\circ}C)$ για διαφορά θερμοκρασίας $\Delta T=75$ °C.	81
3.15	$\Delta V - \Delta T$ για διάφορες διαμέτρους (D) θερμοστοιχείων και τιμές αγωγιμότητας πολυμερικής ρητίνης.	82
3.16	$P_{max} - \Delta T$ για διάφορες διαμέτρους (D) θερμοστοιχείων και τιμές αγωγιμότητας για την πολυμερική ρητίνη.	82
3.17	Αντιπροσωπευτική αρχιτεκτονική ANN που χρησιμοποιείται για την πρόβλεψη τάσης εξόδου.	84
3.18	Γράφημα παλινδρόμησης για σετ εκμάθησης (πάνω αριστερά), δοκιμαστικό σύνολο (πάνω δεξιά) και σύνολο (κάτω). .	86

3.19 Εκτίμηση της τάσης εξόδου της συσκευής μοντέλου TEG χρησιμοποιώντας τεχνικές νευρωνικών δικτύων για διάφορες θερμοκρασιακές διαφορές	87
3.20 Εκτίμηση της τάσης εξόδου της συσκευής μοντέλου TEG χρησιμοποιώντας τεχνικές νευρωνικών δικτύων για διάφορες ρητίνες και διαφορές θερμοκρασίας	88
3.21 Εκτίμηση της τάσης εξόδου της συσκευής μοντέλου TEG χρησιμοποιώντας τεχνικές νευρωνικών δικτύων για διάφορο αριθμός θερμοστοιχείων - συσκευών σε σειρά	89
3.22 Εκτίμηση της τάσης εξόδου της συσκευής μοντέλου TEG χρησιμοποιώντας τεχνικές νευρωνικών δικτύων για διάφορες αποστάσεις	90
3.23 Εκτίμηση της τάσης εξόδου της συσκευής μοντέλου TEG χρησιμοποιώντας τεχνικές νευρωνικών δικτύων	91
4.1 Γεωμετρία και συνοριακές συνθήκες της πολυμερούς συσκευής TEG ενισχυμένης με ίνες υάλου	95
4.2 Κατανομές θερμοκρασίας και ηλεκτρικού δυναμικού στη δομική συσκευή TEG	99
4.3 Τάση και ισχύς εξόδου της συσκευής TEG ως συνάρτηση των εφαρμοσμένων ΔT	101
4.4 Η Πραγματική συσκευή SWCNT τύπου p και n	103
4.5 Διακριτοποιημένο μοντέλο.	104
4.6 Σύνθετο πολυστρωματικό GFRP-GTEG με τέσσερα (4) στρώματα TE όπου κάθε στρώμα φιλοξενεί 16 στοιχεία	105
4.7 3-Δ Γεωμετρία και συνοριακές συνθήκες για το Σύνθετο πολυστρωματικό GFRP-GTEG	106
4.8 Αποτελέσματα προσομοίωσης για το μοντέλο 8 p/n ζευγών του πολυστρωματικού υλικού GFRP-OTEG	108

4.9	Τάση ανοιχτού κυκλώματος (V_{oc}) για μοντέλο 464 θερμοστοιχείων	110
4.10	Απεικόνιση των θερμοκρασιών για συσκευή 29 στοιχειωδών συσκευών (εξωτερική επιφάνεια).	111
4.11	Η διακριτοποιημένη γεωμετρία της θερμοηλεκτρικής διάταξης για την συσκευή GF με δυνατότητα TEG	113
4.12	Κατανομές θερμοκρασίας στην συσκευή TEG	115
4.13	Κατανομές ηλεκτρικού δυναμικού στην συσκευή TEG	116
4.14	Σύγκριση των τάσεων εξόδου FEM και των πειραματικών μετρήσεων	117
4.15	Ισχύς εξόδου της συσκευής TEG ως συνάρτηση της διαφοράς θερμοκρασίας ΔT Πειραματικά - Προσομοιώσεις	118
5.1	Μοντέλο αγωγιμότητας.	126
5.2	Μοντέλο αγωγιμότητας σε $\log(\sigma_{dc})\log(p - p_c)$ διάγραμμα.	126
5.3	Παράδειγμα percolation - μή percolation για δύο πιθανότητες κατάληψης	129
5.4	Τα 4 συχνότερα χρησιμοποιούμενα Αρχιμήδεια Πλέγματα	130
5.5	Ασυνεχές Μοντέλο κατάληψης θέσεων και κατάληψης δεσμών.	131
5.6	Τέσσερις πλησιέστεροι γείτονες (α) και επόμενων-πλησιέστερων γειτόνων (β).	132
5.7	Εφαρμογή του αλγορίθμου HK.	138
5.8	Εφαρμογή του αλγορίθμου DFS [40].	140
5.9	Απόσπασμα συνεχούς percolation για κυκλικά συστατικά.	143
5.10	Απόσπασμα συνεχούς percolation με φαινόμενο σήραγγας	145
5.11	Απεικόνιση δικτύου αντιστάσεων με όλους τους δεσμούς	146
5.12	Απεικόνιση δικτύου αντιστάσεων μή πλήρης	147

6.1	Άπειρο Μέσο (μεγάλη εικόνα) και μικροδομή (μεγεθυμένη εικόνα).	160
6.2	Προτεινόμενος Αλγόριθμος.	162
6.3	Μοντελοποίηση κυκλικών επικαλυπτόμενων σωματιδίων με διάδοση και εφαρμογή του DFS	164
6.4	Μοντελοποίηση πολυφασικού συστήματος με διάδοση σήραγγας	165
6.5	Διάγραμμα ροής του προτεινόμενου αλγορίθμου.	166
6.6	Γραφική αναπαράσταση της διαδικασίας ψηφιοποίησης	169
6.7	Δείγμα RSE με διαφορετικές τιμές παραμέτρου $ppms$ για ίδια μεγέθη RSE.	173
6.8	Επίδραση της παραμέτρου $ppms$ στην ακρίβεια της μεθόδου για τρεις διαφορετικές γεωμετρίες πληρωτικών.	174
6.9	Εμφάνιση σχεδόν τυχαίας μη συνεχούς percolation που δημιουργείται από πολύ μικρές τιμές $ppms$	175
6.10	Επίδραση του $ppms$ στον υπολογιστικό χρόνο για ένα βήμα MC	177
6.11	Πιθανότητα percolation ως συνάρτηση των επαναλήψεων του MC	178
6.12	Επίδραση της διάστασης πλέγματος L στην ακρίβεια και τον υπολογιστικό χρόνο	179
6.13	Επίδραση του παράγοντα $ppms^2/(4L^2)$ στην ακρίβεια p_c για κυκλικό συστατικό	180
6.14	Πιθανότητα percolation p για κυκλικά πληρωτικά ως συνάρτηση του κλάσματος επιφάνειας Φ για διαφορετικά μεγέθη RSE	181
6.15	Επίλυση του προβλήματος percolation για σύστημα που αποτελείται από δύο ελλειπτικά πληρωτικά	182

6.16 Πρόβλημα percolation για ένα σύστημα που αποτελείται από τρεις τύπους σωματιδίων πλήρωσης καθώς και το φαινόμενο σήραγγας	184
6.17 Πρόβλημα percolation για ένα σύστημα αποτελούμενο από τρία ορθογώνια πληρωτικά	185
6.18 Πρόβλημα των κενών (Swiss Cheese Problem)	186
6.19 Επίλυση σε τρεις διαστάσεις	187
7.1 Μοντέλο ευθυγράμμων αγωγών	201
7.2 Μοντέλο μη-ευθυγράμμων αγωγών	203
7.3 Λύση δύο σταδίων: μάκρο κλίμακα (μεγάλη εικόνα) και μικρο κλίμακα (μεγεθυμένος τομέας).	205
7.4 Αναζήτηση αγώγιμων διαδρομών σε τυχαίο υλικό με πιθανότητα κατάληψης ίση με 0.69.	208
7.5 Αλγόριθμος Lee.	209
7.6 Επίλυση 3-Φασικού συστήματος	210
7.7 Αγωγιμότητα διαδρομής.	211
7.8 Παρουσίαση του αλγορίθμου	212
7.9 Η έννοια του ενεργού πάχους μονοπατιού	213
7.10 Σύγκλιση της μεθόδου. Μέση τιμή ηλεκτρικής αγωγιμότητας και % σφάλμα ως συνάρτηση των επαναλήψεων.	215
7.11 Συσχετισμός μεταξύ $\log(\sigma/\sigma_{max})$ και $\log((\Phi - \Phi_c)/\Phi_c)$ για διάφορα πλέγματα	216
7.12 Συσχέτιση μεταξύ $\log(L) - \log(\sigma/\sigma_{max})$ για διάφορα πλέγματα στην κρίσιμη συγκέντρωση	217
7.13 Συνολικές διαδρομές και μέσο μήκος διαδρομής για διάφορα επιφανειακά κλάσματα	218
7.14 Ηλεκτρική αγωγιμότητα σύνθετου με υλικό γεωμετρίας κύκλου.	219

7.15	Αγωγή μονοπάτια σε περίπτωση ελλειπτικού πληρωτικού με $a_R=10$	221
7.16	Ηλεκτρική αγωγιμότητα ελλειπτικού πληρωτικού με $a_R = 10$.	222
7.17	Αγωγή μονοπάτια σε περίπτωση συστήματος με δύο πληρωτικά: ένα ελλειπτικό και ένα κυκλικό	223
7.18	Αγωγιμότητα τριών συστατικών που αποτελείται από ελλειπτικό συστατικό και κυκλικό υλικό πλήρωσης.	224
7.19	Σύνθετο υλικό αποτελούμενο από τυχαίους κύβους.	224

Κατάλογος Πινάκων

3.1	Ιδιότητες των CF.	59
3.2	Ιδιότητες Ρητινών.	60
3.3	Ιδιότητες των Carbon Fibers.	60
3.4	Ηλεκτρικές ιδιότητες κράματος χαλκού: Ηλεκτρική αντίσταση (ισότροπη - εξαρτάται από τη θερμοκρασία).	61
3.5	Κράμα αλουμινίου Θερμική αγωγιμότητα - Ηλεκτρική Αντίστα- ση	61
3.6	Συνοπτικά αποτελέσματα προσομοιώσεων.	68
3.7	Θερμοηλεκτρική γεννήτρια εξωτερικές διαστάσεις και γεωμε- τρικά χαρακτηριστικά των θερμοστοιχείων που χρησιμοποιο- ύνται	71
4.1	Σύγκριση πειραματικών και υπολογιζόμενων τάσεων ανοι- χτού κυκλώματος.	116
5.1	Κρίσιμη συγκέντρωση Φ_c για εγκλείσματα διαφόρων σχη- μάτων κύκλος - ελλείψεις.	144
6.1	Προβλέψεις μεθόδου για 2D, κρίσιμη πιθανότητα percolation (p_c^{sim}) και κρίσιμο κλάσμα επιφάνειας (Φ_c^{sim}).	171
6.2	Προβλέψεις μεθόδου για προσομοιώσεις σε δισδιάστατα συ- στήματα για κρίσιμη πιθανότητα percolation (p_c^{sim}) και κρίσι- μο κλάσμα επιφάνειας (Φ_c^{sim}).	171

6.3 Πρόβλημα με φαινόμενο σήραγγας: τρία (3) συστατικά (δύο ελλειπτικά και ένα κυκλικό) στο ίδιο κλάσμα επιφάνειας Φ . . 183

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

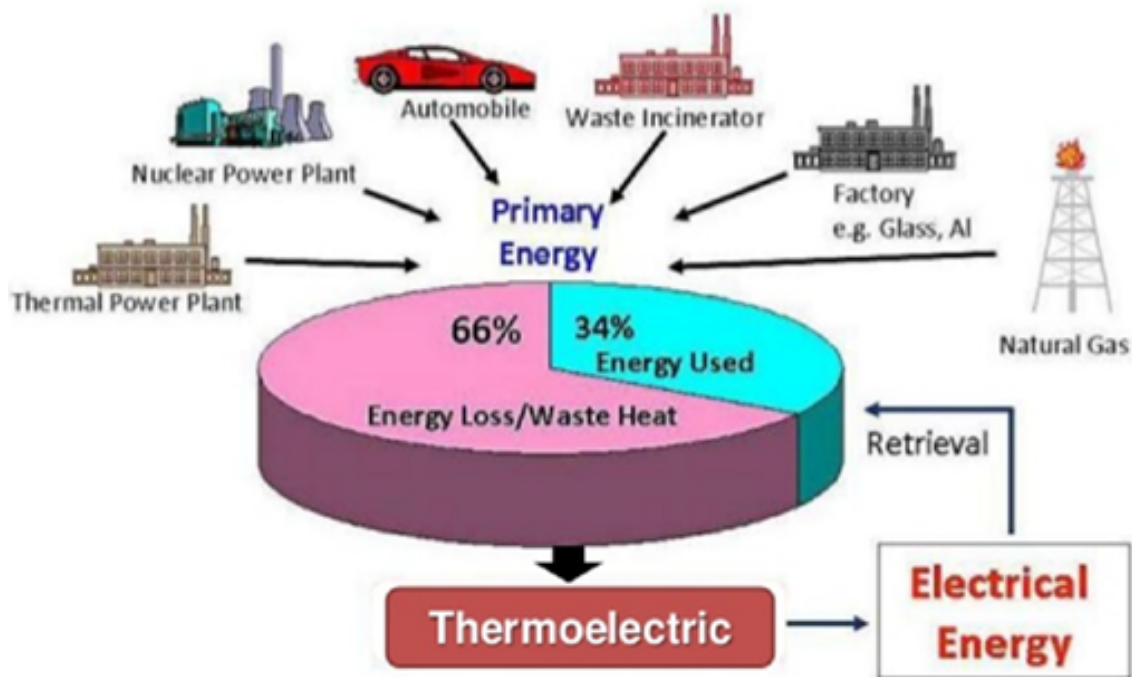
1.1 Συγκομιδή Ενέργειας: Θερμοηλεκτρικά Φαινόμενα και Υλικά

Η συνολική παγκόσμια κατανάλωση ενέργειας, έχει παρουσιάσει μια αυξητική τάση τις τελευταίες δεκαετίες με σημερινή τιμή περίπου στα 600 τετράκις εκατομμύρια βρετανικές θερμικές μονάδες (Btu). Αυτή η τιμή προβλέπεται να αυξηθεί κατά 28% περίπου φτάνοντας τα 736 τετράκις δισεκατομμύρια (Btu) το 2040 [1]. Η ακραία αύξηση της κατανάλωσης ενεργειακών πόρων και ιδιαίτερα αυτής των πρώτων υλών πετρελαίου θα μπορούσε να αποδοθεί κυρίως: (α) στη βιομηχανική ανάπτυξη και (β) στην αύξηση του πληθυσμού [2]. Η πεπερασμένη προσφορά ορυκτών καυσίμων, η οποία είχε ως αποτέλεσμα την εντεινόμενη ενεργειακή κρίση τον 21ο αιώνα, έχει καταστήσει τη ζήτηση για εναλλακτικούς πόρους ενέργειας υψηλότερη από ποτέ [3].

Πρέπει να αναφερθεί πως οι χρήσεις φυσικού αερίου, πετρελαίου και άνθρακα για την παραγωγή ηλεκτρικής ενέργειας έχουν καταστεί μη βιώσιμες για τον άνθρωπο λόγω των δυσμενών επιπτώσεών τους στην ατμοσφαιρική ρύπανση και την υπερθέρμανση του πλανήτη. Ωστόσο, η ηλεκτρική ενέρ-

γεια που παράγεται από σταθμούς ηλεκτροπαραγωγής που χρησιμοποιούν φυσικό αέριο αυξάνεται κάθε χρόνο [4]. Επιπλέον, η παγκόσμια κατανάλωση και παραγωγή υγρών καυσίμων αυξήθηκε από 94 εκατομμύρια βαρέλια την ημέρα στα μέσα του 2014 σε 100 εκατομμύρια στα μέσα του 2018, γεγονός που οδηγεί σε διαρκώς αυξανόμενο ενεργειακό κόστος. Για να αντιμετωπιστεί αυτή η παγκόσμια αύξηση της κατανάλωσης ορυκτών καυσίμων, αρκετά ακριβών και ρυπογόνων, εφαρμόστηκαν νέες τεχνικές και τεχνολογίες ανάκτησης και συγκομιδής ενέργειας περισσότερο φιλικές προς το περιβάλλον τις τελευταίες δεκαετίες.

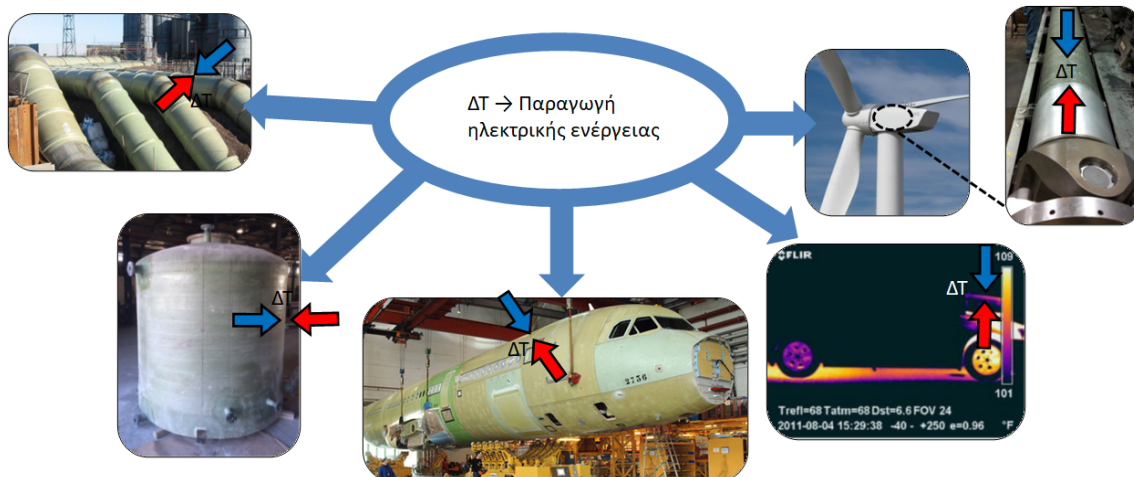
Σε βιομηχανικά περιβάλλοντα και την καθημερινή ζωή (Σχήμα 1.1), μεγάλη ποσότητα από την παραγόμενη θερμότητα σπαταλάται στο περιβάλλον καθώς δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί αποτελεσματικά. Ενδεικτικά μπορούν να αναφερθούν ως παραδείγματα οι θερμικές εκπομπές εργοστασιακών λεβήτων, οι εξατμίσεις αυτοκινήτων, οι τριβές μηχανικών μερών μεταξύ άλλων. Ένας σημαντικός τομέας που συμβάλλει στη σπατάλη θερμότητας είναι οι μεταφορές. Μεταξύ των ανεπτυγμένων χωρών, οι μεταφορές αντιπροσωπεύουν το 20 με 25% της συνολικής ενέργειας που καταναλώνεται [5]. Η αεροναυπηγική και η αυτοκινητοβιομηχανία είναι χαρακτηριστικά παραδείγματα υψηλής χρήσης ενέργειας με χαμηλή απόδοση, όπου περίπου το 75% της ενέργειας που παράγεται κατά την καύση χάνεται στον στρόβιλο / εξάτμιση ή ψυκτικό κινητήρα με τη μορφή θερμότητας. Σε παγκόσμια κλίμακα, περίπου το 60% της παραγόμενης ενέργειας δεν χρησιμοποιείται ποτέ, καθώς το μεγαλύτερο μέρος της διαχέεται με τη μορφή απορριπτόμενης θερμότητας [1]. Στις μέρες μας η ενέργεια που διαχέεται στο περιβάλλον ως διαφυγούσα θερμότητα έχει γίνει ή μπορεί να γίνει η πιο σημαντική εναλλακτική πηγή ενέργειας. Η αναζήτηση εναλλακτικής ενέργειας καθώς και εναλλακτικών πηγών ενέργειας όπως η ηλιακή, η θερμική, η αιολική, η ενέργεια του υδρογόνου και η ενέργεια από βιομάζα για την αντικατάστα-



Σχήμα 1.1: Χρήση και απώλεια ενέργειας. Η ανάγκη για συγκομιδή/ανάκτηση ενέργειας και το θερμοηλεκτρικό φαινόμενο.

ση των συμβατικών ορυκτών καυσίμων, συνδυασμένη με τη βελτίωση της τρέχουσας απόδοσης της χρήσης ενέργειας είναι αναμφίβολα μια πρόσφορη και βιώσιμη προσέγγιση.

Σήμερα το ενδιαφέρον για την ενέργεια που μπορεί να ανακτηθεί από διάφορες φυσικές πηγές, όπως η ακτινοβολία ραδιοσυχνότητας, η θερμική, η ηλιακή, η δονητική/μηχανική ενέργεια κ.λ.π., και η μετέπειτα μετατροπή της σε ηλεκτρική για την τροφοδοσία των ηλεκτρονικών συσκευών και μηχανημάτων του κόσμου, αυξάνεται εκθετικά. Τόσο σε εφαρμογές και διεργασίες του παρελθόντος αλλά και επί του παρόντος όπως στη λειτουργία ηλεκτρονικών συσκευών (ολοκληρωμένα κυκλώματα, τηλέφωνα, υπολογιστές, κ.λ.π.), στη λειτουργία οχημάτων, σε εσωτερικούς χώρους κτιρίων και εγκαταστάσεων αλλά ακόμα και στους ζώντες οργανισμούς έκδηλη είναι η παρουσία θερμικής ενέργειας και των ανεκμετάλλευτων υψηλών απωλειών της. Στην κατεύθυνση της συγκομιδής και ανάκτησης ενέργειας σύγχρονα υλικά μπορούν να παίξουν καθοριστικό ρόλο. Η μελέτη των θερ-



Σχήμα 1.2: Ενδεικτικά παραδείγματα ύπαρξης βαθμίδας θερμοκρασίας που οδηγεί σε απώλεια θερμορροής-θερμικής ενέργειας και δυνητικά μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την παραγωγή ηλεκτρικής ενέργειας.

μοληλεκτρικών υλικών αποτελεί σύγχρονο αντικείμενο σε θέματα έρευνας και τεχνολογίας προηγμένων υλικών σε παγκόσμιο επίπεδο επειδή ακριβώς σχετίζεται άμεσα με συστήματα ενέργειας. Κατάλληλα σχεδιασμένα και υλοποιημένα δύνανται να αξιοποιούν τη διαφεύγουσα θερμότητα που εκλύεται ως παραπροϊόν διάφορων διεργασιών και να τη μετατρέπουν σε χρήσιμη ηλεκτρική ενέργεια.

Πιο συγκεκριμένα οι θερμοηλεκτρικές γεννήτριες (TEG) είναι συσκευές που μετατρέπουν τη θερμική ενέργεια σε ηλεκτρική βασιζόμενες στη διαφορά θερμοκρασίας. Στο Σχήμα 1.2 δίνονται ενδεικτικά παραδείγματα ύπαρξης βαθμίδας θερμοκρασίας που οδηγεί σε απώλεια θερμορροής-θερμικής ενέργειας και δυνητικά μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την παραγωγή ηλεκτρικής ενέργειας με χρήση του θερμοηλεκτρικού φαινομένου Seebeck.

Τα TEG είναι κατασκευασμένα από ανόμοια θερμοστοιχεία, και εκμεταλλεύονται το φαινόμενο Seebeck (το οποίο θα παρουσιαστεί αναλυτικά στη συνέχεια της παρούσης διδακτορικής διατριβής), είναι δε συνδεδεμένα ηλεκτρικά σε σειρά και θερμικά παράλληλα. Στα πλεονεκτήματά τους αναφέρεται ότι μπορούν να είναι φιλικές προς το περιβάλλον, λειτουργούν

αθόρυβα λόγω του ότι δεν έχουν μηχανικές δομές ή/και κινούμενα μέρη και μπορούν να κατασκευαστούν σε πολλούς τύπους υποστρωμάτων όπως σε πυρίτιο, πολυμερή και κεραμικά υλικά. Η ευρεία χρήση τους και η αναζήτηση πεδίων εφαρμογής τους συνεπικουρείται από τη μεγάλη διάρκεια ζωής τους, της ικανότητάς τους για ενσωμάτωση σε εύκαμπτες συσκευές και διατάξεις (κυρίως λόγω του μικρού μεγέθους και της ευκαμψίας που έχουν οι σύγχρονες υλοποιήσεις των υλικών που τα αποτελούν) και στις περισσότερες των περιπτώσεων το μηδαμινό κόστος συντήρησης. Μπορούν να εγκατασταθούν δυνητικά σε ηλεκτρονικές συσκευές χαμηλής ισχύος (ιατρικές και φορητές συσκευές, internet of things (IoT) και ασύρματα δίκτυα αισθητήρων (WSNs) καθώς και σε εφαρμογές υψηλής ισχύος (βιομηχανικά ηλεκτρονικά, κινητήρες αυτοκινήτων και αεροδιαστημική) [6].

Για υψηλές θερμοκρασίες χρησιμοποιούνται σήμερα κατά κύριο λόγο υλικά που είναι βασισμένα σε διαφορετικά συστήματα όπως PbTe [7] και Si-Ge [8] ενώ ερευνώνται εντατικά τα πυριτίδια [8], τα οξειδία, καθώς και οι skutterudites [9],[10], [11] για θερμοκρασίες μέχρι 1300 °K. Οι ενώσεις του πυριτίου αποτελούν πλεονεκτικότερη επιλογή λόγω της αφθονίας τους στη φύση καθώς και λόγω τη μη-τοξικότητάς τους η οποία συμβαδίζει με την πολιτική για φιλική στο περιβάλλον και στον άνθρωπο τεχνολογία.

1.1.1 Το θερμοηλεκτρικό φαινόμενο

Το θερμοηλεκτρικό φαινόμενο είναι η άμεση μετατροπή των διαφορών θερμοκρασίας σε ηλεκτρική τάση και αντίστροφα μέσω ενός θερμοστοιχείου [1]. Μια θερμοηλεκτρική συσκευή δημιουργεί τάση όταν υπάρχει διαφορετική θερμοκρασία σε κάθε πλευρά. Αντίθετα, όταν εφαρμόζεται τάση σε αυτό, η παραγόμενη θερμότητα μεταφέρεται από τη μια πλευρά στην άλλη, δημιουργώντας μια διαφορά θερμοκρασίας. Στην ατομική κλίμακα μια εφαρμοζόμενη κλίση θερμοκρασίας αναγκάζει τους φορείς φορτίου στο

υλικό να διαχέονται από τη θερμή προς την ψυχρή πλευρά. Αυτό το φαινόμενο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την παραγωγή ηλεκτρικής ενέργειας. Επειδή η κατεύθυνση θέρμανσης και ψύξης επηρεάζεται από την εφαρμοζόμενη τάση, οι θερμοηλεκτρικές συσκευές μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως ελεγκτές θερμοκρασίας.

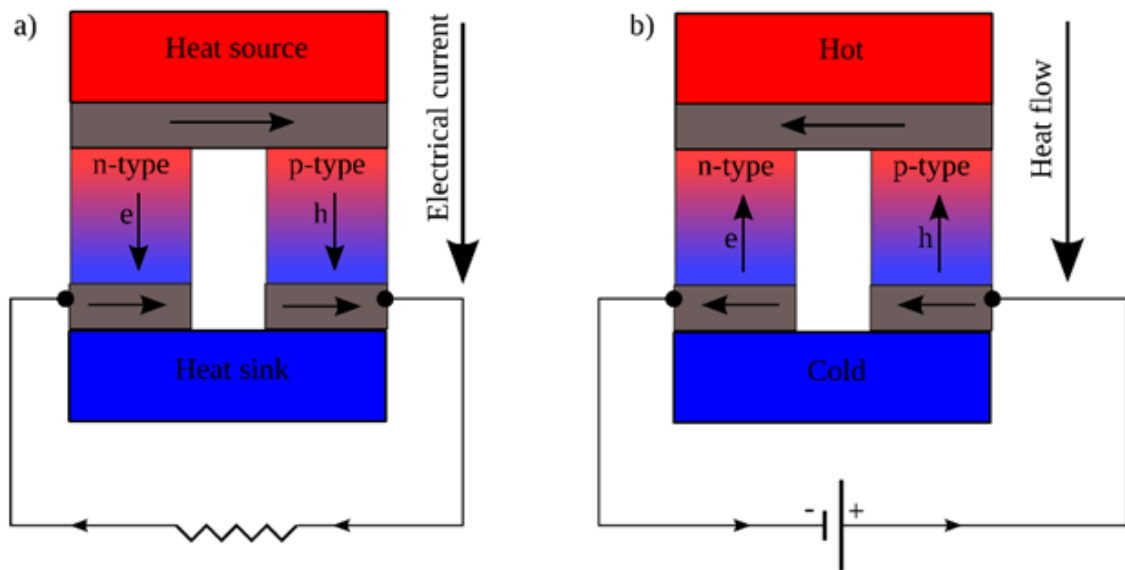
Ο όρος «θερμοηλεκτρικό φαινόμενο» περιλαμβάνει τρία ξεχωριστά προσδιορισμένα φαινόμενα:

- το φαινόμενο Seebeck
- το φαινόμενο Peltier
- και το φαινόμενο Thomson

Τα αποτελέσματα Seebeck και Peltier είναι διαφορετικές εκδηλώσεις της ίδιας φυσικής διαδικασίας. Το φαινόμενο μπορεί να αναφέρεται στην βιβλιογραφία και ως φαινόμενο Peltier - Seebeck (ο διαχωρισμός προέρχεται από τις ανεξάρτητες ανακαλύψεις του Γάλλου φυσικού Jean Charles Athanase Peltier και του εκ της Βαλτικής Γερμανού φυσικού Thomas Johann Seebeck). Στο **Σχήμα 1.3** παρουσιάζεται μια γραφική αναπαράσταση των παραπάνω φαινομένων. Το φαινόμενο Thomson είναι μια επέκταση του φαινομένου Peltier - Seebeck και πιστώνεται στον William Thomson (Λόρδο Kelvin). Η θέρμανση Joule, σχετίζεται με η θερμότητα που παράγεται κάθε φορά που ένα ρεύμα διέρχεται από ένα αγώγιμο υλικό, δεν ονομάζεται γενικά θερμοηλεκτρικό φαινόμενο. Τα φαινόμενα Peltier - Seebeck και Thomson είναι θερμοδυναμικά αναστρέψιμα [2], ενώ η θέρμανση Joule δεν είναι.

1.1.2 Φαινόμενο Seebeck

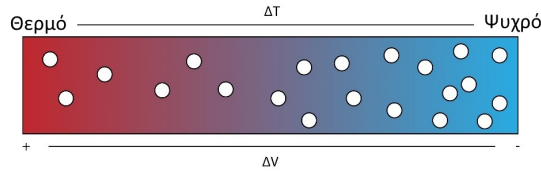
Τα θερμοηλεκτρικά υλικά (TE) είναι εν δυνάμει υποψήφια για τη συλλογή θερμικής ενέργειας η οποία δεν χρησιμοποιείται περαιτέρω, λόγω



Σχήμα 1.3: Εκφάνσεις του θερμοηλεκτρικού φαινομένου: τα φαινόμενα Seebeck a), Peltier b).

της ικανότητάς τους να παράγουν ηλεκτρική ενέργεια ακόμη και από μικρές μεταβολές της θερμοκρασίας. Τα θερμοηλεκτρικά υλικά υπακούουν το θερμοηλεκτρικό ή φαινόμενο Seebeck, που είναι η άμεση μετατροπή της θερμικής σε ηλεκτρική ενέργεια [8], [12]. Το 1821, ο Thomas Seebeck ανακάλυψε ότι η δημιουργία μιας διαφοράς θερμοκρασίας στις συνδέσεις δύο ανόμοιων αγωγών συνοδεύεται από ροή ηλεκτρικού ρεύματος μέσω του βρόχου των αγωγών. Για την ακρίβεια ο Seebeck παρατήρησε τη μετατόπιση μιας βελόνας πυξίδας ενώ πειραματιζόταν με ενωμένα ημικυκλικά κομμάτια βισμούθιου και χαλκού στην περιοχή κοντά στην πυξίδα. Αρχικά πίστευε ότι η μεταβολή της θερμοκρασίας σχετίζεται με τη δημιουργία ενός μαγνητικού πεδίου, περιγράφοντας το φαινόμενο ως "ther momagnetism". Ωστόσο, αργότερα έγινε κατανοητό ότι το ηλεκτρικό ρεύμα που ρέει μέσα από τους αγωγούς ήταν υπεύθυνος για τη γέννηση του μαγνητικού πεδίου που ανάγκασε τη βελόνα της πυξίδας να κινηθεί.

Σε περίπτωση βαθμίδας θερμοκρασίας σε ένα ηλεκτρικά αγώγιμο στοιχείο, η θερμότητα ρέει από τη ζεστή στην ψυχρή πλευρά του στοιχείου. Επιπλέον, η ροή θερμότητας συνοδεύεται από την κίνηση των φορέων η-



Σχήμα 1.4: Το φαινόμενο Seebeck.

λεκτρικού φορτίου (ηλεκτρόνια σε περίπτωση των αγωγών), ακολουθώντας την ίδια κατεύθυνση από το θερμό προς το ψυχρό μέρος (Σχήμα. 1.4).

Ο συντελεστής Seebeck ορίζεται ως:

$$S = -\frac{\Delta V}{\Delta T} \quad (1.1)$$

όπου ΔV είναι η διαφορά ηλεκτρικού δυναμικού ή η τάση που δημιουργείται από διαφορά θερμοκρασίας ΔT . Ο συντελεστής Seebeck χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του συντελεστή ισχύος (Power Factor-PF) που ορίζεται ως

$$PF = \sigma S^2 \quad (1.2)$$

όπου σ είναι η ηλεκτρική αγωγιμότητα. Μια πολύ γνωστή ποσότητα για τη σύγκριση της απόδοσης διαφορετικών θερμοηλεκτρικών υλικών είναι η αδιάστατη ποσότητα ZT ή παράγοντας θερμοηλεκτρικής απόδοσης (Figure of Merit) που μπορεί να υπολογιστεί ως:

$$ZT = \frac{\sigma S^2}{\kappa} T \quad (1.3)$$

όπου κ είναι η θερμική αγωγιμότητα και T είναι η απόλυτη θερμοκρασία. Ο συντελεστής Seebeck είναι μια ιδιότητα του υλικού και συνδέεται με τις μεταφορικές ηλεκτρονιακές του ιδιότητες. Δεν εξαρτάται από τη γεωμετρία και τις χωρικές διαστάσεις του εκάστοτε υλικού. Λαμβάνει θετικές

τιμές για τύπου p -ημιαγωγούς και αρνητικές τιμές για ημιαγωγούς τύπου n . Ένα υψηλό ZT θα μπορούσε ιδεατά να επιτευχθεί με τη δημιουργία ενός υλικού που παρουσιάζει υψηλό συντελεστή ισχύος και χαμηλή θερμομική αγωγιμότητα.

Το φαινόμενο Seebeck είναι άμεσα σχετιζόμενο με την ηλεκτρεγερτική δύναμη (emf) που αναπτύσσεται σε δύο σημεία ενός ηλεκτρικά αγώγιμου υλικού όταν υπάρχει διαφορά θερμοκρασίας μεταξύ τους. Το emf ονομάζεται Seebeck emf (ή θερμο/θερμικό/θερμοηλεκτρικό emf). Η αναλογία μεταξύ του emf και της διαφοράς θερμοκρασίας είναι ο συντελεστής Seebeck (**Εξίσωση 1.1**).

Σε ένα θερμοστοιχείο τα ηλεκτρόνια από τη θερμή περιοχή του μετάλλου έχουν περισσότερη ενέργεια - μεγαλύτερες ταχύτητες, συγκριτικά με αυτά στην ψυχρή. Θα παρατηρηθεί λοιπόν διάχυση ηλεκτρονίων από τη θερμή περιοχή στην ψυχρή. Ως αποτέλεσμα θα υπάρχει συσσώρευση ηλεκτρονίων στην ψυχρή περιοχή συσσώρευση απογυμνωμένων θετικών μεταλλικών ιόντων στη θερμή. Η διαδικασία αυτή έχει ως αποτέλεσμα τη δημιουργία δυναμικού το οποίο τελικά θα πάρει τιμή ικανή να εμποδίσει οποιαδήποτε περαιτέρω κίνηση ηλεκτρονίων. Οι συντελεστές Seebeck εξαρτώνται από τη θερμοκρασία και και σε μεγάλο βαθμό από το υλικό του αγωγού. Για συνηθισμένα υλικά σε θερμοκρασία δωματίου, ο συντελεστής Seebeck κυμαίνεται από $100 \mu\text{V/K}$ έως $1000 \mu\text{V/K}$ για διαφορετικά υλικά.

1.1.3 Απόδοση Θερμοηλεκτρικών Υλικών

Τα υλικά που χρησιμοποιούνται στις Θ/H διατάξεις είναι κυρίως ημιαγωγοί. Οι αυξημένες απαιτήσεις των εφαρμογών οδηγούν στη συνεχή αναζήτηση βελτιωμένων υλικών με στόχο την ενίσχυση της απόδοσης. Για τις θερμοηλεκτρικές εφαρμογές ένα ιδανικό υλικό πρέπει να έχει υψηλή ηλεκτρική αγωγιμότητα, υψηλό συντελεστή Seebeck και χαμηλή θερμομική αγωγιμότητα,

έτσι ώστε ο θερμοηλεκτρικός δείκτης ZT να υπερβεί καταρχήν την μονάδα [13].

Φορείς μεγάλης κινητικότητας είναι επιθυμητοί για να υπάρχει η μεγαλύτερη ηλεκτρική αγωγιμότητα για μια δεδομένη συγκέντρωση φορέων. Υπάρχουν δύο ειδών θερμοηλεκτρικά ζεύγη τα τύπου- n και τα τύπου- p . Αγνοώντας παρασιτικές συνεισφορές που μειώνουν την απόδοση της συσκευής όπως είναι η αντίσταση επαφής ο ZT για το ζεύγος που βασίζεται μόνο σε θερμοηλεκτρικά υλικά γίνεται [14]:

$$ZT = \frac{(S_p - S_n)^2 T}{(\rho_n \kappa_n)^{1/2} + (\rho_p \kappa_p)^{1/2}} \quad (1.4)$$

όπου S_p , S_n είναι οι συντελεστές Seebeck τα κ_p , κ_n είναι οι θερμικές αγωγιμότητες. Από την παραπάνω σχέση φαίνεται ότι για την κατασκευή μιας θερμοηλεκτρικής γεννήτριας (Thermoelectric generator TEG) με καλή απόδοση απαραίτητη προϋπόθεση είναι τα θερμοηλεκτρικά υλικά να έχουν ορισμένες ιδιότητες: Θα πρέπει να έχουν μεγάλο συντελεστή Seebeck S , και μεγάλη ηλεκτρική αγωγιμότητα (σ) καθώς είναι πολύ σημαντική για τη μείωση της απώλειας θερμότητας από το φαινόμενο Joule. Επιπλέον, θα πρέπει να έχουν μικρή θερμική αγωγιμότητα (κ), ώστε να μπορεί να διατηρηθεί η διαφορά θερμοκρασίας μεταξύ της θερμής και της ψυχρής περιοχής που εντοπίζονται στα δύο άκρα του. Οι S , σ και κ είναι υλικές παράμετροι που εξαρτώνται από τη συγκέντρωση των φορέων του υλικού. Για την ακρίβεια είναι ιδιότητες που σχετίζονται άμεσα με τις μεταφορικές ιδιότητες των ηλεκτρονίων.

1.1.4 Θερμοηλεκτρικά υλικά

Τα πρώτα υλικά στα οποία εξετάστηκαν οι θερμοηλεκτρικές τους ιδιότητες ήταν τα μέταλλα, τα οποία έχουν συντελεστή Seebeck μερικών $\mu V/K$, κάτι που δρα περιοριστικά σε ό,τι αφορά στις πρακτικές εφαρμογές. Αναπόφευ-

κτα το ενδιαφέρον των επιστημόνων στράφηκε στην αναζήτηση, μελέτη και σύνθεση άλλων υλικών που παρουσιάζουν υψηλότερο συντελεστή Seebeck και κατάλληλες τιμές θερμικής αγωγιμότητας. Τα θερμοηλεκτρικά υλικά υψηλής απόδοσης είναι κυρίως ανόργανα υλικά, όπως τα Bi_2Te_3 [15], [16], [17], [18], Mg_3Bi_2 [19], GeTe [20], [21], σκουττερουδίτες (skutterudites) [22], χαλκογονίδια [23] καθώς και κάποια αλλότροπα άνθρακα [24].

Οι θερμοηλεκτρικές γεννήτριες με βάση τα χαλκογονίδια έχουν προσελκύσει μεγάλο ενδιαφέρον και έχουν μελετηθεί εντατικά. Μεταξύ της οικογένειας των χαλκογονιδίων, το τελλουρίδιο βισμούθιου (BiTe) και το κράμα του βισμούθιου τελλουριδίου αντιμονίου BiSbTe αναγνωρίζονται ως τα πιο αποτελεσματικά θερμοηλεκτρικά υλικά τύπου p και n , επειδή έχουν εξαιρετικό συντελεστή Seebeck, υψηλή ηλεκτρική αγωγιμότητα και χαμηλή θερμική αγωγιμότητα που προσδίδουν υψηλό ZT . Τα κράματα BiTe χρησιμοποιούνται σε εμπορικές εφαρμογές εδώ και χρόνια [25]. Το (Bi_2Te_3) και τα κράματά του χρησιμοποιούνται για θερμοκρασίες χαμηλότερες της θερμοκρασίας δωματίου [15], [16]. Πάνω από θερμοκρασίες δωματίου μειώνεται ο συντελεστής Seebeck και επίσης πρέπει να μη παραβλέπεται το γεγονός της τοξικότητάς του. Το PbTe μπορεί να χρησιμοποιηθεί επίσης ως θερμοηλεκτρικό υλικό [26]. Οι θερμοκρασίες λειτουργίας του είναι 27-427 °C με σημείο τήξης τους 923 °C. Ο μόλυβδος και το τελλούριο είναι τοξικά και επιβλαβή για το περιβάλλον και τον άνθρωπο.

Τα κράματα SiGe χρησιμοποιούνται για θερμοηλεκτρικές εφαρμογές σε θερμοκρασίες 327-1027 °C. Τα κράματα πλούσια σε Si είναι κατάλληλα για εφαρμογές υψηλής θερμοκρασίας. Βρίσκουν ευρεία εφαρμογή στην τεχνολογία τρανζίστορ και στις διαστημικές βιομηχανίες λόγω των αξιόλογων χαρακτηριστικών-πλεονεκτημάτων του, όπως ο εύκολος σχηματισμός τύπου n και p τύπου ημιαγωγών ανάλογα με την πρόσμιξη, η φιλικότητα προς το περιβάλλον, η αφθονία τους στο φλοιό της γης και παράλληλα η

υψηλή μηχανική αντοχή που έχουν [27].

Σε θερμοηλεκτρικές γεννήτριες χρησιμοποιούνται επίσης οι σκουττερουδίτες (Skutterudites). Πρόκειται για αρσενικούχα ορυκτά του κοβαλτίου με χημικό τύπο AB_3 όπου $A = Co, Ir, Rh$ και $B = P, As, Sb$. Έχουν χαμηλή θερμική αγωγιμότητα και οι τιμές του συντελεστή Seebeck είναι της τάξης των $\pm 300 \mu V/K$ [28].

Άλλη μια γνωστή κατηγορία ενώσεων υποψήφιων ως θερμοηλεκτρικά υλικά είναι οι κλειθρίτες (Clathrates), ενώσεις Ge ή Si μέσα στο πλέγμα των οποίων υπάρχουν ενδόθετα άλλα άτομα, και χαρακτηρίζονται από χαμηλή θερμική αγωγιμότητα [29].

Τα οξειδία μετάλλων χρησιμοποιούνται σε πολλές εφαρμογές όπως σε θερμοηλεκτρικά, ηλιακά κύτταρα, αισθητήρες, τρανζίστορ και οπτοηλεκτρονικές συσκευές λόγω των εξαιρετικών μηχανικών, χημικών, ηλεκτρικών και οπτικών ιδιοτήτων τους. Για παράδειγμα, ο υψηλός συντελεστής Seebeck, η υψηλή θερμική σταθερότητα και η αφθονία τους τα καθιστούν κατάλληλα για παραγωγή θερμοηλεκτρικής ενέργειας, ιδιαίτερα σε καθεστώς υψηλής θερμοκρασίας. Στα πλεονεκτήματά τους αναφέρονται η σταθερότητά τους σε υψηλές θερμοκρασίες καθώς είναι δυναμικά σταθερά, είναι χημικά αδρανή, είναι σκληρά και εύκολα στην επεξεργασία τους. Αρχικά χρησιμοποιήθηκε το Na_xCoO_2 . Ο συντελεστής ZT είναι μεγαλύτερος του Bi_2Te_3 [30].

Τα πυριτίδια εκπροσωπούν μια ομάδα από υποσχόμενα θερμοηλεκτρικά υλικά καθώς το πυρίτιο είναι το τέταρτο σε αφθονία στοιχείο και ένα από τα πιο εκτεταμένα στοιχεία στο φλοιό της Γης. Επιπλέον δεν είναι τοξικά και διευκολύνουν ποικίλους μηχανισμούς μεταφοράς ηλεκτρονίων.

Οι περοβσκίτες έχουν κρυσταλλική δομή παρόμοια με το οξείδιο του τιτανιούχου ασβεστίου ($CaTiO_3$) και χρησιμοποιούνται σε θερμοηλεκτρικές εφαρμογές έχοντας σχετικά μεγάλο συντελεστή Seebeck, μικρή ηλεκτρική

και μεγάλη θερμική αγωγιμότητα [31]. Το πολυκρυσταλλικό $SrTiO_3$ για παράδειγμα έχει συντελεστή Seebeck $S = -410 \mu V/K$, ηλεκτρική $\sigma = 0.18 S/cm$ και θερμική αγωγιμότητα $\kappa = 7.5 W/mK$ στους $375^\circ K$.

Τα τελευταία χρόνια έντονο είναι το ενδιαφέρον ανάπτυξης νέων υλικών με αυξημένες λειτουργικότητες και τα Ιεραρχικά Σύνθετα Πολύστρωτα μπορούν να παίξουν σημαντικό ρόλο σε αυτή την κατεύθυνση.

1.1.5 Ιεραρχικά σύνθετα πολύστρωτα ως θερμοηλεκτρικά υλικά

Τα σύνθετα πολυμερή ενισχυμένα με ίνες άνθρακα (Carbon Fiber Reinforced Plastics - CFRP) προσφέρουν τη δυνατότητα ευέλικτων προσεγγίσεων σχεδιασμού για προηγμένα δομικά υλικά με σημαντικά βελτιωμένες ειδικές ιδιότητες, όπως αντοχή και ακαμψία [32, 33]. Τα σύνθετα υλικά πολυμερικής μήτρας ενισχυμένα με υψηλό κλάσμα όγκου συνεχών ευθυγραμμισμένων ινών άνθρακα (CF) είναι τα κυρίαρχα προηγμένα ελαφριά δομικά υλικά για αεροσκάφη, δορυφόρους, αθλητικά είδη, μεταξύ άλλων. Πρόσφατα στον τομέα των προηγμένων σύνθετων υλικών, η πολύ-λειτουργικότητα είναι επίσης ένα θέμα ενεργού έρευνας. Σε σύγκριση με τη χρήση ενσωματωμένων ή προσαρτημένων συσκευών εντός της σύνθετης δομής, ένα πολύ-λειτουργικό δομικό σύνθετο υλικό πλεονεκτεί ως προς το χαμηλό κόστος, την υψηλή αντοχή, το μεγάλο λειτουργικό όγκο και την απουσία απώλειας μηχανικών ιδιοτήτων. Ο πολύ-λειτουργικός χαρακτήρας των σύνθετων δομών καταδείχθηκε σε πολλούς διαφορετικούς τρόπους, π.χ. παρακολούθηση τάσεων/ζημιών [34], υγρασία και θερμοκρασία [35], προστασία από κεραυνούς και απαγωγή θερμότητας [36], αποθήκευση ενέργειας [37], ανώτερες ηλεκτρικές [38] και θερμικές αγωγιμότητες [39], θερμοηλεκτρική συγκομιδή ενέργειας [40], καθώς και έγχρωμες διεπιφάνειες ένδειξης βλαβών [41].

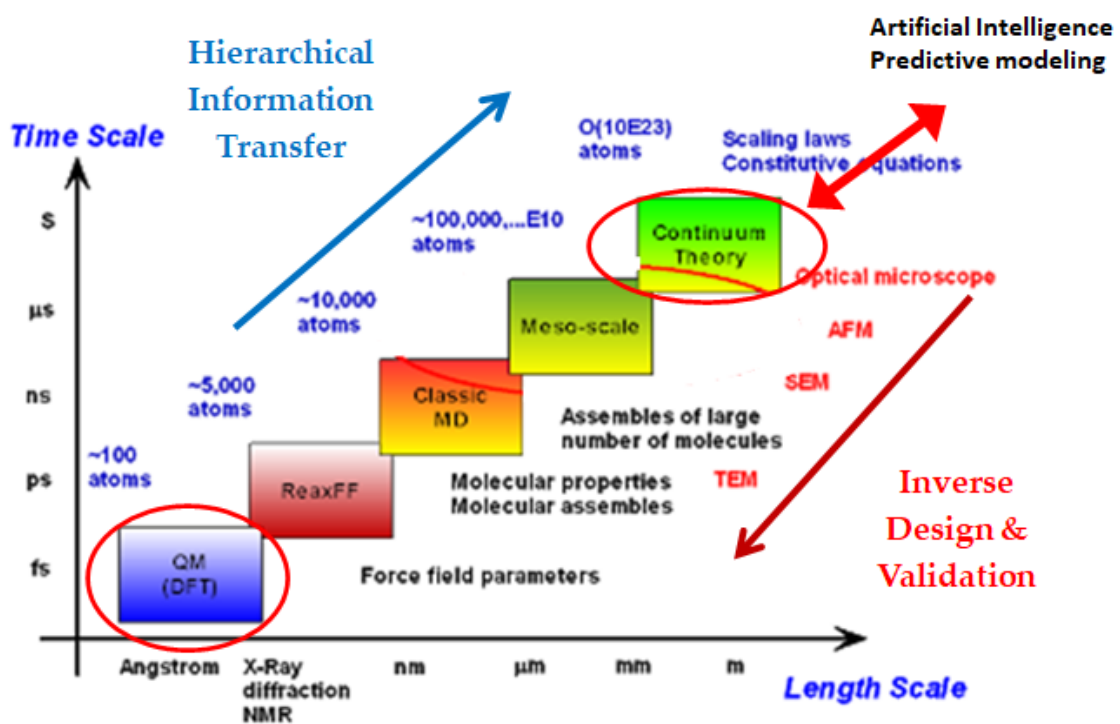
Στην αεροδιαστημική, αεροναυπηγική και αυτοκινητοβιομηχανία, τα χρησιμοποιούμενα δομικά CFRP εκτίθενται συχνά σε περιβάλλοντα όπου υπάρχει διαφορά θερμοκρασίας π.χ. στην άτρακτο αεροπλάνου, στο καπό αυτοκινήτου. Ως εκ τούτου, η δυνατότητά τους να λειτουργούν ως θερμοηλεκτρικά υλικά αποτελεί ένα πολύ ενεργό πεδίο έρευνας [42]. Η συγκομιδή θερμοηλεκτρικής ενέργειας από CFRP δεν αναφέρεται συχνά στη βιβλιογραφία. Συγκεκριμένα, η θερμοηλεκτρική ισχύς σύνθετων υλικών από κοντές ίνες άνθρακα / πολύ-ανθρακικό [43], και τα ενισχυμένα με συνεχείς μακρές ίνες σε στρώματα (laminates) χρησιμοποιούνται ως θερμοστοιχεία για την κατασκευή TEG.

1.1.6 Βασικές μεταφορικές ιδιότητες σχετιζόμενες με το Θερμοηλεκτρικό Φαινόμενο και η ανάγκη για υπολογισμούς σε πολλαπλές κλίμακες

Οι υλικές παράμετροι που προαναφέρθηκαν είναι εξόχως σημαντικές για την απόδοση ενός θερμοηλεκτρικού υλικού και κατ'επέκταση μιας θερμοηλεκτρικής γεννήτριας. Ο υπολογισμός τους σε θεωρητικό καθώς και επίπεδο προσομοίωσης αποτελεί μια περίπλοκη διαδικασία που εμπλέκει αριθμητικές μεθοδολογίες διαφορετικών κλιμάκων εκκινώντας από υπολογισμούς πρώτων αρχών εμπλέκοντας τις πυκνότητες ενεργειακών καταστάσεων των ηλεκτρονίων για το προς μελέτη υλικό σύστημα. Κβαντομηχανικοί υπολογισμοί όπως αυτοί της Θεωρίας Συναρτησιακού Πυκνότητας Ηλεκτρονίων (Density Functional Theory-DFT) μπορούν να δώσουν τις πυκνότητες καταστάσεων και να τροφοδοτήσουν περαιτέρω υπολογισμούς που απαιτούν την επίκληση της Θεωρίας Μεταφοράς του Boltzmann για την εύρεση των προαναφερθέντων υλικών παραμέτρων: του συντελεστή Seebeck, της θερμομικής και ηλεκτρικής αγωγιμότητας σε περιοδικές δομές κατά βάση και ε-

μπλέκοντας εκ των πραγμάτων μικρό αριθμό ατόμων σε επίπεδο κυψελίδας ή υπέρ-κυψελίδας. Οι τιμές μεταφορικών ηλεκτρονικών ιδιοτήτων όπως εξάγονται από την μικροκλίμακα για τους νανοσωλήνες άνθρακα απέχουν από τις ιδιότητες που μετρώνται για παράδειγμα σε δεμάτια - θυσάνους αυτών σε μέσο και μακρο κλίμακες. Για τη θερμική αγωγιμότητα είναι σαφές επίσης πως η συνεισφορά του κρυστάλλου και ειδικά του πραγματικού κρυστάλλου (με τις πιθανές ατέλειες ή προσμίξεις) σαφώς και δεν πρέπει να αγνοηθεί μια και είναι εξίσου ή μεγαλύτερη της συνεισφοράς των ηλεκτρονίων. Αναπόφευκτα λοιπόν σε επίπεδο μεσοκλίμακας και σαφώς σε επίπεδο μακροκλίμακας οι τιμές των ηλεκτρονικών ιδιοτήτων δεν είναι δυνατό να ληφθούν αμετάβλητες ή να αναχθούν στις ανώτερες κλίμακες χώρου και χρόνου με σαφή τρόπο ή με σχέσεις κλειστής μορφής. Επίσης η διαφοροποίηση των χημικών και φυσικών μηχανισμών και των επιπρόσθετων αλληλεπιδράσεων (όχι πάντα γνωστών-στις περισσότερες περιπτώσεις είναι άγνωστες) εμπλέκει τη διαδικασία της πρόβλεψης μεσοσκοπικών ή μακροσκοπικών ιδιοτήτων.

Μια τέτοια προσέγγιση για ανάκτηση και σύνδεση πληροφορίας μεταξύ διαφορετικών-πολλαπλών κλιμάκων στην παρούσα διατριβή λαμβάνει χώρα χρησιμοποιώντας τη θεωρία διήθησης (percolation) και η εφαρμογή της συνδυασμένη με αριθμητικές επιλύσεις θα παρουσιαστεί αναλυτικά στη συνέχεια και σε ξεχωριστά κεφάλαια. Από την άλλη πλευρά στην παρούσα διατριβή γίνεται μοντελοποίηση θερμοηλεκτρικών φαινομένων και θερμοηλεκτρικών συσκευών με ιδιότητες μακροσκοπικού χαρακτήρα που λαμβάνονται από πειραματικές μετρήσεις και σαφώς σε επίπεδο συνεχούς. Μια τέτοια μοντελοποίηση είναι μονόδρομος όταν μοντελοποιούνται συσκευές και διατάξεις που πρόκειται να ενσωματωθούν σε πραγματικές συσκευές, όπως συσκευές συγκομιδής ενέργειας.



Σχήμα 1.5: Μοντελοποίηση σε πολλαπλές κλίμακες.

1.2 Διάρθρωση Διδακτορικής Διατριβής

Στο πρώτο κεφάλαιο παρουσιάζονται οι απαραίτητες έννοιες και μεθοδολογίες οι οποίες είναι χρήσιμες στην κατανόηση τόσο στην επίλυση των θερμοηλεκτρικών προβλημάτων όσο και στο υπολογισμό των θερμικών - ηλεκτρικών ιδιοτήτων σύνθετων υλικών.

Στο δεύτερο κεφάλαιο γίνεται η ανασκόπηση της σύγχρονης βιβλιογραφίας και τεχνολογιών αιχμής τόσο για το θερμοηλεκτρικό φαινόμενο και την μοντελοποίηση θερμοηλεκτρικών ηλεκτρικών συσκευών καθώς και για το πεδίο της percolation και τον υπολογισμό θερμικών και ηλεκτρικών ιδιοτήτων.

Στο τρίτο και τέταρτο κεφάλαιο μοντελοποιούνται τέσσερις (4) θερμοηλεκτρικές γεννήτριες - συσκευές οι οποίες έχουν κατασκευαστεί στο εργαστήριο Μηχανικής Συνθέτων και Ευφυών Υλικών του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης των Υλικών (ΤΜΕΥ) από τα στελέχη του και είναι ακριβή αντίγραφα τους με στόχο να μελετηθεί η θερμοηλεκτρική τους απόδοση. Μία εξ' αυτών των συσκευών μελετήθηκε, στο τρίτο κεφάλαιο, ως προς τα χαρακτηριστικά σχεδιασμού προκειμένου να μεγιστοποιηθεί η απόδοσή της. Αφού παρουσιάζονται οι καταστατικές εξισώσεις του φαινομένου, μοντελοποιούνται οι συσκευές, αναλύεται η απόδοσή τους αναφορικά με την ικανότητα παραγωγής χρηστικής τάσης εξόδου καθώς και της μέγιστης ισχύος που μπορούν να παράξουν. Στο τέλος του τρίτου κεφαλαίου επιχειρείται παραμετρική ανάλυση της συσκευής για διάφορες παραμέτρους σχεδιασμού όπως η θερμική αγωγιμότητα της ρητίνης, το μήκος των θερμοστοιχείων μεταξύ άλλων και γίνεται προσαρμογή της απόδοσης σε σχέση με τις παραμέτρους σχεδιασμού με τη βοήθεια νευρωνικών δικτύων.

Στο πέμπτο κεφάλαιο παρουσιάζεται το βασικό θεωρητικό υπόβαθρο της θεωρίας διήθησης δηλαδή η διήθηση πλέγματος, η διήθηση συνεχούς και παρουσιάζονται οι τεχνικές που χρησιμοποιούνται επί το πλείστον στην

σύγχρονη βιβλιογραφία. Επίσης αναλύονται οι μέθοδοι για τον υπολογισμό θερμικών - ηλεκτρικών ιδιοτήτων ενός τυχαίου σύνθετου σε επίπεδο μικροδομής.

Στο έκτο κεφάλαιο ένα νέο θεωρητικό μοντέλο και η υπολογιστική του υλοποίηση σε δύο διαστάσεις (2D) παρουσιάζεται για τη μελέτη φαινομένων διήθησης συνεχούς στην μικροκλίμακα και μακροκλίμακα. Ο προτεινόμενος αριθμητικός αλγόριθμος εξετάζει τα σωματίδια στο RSE όπως ψηφιοποιηθήκαν χρησιμοποιώντας εικονοστοιχεία (pixels). Σε συνέχεια της διαδικασίας ψηφιοποίησης, παραδοσιακές υπολογιστικές μέθοδοι όπως το Depth First Search, χρησιμοποιούνται στην ανίχνευση πιθανών μονοπατιών διάδοσης στο τυχαία επιλεγμένα τετράγωνα δείγματα. Αφού αναλυθεί το θεωρητικό υπόβαθρο της μεθόδου, ελέγχεται η ακρίβειά της μέσω γνωστών προβλημάτων της βιβλιογραφίας και αναλύονται οι παράγοντες που επηρεάζουν την ακρίβειά της όπως ο αριθμός των ενγλΜΣ επαναλήψεων το επίπεδο μεγέθυνσης $ppms$ κ.α. Σε μακροκλίμακα το φυσικό μέσο προσομοιώνεται ως ένα (άπειρο) πλέγμα που αποτελείται από αντιπροσωπευτικό επιφανειακά στοιχεία (RSEs). Υποθέτοντας την ομοιογένεια του μέσου, η μέση διάδοση των RSEs η πιθανότητα μπορεί να ερμηνευθεί και να γενικευτεί ως η πιθανότητα κατάληψης για το άπειρο μέσο. Τα αποτελέσματα της μεθόδου συγκρίνονται με την βιβλιογραφία λύνονται πολύπλοκα προβλήματα δύο (2) και περισσότερων φάσεων με ή χωρίς φαινόμενο σήραγγος (tunnel effect) καθώς και το πρόβλημα των κενών (voids) προκειμένου να δειχθεί η γενικότητα της μεθόδου. Νέα αποτελέσματα αναφέρονται τα οποία καλύπτουν ένα ευρύ φάσμα γεωμετρικών τύπων σωματιδίων (κυκλικά, ελλειπτικά, ορθογώνια) και επιφανειακά κλάσματα σε συστήματα πλήρωσης μήτρας που αποδεικνύουν την ευρωστία και τη γενικότητα της προτεινόμενης μεθοδολογίας.

Στο έβδομο κεφάλαιο, γίνεται μια προσπάθεια συσχέτισης της ηλεκτρι-

κής - θερμικής αγωγιμότητας ενός σύνθετου τυχαίου υλικού με τον αριθμό των αγωγιμων μονοπατιών που μετρήθηκαν σε ένα αντιπροσωπευτικό στοιχείο επιφάνειας (RSE) με δειγματοληψία Monte Carlo. Αρχικά αναπτύσσεται ο θεωρητικός υπολογισμός για τη συσχέτιση των αγωγιμων μονοπατιών με τις ιδιότητες υιοθετώντας τρεις προσεγγίσεις αυξανόμενης ακρίβειας και πολυπλοκότητας: ευθύγραμμες διαδρομές ενός συστατικού, ευθείες διαδρομές πολλαπλών συστατικών και τέλος μη ευθείες διαδρομές πολλαπλών συστατικών. Στη συνέχεια, στο δεύτερο μέρος παρουσιάζεται μια αριθμητική μεθοδολογία για τον υπολογισμό των αγωγιμων μονοπατιών για το γενικό μοντέλο πολλών συστατικών - μη ευθειών μονοπατιών. Επαληθεύεται σε τυχαίο δυαδικό υλικό και στην συνέχεια εφαρμόζεται για την επίλυση συνθετικών προβλημάτων συνεχούς διαφυγής σε δύο κλίμακες: μικροκλίμακα και μακροκλίμακα. Η ακρίβεια των υπολογισμών ελέγχεται με γνωστά προβλήματα της βιβλιογραφίας. Τέλος υπολογίζονται οι εκθέτες κλιμάκωσης της αγωγιμότητας σε σχέση με τον αριθμό των αγωγιμων μονοπατιών, το μέσο μήκος των μονοπατιών και το μέσο ενεργό πλάτος.

Τέλος στο όγδοο κεφάλαιο αποτυπώνονται τα συμπεράσματα καθώς και οι κατευθύνσεις για μελλοντική έρευνα.

Βιβλιογραφία

- [1] U.S. Energy Information Administration, “International energy outlook 2021.” "<https://www.eia.gov/outlooks/ieo/>", 2021. [Online; accessed 6-October-2021].
- [2] H. Zhang, F. Xing, H.-Z. Cui, D.-Z. Chen, X. Ouyang, S.-Z. Xu, J.-X. Wang, Y.-T. Huang, J.-D. Zuo, and J.-N. Tang, “A novel phase-change cement composite for thermal energy storage: Fabrication, thermal and mechanical properties,” *Applied Energy*, vol. 170, pp. 130–139, 2016.
- [3] W. He, G. Zhang, X. Zhang, J. Ji, G. Li, and X. Zhao, “Recent development and application of thermoelectric generator and cooler,” *Applied Energy*, vol. 143, pp. 1–25, 2015.
- [4] H. Lu, F. Cheng, X. Ma, and G. Hu, “Short-term prediction of building energy consumption employing an improved extreme gradient boosting model: A case study of an intake tower,” *Energy*, vol. 203, p. 117756, 2020.
- [5] R. Agrawal, N. R. Singh, F. H. Ribeiro, and W. N. Delgass, “Sustainable fuel for the transportation sector,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 104, no. 12, pp. 4828–4833, 2007.
- [6] N. Jaziri, A. Boughamoura, J. Müller, B. Mezghani, F. Tounsi, and M. Ismail, “A comprehensive review of thermoelectric generators: Technologies and common applications,” *Energy Reports*, vol. 6, pp. 264–287, 2020. SI:Energy Storage - driving towards a clean energy future.
- [7] R. Dalven, “A review of the semiconductor properties of pbte, pbse, pbs and pbo,” *Infrared Physics*, vol. 9, no. 4, pp. 141–184, 1969.

- [8] D. Rowe, *CRC Handbook of Thermoelectrics*. USA: CRC Press, 1st ed., 1995.
- [9] C. Uher, “Chapter 5 skutterudites: Prospective novel thermoelectrics,” in *Recent Trends in Thermoelectric Materials Research I* (T. M. Tritt, ed.), vol. 69 of *Semiconductors and Semimetals*, pp. 139–253, Elsevier, 2001.
- [10] H. Ohta, “Thermoelectrics based on strontium titanate,” *Materials Today*, vol. 10, no. 10, pp. 44–49, 2007.
- [11] P.-H. Xiang, Y. Kinemuchi, H. Kaga, and K. Watari, “Fabrication and thermoelectric properties of $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9/\text{Ag}$ composites,” *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 454, pp. 364–369, 04 2008.
- [12] I. Terasaki, “Thermal conductivity and thermoelectric power of semiconductors,” in *Reference Module in Materials Science and Materials Engineering*, Elsevier, 2016.
- [13] M. Dresselhaus, G. Chen, M. Tang, R. Yang, H. Lee, D. Wang, Z. Ren, J.-P. Fleurial, and P. Gogna, “New directions for low-dimensional thermoelectric materials,” *Advanced Materials*, vol. 19, pp. 1043 – 1053, 06 2007.
- [14] T. M. Tritt and M. A. Subramanian, “Thermoelectric materials, phenomena, and applications : A bird’s eye view,” *Mrs Bulletin*, vol. 31, pp. 188–198, 2006.
- [15] M. Tan, X.-L. Shi, W.-D. Liu, M. Li, Y. Wang, H. Li, Y. Deng, and Z.-G. Chen, “Synergistic texturing and bi/sb-te antisite doping secure high thermoelectric performance in $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ -based thin films,” *Advanced Energy Materials*, vol. 11, no. 40, p. 2102578, 2021.

- [16] W. Xie, X. Tang, Y. Yan, Q. Zhang, and T. M. Tritt, “Unique nanostructures and enhanced thermoelectric performance of melt-spun bisbte alloys,” *Applied Physics Letters*, vol. 94, no. 10, p. 102111, 2009.
- [17] R. Deng, X. Su, Z. Zheng, W. Liu, Y. Yan, Q. Zhang, V. P. Dravid, C. Uher, M. G. Kanatzidis, and X. Tang, “Thermal conductivity in $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_{3+i}\text{X}_i$ and the role of dense dislocation arrays at grain boundaries,” *Science Advances*, vol. 4, no. 6, p. eaar5606, 2018.
- [18] S. I. Kim, K. H. Lee, H. A. Mun, H. S. Kim, S. W. Hwang, J. W. Roh, D. J. Yang, W. H. Shin, X. S. Li, Y. H. Lee, G. J. Snyder, and S. W. Kim, “Dense dislocation arrays embedded in grain boundaries for high-performance bulk thermoelectrics,” *Science*, vol. 348, no. 6230, pp. 109–114, 2015.
- [19] R. Shu, Y. Zhou, Q. Wang, Z. Han, Y. Zhu, Y. Liu, Y. Chen, M. Gu, W. Xu, Y. Wang, W. Zhang, L. Huang, and W. Liu, “ $\text{Mg}_{3+\delta}\text{Sb}_x\text{Bi}_{2-x}$ family: A promising substitute for the state-of-the-art n-type thermoelectric materials near room temperature,” *Advanced Functional Materials*, vol. 29, no. 4, p. 1807235, 2019.
- [20] Q. Sun, M. Li, X.-L. Shi, S.-D. Xu, W.-D. Liu, M. Hong, W.-y. Lyu, Y. Yin, M. Dargusch, J. Zou, and Z.-G. Chen, “Versatile vanadium doping induces high thermoelectric performance in gete via band alignment and structural modulation,” *Advanced Energy Materials*, vol. 11, no. 20, p. 2100544, 2021.
- [21] D. Wu, L. Xie, X. Xu, and J. He, “High thermoelectric performance achieved in gete– Bi_2Te_3 pseudo-binary via van der waals gap-induced hierarchical ferroelectric domain structure,” *Advanced Functional Materials*, vol. 29, no. 18, p. 1806613, 2019.

- [22] W. Zhao, Z. Liu, Z. Sun, Q. Zhang, P. Wei, X. Mu, H. Zhou, C. Li, S. Ma, D. He, P. Ji, W. Zhu, X. Nie, X. Su, X. Tang, B. Shen, X. Dong, J. Yang, Y. Liu, and J. Shi, “Superparamagnetic enhancement of thermoelectric performance,” *Nature*, vol. 549, pp. 247–251, Sep 2017.
- [23] X. Su, F. Fu, Y. Yan, G. Zheng, T. Liang, Q. Zhang, X. Cheng, D. Yang, H. Chi, X. Tang, Q. Zhang, and C. Uher, “Self-propagating high-temperature synthesis for compound thermoelectrics and new criterion for combustion processing,” *Nature Communications*, vol. 5, p. 4908, Sep 2014.
- [24] W.-D. Liu, Y. Yu, M. Dargusch, Q. Liu, and Z.-G. Chen, “Carbon allotrope hybrids advance thermoelectric development and applications,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 141, p. 110800, 2021.
- [25] R. E. Taylor, B. Leung, M. P. Lake, and L.-S. Bouchard, “Spin–lattice relaxation in bismuth chalcogenides,” *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 116, pp. 17300–17305, Aug 2012.
- [26] X. Hu, P. Jood, M. Ohta, M. Kunii, K. Nagase, H. Nishiate, M. G. Kanatzidis, and A. Yamamoto, “Power generation from nanostructured pbte-based thermoelectrics: comprehensive development from materials to modules,” *Energy Environ. Sci.*, vol. 9, pp. 517–529, 2016.
- [27] R. Basu and A. Singh, “High temperature si–ge alloy towards thermoelectric applications: A comprehensive review,” *Materials Today Physics*, vol. 21, p. 100468, 2021.
- [28] S. El Oualid, I. Kogut, M. Benyahia, E. Geczi, U. Kruck, F. Kosior, P. Masschelein, C. Candolfi, A. Dauscher, J. D. Koenig, A. Jacquot, T. Caillat, E. Alleno, and B. Lenoir, “High power density thermoelec-

- tric generators with skutterudites,” *Advanced Energy Materials*, vol. 11, no. 19, p. 2100580, 2021.
- [29] A. V. Shevelkov, “Thermoelectric power generation by clathrates,” in *Thermoelectrics for Power Generation* (S. Skipidarov and M. Nikitin, eds.), ch. 10, Rijeka: IntechOpen, 2016.
- [30] D. Rowe, *Thermoelectrics Handbook: Macro to Nano*. CRC Press, 2018.
- [31] M. A. Haque, S. Kee, D. R. Villalva, W.-L. Ong, and D. Baran, “Halide perovskites: Thermal transport and prospects for thermoelectricity,” *Advanced Science*, vol. 7, no. 10, p. 1903389, 2020.
- [32] F. De Luca, A. J. Clancy, N. R. Carrero, D. B. Anthony, H. G. De Luca, M. S. P. Shaffer, and A. Bismarck, “Increasing carbon fiber composite strength with a nanostructured brick-and-mortar interphase,” *Mater. Horiz.*, vol. 5, pp. 668–674, 2018.
- [33] G. Karalis, L. Tzounis, E. Lambrou, L. N. Gergidis, and A. S. Paipetis, “A carbon fiber thermoelectric generator integrated as a lamina within an 8-ply laminate epoxy composite: Efficient thermal energy harvesting by advanced structural materials,” *Applied Energy*, vol. 253, p. 113512, 2019.
- [34] K. Tsirka, L. Tzounis, A. Avgeropoulos, M. Liebscher, V. Mechtcherine, and A. S. Paipetis, “Optimal synergy between micro and nano scale: Hierarchical all carbon composite fibers for enhanced stiffness, interfacial shear strength and raman strain sensing,” *Composites Science and Technology*, vol. 165, pp. 240–249, 2018.
- [35] R.-C. Zhuang, T. T. L. Doan, J.-W. Liu, J. Zhang, S.-L. Gao, and E. Mäder, “Multi-functional multi-walled carbon nanotube-jute fibres and composites,” *Carbon*, vol. 49, no. 8, pp. 2683–2692, 2011.

- [36] D. K. Chakravarthi, V. N. Khabashesku, R. Vaidyanathan, J. Blaine, S. Yarlagadda, D. Roseman, Q. Zeng, and E. V. Barrera, “Carbon fiber bismaleimide composites filled with nickel-coated single-walled carbon nanotubes for lightning-strike protection,” *Advanced Functional Materials*, vol. 21, no. 13, pp. 2527–2533, 2011.
- [37] E. Senokos, Y. Ou, J. J. Torres, F. Sket, C. González, R. Marcilla, and J. J. Vilatela, “Energy storage in structural composites by introducing CNT fiber/polymer electrolyte interleaves,” *Sci Rep*, vol. 8, p. 3407, Feb. 2018.
- [38] T. Pozegic, I. Hamerton, J. Anguita, W. Tang, P. Ballocci, P. Jenkins, and S. Silva, “Low temperature growth of carbon nanotubes on carbon fibre to create a highly networked fuzzy fibre reinforced composite with superior electrical conductivity,” *Carbon*, vol. 74, pp. 319–328, 2014.
- [39] T. R. Pozegic, J. V. Anguita, I. Hamerton, K. D. G. I. Jayawardena, J.-S. Chen, V. Stolojan, P. Ballocci, R. Walsh, and S. R. P. Silva, “Multi-functional carbon fibre composites using carbon nanotubes as an alternative to polymer sizing,” *Scientific Reports*, vol. 6, p. 37334, Nov 2016.
- [40] L. Tzounis, C. Gravalidis, S. Vassiliadou, and S. Logothetidis, “Fiber yarns / cnt hierarchical structures as thermoelectric generators,” *Materials Today: Proceedings*, vol. 4, no. 7, Part 1, pp. 7070–7075, 2017. 13th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies (NN16), July (5-8) 2016, Thessaloniki, Greece.
- [41] Y. Deng, S. Gao, J. Liu, U. Gohs, E. Mäder, and G. Heinrich, “Variable structural colouration of composite interphases,” *Mater. Horiz.*, vol. 4, pp. 389–395, 2017.
- [42] L. Tzounis, T. Gärtner, M. Liebscher, P. Pötschke, M. Stamm, B. Voit,

and G. Heinrich, “Influence of a cyclic butylene terephthalate oligomer on the processability and thermoelectric properties of polycarbonate/mwcnt nanocomposites,” *Polymer*, vol. 55, no. 21, pp. 5381–5388, 2014.

[43] S. Saq’an, A. M. Zihlif, S. R. Al-Ani, and G. Ragosta, “Thermoelectric power and ac electrical properties of pan-based carbon fiber composites,” *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, vol. 19, pp. 1079–1085, Nov 2008.

[44] C. Tyrpenou, V. D. Stavrou, and L. N. Gergidis, “Magnetic skyrmions in fept square-based nanoparticles around room-temperature,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 56, p. 085002, feb 2023.

Κεφάλαιο 2

Μοντελοποίηση θερμοηλεκτρικών συσκευών για συγκομιδή ενέργειας σε επίπεδο συνεχούς

2.1 Ανάγκη για μοντελοποίηση θερμοηλεκτρικών συσκευών

Λόγω των πολύπλοκων φαινομένων που σχετίζονται με την παραγωγή θερμοηλεκτρικής ενέργειας, η επίλυση του θερμοηλεκτρικού προβλήματος για συσκευές που είναι δυνατόν να υλοποιούνται σε ένα πειραματικό εργαστήριο καθώς και η αξιολόγηση της απόδοσής τους με υπολογιστικές μεθόδους είναι μεγάλης σημασίας τόσο σε ό,τι αφορά στα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά εξόδου όσο και στην αξιολόγηση της προοπτικής για εφαρμογές διαφορετικών υλικών όσο και για τον καθορισμό κρίσιμων παραμέτρων σχεδιασμού όπως η γεωμετρία των θερμοστοιχείων, οι διαστάσεις τους τα συγκολλητικά μέσα καθώς και τα υποστρώματα στα οποία τοποθετούνται ή τυπώνονται. Η εξοικονόμηση ανθρωπίνων και υλικών πόρων είναι εξόχως σημαντική και η προσομοίωση δύναται να συνεισφέρει τα μέγιστα σε αυ-

τή την κατεύθυνση. Επιπλέον, η υπολογιστική ανάλυση μπορεί να είναι εξαιρετικά χρήσιμη για την αξιολόγηση της απόδοσης μεγαλύτερων συστημάτων όπου πρέπει να χρησιμοποιηθούν περισσότερες γεννήτριες και η πολυπλοκότητα της συνολικής δομής αναπόφευκτα αυξάνει, λαμβάνοντας πάντα υπόψη τα προβλήματα που προκύπτουν από την ενσωμάτωση πρόσθετων υποσυστημάτων.

Η προσομοίωση θερμοηλεκτρικών συσκευών είναι μια απαιτητική υπολογιστικά διαδικασία καθώς οι συσκευές αυτές συνήθως έχουν περίπλοκη γεωμετρία και οι διαφορικές εξισώσεις που περιγράφουν το θερμοηλεκτρικό φαινόμενο είναι συζευγμένες, όπως θα παρουσιαστεί και θα αναδειχθεί στη συνέχεια. Η αριθμητική μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων είναι μια ιδιαίτερα ισχυρή υπολογιστική μεθοδολογία για τη μελέτη θερμοηλεκτρικών συσκευών μέσω της επίλυσης του αντίστοιχου συζευγμένου προβλήματος συνοριακών τιμών καθώς μπορεί αφ' ενός μεν να επιλύσει μεμονωμένα προβλήματα αφ' εταίρου δε να χρησιμοποιηθεί σε παραμετρικές μελέτες προκειμένου να βελτιστοποιηθούν οι παράμετροι σχεδιασμού και απόδοσης των συσκευών αυτών. Μια τέτοια προσπάθεια λαμβάνει χώρα στην παρούσα διδακτορική διατριβή συνδυάζοντας τα πλεονεκτήματα της ευθείας αριθμητικής επίλυσης των σχετικών μερικών διαφορικών εξισώσεων και των δεδομένων που παράγει με τη χρήση τεχνικών πρόβλεψης τεχνητών νευρωνικών δικτύων (Artificial Neural Networks-ANNs) που μπορούν να συνδράμουν τα μέγιστα στο βέλτιστο σχεδιασμό ρεαλιστικών συσκευών συγκομιδής ηλεκτρικής ενέργειας.

2.2 Το θερμοηλεκτρικό πρόβλημα συζευγμένων πεδίων-Καταστατικές εξισώσεις

Τα θερμοηλεκτρικά φαινόμενα μπορούν να περιγραφούν σε επίπεδο συνεχούς χρησιμοποιώντας τις ακόλουθες καταστατικές εξισώσεις [1]

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = \dot{q}_G \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \left(\mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right) = 0 \quad (2.2)$$

που αντιπροσωπεύει την εξίσωση συνέχειας για το ηλεκτρικό φορτίο. Η σύζευξη των προαναφερθέντων μερικών διαφορικών εξισώσεων δίνεται από τις ακόλουθες σχέσεις:

$$\mathbf{q} = [\Pi] \mathbf{J} - [\lambda] \nabla T \quad (2.3)$$

$$\mathbf{J} = [\sigma] (\mathbf{E} - [a] \nabla T) \quad (2.4)$$

$$\mathbf{D} = [\epsilon] \mathbf{E} \quad (2.5)$$

όπου οι σχετικές ποσότητες είναι:

ρ = πυκνότητα [kg/m^3],

C = ειδική θερμοχωρητικότητα [$J/(kgK)$],

T = απόλυτη θερμοκρασία [$^{\circ}K$],

(\dot{q}_G) = ρυθμός παραγωγής θερμότητας ανά μονάδα όγκου [W/m^3],

\mathbf{q} = διάνυσμα ροής θερμότητας [W/m^2],

\mathbf{J} = διάνυσμα πυκνότητας ηλεκτρικού ρεύματος [A/m^2],

\mathbf{E} = διάνυσμα έντασης ηλεκτρικού πεδίου [V/m],

\mathbf{D} = διάνυσμα πυκνότητας ηλεκτρικής ροής [C/m^2],

$[\lambda]$ = ταυιστής θερμικής αγωγιμότητας [$W/m^{\circ}K$],

- [σ] = ταυστής ηλεκτρικής αγωγιμότητας [S/m],
 [a] = ταυστής συντελεστή Seebeck [V/K],
 [Π] = $T[a]$ = ταυστής συντελεστή Peltier [V],
 [ϵ] = ταυστής διηλεκτρικής διαπερατότητας [F/m].

Λόγω της απουσίας του χρονικά μεταβαλλόμενου μαγνητικού πεδίου, το ηλεκτρικό πεδίο E είναι αστρόβιλο ($\nabla \times \mathbf{E} = \mathbf{0}$) και μπορεί να προέλθει από ένα βαθμωτό ηλεκτρικό δυναμικό φ :

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi \quad (2.6)$$

Αντικαθιστώντας τις εξισώσεις (3) - (6) στις εξισώσεις (1) - (2) εξάγεται ένα σύστημα συζευγμένων μερικών διαφορικών εξισώσεων που περιγράφουν το θερμοηλεκτρικό φαινόμενο

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot ([\Pi] \mathbf{J}) - \nabla \cdot ([\lambda] \nabla T) = \dot{q}_G \quad (2.7)$$

$$\nabla \cdot ([\epsilon] \nabla \frac{\partial \varphi}{\partial t}) + \nabla \cdot ([\sigma] [S] \nabla T) + \nabla \cdot ([\sigma] \nabla \varphi) = 0 \quad (2.8)$$

2.2.1 Η Μέθοδος Πεπερασμένων στοιχείων

Η αναλυτική λύση των εξισώσεων με τις οποίες περιγράφεται το πρόβλημα του θερμοηλεκτρισμού - συζευγμένες μερικές διαφορικές εξισώσεις - είναι δυνατή μόνο σε ειδικές περιπτώσεις, όπου τα γεωμετρικά σχήματα και οι συνοριακές συνθήκες είναι πάρα πολύ απλά. Για να επιλυθούν στην πράξη, σε πραγματικά προβλήματα απαιτείται να εφαρμοστούν αριθμητικές μέθοδοι.

Η μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων (Finite Elements Method-FEM) είναι μια αριθμητική μέθοδος, με τον υπολογισμό των λύσεων να γίνεται με χρήση Η/Υ προσεγγιστικά με ελεγχόμενο σφάλμα. Η μέθοδος είναι

μεν προσεγγιστική, αλλά μπορεί να δώσει αξιόπιστα αποτελέσματα και έχει το πλεονέκτημα ότι είναι δυνατό να εφαρμοστεί σε ένα πολύ μεγάλο εύρος προβλημάτων σε περίπλοκες γεωμετρίες και με ρεαλιστικές συνθηκές. Το μειονέκτημά της είναι οι αυξημένες απαιτήσεις σε υπολογιστική ισχύ - μνήμη. Η μέθοδος των Πεπερασμένων Στοιχείων είναι ευρέως χρησιμοποιούμενη και δημοφιλής στην κοινότητα των μηχανικών-επιστημόνων. Διαθέτει απλά, συμπαγή και προσανατολισμένα στο αποτέλεσμα χαρακτηριστικά που είναι ελκυστικά για τους ερευνητές. Παραθέτουμε τα βασικά πλεονεκτήματα αυτής της αριθμητικής μεθοδολογίας.

Μοντελοποίηση (Modeling): Τα FEM επιτρέπουν την ευκολότερη μοντελοποίηση σύνθετων γεωμετρικών και ακανόνιστων σχημάτων. Επειδή ο ερευνητής είναι σε θέση να μοντελοποιήσει τόσο το εσωτερικό όσο και το εξωτερικό της γεωμετρίας ενδιαφέροντος, μπορεί να καθορίσει πώς κρίσιμοι παράγοντες μπορεί να επηρεάσουν ολόκληρη τη δομή και γιατί μπορεί να συμβούν αστοχίες-εσφαλμένη λειτουργία.

Ικανότητα προσαρμογής (Adaptivity): Τα FEM μπορούν να προσαρμοστούν ώστε να πληρούνται ορισμένες προδιαγραφές για ακρίβεια, προκειμένου να μειωθεί η ανάγκη για φυσικά-πραγματικά πρωτότυπα στη διαδικασία σχεδιασμού. Η δημιουργία πολλαπλών επαναλήψεων αρχικών πρωτοτύπων είναι συνήθως μια δαπανηρή και χρονικά κοστοβόρα διαδικασία. Αντί να ξοδεύει εβδομάδες για πρωτότυπα, ο σχεδιαστής μπορεί να μοντελοποιήσει διαφορετικά σχέδια και υλικά σε ώρες ή σε λογικό χρονικό εύρος μέσω λογισμικού.

Ακρίβεια (Accuracy): Ενώ η μοντελοποίηση μιας πολύπλοκης φυσικής διαδικασίας στο χαρτί μπορεί να είναι ασύμφορη ή πρακτικά αδύνατη αναγκάζοντας τον ερευνητή να προβεί σε παραδοχές και απλουστευτικές θεωρήσεις οδηγώντας αναπόφευκτα στην εύρεση λύσεων χαμηλής ακρίβειας, ένας υπολογιστής που χρησιμοποιεί FEM μπορεί να λύσει το πρόβλημα με

υψηλό βαθμό ακρίβειας.

Προσομοίωση εξαρτώμενη από το χρόνο (Time-dependent simulation): Τα FEM είναι πολύ χρήσιμα για την προσομοίωση φυσικών φαινομένων που εξαρτώνται από το χρόνο.

Συνοριακές Συνθήκες (Boundary Conditions): Με τα FEM, οι ερευνητές μπορούν να χρησιμοποιήσουν ρεαλιστικές συνοριακές συνθήκες στο υπολογιστικό τους μοντέλο παίρνοντας τα μέγιστα από το αντίστοιχο φυσικό ή μαθηματικό μοντέλο. Οι συνοριακές συνθήκες μπορεί να περιλαμβάνουν σημειακές δυνάμεις, κατανεμημένες δυνάμεις, θερμικές επιδράσεις (όπως αλλαγές θερμοκρασίας ή εφαρμοζόμενη θερμική ενέργεια-θερμικό φορτίο) και περιορισμούς θέσης.

Οπτικοποίηση Δεδομένων (Data Visualization): Οι ερευνητές μπορούν να επεξεργαστούν τις λύσεις και να οπτικοποιήσουν παραμέτρους και φαινόμενα. Τους δίνεται η δυνατότητα να εντοπίσουν οποιαδήποτε ευπάθεια/αβλεψία στο σχεδιασμό με τις λεπτομερείς απεικονίσεις που παρέχει η FEM μοντελοποίηση και στη συνέχεια να χρησιμοποιήσουν τα νέα δεδομένα για να κάνουν ένα νέο σχέδιο ή ακόμα και ένα νέα φυσικό ή μαθηματικό μοντέλο.

Όραμα (Vision): Με όλες αυτές τις δυνατότητες ο ερευνητής μπορεί να απελευθερώσει τη δημιουργική του και να προχωρήσει σε σχεδιασμό και μοντελοποίηση συσκευών που δεκαετίες πριν αποτελούσαν αποκυήματα ευφάνταστων ερευνητών.

Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων είναι η εξέλιξη των μητρικών μεθόδων αριθμητικής επίλυσης διαφορικών εξισώσεων και έλαβε σάρκα και οστά με τις πρωτοποριακές μελέτες σπουδαίων επιστημόνων όπως οι Ιωάννης Αργύρης [2], ο Walther Ritz, ο Boris Galerkin μεταξύ άλλων.

Αποτέλεσε αρχικά μια ενεργειακή μέθοδο για την επίλυση δισδιάστατων φορέων όπως οι μέθοδοι Rayleigh-Ritz και Galerkin, τις οποίες μετέφερε ου-

σιαστικά από το χώρο των συνεχών συστημάτων στα διακριτά συστήματα. Στη συνέχεια επεκράτησαν οι αρχές των ισοπαραμετρικών στοιχείων που εξασφαλίζουν ακρίβεια στους υπολογισμούς και βελτιώνουν σημαντικά τον ενιαίο προγραμματισμό της μεθόδου [3].

Η ανάπτυξή της μπορεί να θεωρηθεί ως συμβολή τριών βασικών επιστημονικών περιοχών, των ενεργειακών μεθόδων της μηχανικής (energy methods), της θεωρίας προσεγγίσεων των μαθηματικών (approximation theory), αλλά και των πληροφοριακών συστημάτων σχεδιασμού CAD (Computer Aided Design).

Για την επίλυση ενός προβλήματος συνοριακών συνθηκών με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων απαιτούνται τα παρακάτω διακριτά στάδια:

- Σχεδιασμός της γεωμετρίας του προβλήματος
- Διακριτοποίηση της γεωμετρίας σε πεπερασμένα στοιχεία (π.χ. τετράεδρα, εξάεδρα)
- Καθορισμός των συνοριακών συνθηκών και εφαρμογή τους στη γεωμετρία
- Επίλυση του μοντέλου
- Επεξεργασία της λύσης και υπολογισμός των ζητούμενων φυσικών μεγεθών ενδιαφέροντος

2.2.2 Οι εξισώσεις του θερμοηλεκτρικού φαινομένου υπό το πλαίσιο των FEM

Το σύστημα των θερμοηλεκτρικών εξισώσεων για πεπερασμένα στοιχεία μπορεί να επιτευχθεί με την εφαρμογή της μεθόδου Galerkin, στις συζευγμένες εξισώσεις όπως παρουσιάστηκαν. Η τεχνική περιλαμβάνει προσέγγιση της θερμοκρασίας T καθώς και του ηλεκτρικού βαθμωτού δυναμικού

φ σε ένα πεπερασμένο στοιχείο ως:

$$T = \mathbf{N}T_e \quad (2.9)$$

$$\varphi = \mathbf{N}\varphi_e \quad (2.10)$$

Όπου: \mathbf{N} , διάνυσμα κομβικών ηλεκτρικών δυναμικών T_e , φορέας κομβικών θερμοκρασιών, φ_e , διάνυσμα συναρτήσεων σχημάτων στοιχείων, Οι εξισώσεις των θερμοηλεκτρικών πεπερασμένων στοιχείων είναι:

$$\begin{bmatrix} C^{TT} & 0 \\ 0 & C^{\varphi\varphi} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{T}_e \\ \dot{\varphi}_e \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} K^{TT} & 0 \\ K^{\varphi T} & K^{\varphi\varphi} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} T_e \\ \varphi_e \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} Q + Q^P + Q_e \\ I \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

Όπου

$$K^{TT} = \int_V \nabla \mathbf{N} \cdot [\lambda] \cdot \nabla \mathbf{N} dV \text{ μήτρα θερμοικής ακαμψίας}$$

$$K^{\varphi\varphi} = \int_V \nabla \mathbf{N} \cdot [\sigma] \cdot \nabla \mathbf{N} dV \text{ μήτρα ηλεκτρικής ακαμψίας}$$

$$K^{\varphi T} = \int_V \nabla \mathbf{N} \cdot [\sigma] \cdot [a] \cdot \nabla \mathbf{N} dV \text{ μήτρα ακαμψίας Seebeck}$$

$$C^{TT} = \rho \int_V C \mathbf{N} \mathbf{N} dV \text{ μήτρα θερμοικής απόσβεσης}$$

$$C^{\varphi\varphi} = \int_V \nabla \mathbf{N} \cdot [\epsilon] \cdot \nabla \mathbf{N} dV \text{ μήτρα διηλεκτρικής απόσβεσης}$$

Q – διάνυσμα συνδυασμένων φορτίων παραγωγής θερμότητας

$$Q^P = \int_V \nabla \mathbf{N} \cdot [II] \cdot \mathbf{J} dV \text{ διάνυσμα θερμοικού φορτίου Peltier}$$

$$Q^e = \int_V \mathbf{N} \mathbf{E} \cdot \mathbf{J} dV \text{ διάνυσμα φορτίου ηλεκτρικής ισχύος}$$

I – διάνυσμα ηλεκτρικού ρεύματος

Τα θερμικά φορτία (Q) μπορεί να έχουν τη μορφή επιβαλλόμενης θερμοκρασίας, σημειακή ταχύτητα ροής θερμότητας, επιφανειακή ροή θερμότητας, συναγωγή ή ακτινοβολία, καθώς και ο ρυθμός παραγωγής θερμότητας του σώματος για άλλες αιτίες από τη διαρροή ηλεκτρικής ενέργειας (υπολογίζεται στο Q_e). Τα ηλεκτρικά φορτία (I) μπορούν να έχουν τη μορφή επιβαλλόμενων ηλεκτρικών δυναμικών καθώς και σημειακό ηλεκτρικό ρεύμα. Οι πίνακες-τανυστές $[\lambda]$, $[\sigma]$, $[a]$, $[\epsilon]$ αντιστοιχούν στις φυσικές ιδιότητες του υλικού [1].

2.3 Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα

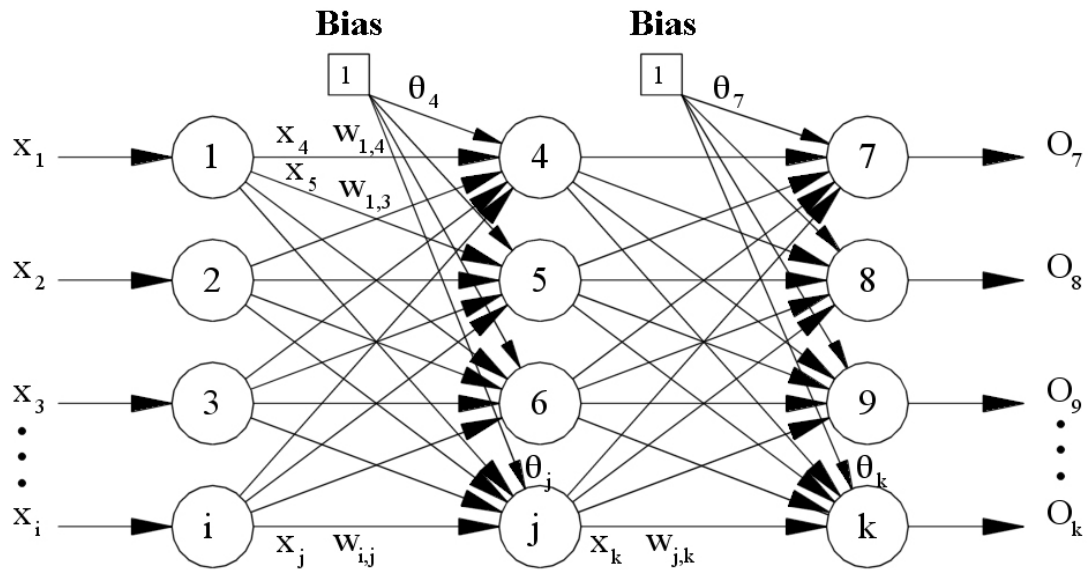
Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα (Artificial Neural Networks-ANNs) αποτελούν μια σχετικά νέα περιοχή στις επιστήμες του μηχανικού καθώς και στις φυσικές επιστήμες, καθ' όσον εφαρμόζονται με αυξανόμενη ευρύτητα και ένταση τα τελευταία σαράντα περίπου χρόνια. Την τελευταία δεκαετία τα ANNs καθώς και οι άλλες μεθοδολογίες που συναποτελούν το αντικείμενο της τεχνητής νοημοσύνης (Artificial Intelligence -AI) έχουν γνωρίσει τόσο μεγάλη άνθηση που αγγίζουν τα όρια της επιστημονικής επανάστασης. Το κύριο χαρακτηριστικό τους είναι ότι οι πρώτες αρχές και λειτουργίες τους βασίζονται στο νευρικό σύστημα των ζώντων οργανισμών, αλλά η μελέτη και χρήση τους έχει προχωρήσει πολύ πέρα από τους βιολογικούς οργανισμούς. Σήμερα χρησιμοποιούνται σε υπολογιστικές μελέτες σε ένα τεράστιο εύρος προβλημάτων και επιστημών. Η λειτουργία τους προσπαθεί να συνδυάσει τον τρόπο δράσης των εγκεφάλων με έναν αφηρημένο μαθηματικό τρόπο. Οι ζώντες οργανισμοί, από τους πιο απλούς μέχρι τους πιο περίπλοκους, έχουν ένα νευρικό σύστημα, το οποίο είναι υπεύθυνο για μια σειρά από στοιχειώδες διεργασίες, όπως είναι η επαφή με τον εξωτερικό κόσμο, η μάθηση, η απομνημόνευση, κλπ. Το νευρικό σύστημα των

οργανισμών αποτελείται από πολλά νευρωνικά δίκτυα τα οποία είναι εξειδικευμένα για την κάθε διεργασία. Η κεντρική μονάδα του νευρικού συστήματος είναι, ο εγκέφαλος, ο οποίος επίσης αποτελείται από νευρωνικά δίκτυα.

Κάθε νευρωνικό δίκτυο αποτελείται από έναν αριθμό μονάδων, που λέγονται νευρώνες (neurons), οι οποίοι συνεχώς επεξεργάζονται πληροφορίες, λαμβάνοντας και αποστέλλοντας ηλεκτρικά σήματα σε νευρώνες με τους οποίους είναι διασυνδεδεμένοι. Οι διεργασίες που επιτελούνται από τα βιολογικά νευρωνικά δίκτυα στους ζώντες οργανισμούς είναι ιδιαίτερα περίπλοκες, αλλά και απαραίτητες για την επιβίωση και ανάπτυξη του οργανισμού. Μερικές από αυτές είναι εργασίες ρουτίνας τις οποίες ο εγκέφαλος εκτελεί με ελάχιστη ή μηδαμινή προσπάθεια, όπως π.χ. αναγνώριση μιας εικόνας ή ενός ήχου.

Τα (ANNs) αναπτύχθηκαν προκειμένου ο ηλεκτρονικός υπολογιστής να μιμηθεί τη λειτουργία ενός εγκεφάλου - νευρικού συστήματος ώστε να μπορεί από μόνος του να επιτελεί ορισμένες διεργασίες, π.χ. να αναγνωρίζει εικόνες, αφού πρώτα έχει εκπαιδευθεί κατάλληλα. Η λέξη δίκτυο αναφέρεται στη διασύνδεση μεταξύ των νευρώνων που υπάρχουν σε διάφορα στρώματα ενός συστήματος.

Η δομή αποτελείται από τεχνητούς νευρώνες ή κόμβους [4]. Οι συνδέσεις του βιολογικού νευρώνα μοντελοποιούνται σε τεχνητά νευρωνικά δίκτυα ως βάρη μεταξύ κόμβων. Αυτά τα βάρη αντιπροσωπεύουν τις συνδέσεις μεταξύ των νευρώνων που καθορίζουν την επίδραση του ενός νευρώνα στον άλλο [5]. Ένα θετικό βάρος αντανακλά μια διεγερτική σύνδεση, ενώ οι αρνητικές τιμές σημαίνουν ανασταλτικές συνδέσεις. Όλες οι εισοδοί τροποποιούνται κατά βάρος και αθροίζονται. Αυτή η δραστηριότητα αναφέρεται ως γραμμικός συνδυασμός. Τέλος, μια συνάρτηση ενεργοποίησης ελέγχει το πλάτος της εξόδου. Για παράδειγμα, ένα αποδεκτό εύρος



Σχήμα 2.1: Δομή Τεχνητού Νευρωνικού Δικτύου [10].

εξόδου είναι συνήθως μεταξύ 0 και 1 ή μπορεί να είναι -1 και 1. Τα ANNs χρησιμοποιούνται ως εργαλεία για την παροχή λύσεων σε ένα ευρύ φάσμα προβλημάτων όπως ταξινόμηση, πρόβλεψη και μείωση θορύβου, καθιστώντας τα εφαρμόσιμα σε διάφορους τομείς της επιστήμης [6, 7, 8, 9].

Η βασική αρχιτεκτονική-δομή ενός νευρωνικού δικτύου (Σχήμα 2.1), περιλαμβάνει το επίπεδο εισόδου, τουλάχιστο ένα κρυφό επίπεδο, και το επίπεδο εξόδου. Τα διάφορα επίπεδα συνδέονται μεταξύ τους μέσω ενός συνόλου βαρών (weights- w). Ένα νευρωνικό δίκτυο u_k με μαθηματικούς όρους μπορεί να περιγραφεί ως ένα άθροισμα perceptron ([9]) οργανωμένων σε στρώματα. Οι πληροφορίες περνούν από τα κρυφά επίπεδα εισόδου στο επίπεδο εξόδου.

Τα ANNs μπορούν να χρησιμοποιηθούν για προγνωστική μοντελοποίηση, προσαρμοστικό έλεγχο και εφαρμογές που μπορούν να εκπαιδευτούν μέσω ενός συνόλου δεδομένων. Η αυτό-μάθηση που προκύπτει από την εμπειρία μπορεί να συμβεί μέσα σε δίκτυα, τα οποία μπορούν να αντλήσουν συμπεράσματα από ένα περίπλοκο και φαινομενικά άσχετο σύνολο πλη-

ροφοριών. Είναι ικανά να προσαρμοστούν σε οποιαδήποτε δεδομένα και να γενικεύονται ακόμη και όταν το σύνολο δεδομένων εισόδου περιέχει θόρυβο ή λείπουν τιμές [11].

2.3.1 Εκπαίδευση Νευρωνικών Δικτύων

Μια από τις πιο βασικές ιδιότητες των Νευρωνικών Δικτύων είναι η ικανότητά τους για εκπαίδευση. Η εκπαίδευση αυτή επιτυγχάνεται μέσω της ανταλλαγής τιμών και βαρών, που αποσκοπεί στη βαθμιαία σύλληψη της πληροφορίας η οποία στη συνέχεια θα είναι διαθέσιμη προς ανάκτηση. Υπάρχουν πολλοί αλγόριθμοι που η εφαρμογή τους έχει ως στόχο την προσαρμογή των τιμών των βαρών ενός ANN. Οι μέθοδοι μάθησης μπορούν να καταταχθούν σε δύο κατηγορίες: τη μάθηση με επίβλεψη (supervised learning) και τη μάθηση χωρίς επίβλεψη (unsupervised learning) [12].

Η μάθηση με επίβλεψη είναι μια διαδικασία η οποία συνδυάζει έναν εξωτερικό εκπαιδευτή και τη συνολική πληροφορία. Κάποιες από τις μεθόδους οι οποίες συγκαταλέγονται σε αυτή την κατηγορία είναι η μάθηση με διόρθωση σφάλματος και η στοχαστική μάθηση. Παραδείγματα τα οποία αντιπροσωπεύουν την μάθηση με επίβλεψη συμπεριλαμβάνουν αποφάσεις για το πότε θα πρέπει να σταματήσει η διαδικασία εκπαίδευσης, αποφάσεις αναφορικά με τη συχνότητα παρουσίασης στο δίκτυο τα πρότυπα εκπαίδευσης και η παρουσίαση προόδου του δικτύου. Η μάθηση με επίβλεψη χωρίζεται σε δύο ακόμα κατηγορίες: στη δομική (structural) και στην προσωρινή (temporal) εκμάθηση. Οι αλγόριθμοι οι οποίοι βρίσκονται στην πρώτη κατηγορία, χρησιμοποιούνται για την εύρεση της βέλτιστης σχέσης μεταξύ εισόδων και εξόδων για κάθε ξεχωριστό ζευγάρι προτύπων. Παραδείγματα της δομικής εκμάθησης αποτελούν η αναγνώριση και η κατηγοριοποίηση προτύπων, ενώ παραδείγματα της προσωρινής εκμάθησης η πρόβλεψη και ο έλεγχος.

Μάθηση χωρίς επίβλεψη: Οι αλγόριθμοι της εν λόγω μάθησης αναφέρονται ως αυτό-οργανωμένοι (self-organized) και είναι διαδικασίες οι οποίες δεν απαιτούν να είναι παρών ένας «εξωτερικός» δάσκαλος ή επιβλέπων. Βασίζονται, μάλιστα, μόνο σε τοπική πληροφορία καθ' όλη τη διάρκεια της εκπαίδευσης του Τεχνητού Νευρωνικού Δικτύου. Οι συγκεκριμένοι αλγόριθμοι οργανώνουν τα δεδομένα και ανακαλύπτουν τις σημαντικές συλλογικές ιδιότητες. Για παράδειγμα κάποιοι ενδεικτικοί αλγόριθμοι εκπαίδευσης χωρίς επίβλεψη είναι ο αλγόριθμοι - T.N.Δ. Hebbian, οι Self-organizing maps-SOM και το Generative Adversarial Network (GAN) [13].

2.3.2 Είδη Νευρωνικών Δικτύων

Τα είδη των νευρωνικών δικτύων είναι παρά πολλά και κατηγοριοποιούνται ανάλογα με το είδος του προβλήματος (στατικό - δυναμικό), το αν θα εκπαιδευτεί με επίβλεψη ή χωρίς, αν θα έχει πολλά στρώματα, και τέλος από τις αλληλοσυνδέσεις των νευρώνων. Επιγραμματικά αναφέρονται στη βιβλιογραφία [6, 7, 8, 9] οι εξής κατηγορίες:

- Νευρωνικά δίκτυα ενός στρώματος: Νευρωνικό δίκτυο Perceptron, Adaline και madalines.
- Δίκτυα εμπρόσθιας διάδοσης – μάθηση με επίβλεψη: Αλγόριθμος back propagation, deep learning και convolution networks.
- Μάθηση χωρίς επίβλεψη: Αυτό-προσαρμοζόμενοι χάρτες χαρακτηριστικών Kohonen, μάθηση διανυσματικής κβαντοποίησης, νευρωνικά δίκτυα ART.
- Δίκτυα ακτινικών συναρτήσεων βάσης.

Το εμπρόσθιας διάδοσης (feedforward ANN) ήταν ο πρώτος και απλούστερος τύπος. Σε αυτό το δίκτυο οι πληροφορίες μετακινούνται από το ε-

πίπεδο εισόδου απευθείας μέσω πιθανών κρυφών επιπέδων στο επίπεδο εξόδου χωρίς κύκλους/βρόχους. Τα δίκτυα τροφοδοσίας μπορούν να κατασκευαστούν με διάφορους τύπους μονάδων, όπως δυαδικούς νευρώνες McCulloch Pitts, ο απλούστερος από τους οποίους είναι το perceptron. Οι συνεχείς νευρώνες, συχνά με σιγμοειδή ενεργοποίηση, χρησιμοποιούνται συνδυαστικά με τον αλγόριθμο μάθησης backpropagation.

Ένας αυτόματος κωδικοποιητής - ένας αυτόματος συσχετιστής είναι παρόμοιο με το πολυστρωματικό perceptron (MLP) – με ένα επίπεδο εισόδου, ένα επίπεδο εξόδου και ένα ή περισσότερα κρυφά επίπεδα που τα συνδέουν. Ωστόσο, το επίπεδο εξόδου έχει τον ίδιο αριθμό μονάδων με το επίπεδο εισόδου. Σκοπός του είναι να ανακατασκευάσει τις δικές του εισόδους (αντί να εκπέμπει μια τιμή στόχο). Επομένως, οι αποκωδικοποιητές είναι μοντέλα εκμάθησης χωρίς επίβλεψη. Ένας αυτόματος κωδικοποιητής χρησιμοποιείται για μη εποπτευόμενη εκμάθηση αποτελεσματικών κωδικοποιήσεων [14], [15] συνήθως με σκοπό τη μείωση της διάστασης και για την εκμάθηση μοντέλων παραγωγής δεδομένων.

Στην παρούσα διατριβή θα χρησιμοποιηθεί μόνο ο τύπος feedforward ANN με τον αλγόριθμο μάθησης back -propagation.

2.3.3 Ο τεχνητός Νευρώνας

Ο πρώτος τεχνητός νευρώνας αρχικά προτάθηκε σε επίσημο μοντέλο το 1943 από τους McCulloch και Pitts [16]. Απέδειξαν ότι αυτό το μοντέλο νευρώνα ήταν σε θέση να εκτελέσει οποιαδήποτε υπολογιστική λειτουργία χρησιμοποιώντας πεπερασμένο αριθμό τεχνητών νευρώνων και συναπτικών ρυθμιζόμενων βαρών. Οι νευρώνες στο στρώμα εισόδου λαμβάνουν το δεδομένα και τα μεταφέρουν σε νευρώνες στο πρώτο κρυφό επίπεδο μέσω των βαρών. Τα δεδομένα επεξεργάζονται και το αποτέλεσμα μεταφέρονται στους νευρώνες στο επόμενο στρώμα. Η έξοδος του δικτύου παρέχεται α-

πό τους νευρώνες του τελευταίου στρώματος. Η συμπεριφορά ενός απλού νευρώνα k σε κρυφό στρώμα περιγράφεται από τη σταθμισμένη είσοδό του

$$u_k = \sum_{j=1}^N w_{kj} \chi_j \quad (2.12)$$

και τη

$$y_k = \varphi(u_k - \theta_k), \quad (2.13)$$

όπου χ_j αντιπροσωπεύει τις εισόδους, w_{kj} το σύνολο των βαρών, θ_k την προκατάληψη του συστήματος bias, y_k την έξοδο και φ η συνάρτηση ενεργοποίησης [17]. Δηλαδή ο νευρώνας σε ένα κρυφό στρώμα επεξεργάζεται τα εισερχόμενα δεδομένα χ_j με υπολογισμό του σταθμισμένου αθροίσματος και προσθήκη ενός όρου που ονομάζεται πόλωση bias σύμφωνα με την σχέση [16]. Ως συνάρτηση ενεργοποίησης ή μεταφοράς φ χρησιμοποιείται συνήθως η βηματική (step function), η σιγμοειδής η γραμμική καθώς και η τροποποιημένη γραμμική (Rectified Linear Unit-ReLU). Για τις ερευνητικές ανάγκες της παρούσας διατριβής χρησιμοποιήθηκε η ReLU συνάρτηση η οποία περιγράφεται από τη σχέση:

$$f(x) = x^+ = \max(0, x), \quad (2.14)$$

όπου x είναι η είσοδος σε έναν νευρώνα. Αυτό είναι επίσης γνωστό ως συνάρτηση ράμπας και είναι ανάλογο με την ανόρθωση μισού κύματος στην ηλεκτροτεχνία. Αυτή η συνάρτηση ενεργοποίησης εισήχθη για πρώτη φορά σε ένα δυναμικό δίκτυο από τους Hahnloser και συνεργάτες [18]. Αποδείχθηκε για πρώτη φορά το 2011 ότι επιτρέπει την καλύτερη εκπαίδευση βαθύτερων δικτύων (deep networks) [19] σε σύγκριση με τις ευρέως χρησιμοποιούμενες προ του 2011 συναρτήσεις ενεργοποίησης όπως το λογιστικό σιγμοειδές και την υπερβολική εφαπτομένη [20].

2.3.4 Αλγόριθμοι εκπαίδευσης

Ο backpropagation είναι ένας ευρέως χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος για την εκπαίδευση των (feedforward ANNs) και χρησιμοποιήθηκε ως επί το πλείστον στην παρούσα διδακτορική διατριβή. Υπολογίζει τη διαβάθμιση της συνάρτησης απώλειας σε σχέση με τα βάρη του δικτύου και αυτό είναι ιδιαίτερα αποτελεσματικό μια και δεν υπολογίζει αφελώς απευθείας τη διαβάθμιση για κάθε βάρος. Αυτή η αποτελεσματικότητα καθιστά δυνατή τη χρήση μεθόδων κλίσης για την εκπαίδευση δικτύων πολλαπλών επιπέδων και την ενημέρωση βαρών για την ελαχιστοποίηση της απώλειας. Συχνά χρησιμοποιούνται παραλλαγές όπως η βαθμιδωτή κάθοδος ή η στοχαστική κλίση.

Ο αλγόριθμος οπίσθιας διάδοσης λειτουργεί υπολογίζοντας τη διαβάθμιση της συνάρτησης απώλειας σε σχέση με κάθε βάρος μέσω του κανόνα της αλυσίδας, υπολογίζοντας τη διαβάθμιση στρώμα προς στρώμα και επαναλαμβάνοντας προς τα πίσω από το τελευταίο επίπεδο για να αποφευχθεί ο περιττός υπολογισμός των ενδιάμεσων όρων στον κανόνα της αλυσίδας.

2.3.5 Βιβλιογραφική ανασκόπηση υπολογιστικών μελετών σχετιζόμενες με τη μοντελοποίηση θερμοηλεκτρικών συσκευών

Μια από τις πρώτες μελέτες σχετικές με τη μοντελοποίηση θερμοηλεκτρικών συσκευών και αριθμητικών προσομοιώσεων πεπερασμένων στοιχείων παρουσιάστηκε από τους Antonova και Looman [1]. Στην εργασία αυτή μελέτησαν φαινόμενα σχετιζόμενα με θέρμανση Joule και των φαινομένων Seebeck, Peltier, Thomson που αποτελούν εκφάνσεις του θερμοηλεκτρικού φαινομένου. Διεξήγαγαν προσομοιώσεις σταθερής και μεταβατικής κατάστασης μιας θερμοηλεκτρικής γεννήτριας και ενός ψύκτη Peltier ενός

σταδίου. Επίσης πραγματοποίησαν ανάλυση ενός θερμοηλεκτρικού φύκτη πολλαπλών σταδίων για να αποδειχθεί η ικανότητα παραμετρικής ανάλυσης του εμπορικού πακέτου ANSYS. Τα αριθμητικά αποτελέσματα συμφωνούν με την απόδοση της συσκευής που προβλέπεται από αναλυτικά και πειραματικά δεδομένα.

Οι Mitrani και συνεργάτες [21] ανέπτυξαν διαφορετικά εργαλεία για προσομοίωση ηλεκτρονικών - ηλεκτρικών συσκευών με χρήση του λογισμικού SPICE και μαθηματικά εργαλεία γραμμένα στη Mathematica για την πρόβλεψη της συμπεριφοράς μεμονωμένων θερμοζευγών καταδεικνύοντας την καλή συμφωνία μεταξύ υπολογιστικών και θεωρητικών αποτελεσμάτων.

Στην εργασία των Setawan και συνεργατών [22] σχεδιάστηκε θερμοηλεκτρική γεννήτρια και επιλύθηκε με αριθμητικές μεθόδους. Η θερμοηλεκτρική μονάδα κατασκευάστηκε από CaMnO_3 τύπου n και $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ τύπου p και επιλύθηκε με τη βοήθεια της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης επαληθεύτηκαν συγκρίνοντας με αντίστοιχα πειραματικά καταδεικνύοντας καλή συμφωνία. Ως παράμετρος επιλέχθηκε το ύψος του TEG και απέδειξαν ότι οι τάσεις εξόδου εξαρτώνται γραμμικά από αυτό μέχρι κάποια οριακή τιμή.

Η ανάλυση FEM έχει επίσης χρησιμοποιηθεί για την αξιολόγηση της απόδοσης διαφορετικών θερμοηλεκτρικών υλικών καθώς και για εναλλακτικές τεχνικές υλοποίησης στις συνδέσεις θερμοστοιχείων εκεί όπου η παραδοσιακή συγκόλληση χωρίς μόλυβδο δεν μπορεί να εφαρμοστεί σε θερμοκρασίες πάνω από $200\text{ }^\circ\text{C}$ διότι ο σύνδεσμος μπορεί να τηχθεί και να αστοχήσει σε υπερβολικά υψηλές θερμοκρασίες.

Στην εργασία των Liao και συνεργατών [23] το Ni/Sn/Ag υιοθετήθηκε ως το υλικό σύνδεσης για τη δομή TEG. Το TEG συναρμολογήθηκε με 12 ζεύγη θερμοηλεκτρικών στοιχείων και μετρήθηκε η απόδοσή του. Τα

θερμοηλεκτρικά χαρακτηριστικά δεν διαφέρουν σημαντικά πριν και μετά τη θερμική επεξεργασία. Με την FE ανάλυση, η θερμοκρασία και η ισχύς εξόδου υπολογίστηκαν σε συγκεκριμένα θερμικά φορτία.

Αριθμητικές και στατιστικές μέθοδοι χρησιμοποιούνται για την πρόβλεψη της επίδρασης των γεωμετρικών παραμέτρων - διαστάσεων. Στα δημοσιευμένα άρθρα του Erturun και συνεργατών [24, 25] με τη βοήθεια πεπερασμένων στοιχείων μοντελοποιήθηκαν συσκευές που αποτελούνται από 2 θερμοζεύγη για την αξιολόγηση της επίδρασης διαφόρων γεωμετριών των θερμοηλεκτρικών άκρων (thermoelectric legs) καθώς και του μεγέθους και της μεταξύ τους απόστασης. Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι η απόδοση ισχύος και η απόδοση μετατροπής αυξάνονται αυξάνοντας το πλάτος των άκρων καθώς και μειώνοντας το ύψος και ότι υπάρχει μια αντίστροφη σχέση μεταξύ της απόδοσης παραγωγής ενέργειας και των επιπέδων θερμικής καταπόνησης.

Στην εργασία των Geppert και συνεργατών [26] αναπτύχθηκε ένα ευέλικτο εργαλείο προσομοίωσης πεπερασμένων στοιχείων για την πρόβλεψη της ηλεκτρικής ισχύος εξόδου, της κατανομής του δυναμικού ηλεκτρικής και της απόλυτης θερμοκρασία για μια θερμοηλεκτρική γεννήτρια που είναι διαθέσιμη στο εμπόριο. Οι παράμετροι εισόδου ήταν η αρχιτεκτονική της θερμογεννήτριας (δηλαδή, οι γεωμετρίες των διαφορετικών στοιχείων και ο αριθμός των θερμοηλεκτρικών άκρων) και οι ιδιότητες του υλικού όπως η ειδική ηλεκτρική αγωγιμότητα, ο συντελεστής Seebeck και η θερμική αγωγιμότητα. Το εργαλείο προσομοίωσης πεπερασμένων στοιχείων χρησιμοποιήθηκε για τη μοντελοποίηση μιας εμπορικά διαθέσιμης θερμοηλεκτρικής γεννήτριας, η οποία βασίστηκε σε ημιαγωγούς τύπου n και p $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ με κεραμικές πλάκες κάλυψης, και συγκρίθηκαν τα μοντελοποιημένα χαρακτηριστικά τάσης - ρεύματος και τα χαρακτηριστικά ισχύος με πειραματικές τιμές για διαφορετικές συνθήκες θερμοκρασίας.

Μια ανασκόπηση τεχνικών μοντελοποίησης θερμοηλεκτρικών γεννητριών με τη χρήση της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων παρουσιάζεται στην εργασία των Korotkon και συνεργατών [27] όπου πραγματοποιείται μια συγκριτική ανάλυση διαφορετικών μοντέλων και τα αποτελέσματα συγκρίνονται με πειραματικές τιμές. Γίνεται υπολογισμός των γεωμετρικών παραμέτρων των θερμοστοιχείων για την επίλυση του προβλήματος βελτιστοποίησης με κριτήριο αυτό της μεγιστοποίησης της ισχύος εξόδου. Επιπλέον εξετάζονται παράμετροι όπως το εύρος θερμοκρασίας λειτουργίας, της αντίστασης φορτίου και της ισχύος εξόδου.

Στην εργασία των Li,Feng [28], το θερμοηλεκτρικό πρόβλημα επιλύεται με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων για προτεινόμενο θερμοηλεκτρικό βραστήρα που θα μπορούσε να παράγει ενέργεια για βρασμό. Από τους συγγραφείς υπολογίστηκε η κατανομή του πεδίου θερμοκρασίας. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης χρησιμοποιήθηκαν για την καθοδήγηση προκειμένου να σχεδιαστεί το βέλτιστο σύστημα παραγωγής θερμοηλεκτρικής ενέργειας αλλά και την αξιολόγηση της σκοπιμότητας του συγκεκριμένου σχεδιασμού.

Μια προσπάθεια μοντελοποίησης και ποσοτικοποίησης των απωλειών περιγράφεται στην εργασία των Ziolkowski και συνεργατών [29] με την βοήθεια του εμπορικού λογισμικού ANSYS. Υλοποιήθηκε η γεωμετρία μιας συσκευής με διάφορες παραμέτρους: λόγοι διαστάσεων και διαμορφώσεις ιδιοτήτων επαφής (αντίσταση θερμικής / ηλεκτρικής διεπαφής) αξιολογήθηκαν για την επίδρασή τους στην απόδοση του TEG καθώς και για παρασιτικές επιδράσεις όπως η μεταφορά, η ακτινοβολία και η αγώγιμη παράκαμψη θερμότητας.

Η ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων χρησιμοποιείται στην εργασία των Ramos και συνεργατών [30] για την κατανόηση της αλληλεπίδρασης μεταξύ θερμικών και ηλεκτρικών ροών θερμότητας σε μικρο-θερμοηλεκτρικές

συσκευές. Προσδιορίζονται οι κατευθυντήριες γραμμές σχεδιασμού για τις μεταλλικές επάνω και κάτω επαφές και τα θερμοηλεκτρικά στοιχεία, καθώς και η βέλτιστη πυκνότητα διευθέτησης των θερμοηλεκτρικών στοιχείων. Από τα αποτελέσματα αναδεικνύεται ότι στην κλίμακα μικρομέτρων, οι επιδράσεις των καθαρών ηλεκτρικών και θερμικών αντιστάσεων των επιμέρους εξαρτημάτων των συσκευών (δηλαδή, θερμοηλεκτρικές επαφές άκρων, άνω και κάτω) είναι συγκρίσιμου μεγέθους. Αυτό καθιστά απαραίτητη την εφαρμογή στρατηγικών σχεδιασμού ειδικά για την κλίμακα σε επίπεδο μικρομέτρων, προκειμένου να βελτιστοποιηθεί γεωμετρικά η συσκευή.

Στην μελέτη του Cheng [31] αναπτύσσεται ένα μονοδιάστατο θερμοηλεκτρικό μοντέλο για υπολογισμό και πρόβλεψη απόδοσης θερμοηλεκτρικής γεννήτριας (TEG) σε επίπεδο συσκευής σε μόνιμη κατάσταση. Η ιδέα του μοντέλου λαμβάνει υπόψη τα φαινόμενα Seebeck, Peltier, Thomson καθώς και την Joule αγωγή θερμότητας. Οι θερμικές αντιστάσεις μεταξύ της πηγής θερμότητας, της ψύκτρας και του θερμοστοιχείου λαμβάνονται επίσης υπόψη. Στη συνέχεια, το μοντέλο απλοποιείται για να αναλυθούν οι επιδράσεις των βασικών θερμικών και ηλεκτρικών παραμέτρων στην απόδοση του TEG, όταν το φαινόμενο Thomson αγνοείται. Τέλος μια πειραματική μέτρηση της ισχύος εξόδου πραγματοποιείται για την επικύρωση του μοντέλου.

Στην εργασία των Zulkifli και συνεργατών [32], η ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων (FEA) διεξάγεται σε ένα μοντέλο του TEG συνδεδεμένο με πλάκα αλουμινίου (Al) στο στοιχείο θέρμανσης του TEG. Αποδείχθηκε ότι οι αλλαγές του πλάτους και του πάχους της πλάκας Al αύξησαν τη βαθμίδα θερμοκρασίας μεταξύ θερμών και ψυχρών πλευρών του TEG με άμεση συνέπεια την αύξηση της τάσης που παράγεται από το TEG λόγω του φαινομένου Seebeck. Η αύξηση της θερμοκρασιακής κλίσης λόγω της

αύξησης του πάχους και του πλάτους της πλάκας Al με σκεπτικισμό αποδόθηκε στην αύξηση της θερμικής αντίστασης της πλάκας Al. Μετά από στατιστική ανάλυση και αφού μελετήθηκαν διάφοροι παράγοντες σχεδιασμού διαπιστώθηκε ότι το πάχος της πλάκας Al διαδραματίζει σημαντικό ρόλο στην απόδοση του προτεινόμενου TEG.

Βιβλιογραφία

- [1] E. E. Antonova and D. C. Looman, “Finite elements for thermoelectric device analysis in ansys,” in *ICT 2005. 24th International Conference on Thermoelectrics, 2005.*, pp. 215–218, 2005.
- [2] J. Argyris, H. Balmer, J. Doltsinis, P. Dunne, M. Haase, M. Kleiber, G. Malejannakis, H.-P. Mlejnek, M. Müller, and D. Scharpf, “Finite element method — the natural approach,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 17-18, pp. 1–106, 1979.
- [3] T. Chandrupatla and A. Belegundu, *Introduction to Finite Elements in Engineering*. Cambridge University Press, 5 ed., 2021.
- [4] J. J. Hopfield, “Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities.,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 79, no. 8, pp. 2554–2558, 1982.
- [5] S. V. Kozyrev, “Classification by Ensembles of Neural Networks,” *arXiv e-prints*, p. arXiv:1202.4170, Feb. 2012.
- [6] D. J. Amit, *Modelling Brain Function: The World of Attractor Neural Networks*. USA: Cambridge University Press, 1st ed., 1992.
- [7] C. Christodoulou and M. Georgiopoulos, *Applications of Neural Networks in Electromagnetics*. USA: Artech House, Inc., 1st ed., 2000.
- [8] R. J. M. Russell Reed, “Preface,” in *Neural Smithing: Supervised Learning in Feedforward Artificial Neural Networks*, The MIT Press, 02 1999.
- [9] C. M. Bishop, *Neural Networks for Pattern Recognition*. USA: Oxford University Press, Inc., 1995.

- [10] "UNSW Sydney School of Computer Science & Engineering", "Machine learning tutorials-multi-layer perceptron." <https://www.cse.unsw.edu.au/~cs9417ml/MLP2/BackPropagation.html>, 2021. Online; accessed 6-Oct-2023.
- [11] V. C. Pezoulas, T. P. Exarchos, and D. I. Fotiadis, *Medical Data Sharing, Harmonization and Analytics*. Academic Press, Washington DC., 2020.
- [12] R. Rojas, *Neural Networks - A Systematic Introduction*. Springer Berlin, Heidelberg, 1996.
- [13] H. U. Dike, Y. Zhou, K. K. Deveerasetty, and Q. Wu, "Unsupervised learning based on artificial neural network: A review," in *2018 IEEE International Conference on Cyborg and Bionic Systems (CBS)*, pp. 322–327, 2018.
- [14] C.-Y. Liou, J.-C. Huang, and W.-C. Yang, "Modeling word perception using the elman network," *Neurocomputing*, vol. 71, no. 16, pp. 3150–3157, 2008. *Advances in Neural Information Processing (ICONIP 2006) / Brazilian Symposium on Neural Networks (SBRN 2006)*.
- [15] C.-Y. Liou, W.-C. Cheng, J.-W. Liou, and D.-R. Liou, "Autoencoder for words," *Neurocomputing*, vol. 139, pp. 84–96, 2014.
- [16] W. S. McCulloch and W. Pitts, "A logical calculus of the ideas immanent in neurons activity," *Bulletin of mathematical biophysics*, vol. 5, no. 115-133, p. 10, 1943.
- [17] D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, and R. J. Williams, "Learning representations by back-propagating errors," *Nature*, vol. 323, pp. 533–536, Oct. 1986.

- [18] R. H. R. Hahnloser, R. Sarpeshkar, M. A. Mahowald, R. J. Douglas, and H. S. Seung, “Digital selection and analogue amplification coexist in a cortex-inspired silicon circuit,” *Nature*, vol. 405, pp. 947–951, Jun 2000.
- [19] X. Glorot, A. Bordes, and Y. Bengio, “Deep sparse rectifier neural networks,” in *Proceedings of the Fourteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics* (G. Gordon, D. Dunson, and M. Dudík, eds.), vol. 15 of *Proceedings of Machine Learning Research*, (Fort Lauderdale, FL, USA), pp. 315–323, PMLR, 11–13 Apr 2011.
- [20] C. J. Gatti and M. J. Embrechts, *Reinforcement Learning with Neural Networks: Tricks of the Trade*, pp. 275–310. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [21] D. Mitrani, J. Salazar, A. Turó, M. J. García, and J. A. Chávez, “One-dimensional modeling of te devices considering temperature-dependent parameters using spice,” *Microelectronics Journal*, vol. 40, no. 9, pp. 1398–1405, 2009. Quality in Electronic Design 2nd IEEE International Workshop on Advances in Sensors and Interfaces Thermal Investigations of ICs and Systems.
- [22] T. Seetawan, U. Seetawan, A. Ratchasin, S. Srichai, K. Singsoog, W. Namhongsa, C. Ruttanapun, and S. Siridejachai, “Analysis of thermoelectric generator by finite element method,” *Procedia Engineering*, vol. 32, pp. 1006–1011, 2012. ISEEC.
- [23] L.-L. Liao, M.-J. Dai, C.-K. Liu, and K.-N. Chiang, “Thermo-electric finite element analysis and characteristic of thermoelectric generator with intermetallic compound,” *Microelectronic Engineering*, vol. 120, pp. 194–199, 2014. MAM2013, March 10-13, Leuven, Belgium.
- [24] U. Erturun, K. Erermis, and K. Mossi, “Effect of various leg geometries

on thermo-mechanical and power generation performance of thermoelectric devices,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 73, no. 1, pp. 128–141, 2014.

- [25] U. Erturun, K. Erermis, and K. Mossi, “Influence of leg sizing and spacing on power generation and thermal stresses of thermoelectric devices,” *Applied Energy*, vol. 159, pp. 19–27, 2015.
- [26] B. Geppert, D. Groeneveld, V. Loboda, A. Korotkov, and A. Feldhoff, “Finite-element simulations of a thermoelectric generator and their experimental validation,” *Energy Harvesting and Systems*, vol. 2, no. 1, pp. 95–104, 2015.
- [27] A. S. Korotkov, V. V. Loboda, S. B. Makarov, and A. Feldhoff, “Modeling thermoelectric generators using the ansys software platform: Methodology, practical applications, and prospects,” *Russian Microelectronics*, vol. 46, pp. 131–138, Mar 2017.
- [28] Y. Li and F. Deng, “Modeling and simulation of thermoelectric power generation system based on finite element method,” in *Proceedings of the 33rd Chinese Control Conference*, pp. 6388–6393, 2014.
- [29] P. Ziolkowski, P. Poinas, J. Leszczynski, G. Karpinski, and E. Müller, “Estimation of thermoelectric generator performance by finite element modeling,” *Journal of Electronic Materials*, vol. 39, pp. 1934–1943, Sep 2010.
- [30] D. A. Lara Ramos, V. Barati, J. Garcia, H. Reith, G. Li, N. Pérez, G. Schierning, and K. Nielsch, “Design guidelines for micro-thermoelectric devices by finite element analysis,” *Advanced Sustainable Systems*, vol. 3, no. 2, p. 1800093, 2019.

- [31] F. Cheng, “Calculation methods for thermoelectric generator performance,” in *Thermoelectrics for Power Generation* (S. Skipidarov and M. Nikitin, eds.), ch. 19, Rijeka: IntechOpen, 2016.
- [32] M. N. Zulkifli, I. Ilias, A. Abas, and W. M. W. Muhamad, “Finite element analysis of thermoelectric generator with aluminum plate for waste heat recovery application,” *International Journal on Advanced Science, Engineering and Information Technology*, vol. 7, no. 4, pp. 1328–1333, 2017.

Κεφάλαιο 3

Μοντελοποίηση θερμοηλεκτρικών συσκευών βασισμένες στις ίνες άνθρακα

3.1 Εισαγωγή

Τα προηγμένα ενισχυμένα με ίνες άνθρακα πολυμερικά σύνθετα (Carbon Fiber Reinforced Plastics-CFRPs) κατατάσσονται ως υλικά υψηλής ζήτησης με ιδιότητες που συνδυάζουν χαμηλό βάρος και υψηλή μηχανική αντοχή. Επιπλέον, τα πολύ-λειτουργικά δομικά σύνθετα επιτρέπουν λειτουργίες, όπως η αυτο-παρακολούθηση δομικής ακεραιότητας, έλεγχος θερμοκρασίας, ανίχνευση παραμορφώσεων ή αστοχιών καθώς συγκομιδή και παραγωγή ενέργειας. Υβριδικά (ανόργανα - οργανικά) και οργανικά μελάνια νάνο-σωματιδίων έχουν αναπτυχθεί για να παραχθούν λειτουργικά τυπωμένα υμένια με επιθυμητές ηλεκτρικές ιδιότητες. Στο παρόν κεφάλαιο θα μοντελοποιηθεί θερμοηλεκτρική γεννήτρια που εντάσσεται σε μια θερμοηλεκτρική συσκευή που έχει κατασκευαστεί στο Εργαστήριο Μηχανικής Σύνθετων και Ευφυών Υλικών (CSML) του Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης

Υλικών, προκειμένου να μελετηθεί η συμπεριφορά της υπό πραγματικές συνθήκες. Επιπρόσθετα έγινε περαιτέρω παραμετρική ανάλυση και αξιολόγηση και μελετήθηκε ως προς τα χαρακτηριστικά σχεδιασμού.

Δίνονται οι απαραίτητες πληροφορίες που σχετίζονται με την υπολογιστική μοντελοποίηση της πειραματικής συσκευής και παραλλαγών της με χρήση της μεθόδου Πεπερασμένων Στοιχείων και την αριθμητική επίλυση που λαμβάνει χώρα. Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα ηλεκτρικά χαρακτηριστικά εξόδου της όπως αυτά της διαφοράς δυναμικού στα άκρα της (τάση ανοικτού κυκλώματος) και της μέγιστης ισχύος που δύναται να παράγει. Επίσης γίνεται άμεση σύγκριση με τις μετρήσεις που έγιναν από τα μέλη του Εργαστηρίου CSML. Στο δεύτερο μέρος του κεφαλαίου γίνεται μια παραμετρική ανάλυση της συσκευής όπου το αριθμητικό μοντέλο επιλύεται για διάφορες παραμέτρους σχεδιασμού όπως η θερμική αγωγιμότητα της ρητίνης, το μήκος και το πλήθος των θερμοστοιχείων μεταξύ άλλων. Τα αποτελέσματα από τη μοντελοποίηση της συσκευής καθώς και της παραμετρικής μελέτης στα πλαίσια του βέλτιστου σχεδιασμού της συνδυάζονται με την εφαρμογή της μεθόδου των τεχνητών νευρωνικών δικτύων για προβλέψεις οι οποίες μπορούν να λάβουν χώρα με το ελάχιστο του υπολογιστικού κόστους δίνοντας αξιόπιστη πληροφορία και συνδράμοντας σημαντικά στο σχεδιασμό της βέλτιστης απόδοσης της συσκευής.

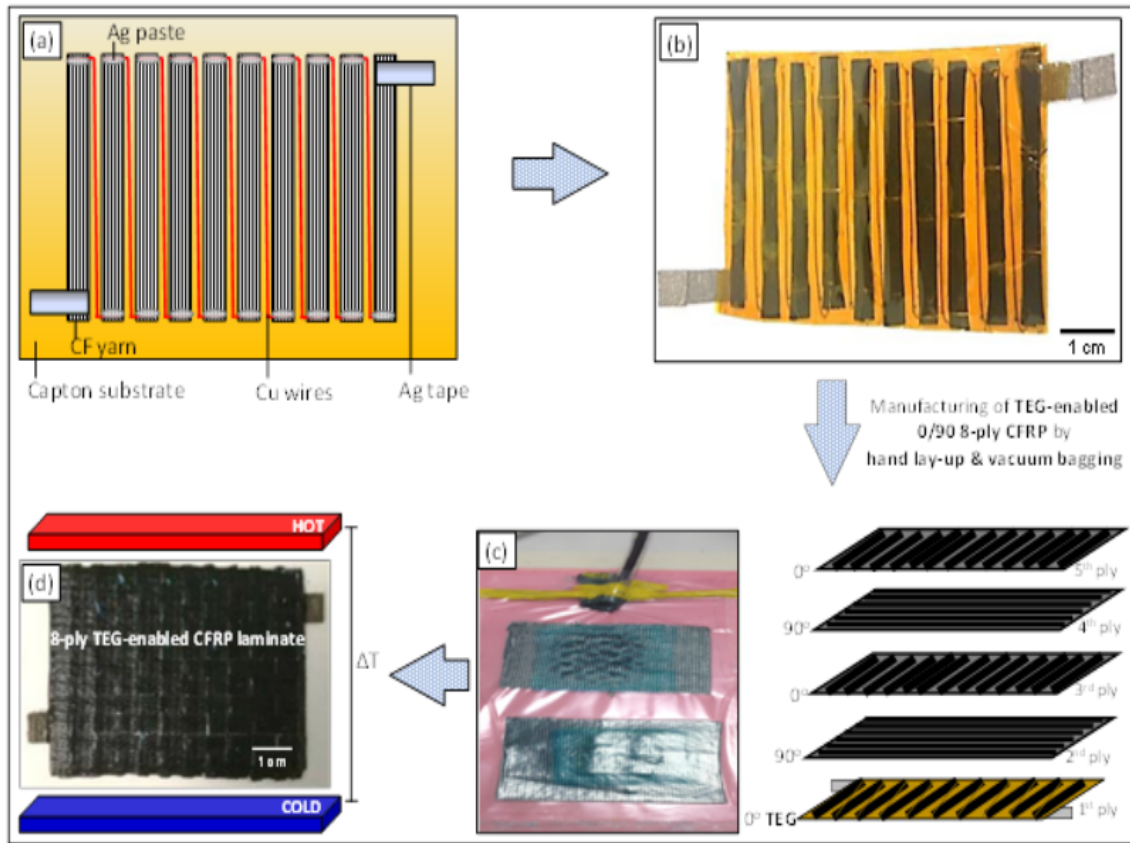
3.2 Μοντελοποίηση Θερμοηλεκτρικής συσκευής βασισμένης σε σύνθετο εποξειδικό πολύστρωτο με ανθρακονήματα

Προσομοιώθηκε θερμοηλεκτρική συσκευή που κατασκευάστηκε από τους Ερευνητές του Εργαστηρίου Μηχανικής Σύνθετων και Ευφυών Υλικών στο

TMEY βασισμένη σε ίνες άνθρακα [1]. Αποτελείται από 10 μ τύπου ημιαγωγούς με την ημιαγώγιμη συμπεριφορά να εκπηγάζει από τις ίνες άνθρακα (Carbon Fiber-CF). Τα σειριακά διασυνδεδεμένα ανθρακονήματα κατασκευάσθηκαν σε ένα φιλμ Karton που ενσωματώνεται περαιτέρω σε εποξειδική ρητίνη. Το στρώμα της συσκευής, που εμπεριέχει τη θερμοηλεκτρική γεννήτρια και τα δέκα (10) θερμοηλεκτρικά στοιχεία, ενισχύεται δομικά με ένα πολυστρωματικό (8 στρωμάτων) $[0/90]_{2s}$ συμμετρικό CFRP. Η φωτογραφική απεικόνιση της εργαστηριακής συσκευής που περιέχει τη θερμική γεννήτρια στο πρώτο στρώμα (θερμοηλεκτρικά ενεργό) καθώς και τα υπερκείμενα προστατευτικά επάλληλα στρώματα και βασίζεται σε CF παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.1.

Στο Σχήμα 3.2 παρουσιάζονται τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά και οι διαστάσεις της θερμοηλεκτρικής γεννήτριας που φιλοξενεί τα δέκα (10) θερμοστοιχεία. Οι εξωτερικές διαστάσεις της συσκευής είναι 40 mm \times 60 mm ακριβώς όπως η πραγματική που αναπτύχθηκε πειραματικά. Η συσκευή περικλείει κυλινδρικά θερμοστοιχεία με διάμετρο 0.245 mm και μήκος 33.4 mm. Τα παρακείμενα θερμοστοιχεία συνδέονται με ηλεκτρικά καλώδια χαλκού (Cu) με πλάτος 0.122 mm με τη θέση της αρχής και του τελικού άκρου του σύρματος να εντοπίζεται και να συνδέεται στις κυλινδρικές βάσεις.

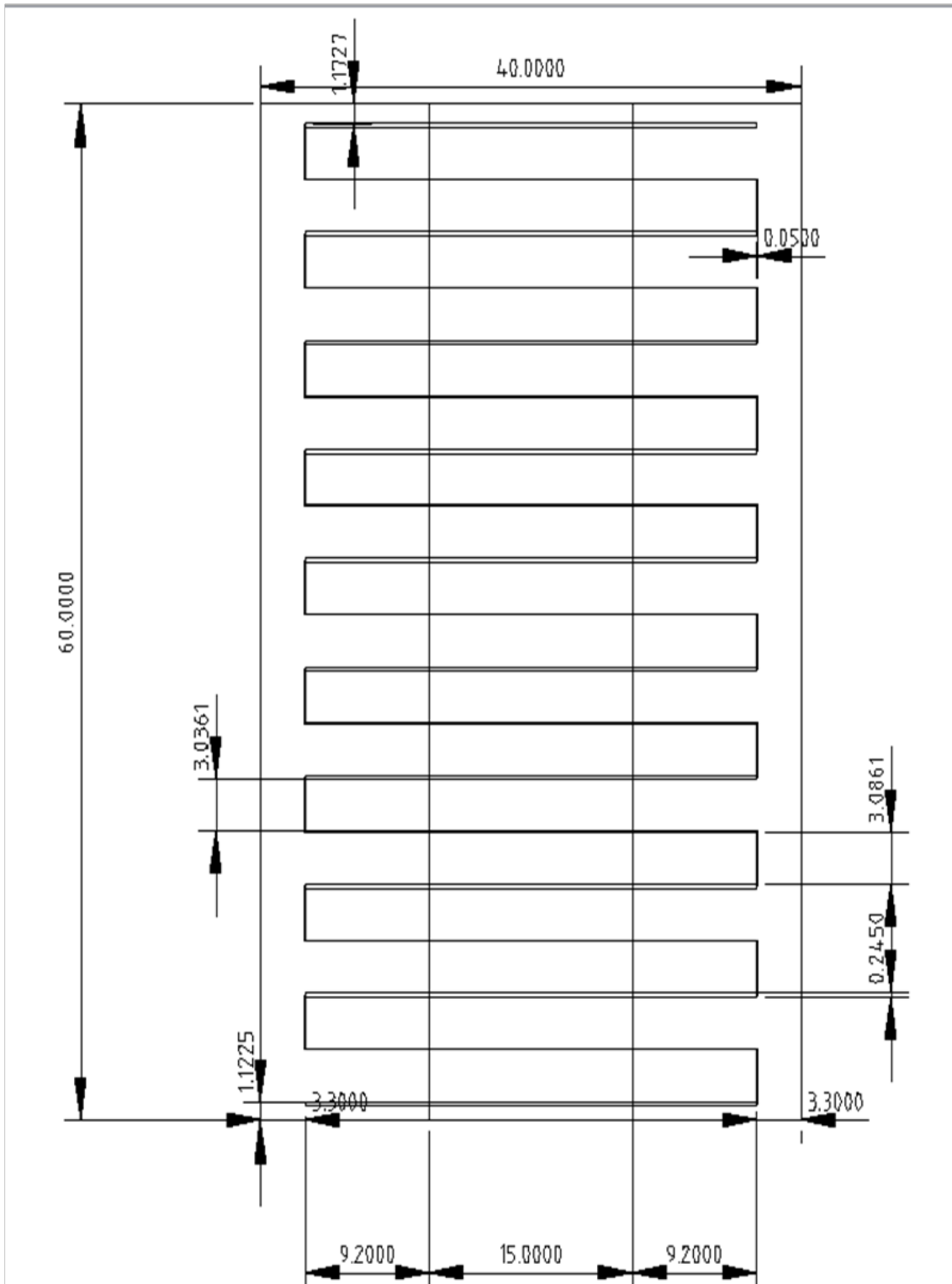
Στο σημείο αυτό πρέπει να αναφερθεί πως η συσκευή που παρουσιάζεται είναι προϊόν μακροσκελών - χρονοβόρων πειραμάτων καθώς και των αντίστοιχων αριθμητικών προσομοιώσεων τόσο για τη βελτιστοποίηση της γεωμετρίας όσο και των επιμέρους συνδέσεων-κολλήσεων με γνώμονα την καλή της λειτουργία καθώς και τη βελτίωση των ηλεκτρικών της χαρακτηριστικών. Ενδεικτικά αναφέρουμε πως για τη συσκευή που τελικά υιοθετήθηκε και χρησιμοποιήθηκε έχουν μοντελοποιηθεί περισσότερες από 20 συσκευές (και ελαφρές παραλλαγές τους) πριν η διαδικασία σχεδιασμού



Σχήμα 3.1: (a) Απεικόνιση της μονάδας TEG που βασίζεται σε CF με δέκα (10) σειριακά διασυνδεδεμένα θερμοστοιχεία CF-M40B τύπου p, (b) την πραγματική συσκευή σε ένα υπόστρωμα Kapton, (c) τη διαδικασία στεγανοποίησης με φίλμ υπό κενό film bagging για την κατασκευή CFRP με δυνατότητα TEG, ακολουθούμενη από θερμομορφοποίηση και σκλήρυνση/μετασκλήρυνση, καθώς και τη σχηματική απεικόνιση του CFRP με δυνατότητα TEG με συμμετρική διαμόρφωση $[0/90]_{2s}$, (d) το τελικό CFRP με δυνατότητα TEG και επίδειξη διαφοράς θερμοκρασίας επί του επιπέδου (ΔT) [1].

και προσομοίωσης ολοκληρωθεί.

Η συγκεκριμένη εργαστηριακή συσκευή παράγαγε πραγματική τάση εξόδου $19.56 \pm 1.31 \text{ mV}$ καθώς και συνολική μέγιστη ηλεκτρική ισχύ εξόδου $0.87 \text{ }\mu\text{W}$ όταν εκτέθηκε σε θερμοκρασιακή διαφορά $75 \text{ }^\circ\text{C}$ και έδωσε μαζί με τις προηγούμενες που κατασκευάστηκαν πειραματικά στο Εργαστήριο Μηχανικής Σύνθετων και Ευφυών Υλικών CSML και μοντελοποιήθηκαν στον υπολογιστή μια πρώτη τάξης ευκαιρία για την επικύρωση του αριθμητικού μοντέλου και την ανάδειξη της ορθότητας και συνέπειας της αριθμητικής



Σχήμα 3.2: Γεωμετρικά χαρακτηριστικά και διαστάσεις της προσομοιωμένης θερμοηλεκτρικής γεννήτριας σε χιλιοστά (mm) που περιλαμβάνει δέκα (10) θερμοστοιχεία.

επίλυσης του αντίστοιχου θερμοηλεκτρικού προβλήματος με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων.

3.3 Υλικά και οι ιδιότητές τους που χρησιμοποιούνται στη μοντελοποίηση TEG συσκευών

Τα υλικά και οι τιμές των σχετικών ιδιοτήτων που χρησιμοποιούνται στην πειραματική υλοποίηση και μοντελοποιήθηκαν στις θερμοηλεκτρικές γεννήτριες παρουσιάζονται στους Πίνακες 3.1 - 3.5. Τα θερμοηλεκτρικά στοιχεία όπως αναφέρθηκε ήταν M40B PAN based CFs (Torayaca Japan) τύπου p εμβαπτισμένα σε ρητίνη η οποία χρησιμοποιήθηκε και ως συγκολλητικό. Τα λουτρά θερμότητας-πλάκες χρησίμευσαν ως γεννήτορες της θερμοκρασιακής βαθμίδας και συνεπώς της θερμορροής. Η θερμική αγωγιμότητα των ανθρακονημάτων θεωρήθηκε ισότροπη. Ο συντελεστής Seebeck θεωρείται στο εύρος των μελετούμενων θερμοκρασιών ανεξάρτητος από τη θερμοκρασία καθώς και η ηλεκτρική αντίσταση που επίσης θεωρείται ισότροπη αποτυπώνονται στον Πίνακα 3.1. Για την ηλεκτρική αντίσταση χρησιμοποιήθηκε η τιμή $6.12 \cdot 10^{-6} \Omega m$ αλλά προκειμένου να υπάρξει μελέτη της επίδρασης της ηλεκτρικής αντίστασης σαν παράμετρος σχεδιασμού χρησιμοποιήθηκε και η δεύτερη τιμή του Πίνακα 3.1.

Πίνακας 3.1: Ιδιότητες των CF.

Φυσικό μέγεθος	Τιμή
Θερμική αγωγιμότητα	1.46 W/(m°C)
Συντελεστής Seebeck	33.826 $\mu V/K$
Ηλεκτρική αντίσταση	$1.0 \cdot 10^{-5} \Omega m$ & $6.12 \cdot 10^{-6} \Omega m$

Η πολυμερική ρητίνη έχει πρακτικά μηδενική ηλεκτρική αγωγιμότητα και σε ό,τι αφορά στην θερμική αγωγιμότητα έχουν χρησιμοποιηθεί διαφορετικές τιμές θερμικής αγωγιμότητας για τον προσδιορισμό του ρόλου της ρητίνης στην απόδοση της συσκευής. Οι τιμές θερμικής αγωγιμότητας της ρητίνης κυμαίνονται από 0.682 W/(m°C) έως 0.02 W/(m°C) (Πίνακας 3.2).

Πίνακας 3.2: Ιδιότητες Ρητινών.

Τύπος	Θερμική Αγωγιμότητα (ισότροπη)
Ρητίνη 1	0.682 $W/(m^{\circ}C)$
Ρητίνη 2	0.02 $W/(m^{\circ}C)$
Ρητίνη 3	0.04 $W/(m^{\circ}C)$
Ρητίνη 4	0.07 $W/(m^{\circ}C)$
Ρητίνη 5	0.1 $W/(m^{\circ}C)$
Ρητίνη 6	0.209 $W/(m^{\circ}C)$
Τύπος	Ειδική ηλεκτρική αντίσταση (ισότροπη)
Ρητίνες 1-6	$10^6 \Omega m$

Πίνακας 3.3: Ιδιότητες των Carbon Fibers.

Ιδιότητα	Τιμή
θερμική αγωγιμότητα στο επίπεδο	6.0 $W/(m^{\circ}C)$
Θερμική αγωγιμότητα κατά μήκος του άξονα z	0.6 $W/(m^{\circ}C)$
Ειδική ηλεκτρική αντίσταση (ισότροπη)	$10^6 \Omega m$

Αυτές οι τιμές είναι τυπικές για θερμικά αγωγίμες πολυμερικές ρητίνες. Επιπρόσθετα μοντελοποιήθηκε η περίπτωση όπου η πολυμερική ρητίνη αντικαταστάθηκε με αέρα προσομοιώνοντας με αυτόν τον τρόπο μια συγκεκριμένη πειραματική διάταξη και εξειδικευμένες πειραματικές μετρήσεις κατά τη διαδικασία της κατασκευής. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι στη συντριπτική πλειοψηφία οι προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν και οι αριθμητικές προβλέψεις ήταν σε πολύ καλή συμφωνία με τις πειραματικές μετρήσεις επιταχύνοντας την πειραματική διαδικασία εξοικονομώντας χρόνο και σημαντικό ανθρώπινο δυναμικό βοηθώντας με αυτόν τον τρόπο στην εξέλιξη του σχεδιασμού των συγκεκριμένων θερμοηλεκτρικών συσκευών. Για τη θερμική αγωγιμότητα του αέρα χρησιμοποιήθηκε η τιμή 0.209 $W/(m^{\circ}C)$. Όσον αφορά στην ηλεκτρική ειδική αντίσταση, χρησιμοποιήθηκε η τιμή $10^6 \Omega m$ ανεξάρτητα από τη χρησιμοποιούμενη ρητίνη. Αυτή η τιμή ειδικής αντίστασης είναι τυπική για έναν ηλεκτρικό μονωτή.

Για ηλεκτρικές συνδέσεις και καλωδιώσεις χρησιμοποιήθηκε κράμα χαλκού (μετά την πειραματική ρύθμιση) με ισοτροπική θερμική αγωγιμότητα 401.0 $W/(m^{\circ}C)$.

Πίνακας 3.4: Ηλεκτρικές ιδιότητες κράματος χαλκού: Ηλεκτρική αντίσταση (ισότροπη - εξαρτάται από τη θερμοκρασία).

Θερμοκρασία	Ηλεκτρική Αγωγιμότητα (ισότροπη)
0 °C	$1.548 \times 10^{-8} \Omega m$
20 °C	$1.694 \times 10^{-8} \Omega m$
100 °C	$2.277 \times 10^{-8} \Omega m$

Πίνακας 3.5: Θερμική αγωγιμότητα-ειδική ηλεκτρική αντίσταση κράματος αλουμινίου (Οι τιμές λαμβάνονται από τη βιβλιοθήκη του ANSYS και εξαρτώνται από την θερμοκρασία).

Θερμική αγωγιμότητα	
°C	W/(m°C)
0	144
100	165
200	175
Ειδική ηλεκτρική αντίσταση	
°C	Ωm
0	$2.43 \cdot 10^{-8}$
20	$2.67 \cdot 10^{-8}$
100	$3.63 \cdot 10^{-8}$

Το τελευταίο υλικό που χρησιμοποιείται στις προσομοιώσεις είναι το κράμα αλουμινίου που χρησιμεύει για την επίτευξη της βαθμίδας θερμοκρασίας (θερμού και ψυχρού λουτρού) και οι θερμικές ιδιότητες του καταγράφονται στον Πίνακα 3.5.

3.3.1 Γεωμετρία και συνοριακές συνθήκες

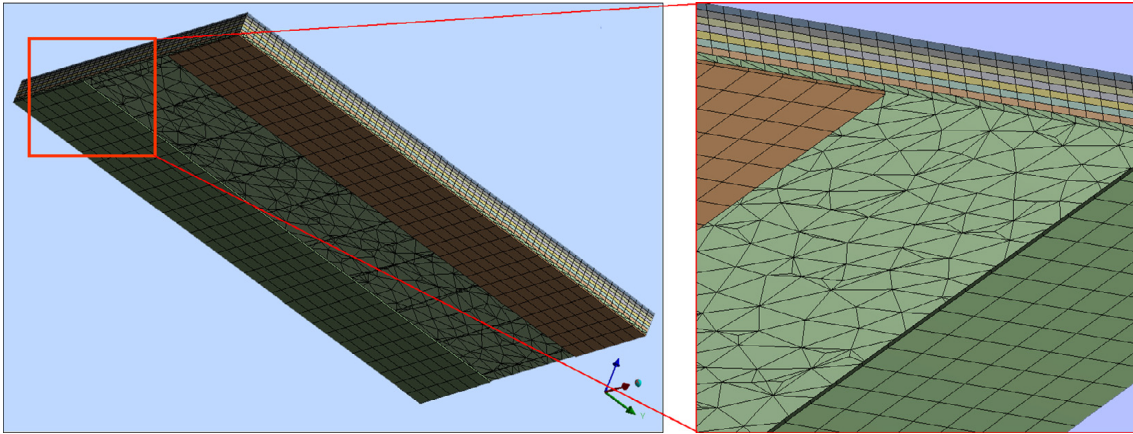
Έγινε προσπάθεια να υιοθετηθεί και αποδοθεί η ακριβής γεωμετρία του CFRP με δυνατότητα TEG, όπως αυτή κατασκευάστηκε στο εργαστήριο. Η μεθοδολογία πεπερασμένων στοιχείων (FEM) χρησιμοποιήθηκε για τη λύση των συζευγμένων διαφορικών εξισώσεων με τις κατάλληλες συνοριακές συνθήκες [2]. Η αριθμητική λύση παρείχε θερμικά πεδία και ηλεκτρικά δυναμικά τα οποία μεταφράζονται σε θερμοκρασία και κατανομές τάσης σε όλη τον όγκο της συσκευής. Το τελικό ζητούμενο ήταν οι τάσεις εξόδου της συσκευής, (τάση ανοιχτού κυκλώματος) προκειμένου να συγκριθεί με

την πειραματικά υλοποιημένη.

Η θερμοηλεκτρική συσκευή χωρίστηκε σε τέσσερις διακριτές περιοχές προκειμένου η διαδικασία παραγωγής πλέγματος (mesh generation process) να διακριτοποιήσει το σύνολο της, μοντελοποιώντας τα διαφορετικά της χωρία. Στο Σχήμα 3.3 παρουσιάζεται το δημιουργημένο πλέγμα του πολυστρωματικού CFRP με τις οκτώ (8) στρώσεις, που ενθυλακώνει δέκα (10) θερμοστοιχεία στο κατώτερο του στρώμα. Οι διαφορετικοί τομείς διακριτοποίησης παρουσιάζονται και είναι εμφανείς τόσο στις εικόνες χαμηλής μεγέθυνσης (αριστερό σχήμα), όσο και στις εικόνες υψηλής μεγέθυνσης (δεξιό σχήμα). Οι πλάκες αλουμινίου, όπου τοποθετήθηκε το CFRP με δυνατότητα TEG για να δημιουργηθεί θερμοκρασιακή μεταβολή, διακριτοποιήθηκαν με μήκος 0.002 m (2 mm) διότι δεν απαιτείται μεγάλη ακρίβεια στην επίλυσή εφ' ενός και αφ' ετέρου να γίνει οικονομία στην καταναλισκόμενη υπολογιστική μνήμη. Για τον γεωμετρικό τομέα των οκτώ (8) στρώσεων, μια διακριτοποίηση μήκους 0.0009 m (0.9 mm) χρησιμοποιήθηκε για κάθε ένα από τα 7 στρώματα του συνθέτου που βρίσκεται υπερκείμενο του πρώτου ενεργού στρώματος.

Η γεννήτρια TEG η οποία ενθυλακώνεται στο πρώτο στρώμα διακριτοποιήθηκε ως εξής: α) για τα κυλινδρικά θερμοστοιχεία CF χρησιμοποιήθηκε μήκος 0.0002 m (0.2 mm), ενώ για τα αγωγίμα σύρματα Cu υιοθετήθηκε μια διακριτοποίηση μήκους 0.0001 m (0.1 mm) για να μπορεί να αναπαραστήσει την περιοχή λεπτομερώς.

Ιδιαίτερη προσοχή δόθηκε στην περιοχή διεπαφής της ρητίνης με τα θερμοστοιχεία και τα καλώδια-σύρματα Cu. Εκεί χρησιμοποιήθηκε προσαρμοστικό πλέγμα (adaptive meshing) προκειμένου να εξασφαλιστούν λεπτομερέστερες διακριτοποιήσεις στις περιοχές διεπιφανειών. Τέλος, η περιοχή της ρητίνης διακριτοποιήθηκε με τετραεδρικά στοιχεία με μέγεθος ίσο με 0.0025 m . Ακολουθώντας την προαναφερθείσα διαδικασία δημιουργήθηκαν

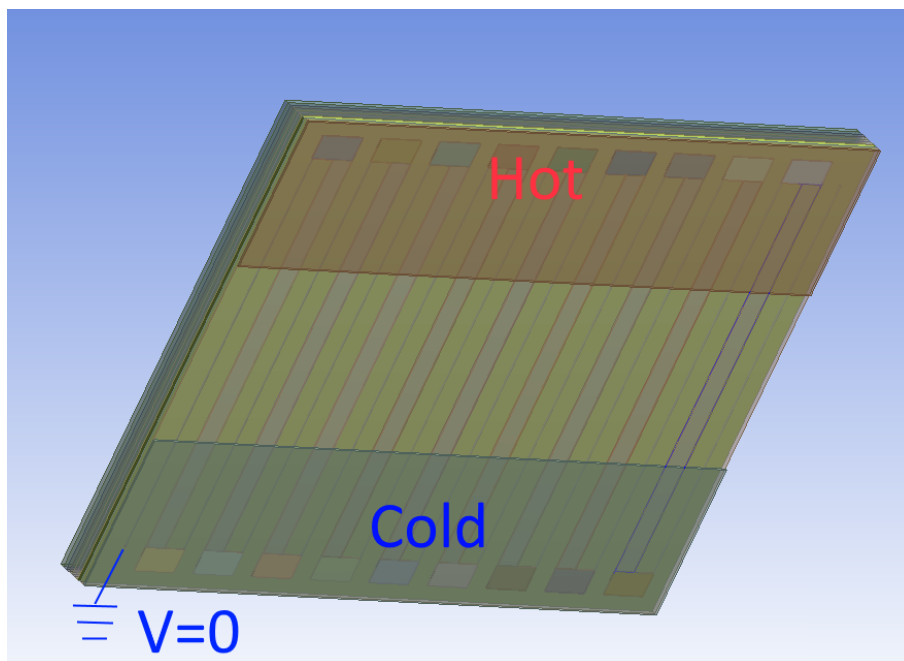


Σχήμα 3.3: Το δημιουργημένο πλέγμα του πολυστρωματικού CFRP με δυνατότητα TEG συνολικά οκτώ (8) στρώσεων, δέκα (10) θερμοστοιχείων στο κάτω στρώμα. Οι διαφορετικοί τομείς διακριτοποίησης είναι εμφανείς τόσο στις εικόνες χαμηλής μεγέθυνσης (αριστερά), όσο και στις εικόνες υψηλής μεγέθυνσης (δεξιά).

περίπου 437,000 κόμβοι με 120,000 πραγματικά στοιχεία (Σχήμα 3.3).

Πριν από τη διαδικασία αριθμητική επίλυσης, εφαρμόστηκαν οι προσήκουσες συνοριακές συνθήκες του προβλήματος οι οποίες αποτυπώνονται στο Σχήμα 3.4. Το ψυχρό στοιχείο (Cold) διατηρήθηκε σε θερμοκρασία 25 °C με το θερμό στοιχείο να μπορεί να αλλάζει τη θερμοκρασία του δημιουργώντας την απαραίτητη βαθμίδα θερμοκρασίας. Στο πρώτο θερμοστοιχείο αποδόθηκε τάση 0 V (γειωμένο άκρο) προκειμένου να κατευθύνεται η ροή της ηλεκτρικής ενέργειας που παράγεται από τη βαθμίδα θερμοκρασίας (ΔT). Με το γεωμετρικό πλέγμα να έχει δημιουργηθεί και τις συνοριακές συνθήκες να έχουν επιβληθεί έγινε επίλυση των συζευγμένων θερμοηλεκτρικών εξισώσεων με τη χρήση πεπερασμένων στοιχείων στο λογισμικό ANSYS. Στο σημείο αυτό θα πρέπει να αναφέρουμε πως στα πρώτα στάδια δοκιμάστηκαν και άλλοι διαθέσιμοι επιλυτές για λόγους επικύρωσης και συνέπειας των υπολογισμών. Τα αποτελέσματα μεταξύ των διαφορετικών επιλυτών κατέδειξαν εξαιρετική συμφωνία.

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι παρόμοια διαδικασία διακριτοποίησης ακολουθήθηκε για τις γεωμετρίες TEG που είναι απαραίτητες για την πολυπα-

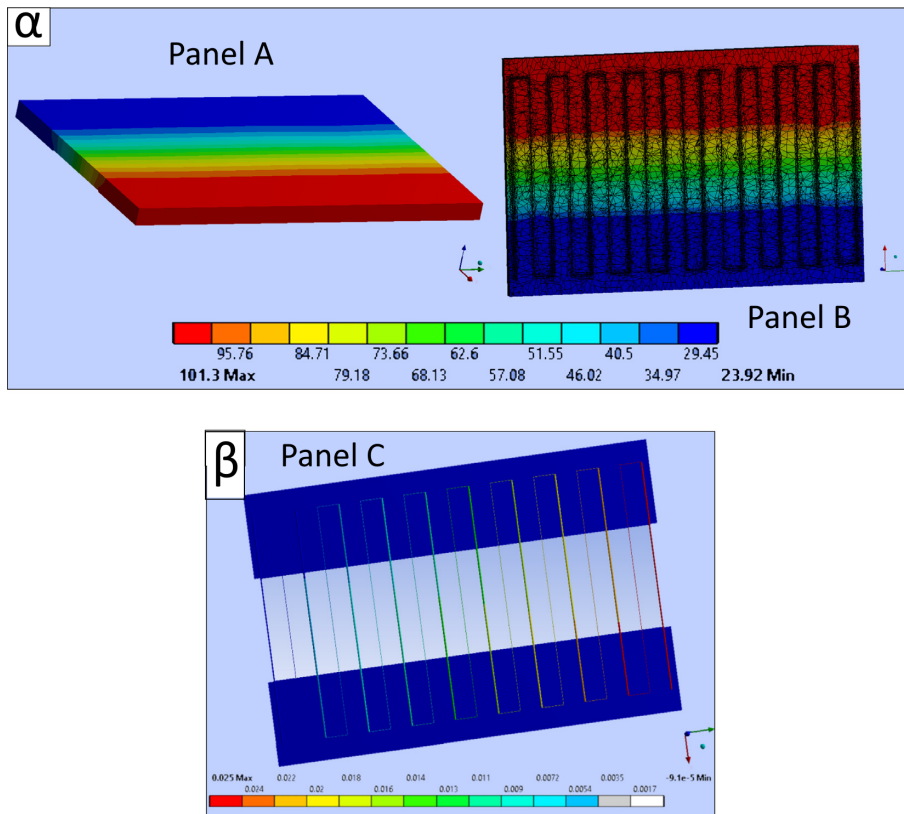


Σχήμα 3.4: Εφαρμοζόμενες συνοριακές συνθήκες που χρησιμοποιούνται στις αριθμητικές προσομοιώσεις πεπερασμένων στοιχείων.

ραμετρική μελέτη που βασικά προέρχονται από τις πειραματικές ανάγκες και τις απαιτήσεις σχεδιασμού.

3.3.2 Αριθμητική επίλυση του μοντέλου

Η αριθμητική επίλυση των συζευγμένων διαφορικών εξισώσεων που περιγράφουν το θερμοηλεκτρικό φαινόμενο επέτρεψε τη λεπτομερή προσομοίωση της προτεινόμενης συσκευής. Η συσκευή μελετήθηκε σε εύρος θερμοκρασιακής διαφοράς ΔT από 25 έως 75 °C. Η θερμοκρασία και το ηλεκτρικό δυναμικό υπολογίστηκε και καταγράφηκε στον εσωτερικό χώρο του συνθέτου. Στο Σχήμα 3.5 απεικονίζεται η κατανομή θερμοκρασίας για τις εξωτερικές και εσωτερικές περιοχές της συσκευής (Πάνελ Α και Β). Τα θερμοκρασιακά προφίλ καταδεικνύουν ομαλή κατανομή θερμοκρασιών μεταξύ των δύο πλακών. Η ομοιόμορφη πτώση της θερμοκρασίας δικαιολογείται πλήρως για το πρόβλημα αγωγής που λαμβάνει χώρα τόσο σε επίπεδο κάτω στρώματος όσο και σε επίπεδο ανώτερων στρωμάτων. Η



Σχήμα 3.5: (α) Κατανομή των θερμοκρασιών εντός του επιπέδου στην ορατή εξωτερική περιοχή της συσκευής CFRP - TEG με δέκα (10) θερμοστοιχεία (Πάνελ A) και σε τομή (Πάνελ B), που δείχνει την κατανομή θερμοκρασίας κατά μήκος και γύρω από τα θερμοστοιχεία. (β) Κατανομή του ηλεκτρικού δυναμικού κατά μήκος του TEG (Πάνελ C).

κατανομή ηλεκτρικού δυναμικού των θερμοστοιχείων στο στρώμα που φιλοξενεί το TEG -CFRP παρουσιάζεται στο Σχήμα 3.5 (Πάνελ C) που επίσης έχει την αναμενόμενη συμπεριφορά με την πτώση του δυναμικού καθώς κινούμαστε από το σημείο εκκίνησης που είναι το γειωμένο άκρο στο πρώτο θερμοστοιχείο στο τερματικό άκρο του τελευταίου θερμοστοιχείου.

3.3.3 Τάση εξόδου και μέγιστη ηλεκτρική ισχύς εξόδου

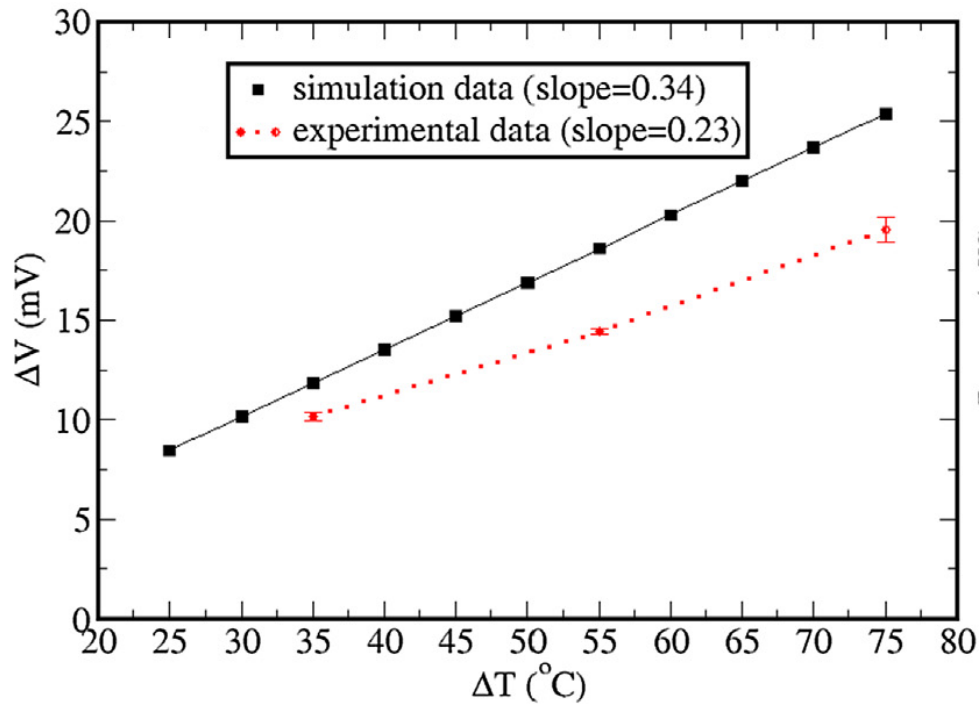
Στο Σχήμα 3.6 παρουσιάζεται η τάση εξόδου (ΔV) της CFRP - TEG ως συνάρτηση του ΔT που εφαρμόζεται στη συσκευή, υπολογιζόμενο από τα δεδομένα προσομοίωσης (μαύρη γραμμή), καθώς και τα πειραματικά μετρημένα (κόκκινη γραμμή με τις αντίστοιχες εκτιμήσεις σφάλματος). Για

τις πειραματικά μετρημένες ηλεκτρικές τάσεις, η συσκευή εκτέθηκε σε τρεις θερμοκρασιακές διαφορές ΔT 35, 55 και 75 °C, ενώ η τάση μετρήθηκε σε κάθε περίπτωση. Η μεγαλύτερη τάση που μετρήθηκε πειραματικά αντιστοιχεί σε διαφορά θερμοκρασίας 75 °C και η συνεπαγόμενη τάση εξόδου (ΔV) ήταν 19.56 mV.

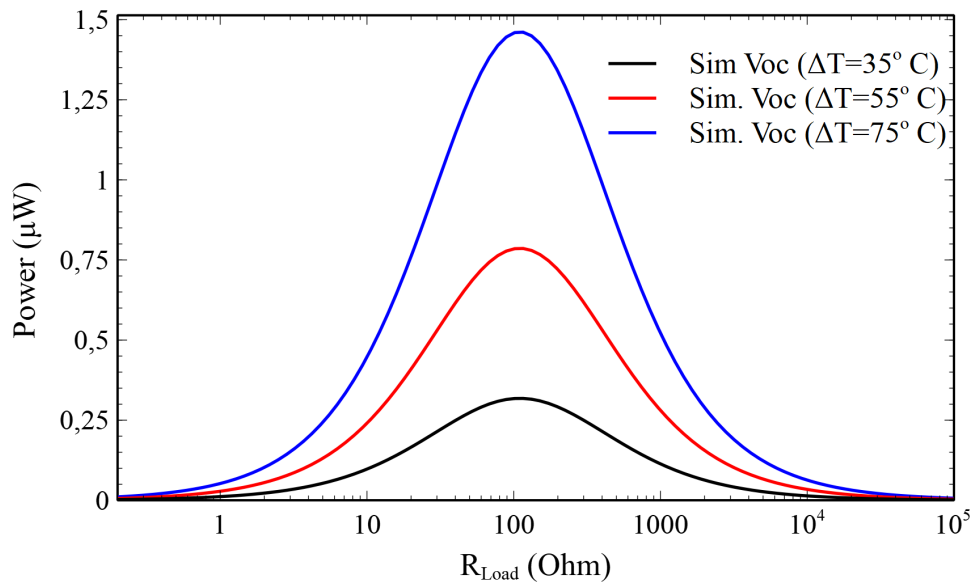
Η συνολική αντίσταση των 10 p τύπου σειριακά διασυνδεδεμένων ημιαγωγών πειραματικά μετρούμενη βρέθηκε ίση με $R_{TEG}=109.98 \Omega$. Σε ό,τι αφορά στο διάγραμμα προσομοίωσης, η διαφορά τάσης του πρώτου και τελευταίου θερμοστοιχείου της συσκευής υπολογίστηκε αφού η συσκευή εκτέθηκε σε διάφορες διαφορές θερμοκρασίας μεταξύ της θερμής και ψυχρής πλάκας, έγινε δηλαδή μια σειρά από αριθμητικές προσομοιώσεις όπου η υπολογίστηκε η διαφορά δυναμικού (ΔV) για ένα εύρος διαφορών θερμοκρασίας (ΔT). Όπως μπορεί να παρατηρηθεί, υπάρχει γραμμική εξάρτηση της τάσης εξόδου ΔV με τη διαφορά θερμοκρασίας ΔT , τόσο για την πειραματική, όσο και για τα αποτελέσματα της προσομοίωσης όπως αναμένεται άλλωστε. Η προαναφερθείσα τάση εξόδου (ΔV) καλείται και ως θερμοηλεκτρική τάση ισχύος (V_{TEP}) ή τάση ανοιχτού κυκλώματος (V_{oc}) ή τάση TEG (V_{TEG}). Μέσω της αριθμητικής προσομοίωσης, προσδιορίστηκε μια τάση εξόδου 25.36 mV για ($\Delta T = 75^\circ C$). Λαμβάνοντας υπόψη την τιμή του συντελεστή Seebeck του τύπου p CF-M40B ($+33.85 \pm 0.51 \mu V/K$), η μέγιστη αναμενόμενη τάση εξόδου σε $\Delta T=75^\circ C$ θα ήταν ιδανικά με μηδαμινές απώλειες (25.39 mV το αποτέλεσμα: $N \times S \times \Delta T$ όπου N : αριθμός θερμοστοιχείων).

Η μέγιστη ηλεκτρική ισχύς εξόδου (P_{max}) υπολογίστηκε σύμφωνα με το Θεώρημα μέγιστης μεταφοράς ισχύος (Jacobi's law):

$$P_{max} = \frac{(NS\Delta T)^2}{4R_0} = \frac{(\Delta V)^2}{4R_0} \quad (3.1)$$



Σχήμα 3.6: Τάση εξόδου (ΔV) ως συνάρτηση της διαφοράς θερμοκρασίας (ΔT) του CFRP με δυνατότητα TEG με 10 θερμοστοιχεία CF-M40B τύπου p (προσομοίωση και πειραματικά δεδομένα).



Σχήμα 3.7: Θερμοηλεκτρική ισχύς σε ΔT 35, 55 και 75 °C για μεταβαλλόμενες αντιστάσεις φορτίου. Η μέγιστη ισχύς των 1.46 μW στο $\Delta T=75$ °K εμφανίστηκε όταν το R_{Load} είναι ίσο με την εσωτερική αντίσταση TEG των 109.98 Ω .

$\Delta T (^{\circ}C)$	$V_{oc} (mV)$	$P_{max} (\mu W)$
35	11.83	0.32
55	18.60	0.79
75	25.36	1.46

Πίνακας 3.6: Συνοπτικά αποτελέσματα προσομοιώσεων.

όπου N είναι ο αριθμός των θερμοστοιχείων τύπου p , S ο συντελεστής Seebeck του CF-M40B, και ΔT είναι η διαφορά θερμοκρασίας. Το P_{max} είναι η μέγιστη απόδοση ηλεκτρικής ισχύος και το R_0 είναι η εσωτερική ηλεκτρική αντίσταση της γεννήτριας (εναλλακτικά αναφέρεται και R_{TEG}). Υπολογίστηκε επίσης η ισχύς για πολλές διαφορετικές αντιστάσεις φορτίου (R_{Load}) που απεικονίζονται στο Σχήμα: 3.7 σε τρεις διαφορετικές τιμές ΔT στις οποίες εκτέθηκε η συσκευή (35, 55 και 75 $^{\circ}C$). Η μέγιστη παραγωγή ισχύος ήταν 1.46 μW σε $\Delta T=75^{\circ}C$ και συμβαίνει όπως προαναφέρθηκε όταν η αντίσταση φορτίου συμπίπτει με την τιμή της εσωτερικής αντίστασης της συσκευής που είναι 109.98 Ω . Σε αυτή την αντίσταση φορτίου, αντιστοιχεί η θερμοηλεκτρική τάση ισχύος $V_{TEP} = 12.68 mV$, σε σύγκριση με ένα ανοιχτό κύκλωμα $V_{TEP} = 25.36 mV$ στο ίδιο ΔT .

Πάνω από την τιμή της αντίστασης $R_{Load} = 109.98 \text{ Ohm}$, το P μειώνεται όσο η αντίσταση φορτίου αυξάνει. Η τετραγωνική συμπεριφορά του V_{TEP} ήταν αναμενόμενη λόγω της γραμμικής τάση του V_{TEP} έναντι του ΔT όπως φαίνεται στο σχήμα 3.7, και τη σχέση:

$$P = \frac{V^2}{R}.$$

Ο Πίνακας 3.6 συνοψίζει τα αποτελέσματα από τις προσομοιώσεις: ανοιχτή τάση κυκλώματος V_{oc} καθώς και μέγιστης ηλεκτρικής ισχύος P_{max} του σύνθετου με δυνατότητα TEG σε ΔT 35, 55 και 75 $^{\circ}C$.

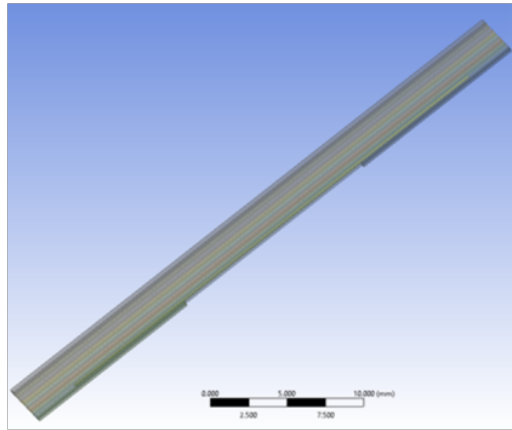
3.4 Παραμετρική ανάλυση προσομοιωμένης συσκευής

Στην ενότητα αυτή θα παρουσιαστεί η μεθοδολογία για την παραμετρική ανάλυση της απόδοσης της θερμοηλεκτρικής συσκευής με CF. Πρόκειται για μελέτη της απόδοσης της συσκευής αλλάζοντας διάφορες παραμέτρους σχεδιασμού όπως οι θερμικές αγωγιμότητες ρητινών, ο συντελεστής Seebeck των θερμοστοιχείων, οι διαστάσεις θερμοστοιχείων καθώς και οι αποστάσεις μεταξύ τους.

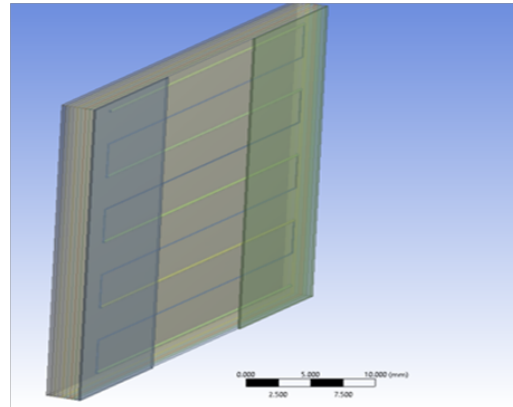
3.4.1 Γεωμετρικά χαρακτηριστικά προσομοιωμένων συσκευών

Η κύρια συσκευή που χρησιμοποιείται στην παρούσα μελέτη περιλαμβάνει δέκα (10) θερμοστοιχεία, για την κατασκευή και την επικύρωση του μοντέλου προσομοίωσης έχουν χρησιμοποιηθεί γεωμετρίες που περιλαμβάνουν ένα (1), πέντε (5) δέκα (10) και σαράντα (40) θερμοστοιχεία. Για σχεδιαστικούς σκοπούς έχουν επίσης χρησιμοποιηθεί και μοντελοποιηθεί θερμοηλεκτρικές συσκευές που περιλαμβάνουν έως και 90 θερμοστοιχεία.

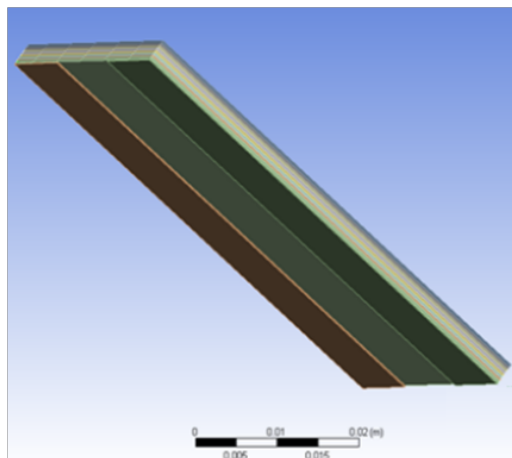
Ο Πίνακας 3.7 συνοψίζει διαφορετικές περιπτώσεις που μελετήθηκαν σε σχέση με τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των μοντελοποιημένων θερμοηλεκτρικών γεννητριών οι οποίες απεικονίζονται στο Σχήμα 3.8 .



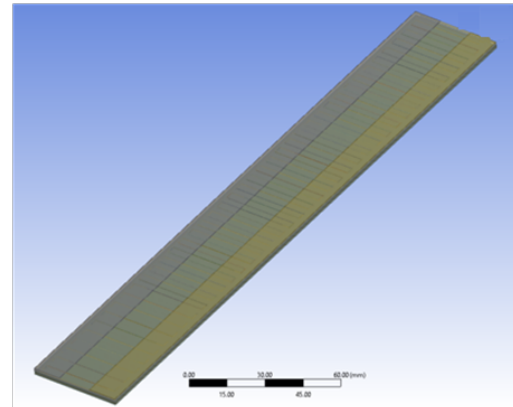
1 Θερμοστοιχείο



5 Θερμοστοιχεία



10 Θερμοστοιχεία.



40 Θερμοστοιχεία

Σχήμα 3.8: Μοντέλο γεωμετρίας της θερμοηλεκτρικής συσκευής με ποικίλο αριθμό θερμοζευγών που κυμαίνεται από 1 έως 40.

Πίνακας 3.7: Θερμοηλεκτρική γεννήτρια (TEG): εξωτερικές διαστάσεις και γεωμετρικά χαρακτηριστικά των θερμοστοιχείων.

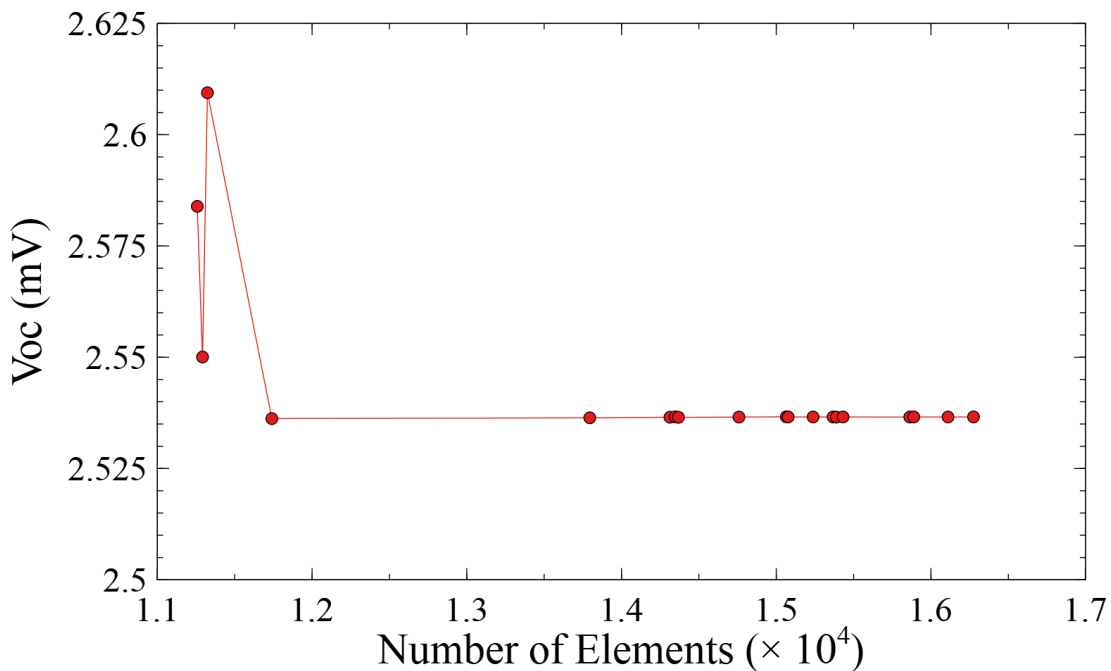
TEG's διαστάσεις (mm)	θερμοστοιχεία	Διάμετρος TE (mm)	Μήκος TE (mm)	Απόσταση μεταξύ θερμοστοιχείων (mm)	Πάχος C
40 × 60	10	0.245	33.4	6	0.1
40 × 2	1	0.245	33.4	0.05	0.1
40 × 30	5	0.245	33.4	0.05	0.1
40 × 240	40	0.245	33.4	0.05	0.1
40 × 60	10	0.245	33.4	3	0.1
40 × 60	10	0.245	33.4	3	1
40 × 60	10	0.245	33.4	3	2
40 × 60	10	0.245	33.4/2	3	2
40 × 60	10	0.245	33.4/2	3	1
40 × 60	10	0.245/2	33.4	6	0.1
40 × 60	10	0.245/2	33.4	6	1
40 × 60	10	0.245/2	33.4	3	2
40 × 60	10	0.245/2	33.4	6	2

Ο διαφορετικός αριθμός των χρησιμοποιούμενων θερμοστοιχείων και τα προκύπτοντα TEG παρουσιάζονται στο Σχήμα 3.8. Έχει διερευνηθεί η επίδραση διαφορετικών παραγόντων και παραμέτρων όπως η διάμετρος, το μήκος, η απόσταση μεταξύ των θερμοζευγών που καθορίζουν την πυκνότητα των θερμοζευγών (Density factor - df) εκτός από το πλάτος του χαλκού.

3.5 Περασμένα στοιχεία Προσομοίωση:Γεωμετρία - Διακριτοποίηση Συνοριακές συνθήκες - Διαδικασία επίλυσης - Σύγκλιση

3.5.1 Συνοριακές Συνθήκες

Πριν από τη διαδικασία επίλυσης, οι απαραίτητες συνοριακές συνθήκες δόθηκαν στον επιλυτή FEM. Στο Σχήμα 3.4 αναφέρθηκαν οι συνοριακές συνθήκες που εφαρμόζονται στο TEG. Το ‘ψυχρό’ στοιχείο διατηρήθηκε σε $T_{cold} = 25 \text{ }^\circ\text{C}$. Το πρώτο θερμοστοιχείο έχει τάση 0.0 V (γειωμένο) προκειμένου να κατευθύνει τη ροή της ηλεκτρικής ενέργειας που παράγεται από τη διαφορά θερμοκρασίας. Το ‘θερμό’ στοιχείο έχει σταθερή θερμοκρασία T_{hot} για τη συγκεκριμένη κατάσταση λειτουργίας της συσκευής. Για την προσομοίωση διαφορετικών συνθηκών λειτουργίας και κατά συνέπεια, μεταβαλλόμενες διαφορές θερμοκρασίας που εφαρμόζονται στη συσκευή TEG, οι τιμές T_{hot} μπορούν να ρυθμιστούν ανάλογα. Στην παρούσα μελέτη προσομοίωσης χρησιμοποιήθηκαν έντεκα (11) T_{hot} θερμοκρασίες ξεκινώντας από $50 \text{ }^\circ\text{C}$ έως $100 \text{ }^\circ\text{C}$ με βήμα αύξησης θερμοκρασίας $\Delta T = 5^\circ\text{C}$.



Σχήμα 3.9: Ανάλυση σύγκλισης FEM (παρακολουθείται η τάση εξόδου του TEG). Η συσκευή TEG αποτελείται από δέκα (10) θερμοστοιχεία με διάμετρο 0.254 mm, μήκος 33.4 mm. Οι p τύπου ημιαγωγοί είναι βυθισμένοι σε ρητίνη με θερμική αγωγιμότητα $0.682 \text{ W}/(\text{m}^\circ\text{C})$.

3.5.2 Διαδικασία Επίλυσης

Με τη γεωμετρία σωστά διακριτοποιημένη και εισαγωγή στον αριθμητικό επιλυτή της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων (FEM) και την εφαρμογή των κατάλληλων συνοριακών συνθηκών που ακολουθούν τις πειραματικές απαιτήσεις, η λύση των συζευγμένων μερικών διαφορικών εξισώσεων είναι το επόμενο βήμα. Οι πραγματικές αριθμητικές λύσεις FEM στα επιθυμητά προβλήματα σχεδίασης ελέγχονται ως προς τη σύγκλιση και τη συνοχή τους. Τα αποτελέσματα της ανάλυσης σύγκλισης σε σχέση με την τάση ανοιχτού κυκλώματος V_{oc} εμφανίζονται για ένα χαρακτηριστικό TEG στο Σχήμα 3.9 και αναδεικνύει-πιστοποιεί την αριθμητική ακρίβεια των προσομοιώσεων FE που πραγματοποιήθηκαν.

3.6 Αποτελέσματα-Συγκρίσεις με Πειραματικές μετρήσεις

Η αριθμητική λύση των συζευγμένων διαφορικών εξισώσεων που περιγράφουν το θερμοηλεκτρικό φαινόμενο επιτρέπει τη λεπτομερή προσομοίωση της απόδοσης της προτεινόμενης συσκευής σε διαφορετικές θερμοκρασίες για τη θερμή πλάκα. Οι κατανομές της θερμοκρασίας και του ηλεκτρικού δυναμικού παρακολουθούνταν στον διακριτοποιημένο χώρο της συσκευής όπως αναφέρθηκε στην επίλυση του προβλήματος των 10 θερμοστοιχείων. Οι αντιπροσωπευτικές κατανομές θερμοκρασίας εμφανίζονται στις εξωτερικές και εσωτερικές περιοχές της συσκευής στο **Σχήμα 3.5.α**. Οι θερμοκρασίες δείχνουν μια ομαλή κατανομή μεταξύ της ψυχρής και της θερμής πλάκας. Υπάρχει η ενδιάμεση περιοχή που φιλοξενεί τα θερμοστοιχεία, την ρητίνη και τα σύρματα χαλκού, όπου το προφίλ θερμοκρασίας αυξάνεται σταδιακά κατά τη διεύθυνση x που είναι η κατεύθυνση κατά μήκος των κυλινδρικών θερμοστοιχείων. Στο **Σχήμα 3.5.β** το υπολογιζόμενο ηλεκτρικό δυναμικό εμφανίζεται κατά μήκος των θερμοστοιχείων.

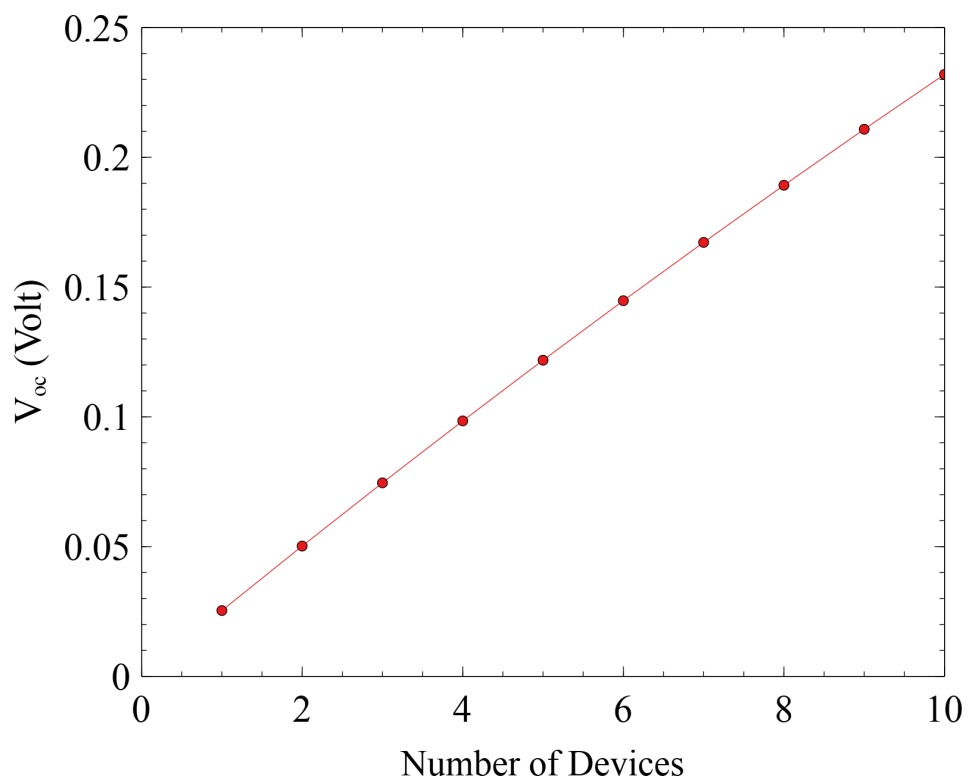
Η πτώση που παρατηρείται στις τιμές του ηλεκτρικού δυναμικού είναι σαφής μέσα από τα σειριακά συνδεδεμένα θερμοστοιχεία. Η διαφορά μεταξύ της υψηλότερης και της ελάχιστης τάσης σχετίζεται άμεσα με την τάση ανοιχτού κυκλώματος της συσκευής TEG και μπορεί να υπολογιστεί άμεσα. Το **Σχήμα 3.6** δείχνει τη διαφορά τάσης εξόδου του (CFRP) σε σχέση με τις μεταβολές της θερμοκρασίας (ΔT), όπως υπολογίζεται από τα δεδομένα προσομοίωσης. Το CFRP με δυνατότητα TEG αποτελείται από 10 σειριακά διασυνδεδεμένα ημιαγώγιμα θερμοστοιχεία τύπου p με χάλκινα σύρματα, με αποτέλεσμα τη συνολική ωμική αντίσταση R_{TEG} . Οι ηλεκτρικές αγωγιμότητες - αντιστάσεις των ινών χαλκού και άνθρακα είναι γνωστές οπότε η χρήση της εξίσωσης

$$R_{TEG} = n\rho_{TH-couple} \frac{L_{TH-couple}}{A_{TH-couple}} + (n-1)\rho_{Cu} \frac{L_{Cu}}{A_{Cu}} \quad (3.2)$$

όπου ρ ειδική ηλεκτρική αντίσταση (Ωm), n ο αριθμός των θερμοστοιχείων στη γενική περίπτωση, L το μήκος του θερμοστοιχείου ή του χαλκού (m) και A η διατομή του θερμοστοιχείου ή του χαλκού (m^2) παρέχει την πραγματική αριθμητική τιμή του R_{TEG} που απαιτείται για τους υπολογισμούς ηλεκτρικών μεγεθών. Επιπλέον, το θεώρημα μεταφοράς μέγιστης ισχύος δηλώνει ότι για να ληφθεί μέγιστη εξωτερική ισχύς από μια πηγή με πεπερασμένη εσωτερική αντίσταση, η αντίσταση του φορτίου πρέπει να ισούται με την αντίσταση της πηγής όπως φαίνεται από τους ακροδέκτες εξόδου της. Από το θεώρημα μεταφοράς μέγιστης ισχύος, η πραγματική μέγιστη ισχύς P_{max} μπορεί να υπολογιστεί εύκολα: η μέγιστη ισχύς της προτεινόμενης συσκευής είναι ίση με $P_{max} = (V_{TEG}^2)/(4R_{TEG})$ όπου V_{TEG} είναι η πραγματική τάση ανοιχτού κυκλώματος (V_{oc}) ή διαφορά δυναμικού (ΔV).

Η διαφορά δυναμικού (ΔV) μεταβάλλεται γραμμικά με τη διαφορά θερμοκρασίας (ΔT), όπως αναμενόταν θεωρητικά, με την κλίση να είναι ίση με το συντελεστή Seebeck. Αυτά τα αποτελέσματα αποδεικνύουν τη συνέπεια και την ευρωστία της αναπτυγμένης μεθοδολογίας προσομοίωσης. Επιπλέον, οι υπολογισμένες τάσεις εξόδου είναι σε καλή συμφωνία με τις μετρούμενες τάσεις λαμβάνοντας υπόψη τις θερμικές και ηλεκτρικές απώλειες που υπάρχουν στην πειραματική διαδικασία.

Κατά τη φάση της προσομοίωσης παραγωγής, η οποία εκτελούνταν σε παράλληλο χρόνο με την πειραματική ανάπτυξη των συσκευών TEG, έχουν διεξαχθεί προσομοιώσεις (όχι μόνο για λόγους αυτοσυνέπειας) για πολλαπλές συσκευές TEG διασυνδεδεμένες σειριακά. Οι διαφορές τάσης για συσκευές που η καθεμία αποτελείται από δέκα (10) θερμοστοιχεία και σειριακή σύνδεση δίνονται στο **Σχήμα 3.10**. Όπως αναμένεται, η τάση εξόδου



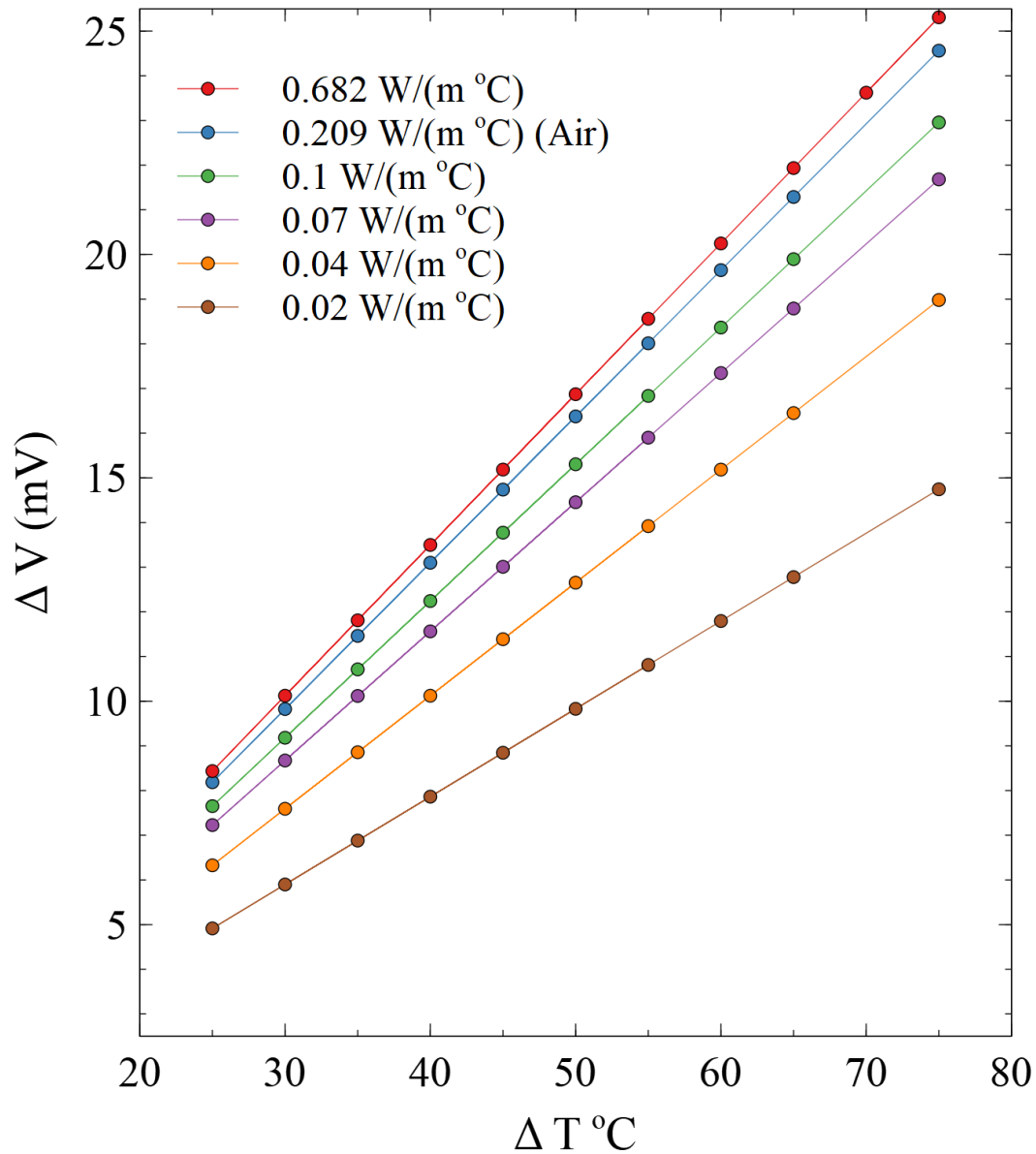
Σχήμα 3.10: V_{oc} για συσκευές σε σειριακή σύνδεση που η καθεμία αποτελείται από δέκα (10) θερμοστοιχεία.

μεταβάλλεται γραμμικά με τον αριθμό των συσκευών και για 9 συσκευές (90 θερμοστοιχεία) μπορεί να επιτευχθεί τάση κοντά στα 0.23V.

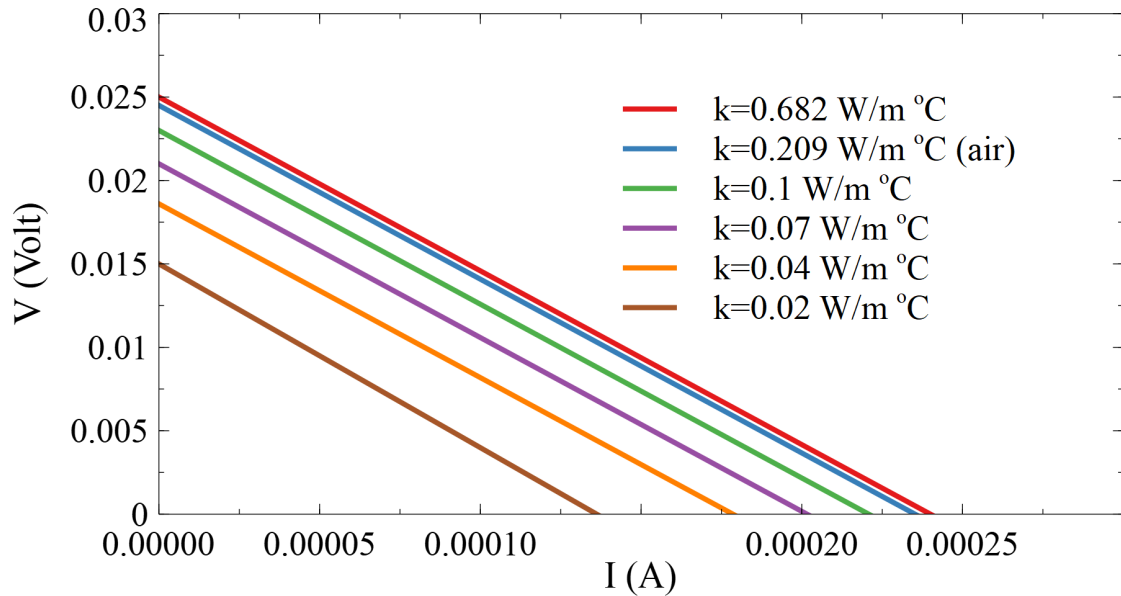
3.7 Αποτελέσματα - Επίδραση ιδιοτήτων υλικού

Τα πειραματικά πρωτόκολλα της συσκευής TEG και οι διαδικασίες ανάπτυξης απαιτούν εκτεταμένη χρήση διαφορετικών σε ορισμένες περιπτώσεις πολυμερικών ρητινών. Η αγωγή της θερμότητας γίνεται μέσω της ρητίνης η οποία γεμίζει τον κενό χώρο μεταξύ των θερμοζευγών (στο πρώτο στρώμα όπου λαμβάνουν χώρα τα βασικά φυσικά θερμοηλεκτρικά φαινόμενα) και χρησιμεύει ως κόλλα πολλαπλών χρήσεων για το πολυστρωματικό CFRP με δυνατότητα TEG οκτώ (8) στρώσεων). Αρχικές υλοποιήσεις με διαφορετικές παραμέτρους σχεδιασμού και ιδιοτήτων υλικών κατέδειξαν ισχυρή εξάρτηση τόσο των θερμοηλεκτρικών αποκρίσεων όσο και της δομικής ακεραιότητας. Οι πολυμερικές ρητίνες διαδραμάτιζαν πάντα ουσιαστικό λόγο.

Οι διαδοχικές βελτιώσεις του μοντέλου προσομοίωσης και ο βέλτιστος έλεγχος της διαδικασίας κατασκευής TEG σημαντικές δυσχέρειες που είχαν ως αποτέλεσμα αυξημένες απώλειες και τη μειωμένη απόδοση σε ό,τι αφορά στην παραγόμενη τάση εξόδου καθώς και στη δομική ακεραιότητα της συσκευής. Οι ιδιότητες της πολυμερικής ρητίνης μαζί με τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά που επηρεάζουν τη διαμόρφωση του θερμοστοιχείου στο στρώμα TEG έχουν αποδειχθεί σημαντικές όσον αφορά στην απόδοση της τελικής συσκευής. Έχουν διεξαχθεί αναλύσεις για την τάση εξόδου της συσκευής σε σχέση με τη θερμική αγωγιμότητα της πολυμερούς ρητίνης και τη διάμετρο του θερμοστοιχείου. Η τάση εξόδου, όπως φαίνεται στο **Σχήμα 3.11** εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από τη ρητίνη που χρησιμοποιείται για την κατασκευή της μονάδας TEG. Όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή αγωγιμότητας τόσο μεγαλύτερη είναι η τάση εξόδου της γεννήτριας.



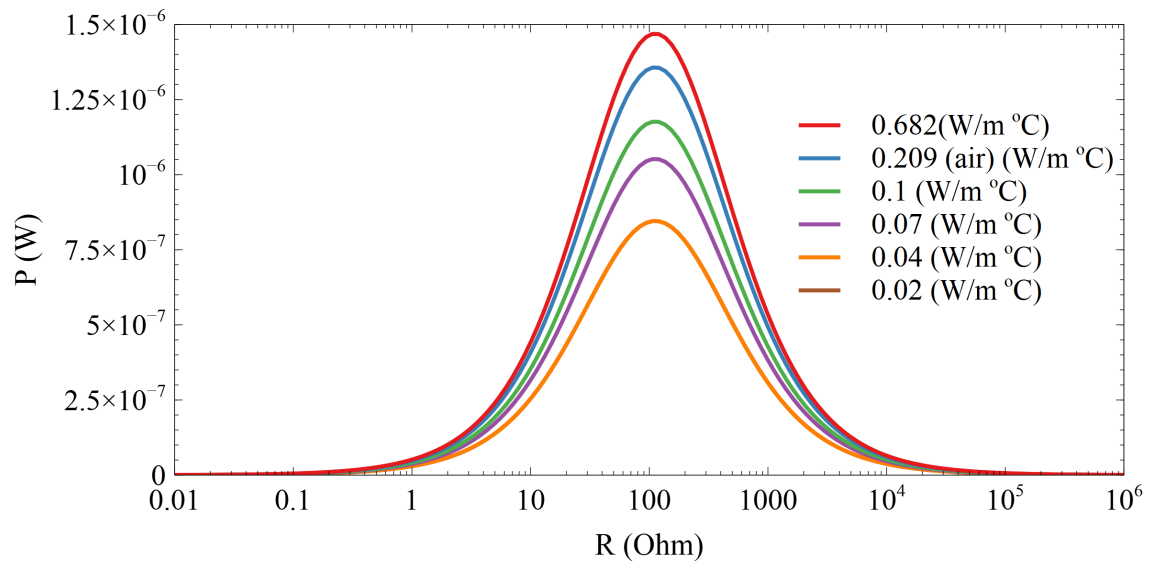
Σχήμα 3.11: Τάση εξόδου ΔV ως συνάρτηση του ΔT για TEG που έχει πληρωθεί με αέρα ή ρητίνες που έχουν διαφορετικές τιμές θερμικής αγωγιμότητας. Η συσκευή TEG φιλοξενεί δέκα (10) θερμοστοιχεία με απόσταση 6 mm μεταξύ των θερμοστοιχείων, πλάτος χαλκού 1 mm, διάμετρο θερμοστοιχείου 0.156 mm και μήκος 33.4 mm.



Σχήμα 3.12: Χαρακτηριστική $V - I$ για TEG που έχει πληρωθεί με αέρα ή ρητίνες που έχουν διαφορετικές τιμές θερμικής αγωγιμότητας. Η συσκευή TEG φιλοξενεί δέκα (10) θερμοστοιχεία με απόσταση 6 mm μεταξύ των θερμοστοιχείων, πλάτος χαλκού 1 mm, διάμετρο θερμοστοιχείου 0.156 mm και μήκος 33.4 mm.

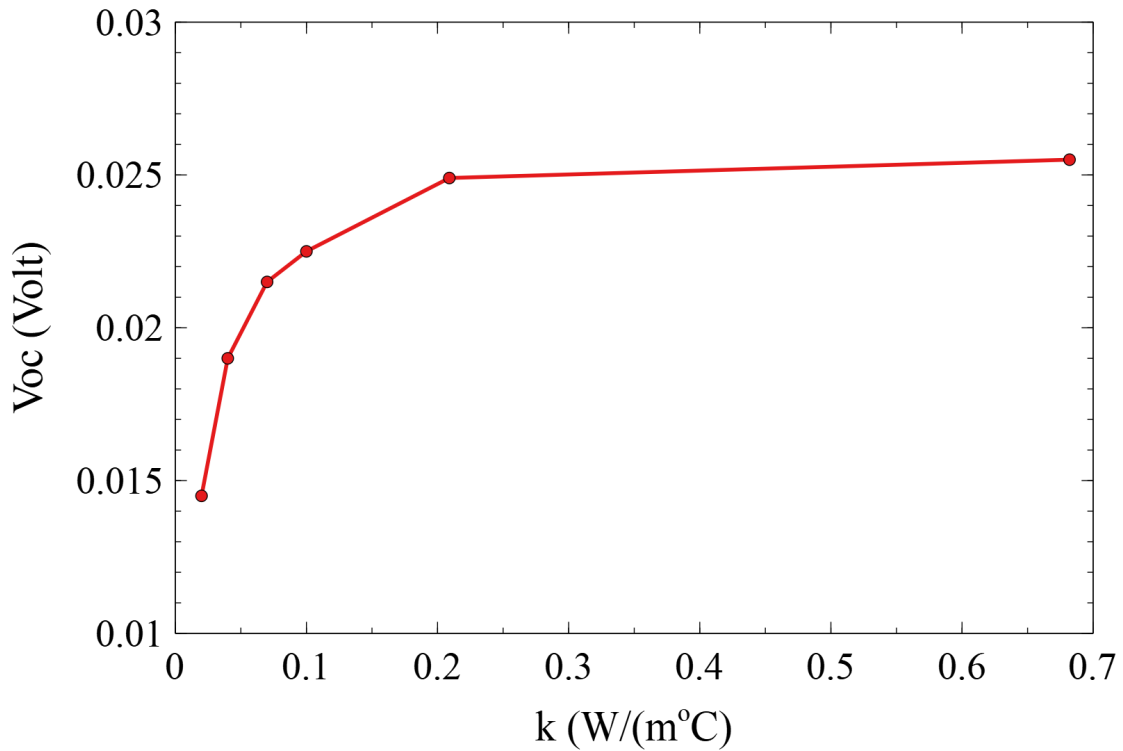
Τα υπολογιζόμενα χαρακτηριστικά $V - I$ και η ηλεκτρική ισχύς (P) που δίνονται από τη σχέση $P = VI = V^2/R$ ως συνάρτηση της αντίστασης φορτίου R για TEG φαίνονται στα **Σχήματα 3.12 και 3.13** για συσκευή TEG με μέσο πλήρωσης αέρα αλλά και διαφορετικές ρητίνες με διάφορες θερμικές αγωγιμότητες. Τα αποτελέσματα που εμφανίζονται έχουν υπολογιστεί για $T_{hot} = 100^\circ C$ δίνοντας μια διαφορά θερμοκρασίας $\Delta T = 75^\circ C$. Η πραγματική συσκευή TEG φιλοξενεί 10 στοιχεία με απόσταση 6 mm μεταξύ των θερμοστοιχείων, πλάτος χαλκού 1 mm, διάμετρο θερμοστοιχείου 0.156 mm και μήκος 33.4 mm. Η κλίση των χαρακτηριστικών $V - I$ δίνει την τιμή R_{TEG} . Είναι προφανές ότι η θερμική αγωγιμότητα της ρητίνης πλήρωσης παίζει σημαντικό ρόλο στη συνολική απόδοση της συσκευής TEG. Αντικατοπτρίζεται τόσο στα διαγράμματα $V - I$ καθώς και στα διαγράμματα παραγωγής ισχύος του προτεινόμενου κατασκευασμένου μοντέλου. Ως άμεσο συμπέρασμα προκύπτει ότι η αύξηση της θερμικής αγωγιμότητας αυξάνει

της τάση εξόδου και συνεπώς την παραγωγή ισχύος. Για τη ρητίνη με την



Σχήμα 3.13: Ισχύς ως συνάρτηση της αντίστασης φορτίου για TEG που έχει πληρωθεί με αέρα ή ρητίνες που έχουν διαφορετικές τιμές θερμικής αγωγιμότητας. Η συσκευή TEG φιλοξενεί δέκα (10) θερμοστοιχεία με απόσταση 6 mm μεταξύ των θερμοστοιχείων, πλάτος χαλκού 1 mm, διάμετρο θερμοστοιχείου 0.156 mm και μήκος 33.4 mm.

υψηλότερη θερμική αγωγιμότητα $k = 0.682 \text{ W/m}^\circ\text{C}$ και έτσι με υψηλότερα χαρακτηριστικά V_{oc} και ισχύος P , οι πραγματικές τιμές των V_{oc} για διαφορά θερμοκρασίας του $\Delta T = 75^\circ\text{C}$ απεικονίζονται στο Σχήμα 3.14. Είναι ενδιαφέρον ότι η εξάρτηση V_{oc} από τη θερμική αγωγιμότητα δείχνει μια σχεδόν γραμμική συμπεριφορά για χαμηλές τιμές k έως $k = 0.1 \text{ W/m}^\circ\text{C}$. Περαιτέρω αύξηση της θερμικής αγωγιμότητας στη τιμή αγωγιμότητας του αέρα και πέραν αυτού προκαλεί την τάση ανοιχτού κυκλώματος V_{oc} να αναπτύξει μια περιοχή οροπεδίου με την υψηλότερη τιμή των V_{oc} περίπου 0.025 V όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.14. Δύο περιπτώσεις διαμέτρου $D=0.156 \text{ mm}$ και $D=0.254 \text{ mm}$ (που αντιστοιχούν σε διαμέτρους κατασκευασμένων θερμοζευγών) αναλύθηκαν για πέντε διαφορετικές θερμικές αγωγιμότητες ρητινών [0.682, 0.209, 0.01, 0.07 και 0.04] $\text{W}/(\text{m}^\circ\text{C})$. Τα αποτελέσματα εμφανίζονται στα Σχήματα 3.15 και 3.16. Σε όλες τις θερμικές αγωγι-

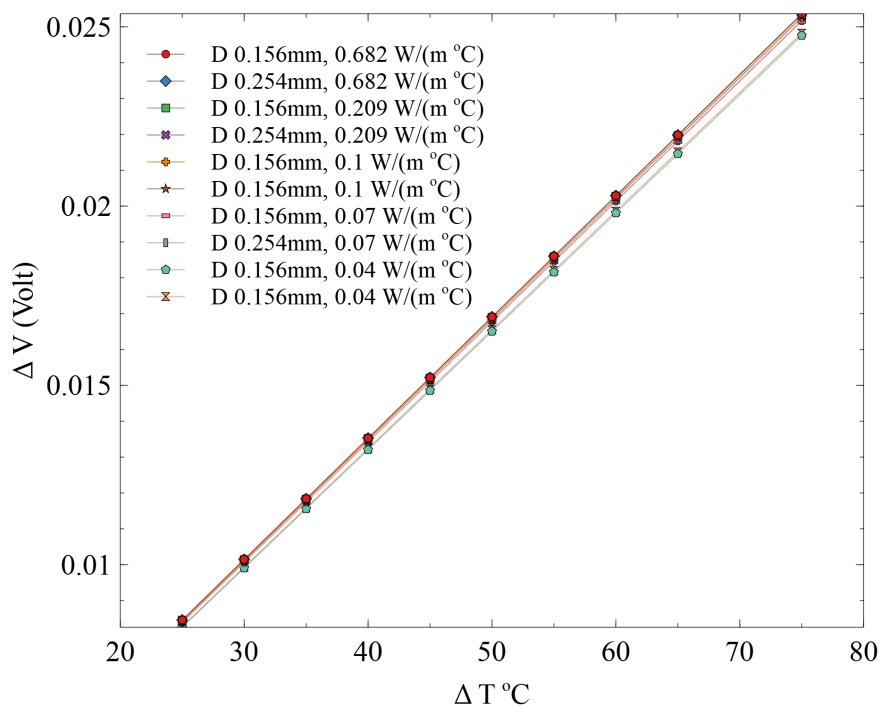


Σχήμα 3.14: Τάση ανοιχτού κυκλώματος (V_{oc}) σε Volt ως συνάρτηση της θερμικής αγωγιμότητας της ρητίνης (k) σε $W/(m^{\circ}C)$ για διαφορά θερμοκρασίας $\Delta T=75^{\circ}C$.

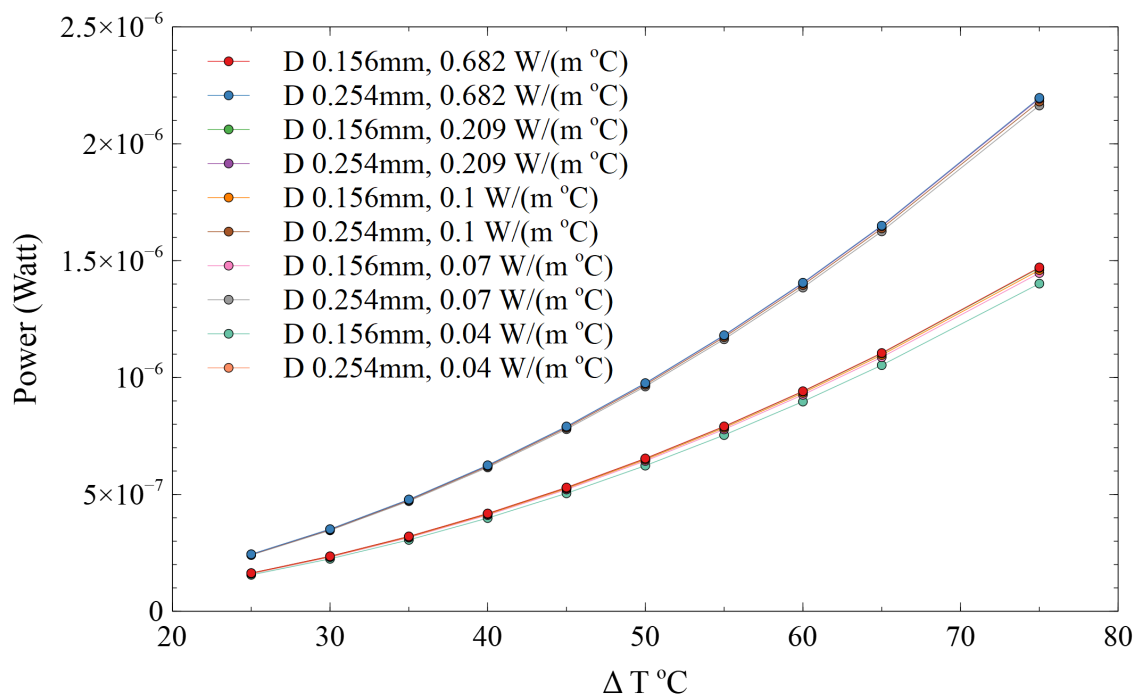
μότητες υπήρχε μια αμελητέα διαφορά στην τάση ανοιχτού κυκλώματος V_{oc} μεταξύ των δύο διαμέτρων που οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η διάμετρος δεν επηρεάζει την τάση ανοιχτού κυκλώματος αλλά επηρεάζει τη μέγιστη ισχύ $P_{max} = (V_{TEG}^2)/(4R_{TEG})$ καθώς η συνολική αντίσταση αυξάνεται μειώνοντας τη διάμετρο για $\Delta T = 75^{\circ}C$.

3.8 Μοντελοποίηση συσκευής TEG με χρήση τεχνητών νευρωνικών δικτύων (ANN)

Στο επίπεδο σχεδιασμού της θερμοηλεκτρικής γεννήτριας, η ανάγκη για βέλτιστη απόδοσή της είναι επιτακτική. Υπάρχει επίσης η απαίτηση του



Σχήμα 3.15: $\Delta V - \Delta T$ για διάφορες διαμέτρους (D) θερμοστοιχείων και τιμές αγωγιμότητας πολυμερικής ρητίνης.

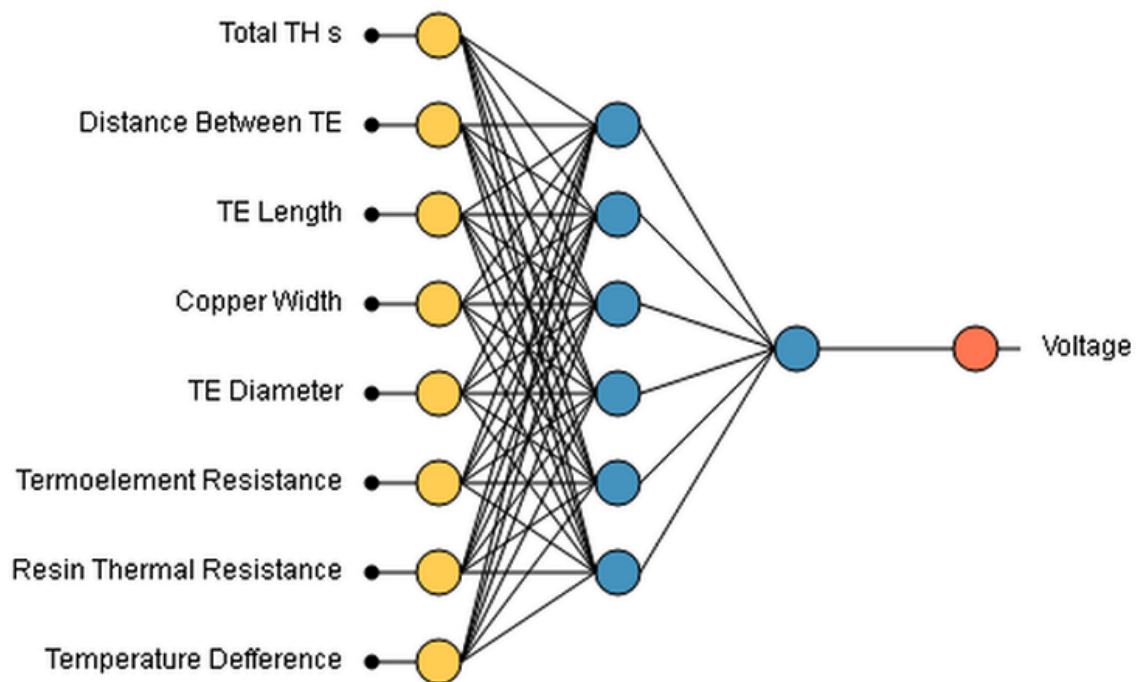


Σχήμα 3.16: $P_{max} - \Delta T$ για διάφορες διαμέτρους (D) θερμοστοιχείων και τιμές αγωγιμότητας για την πολυμερική ρητίνη.

σχεδιαστή να έχει στη διάθεσή του χαρακτηριστικά λειτουργίας σε περίπτωση τροποποίησης ορισμένων από τις πολλές παραμέτρους που προφανώς εμπλέκονται σε μια τέτοια συσκευή κάτι που ενδεχομένως μπορεί να απαιτήσει επανασχεδιασμό της γεωμετρίας και πλήρη επανάληψη των απαραίτητων υπολογισμών. Τα υλικά και γεωμετρικά χαρακτηριστικά των θερμοζευγών, η μεταξύ τους απόσταση, οι ωμικές συνδέσεις τους, η θερμική αγωγιμότητα της ρητίνης είναι μερικές από τις παραμέτρους που μπορούν και παίζουν σημαντικό ρόλο στη λειτουργία της (Σχήμα: 3.17).

Η διαδικασία σχεδιασμού μιας ηλεκτρικής γεννήτριας από το μηδέν είναι μια απαιτητική διαδικασία κατά την οποία η συσκευή ανάλογα με την πολυπλοκότητα μπορεί να χρειαστεί διευρυμένο χρονικό διάστημα για την υλοποίησή - επίλυσή της. Αν υποθεθεί ότι απαιτείται μια παραμετρική μελέτη τότε ο χρόνος - κόστος σχεδιασμού δεν είναι αμελητέος. Ενδεικτικά μπορούμε να αναφέρουμε πως η μοντελοποίηση μιας δοκιμαστικής πειραματικής συσκευής απαιτούσε πέρα από την ρεαλιστική σχεδίαση στον υπολογιστή, την ορθή φόρτωση της γεωμετρίας στο λογισμικό διακριτοποίησης και στη συνέχεια στον επιλυτή πεπερασμένων στοιχείων πάρα πολλούς ελέγχους πιστότητας και εγκυρότητας του μοντέλου πριν την τελική εκτέλεση. Επιπλέον και η ίδια η επίλυση και εκτέλεση είναι απαιτητική ως προς τους υπολογιστικούς πόρους. Ενδεικτικά αναφέρονται ότι για μια υλοποίηση θερμοηλεκτρικής συσκευής που προσομοιώθηκε απαιτήθηκαν περίπου 1 λεπτό για την δημιουργία των πεπερασμένων στοιχείων meshing καθώς και περίπου 5 λεπτά για την επίλυσή του απαιτώντας περίπου 4.5-10 Gb μνήμης τα οποία αυξάνονται τουλάχιστο με κυβικό ρυθμό σε σχέση με την διάσταση των πεπερασμένων στοιχείων.

Στην παρούσα εργασία, οι τεχνικές νευρωνικών δικτύων υιοθετήθηκαν χρησιμοποιώντας λογισμικό και υπολογιστικά εργαλεία από το Tensor Flow της Google (στα πρώτα στάδια της προβλεπτικής διαδικασίας) και το Mat-



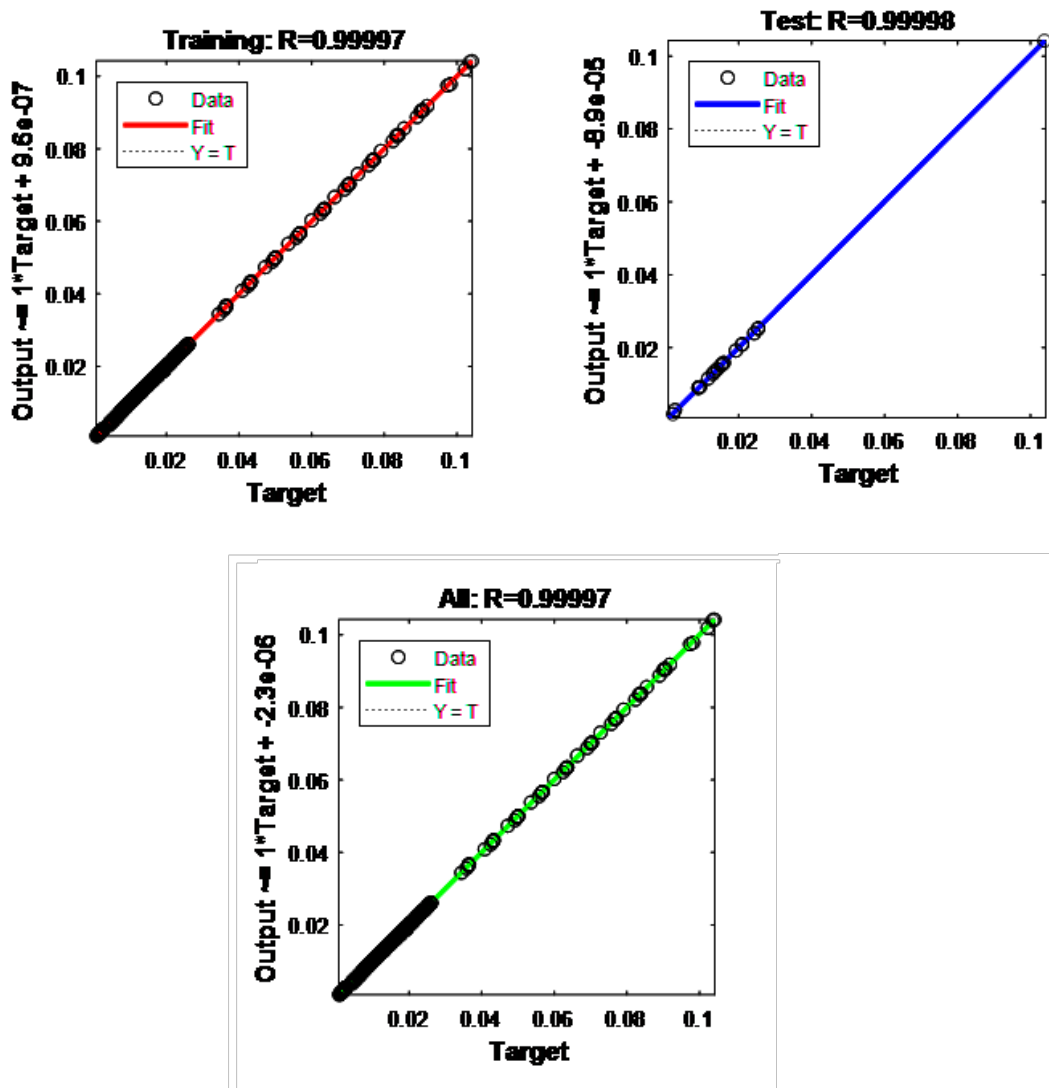
Σχήμα 3.17: Αντιπροσωπευτική αρχιτεκτονική ANN που χρησιμοποιείται για την πρόβλεψη τάσης εξόδου.

Lab της MathWorks για να μοντελοποιήσουν την πρόβλεψη και την εκτίμηση των ηλεκτρικών χαρακτηριστικών της συσκευής. Επιλέχθηκε η ακόλουθη τοπολογία νευρωνικού δικτύου: οκτώ (8) νευρώνες εισόδου, έξι (6) νευρώνες στο μοναδικό κρυφό επίπεδο και μία (1) έξοδος. Ο αριθμός των θερμοστοιχείων, η απόσταση, το μήκος και η διάμετρός τους, η θερμική αγωγιμότητα της ρητίνης συσχετίστηκαν για την εκτίμηση της τάσης εξόδου της συσκευής για ενδιάμεσες τιμές παραμέτρων.

Σχεδιάστηκε και εφαρμόστηκε ένα υπολογιστικό σχήμα για την πρόβλεψη της τάσης εξόδου συσκευών με δεδομένα που αντλήθηκαν από τις προσομοιώσεις των πεπερασμένων στοιχείων. Η αρχιτεκτονική ANN που δημιουργήθηκε για την πρόβλεψη εμφανίζεται στο Σχήμα 3.17. Το νευρωνικό δίκτυο που αναπτύχθηκε χρησιμοποιεί για το στρώμα εισόδου του: Συνολικά θερμοστοιχεία, η απόσταση μεταξύ των θερμοστοιχείων, το μήκος τους, η διάμετρος και η αντίσταση των θερμοστοιχείων, το πλάτος των συνδέσεων

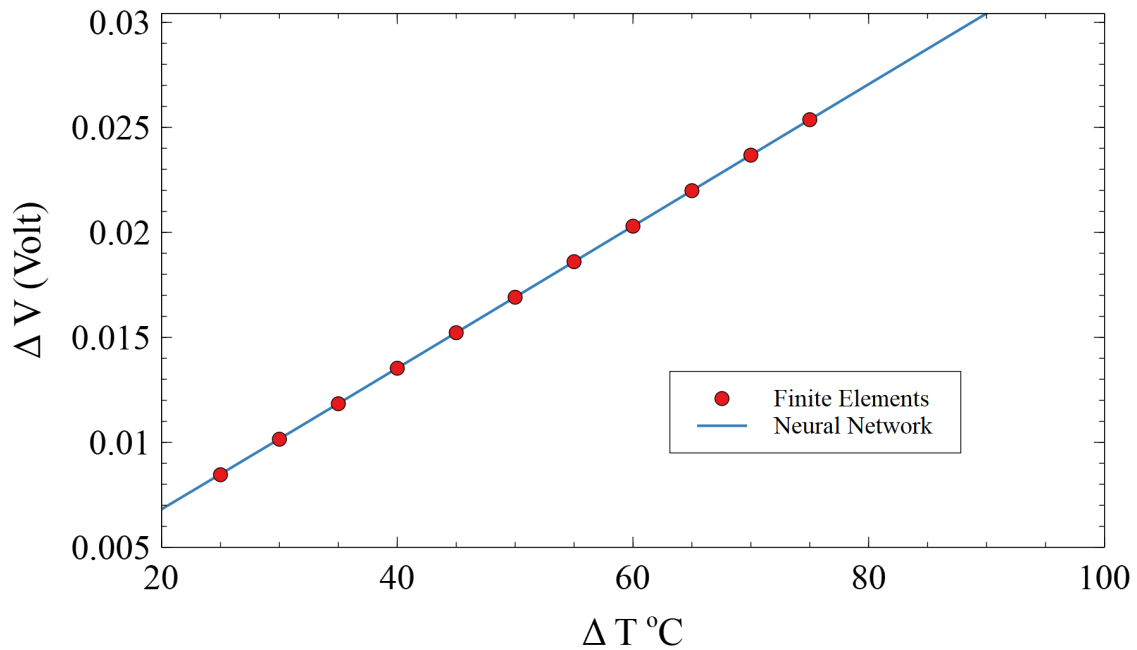
C_u , η θερμική αγωγιμότητα ρητίνης και η βαθμίδα θερμοκρασίας (ΔT). Στην παρούσα μελέτη χρησιμοποιήθηκε ένα κρυφό επίπεδο. Το επίπεδο εξόδου του δικτύου παρέχει μόνο την τιμή της τάσης της συσκευής V_{oc} . Η συνάρτηση ενεργοποίησης που χρησιμοποιείται είναι η συνάρτηση \tanh , η οποία είναι μια συνάρτηση σιγμοειδούς τύπου, που χρησιμοποιείται ευρέως στην προγνωστική μοντελοποίηση ANN λόγω της ικανότητάς της να περιγράφει μη γραμμικά προβλήματα. Ο αλγόριθμος εκμάθησης του ANN κατά το στάδιο της εκπαίδευσης που χρησιμοποιείται στην παρούσα μελέτη είναι ο αλγόριθμος της backpropagation. Ο στόχος της λειτουργίας εκπαίδευσης δικτύου είναι να ενημερώσει τα βάρη και την προκατάληψη με τέτοιο τρόπο που να ελαχιστοποιεί κάποια συνάρτηση κόστους. Η εκπαίδευση γίνεται όταν ελαχιστοποιείται η συνάρτηση κόστους, στην περίπτωσή μας είναι το Sum Squared Error (SSE). Συγκεκριμένα στον αλγόριθμο backpropagation κάθε σύνολο δεδομένων x εισάγεται στο νευρωνικό δίκτυο και υπολογίζεται η απόκριση \hat{y} . Το σφάλμα $\hat{e} = \hat{y} - y$ στη συνέχεια διαδίδεται προς τα πίσω και τα βάρη διορθώνονται με τέτοιο τρόπο ώστε να μειωθεί το τρέχον σφάλμα. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται για όλα τα x και για πολλές ολοκληρωμένες επαναλήψεις της διαδικασίας εκπαίδευσης του τεχνητού νευρωνικού δικτύου (epochs). Αυτή η μέθοδος είναι πολύ γενική και καλύπτει τα περισσότερα προβλήματα [3].

Για την παρούσα διαδικασία προγνωστικής μοντελοποίησης αναπτύχθηκε ένας κώδικας με βάση τη βιβλιοθήκη Neural Net Fit - MATLAB [4]. Το σύνολο των βαρών w ακολουθεί μια τυχαία αρχικοποίηση και διορθώνεται μετά από κάθε επανάληψη- epoch σύμφωνα με τον backpropagation αλγόριθμο. Ο αριθμός των μέγιστων (epochs) ορίστηκε στις 3000. Ο αριθμός αυτός αποδείχτηκε επαρκής. Στην πράξη δεν επιτυγχάνονται όλες αυτές οι επαναλήψεις επειδή το κριτήριο MU [4] επιτυγχάνεται πρώτα, πραγματοποιούνται περίπου 1000 επαναλήψεις.



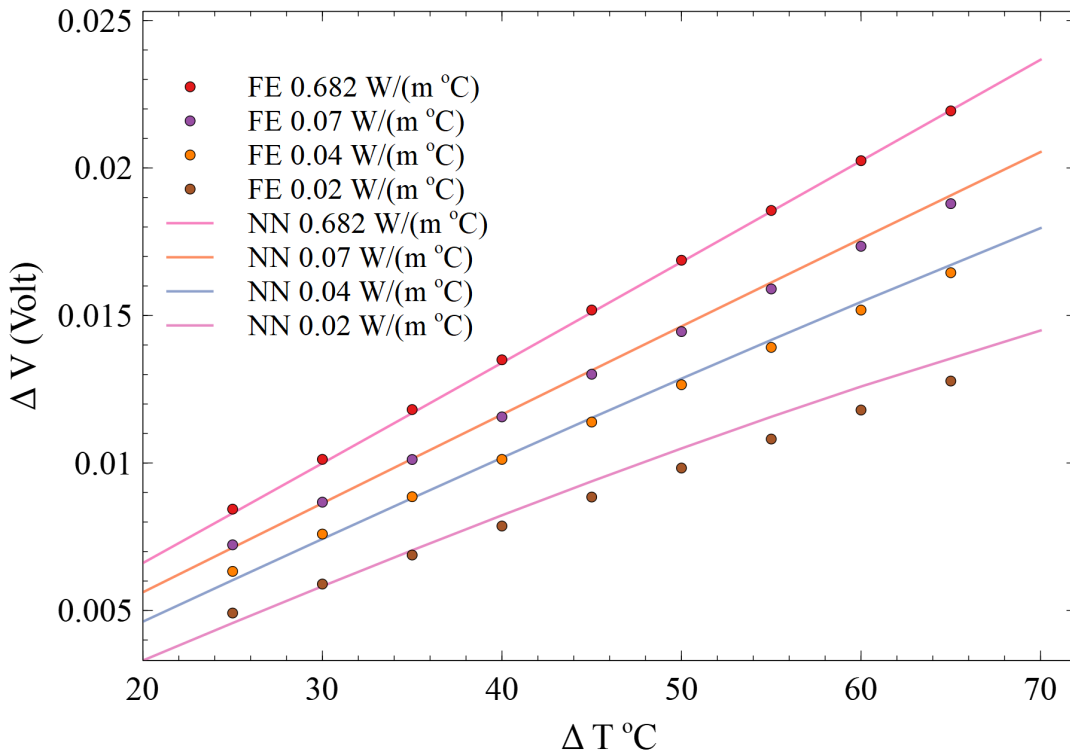
Σχήμα 3.18: Γράφημα παλινδρόμησης για σετ εκμάθησης (πάνω αριστερά), δοκιμαστικό σύνολο (πάνω δεξιά) και σύνολο (κάτω).

Η εκπαίδευση του ANN απαιτούσε 8 έως 10 δευτερόλεπτα για να εκτελεστεί. Η διαδικασία εκπαίδευσης ολοκληρώθηκε με τιμή $SSE = 28.9$ και συντελεστή συσχέτισης για την κατάσταση εκπαίδευσης $R = 0.9997$, για την κατάσταση δοκιμής για $R = 0.9998$ και τη συνδυασμένη εκπαιδευμένη δοκιμή $R = 0.9997$ που φαίνεται στο Σχήμα 3.18. Από το εκπαιδευμένο



Σχήμα 3.19: Εκτίμηση της τάσης εξόδου της συσκευής TEG χρησιμοποιώντας τεχνικές νευρωνικών δικτύων για διάφορες θερμοκρασιακές διαφορές. Παρουσιάζονται επίσης και τα αποτελέσματα από την εφαρμογή της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων.

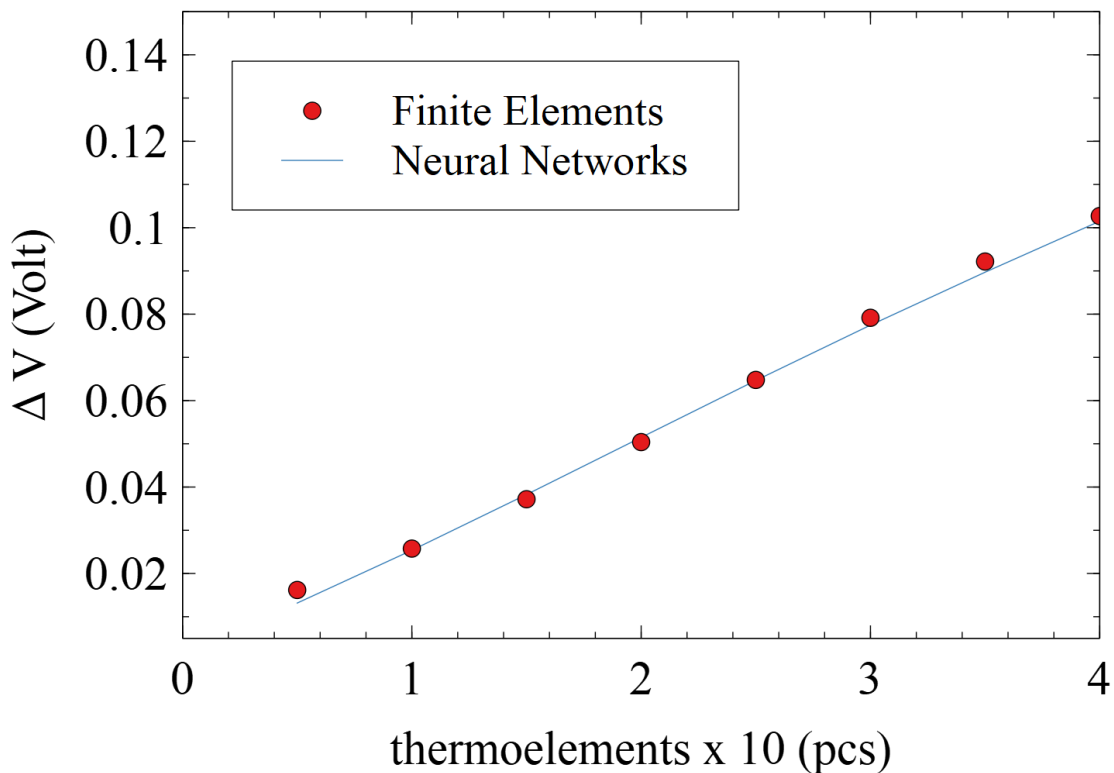
νευρωνικό, αρχικά υπολογίστηκαν οι τιμές της τάσης ανοιχτού κυκλώματος για διάφορες για διάφορες θερμοκρασιακές διαφορές Σχήμα 3.19 καθώς και συνδυαστικά με διάφορες ρητίνες διαφορετικών αγωγιμοτήτων Σχήμα 3.20. Οι τιμές που προέκυψαν από το εκπαιδευμένο νευρωνικό δίκτυο, είναι παρά πολύ κοντά σε αυτές που υπολογίστηκαν από την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων όπως φαίνεται στα σχήματα, καθώς το νευρωνικό δίκτυο ακολουθεί πλήρως την συμπεριφορά της συσκευής για διάφορες ρητίνες.



Σχήμα 3.20: Εκτίμηση της τάσης εξόδου της συσκευής μοντέλου TEG χρησιμοποιώντας τεχνικές νευρωνικών δικτύων για διάφορες ρητίνες και διαφορές θερμοκρασίας. Παρουσιάζονται επίσης και τα αποτελέσματα από την εφαρμογή της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων.

Στο Σχήμα 3.21 αποτυπώνεται η εκτίμηση της τάσης εξόδου της συσκευής για μεταβαλλόμενο αριθμό θερμοστοιχείων - συσκευών σε σειρά καθώς και τα αποτελέσματα από την εφαρμογή της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων όπου φαίνεται μια ενδιαφέρουσα σύμπτωση των αποτελεσμάτων. Η ίδια συμπεριφορά φαίνεται να ισχύει και στο σχήμα Σχήμα 3.22, όπου έχει εκτιμηθεί η τάση εξόδου ως συνάρτηση μεταξύ των θερμοστοιχείων όπως προέκυψαν αριθμητικά με την μέθοδο FE καθώς και με NN, όπου υπάρχει μια πολύ καλή σύμπτωση των αποτελεσμάτων γεγονός που επιβεβαιώνει την σωστή εκτίμηση του NN, παρόλο την μικρή μεταβολή.

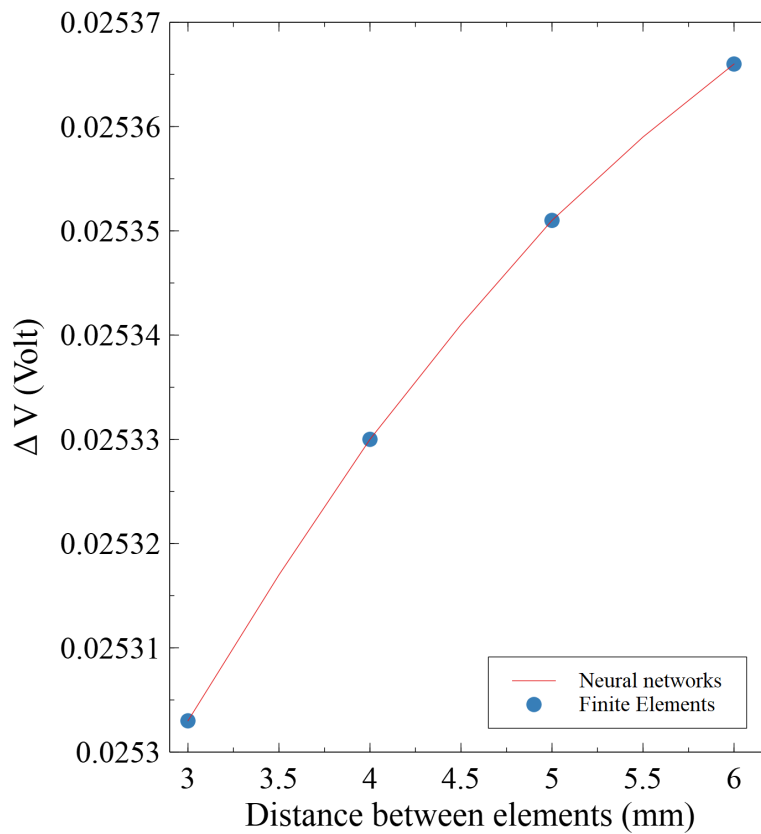
Τέλος, ένας άλλος παράγοντας που εκτιμήθηκε ήταν το πάχος των αγωγίμων συνδέσεων χαλκού. Στο Σχήμα 3.23 παρουσιάζονται οι τιμές



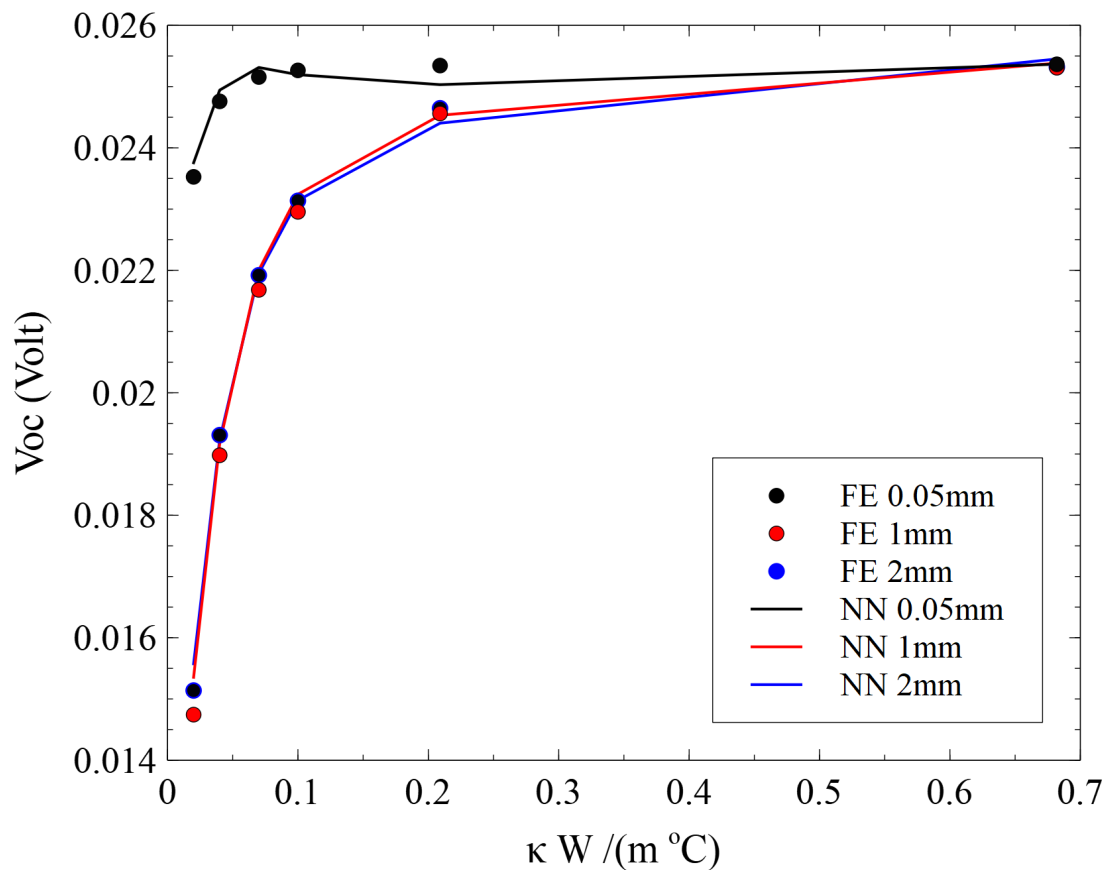
Σχήμα 3.21: Εκτίμηση της τάσης εξόδου της συσκευής μοντέλου TEG χρησιμοποιώντας τεχνικές νευρωνικών δικτύων ως συνάρτηση του αριθμού των θερμοστοιχείων - συσκευών. Παρουσιάζονται επίσης και τα αποτελέσματα από την εφαρμογή της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων.

τάσης εξόδου, που έχουν προκύψει από το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο σε τιμές ενδιάμεσων πάχους για τις αγώγιμες συνδέσεις Cu καθώς και υπολογισμούς σε διαφορετικές αλλά ενδιάμεσες τιμές λύνοντας το θερμοηλεκτρικό πρόβλημα χρησιμοποιώντας πεπερασμένα στοιχεία. Τα αποτελέσματα είναι σε πολύ καλή συμφωνία.

Η χρήση νευρωνικών δικτύων στο γενικό πλαίσιο της τεχνητής νοημοσύνης μπορεί να δώσει ασφαλείς εκτιμήσεις σε ελάχιστο χρόνο σε ενδιάμεσες τιμές για τις παραμέτρους που έχουν λάβει το σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης όπως προέκυψαν από τις αριθμητικές λύσεις πεπερασμένων στοιχείων.



Σχήμα 3.22: Εκτίμηση της τάσης εξόδου της συσκευής μοντέλου TEG χρησιμοποιώντας τεχνικές νευρωνικών δικτύων για διάφορες αποστάσεις μεταξύ των θερμοστοιχείων. Παρουσιάζονται επίσης σε αυτές τις ενδιάμεσες τιμές και αποτελέσματα από την εφαρμογή της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων $\kappa = 0.682W/(m^{\circ}C)$ 10 θερμοστοιχεία, μήκος θερμοστοιχείων 33.4 mm πλάτος σύρματος Cu 0.05mm



Σχήμα 3.23: Εκτίμηση της τάσης εξόδου της συσκευής μοντέλου TEG χρησιμοποιώντας τεχνικές νευρωνικών δικτύων για διαφορετικές θερμικές αγωγιμότητες και πάχος αγώγιμων συνδέσεων Cu. Παρουσιάζονται επίσης σε αυτές τις ενδιάμεσες τιμές και αποτελέσματα από την εφαρμογή της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων.

Βιβλιογραφία

- [1] G. Karalis, L. Tzounis, E. Lambrou, L. N. Gergidis, and A. S. Paipetis, “A carbon fiber thermoelectric generator integrated as a lamina within an 8-ply laminate epoxy composite: Efficient thermal energy harvesting by advanced structural materials,” *Applied Energy*, vol. 253, p. 113512, 2019.
- [2] B. Geppert, D. Groeneveld, V. Loboda, A. Korotkov, and A. Feldhoff, “Finite-element simulations of a thermoelectric generator and their experimental validation,” *Energy Harvesting and Systems*, vol. 2, no. 1, pp. 95–104, 2015.
- [3] D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, and R. J. Williams, “Learning representations by back-propagating errors,” *Nature*, vol. 323, pp. 533–536, Oct. 1986.
- [4] MATLAB, *version 9.3.0 (R2017b)*. Natick, Massachusetts: The MathWorks Inc., 2017.

Κεφάλαιο 4

Μοντελοποίηση θερμοηλεκτρικών συσκευών εκτυπωμένων ημιαγωγικών μελανιών σε υάλους

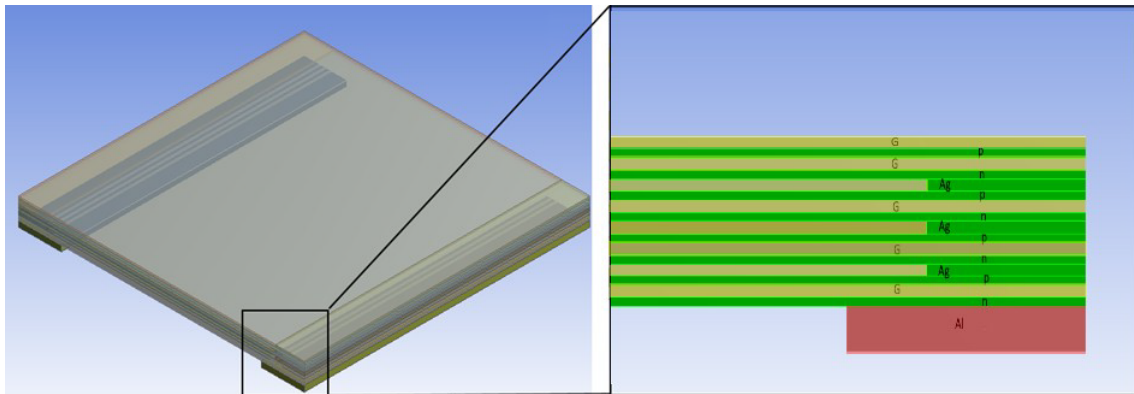
4.1 Εισαγωγή

Στο προηγούμενο κεφάλαιο μελετήθηκε θερμοηλεκτρική συσκευή βασισμένη σε ένα δομικό CFRP με δυνατότητα TEG που ενσωμάτωνε διασυνδεδεμένους δέσμες ανθρακονήματων ως θερμοστοιχεία στην κάτω στρώση του συνθέτου. Η συσκευή CFRP με δυνατότητα TEG μπόρεσε να παράγει τάση εξόδου 20 mV και μέγιστη ισχύ εξόδου 0.9 μW , κάτω από διαφορά θερμοκρασίας 75 °C. Ωστόσο, υπάρχει πειραματικά μια σημαντική δυσκολία σε αυτή την περίπτωση για μεγάλης κλίμακας κατασκευή δομών/συσκευών TEG που βασίζονται σε FRP δομές-συσκευές. Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάζονται οι διαδικασίες μοντελοποίησης τριών διαφορετικών συσκευών βασισμένες σε σύνθετα υλικά με τη θερμοηλεκτρική συμπεριφορά να εκπηγάει από n,p τύπους ημιαγωγούς εκτυπωμένους σε υάλους οι οποίες λειτουργούν ως θερμοηλεκτρικές γεννήτριες.

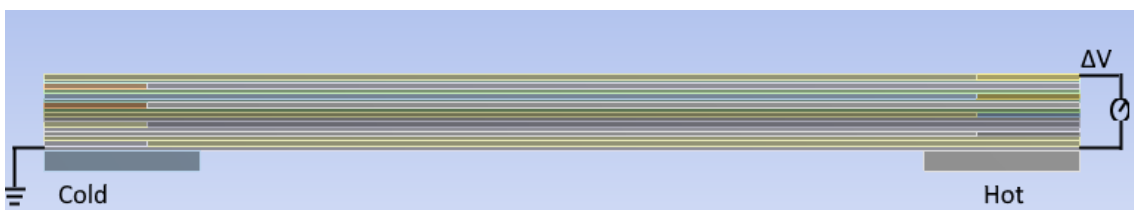
Η πρώτη συσκευή βασίζεται σε ένα δομικό πολύστρωτο σύνθετο πολυμερικής μήτρας ενισχυμένο με υαλονήματα με επαρκή ικανότητα συγκομιδής θερμικής ενέργειας και λειτουργεί ως θερμοηλεκτρική γεννήτρια. Η θερμοηλεκτρική αυτή συσκευή υλοποιήθηκε από το ερευνητικό προσωπικό του Εργαστηρίου Μηχανικής Ευφυών και Σύνθετων Υλικών και προσομοιώθηκε στην παρούσα διδακτορική διατριβή. Αυτό το πολυστρωματικό σύνθετο υλικό κατασκευάστηκε με στοίβαξη στρώσεων από ίνες γυαλιού (GF) επικαλυμμένες με μελάνια νανοσωλήνων άνθρακα μονού τοιχώματος (SWCNT) τύπου p και n. Η θερμοηλεκτρική απόκριση των τύπου p και n GF-SWCNT υφασμάτων κατέδειξε σημαντικές μετρημένες θερμοηλεκτρικές ιδιότητες με τιμές για τους συντελεστές Seebeck +23 και -29 $\mu\text{V}/\text{K}$ και θερμική ισχύ (thermopower) στα 60 και 118 $\mu\text{W}/\text{mK}^2$ για τους p και n τύπους ημιαγωγών αντίστοιχα. Η συσκευή GFRP με δυνατότητα TEG αποτελείται από σειριακά διασυνδεδεμένα τυπωμένα θερμοστοιχεία SWCNT και επέδειξε αξιοσημείωτη θερμοηλεκτρική σταθερότητα, απόδοση και μηχανική αντοχή και ήταν ικανή να παράγει σημαντική θερμική ισχύ σε διάφορες θερμοκρασίες [1].

4.1.1 Γεωμετρικά Χαρακτηριστικά - Μοντελοποίηση

Η θερμοηλεκτρική συμπεριφορά και απόδοση της κατασκευασμένης θερμοηλεκτρικής συσκευής μοντελοποιήθηκε και μελετήθηκε χρησιμοποιώντας διακριτοποιήσεις πεπερασμένων στοιχείων υιοθετώντας την ακριβή γεωμετρία του δομικού GFRP όπως παρουσιάζεται στο **Σχήμα 4.1**. Όπως και στην συσκευή που μελετήθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο, χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων για την επίλυση των συζευγμένων καταστατικών εξισώσεων που διέπουν τα θερμοηλεκτρικά φαινόμενα με τις κατάλληλες συνοριακές συνθήκες προκειμένου να προσομοιωθεί η πειραματική διάταξη.



(α) Γεωμετρία.



(β) Συνοριακές συνθήκες.

Σχήμα 4.1: Γεωμετρία (α) και συνοριακές συνθήκες (β) της πολυμερούς συσκευής ενισχυμένης με ίνες υάλου και δυνατότητα TEG.

Η αριθμητική επίλυση των πεπερασμένων στοιχείων, παρέιχε θερμικά πεδία και ηλεκτρικά δυναμικά που μπορούν να μεταφραστούν σε θερμοκρασιακές και κατανομές ηλεκτρικού δυναμικού σε όλη τη συσκευή καθώς και διαφορές τάσης μεταξύ της διαφορετικής διάταξης ημιαγωγών 16 στρώσεων τύπου $p - n$ της συσκευής (8 στρώματα), ώστε οι προκύπτουσες τιμές να είναι συγκρίσιμες με τις αντίστοιχες πειραματικές.

Το πραγματικό γεωμετρικό πλέγμα περιελάμβανε

- τις περιοχές του θερμού και ψυχρού λουτρού θερμότητας όπου τοποθετήθηκε το δομικό TEG για να εφαρμοστεί η κλίση θερμοκρασίας
- το πολυστρωματικό υλικό που φιλοξενούσε τα 8 $p-n$ στρώματα δίνοντας ένα συνολικό πλήθος $2 \times 8 = 16$ στρωμάτων.
- τα οκτώ (8) στρώματα συνδυασμένης αγωγίμης συνδετικής περιοχής Ag και ίνες υάλου (GF).

Η θερμοηλεκτρική συσκευή και τα επιμέρους τμήματά της - διακριτοί τομείς υλοποιήθηκαν ακολουθώντας τις πειραματικές γεωμετρικές (xyz)-διαστάσεις τους που ήταν:

- n,p : 50.0 mm × 50.0 mm × 0.2 mm
- Ag : 5.0 mm × 50.0 mm × 0.26 mm
- GF : 45.0 mm × 50.0 mm × 0.26 mm
- Al : 7.5 mm × 50.0 mm × 1.0 mm

Σε ό,τι αφορά τη διακριτοποίηση υιοθετήθηκε μια καθολική διάσταση ίση με 1.8 mm. Η διαδικασία αυτή δημιούργησε περίπου 160,000 κόμβους με 23,500 πραγματικά πεπερασμένα στοιχεία. Επιπλέον προσοχή δόθηκε στην εξαιρετικά λεπτή πολυμερική ρητίνη που χρησιμεύει ως κόλλα μεταξύ των διαδοχικών στρωμάτων $GF - Ag$ και ημιαγωγών. Μοντελοποιήθηκε ως επαφή που έχει ιδανική συμπεριφορά κάτι που συνεπάγεται υψηλή θερμική αγωγιμότητα ($\approx 10^7 W/(m^{\circ}C)$) και πολύ χαμηλή ηλεκτρική αγωγιμότητα ($\approx 10^{-7} \Omega^{-1} m^{-1}$) ώστε να διασφαλίζεται η απαραίτητη μεταφορά θερμικής ενέργειας αποτρέποντας παράλληλα την αντίστοιχη ηλεκτρικού φορτίου μέσω των διεπαφών των διαδοχικών στρωμάτων μιμούμενοι με αυτόν τον τρόπο αρκετά πιστά τη συσκευή και τις συνθήκες λειτουργίας της.

Στη συνέχεια το δημιουργημένο πλέγμα που αντιπροσώπευε τη διακριτοποιημένη γεωμετρία της συσκευής εισήχθη στον επιλυτή πεπερασμένων στοιχείων. Η ψυχρή πλάκα διατηρήθηκε σε θερμοκρασία 25 °C και βρίσκεται στην αριστερή πλευρά της συσκευής TEG. Η απέναντι δεξιά πλευρά της συσκευής ήταν σε επαφή με την θερμή πλάκα **Σχήμα 4.1.(β)**. Η αριστερή πλευρά του πρώτου στρώματος ημιαγωγού τύπου n είχε τάση 0.0V (γειωμένη) προκειμένου να κατευθύνει τη ροή ρεύματος της ηλεκτρικής ενέργειας που παράγεται από τη διαφορά θερμοκρασίας ΔT .

Οι προαναφερθείσες φυσικές συνθήκες χρησιμεύουν ως οι εφαρμοζόμενες συνοριακές συνθήκες για τη διαδικασία μοντελοποίησης του προβλήματος συνοριακών τιμών και εισήχθησαν στον επιλυτή FEM. Η πραγματική τάση εξόδου της συσκευής TE μετράται ως η διαφορά ηλεκτρικού δυναμικού μεταξύ του πρώτου και του τελευταίου στρώματος ημιαγωγού και φαίνεται στο Σχήμα 4.1.(β). Οι ιδιότητες του υλικού που χρησιμοποιήθηκαν στην προσέγγιση μοντελοποίησης- προσομοίωσης της συσκευής TE όπως θερμικές, ηλεκτρικές αγωγιμότητες και οι συντελεστές Seebeck των εμπλεκόμενων υλικών ελήφθησαν από πειραματικές μετρήσεις που έλαβαν χώρα από το προσωπικό του CSML και λεπτομέρειες αυτών καθώς και τιμές μπορούν να βρεθούν στην δημοσιευμένη εργασία [1].

4.1.2 Ανάλυση της θερμοηλεκτρικής συσκευής με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων

Η αριθμητική λύση πεπερασμένων στοιχείων των συζευγμένων διαφορικών εξισώσεων, που περιγράφουν το θερμοηλεκτρικό φαινόμενο, επιτρέπει τη λεπτομερή μελέτη - απεικόνιση της κατασκευασμένης συσκευής σε διαφορετικές θερμοκρασιακές διαφορές. Οι κατανομές θερμοκρασίας και ηλεκτρικού δυναμικού είναι οι ποσότητες άμεσου ενδιαφέροντος.

Αντιπροσωπευτικές κατανομές θερμοκρασίας φαίνονται για τη συσκευή στο Σχήμα 4.2. Οι αριθμητικά υπολογισμένες θερμοκρασίες δείχνουν μια ομαλή κατανομή μεταξύ του ψυχρού και θερμού. Η διάδοση της θερμότητας κατά μήκος της διαδοχής των στρώσεων της συσκευής, που λειτουργούν ως επιμέρους θερμικές αντιστάσεις, οδηγεί σταδιακά σταδιακά στην ομαλή μείωση της θερμοκρασίας.

Στο Σχήμα 4.2 φαίνεται το υπολογιζόμενο ηλεκτρικό δυναμικό και η κατανομή του σε όλη τη συσκευή. Η πτώση τάσης είναι σαφής καθώς τα ηλεκτρόνια κινούνται μέσα από τα σειριακά συνδεδεμένα στρώματα

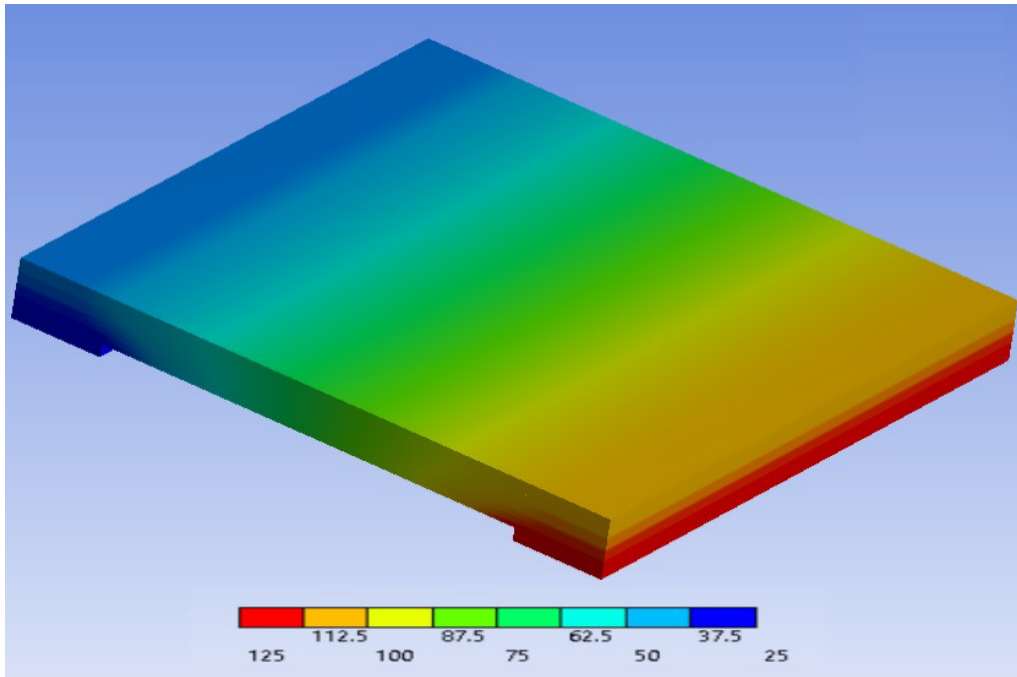
ημιαγωγών p , και τύπου n . Η διαφορά ηλεκτρικού δυναμικού μεταξύ του πρώτου και τελευταίου (ελάχιστο και υψηλότερο, αντίστοιχα) σχετίζεται στενά με την τάση ανοιχτού κυκλώματος της συσκευής TEG και μπορεί να υπολογιστεί για διαφορετικές διαφορές θερμοκρασίας επιτρέποντας την προσομοίωση διαφορετικών συνθηκών λειτουργίας.

Το εύρος θερμοκρασίας που χρησιμοποιήθηκε στις αριθμητικές προσομοιώσεις ήταν ($25\text{ }^{\circ}\text{C} - 100\text{ }^{\circ}\text{C}$). Η διαφορά τάσης ΔV κλιμακώνεται γραμμικά με τη διαφορά θερμοκρασίας ΔT , όπως αναμενόταν θεωρητικά (συντελεστής συσχέτισης ≈ 1.0 για τα δεδομένα προσομοίωσης) με την κλίση να είναι ίση με $197.49\text{ }\mu\text{V/K}$.

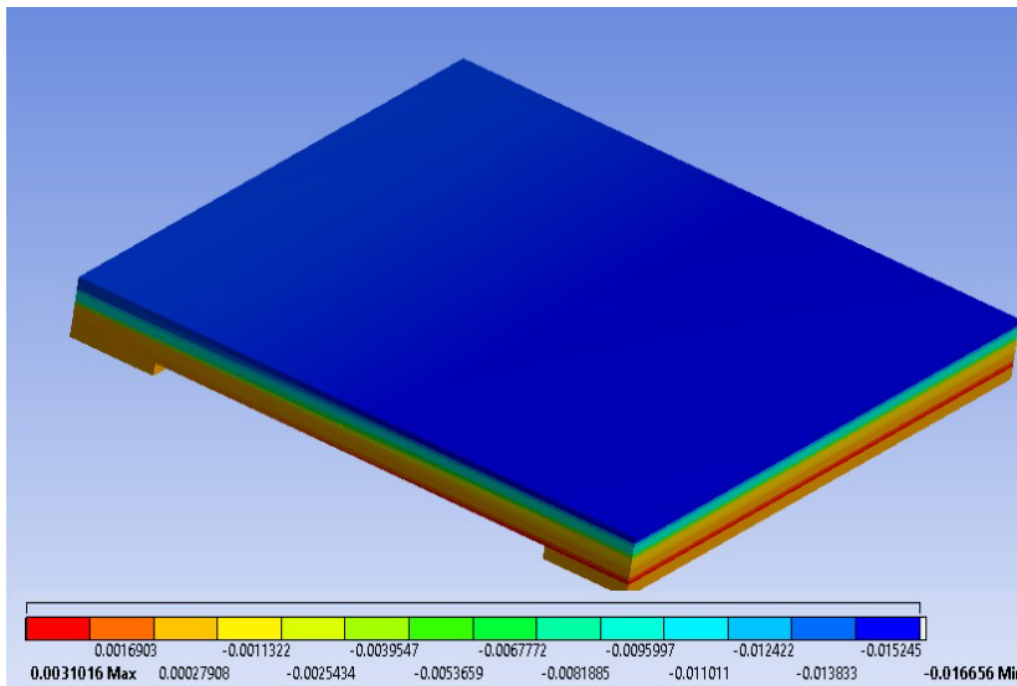
Επιπλέον έγινε και μια χονδροειδής εκτίμηση (αγνοώντας τις ρεαλιστικές διαφορετικές διαφορές θερμοκρασίας και τη διάδοση της θερμικής ενέργειας μεταξύ των διαφορετικών στρωμάτων) που γίνεται χρήση τοπικής περιγραφής του φαινομένου Seebeck $|\Delta V| = |S\Delta T|$ και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να συσχετίσει τους πειραματικούς συντελεστές Seebeck των ημιαγωγών τύπου p , n που χρησιμοποιούνται στη συσκευή με τον συντελεστή Seebeck $|S_{sim}|=197.49\text{ }\mu\text{V/K}$ που εξάγεται από τα δεδομένα προσομοίωσης.

Δεδομένου ότι η δομική συσκευή δεκαέξι (16) στρώσεων αποτελείται από οκτώ (8) p , n ημιαγωγίμα στρώματα, ο συντελεστής Seebeck για ένα ζεύγος $p - n$ είναι ίσος με $49.33\text{ }\mu\text{V/K}$ που είναι κοντά στην υπολογισμένη με χονδροειδή τρόπο πειραματική τιμή ζεύγους $|S_{p-n-pair}| = |S_{p-type}| + |S_{n-type}| = (23+29)\text{ }\mu\text{V/K} = 52\text{ }\mu\text{V/K}$.

Πέρα από τις προαναφερθείσες χονδροειδείς εκτιμήσεις, οι τάσεις εξόδου που υπολογίζονται από την ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων βρίσκονται σε συμφωνία με τις μετρούμενες τάσεις [1] όπως φαίνεται στο Σχήμα 4.2 λαμβάνοντας υπόψη τις θερμικές και ηλεκτρικές απώλειες που αναπόφευκτα υπάρχουν στην πειραματική διαδικασία. Η συμφωνία μεταξύ των δεδομένων προσομοίωσης και των πειραματικών μετρήσεων [1], απο-



(α) Θερμοκρασία.



(β) Ηλεκτρικό δυναμικό.

Σχήμα 4.2: (α). Κατανομές θερμοκρασίας στη δομική συσκευή TEG όπως λαμβάνονται από υπολογισμούς FEM αριθμητικά όπου οι τιμές θερμοκρασίας που εμφανίζονται στη γραμμή χρώματος είναι σε βαθμούς Κελσίου και (β) αντίστοιχες κατανομές ηλεκτρικού δυναμικού που λαμβάνονται από αντίστοιχους υπολογισμούς όπου εμφανίζονται οι τιμές διαφοράς δυναμικού στη γραμμή χρώματος είναι σε Volt.

δεικνύει τη συνέπεια και την ευρωστία της αναπτυγμένης μεθοδολογίας προσομοίωσης.

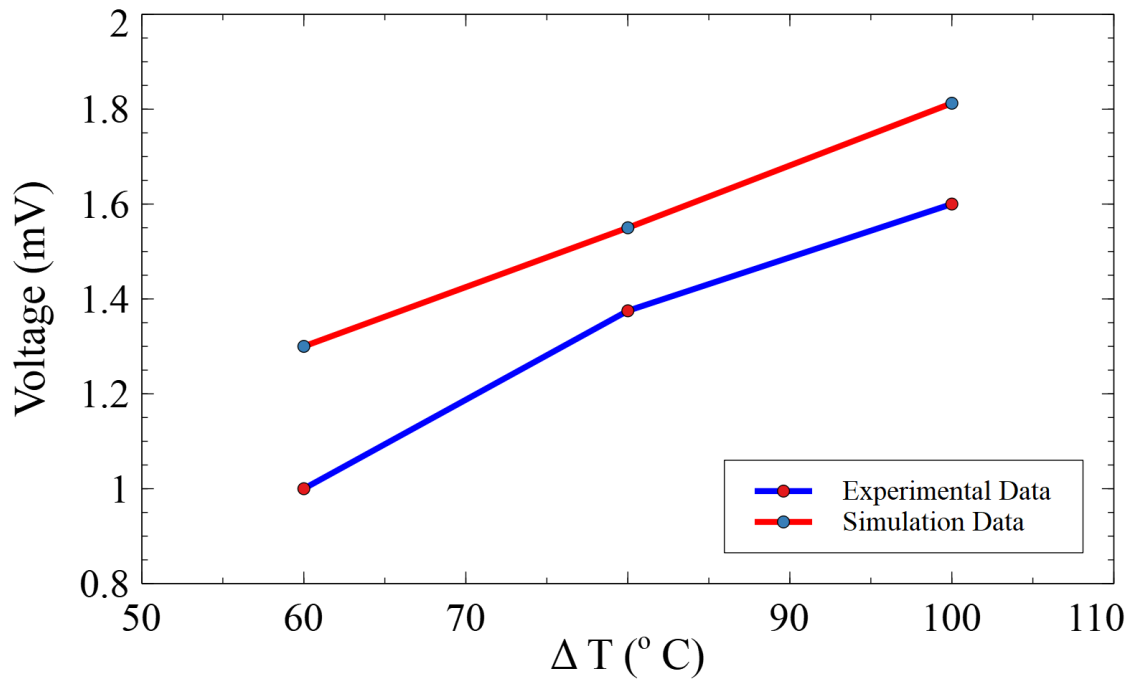
Η δομική συσκευή με δυνατότητα TEG η οποία αποτελείται από 8 σειριακά διασυνδεδεμένα θερμοστοιχεία, έχει συνολική ωμική αντίσταση ίση με $R_{TEG}=35.1 \text{ Ohm}$. Το θεώρημα μεταφοράς μέγιστης ισχύος δηλώνει ότι για να ληφθεί η μέγιστη εξωτερική ισχύς από μια πηγή με πεπερασμένη εσωτερική αντίσταση, η αντίσταση του φορτίου πρέπει να ισούται με την αντίσταση της πηγής όπως φαίνεται από τους ακροδέκτες εξόδου της. Από την επίκληση του θεωρήματος μεταφοράς μέγιστης ισχύος, η πραγματική μέγιστη ισχύς P_{max} μπορεί να υπολογιστεί εύκολα. Η μέγιστη ισχύς της προτεινόμενης συσκευής είναι ίση με $P_{max}=(V_{TEG}^2)/(4R_{TEG})$ όπου V_{TEG} είναι η πραγματική τάση ανοιχτού κυκλώματος (V_{oc}) ή η διαφορά τάσης ΔV .

Η τάση και η ισχύς εξόδου της μελετούμενης συσκευής ως συνάρτηση της διαφοράς θερμοκρασίας έχουν υπολογιστεί και παρουσιάζεται στο Σχήμα 4.3 όπου αποτυπώνονται και οι πειραματικές μετρήσεις για σύγκριση, από όπου φαίνεται ότι τα αποτελέσματα της προσομοίωσης είναι σε αρκετά καλή συμφωνία με τα αντίστοιχα πειραματικά.

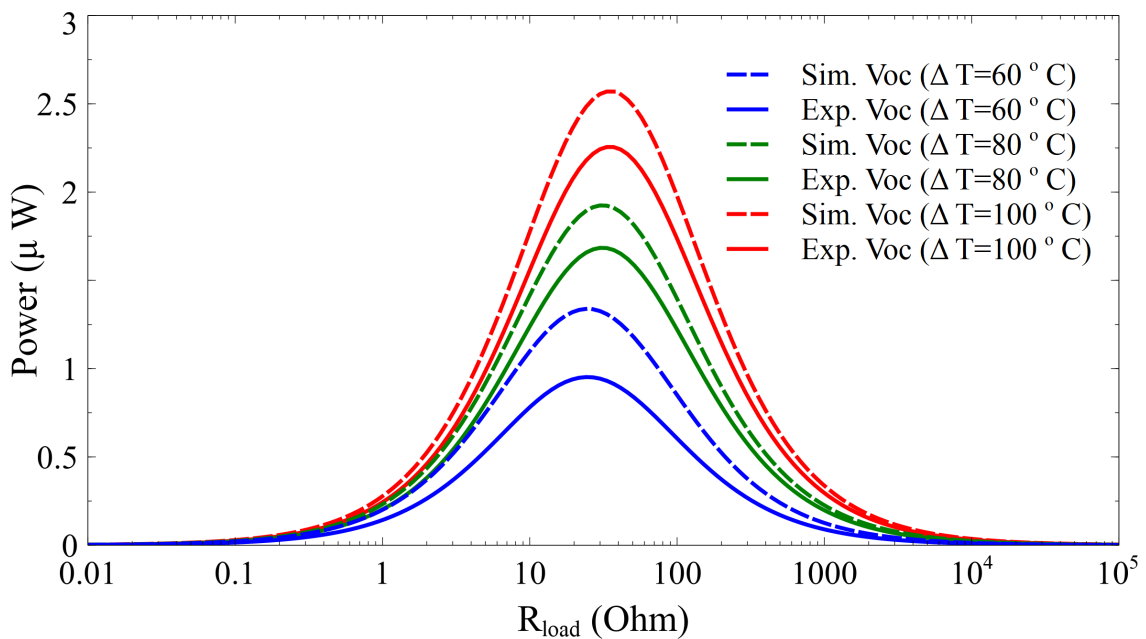
4.2 Ιεραρχικά τροποποιημένο σύνθετο πολυμερές ενισχυμένο με ίνες γυαλιού με επιστρώσεις νανοσωλήνων γραφενίου GFRP-GTEG

4.2.1 Περιγραφή της θερμοηλεκτρικής συσκευής

Στην παρούσα ενότητα μια ακόμη θερμοηλεκτρική συσκευή βασισμένη σε ένα πολυλειτουργικό, ιεραρχικά τροποποιημένο σύνθετο από πολυμερές ενισχυμένο από ίνες υάλου με επιστρώσεις νανοσωλήνων γραφενίου (GFRP-GTEG) ικανό για συγκομιδή θερμοηλεκτρικής ενέργειας, που κατασκευ-



(α) Διαφορά δυναμικού.



(β) Ισχύς.

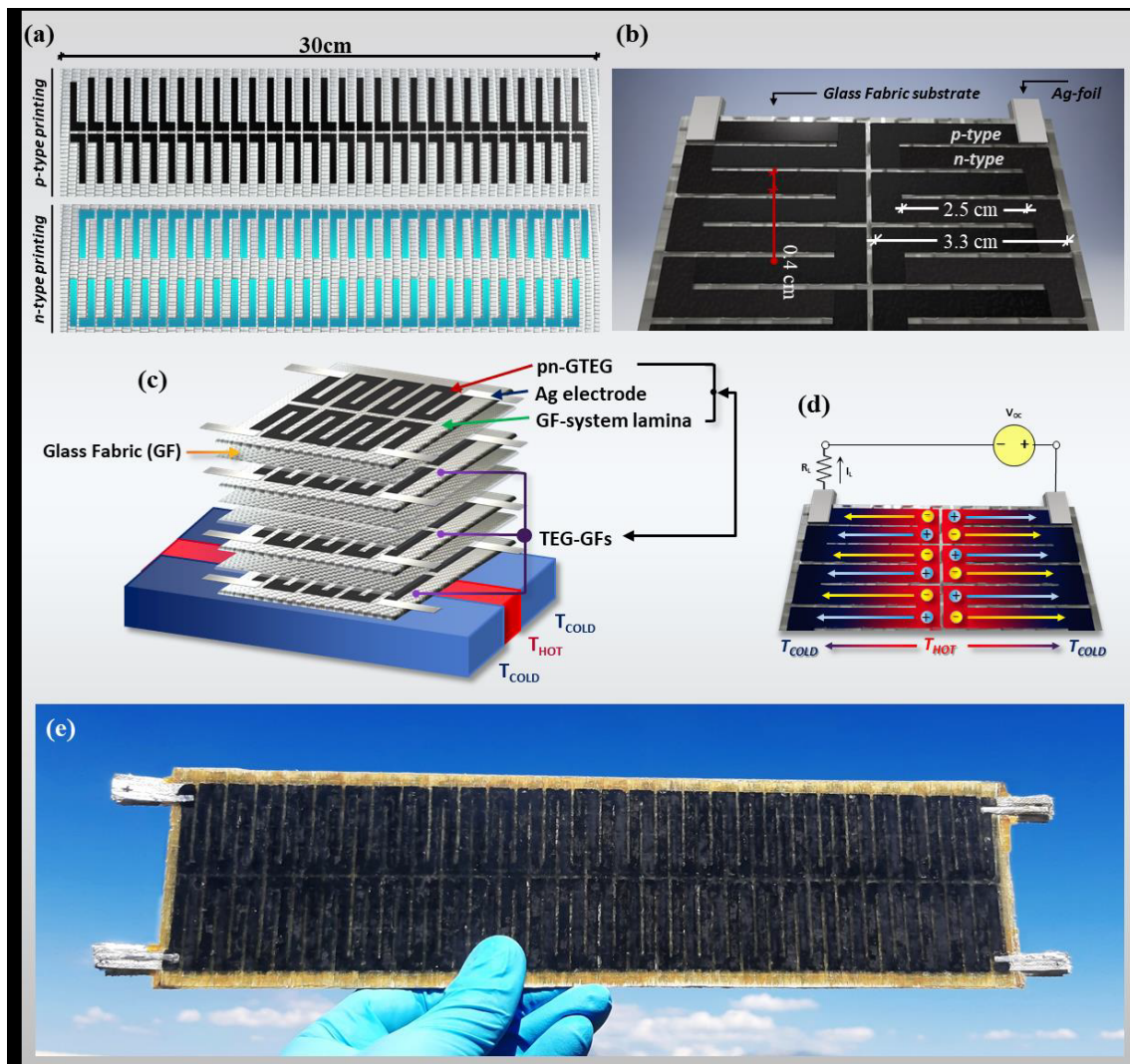
Σχήμα 4.3: (α). Σύγκριση των τάσεων εξόδου της δομικής συσκευής TEG ως συνάρτηση των διαφορών θερμοκρασίας από τα δεδομένα προσομοίωσης και τις πειραματικές μετρήσεις δεδομένων και (β). Ισχύς εξόδου της δομικής συσκευής TEG ως συνάρτηση της διαφορά θερμοκρασίας ΔT που εμφανίζεται για $\Delta T = 60, 80, 100 \text{ } ^\circ K$ που ελήφθη από τις αριθμητικές προσομοιώσεις και τις πειραματικές μετρήσεις.

άστηκε από το προσωπικό του Εργαστηρίου CSML, μοντελοποιήθηκε με τη χρήση της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων. Οι ινώδεις ενισχύσεις που διαμορφώθηκαν ιεραρχικά με εναλλασσόμενη διευθέτηση νανοσωλήνων άνθρακα μονού τοιχώματος - SWCNT τύπου n και p σε μορφή μελάνης και οι οποίες εκτυπώθηκαν. Πρέπει να σημειωθεί πως τα βέλτιστοποιημένα εμποτισμένα με ρητίνη υμένια-υφάσματα που εσωκλείουν τα τυπωμένα τύπου n και p θερμοστοιχεία παρουσίασαν εργαστηριακά υψηλή ισχύ με τιμές στα 82 και 96 $\mu W/mK^2$, αντίστοιχα, και εξαιρετική σταθερότητα στον αέρα.

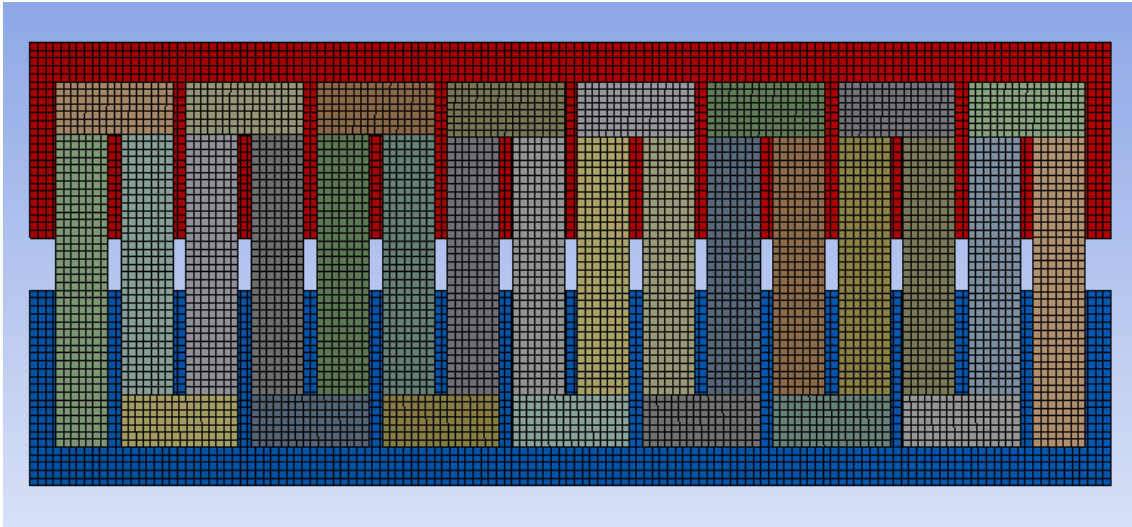
Η συσκευή που αποτελείται από 232 ζεύγη p/n και παρήγαγε στην πράξη τάση ανοιχτού κυκλώματος μεγαλύτερη από 1.0V, $I_{SC}=850 \mu A$ που αντιστοιχεί στην αξιοσημείωτη ισχύ εξόδου 215 μW για διαφορά θερμοκρασίας 100 °K [2]. Αυτή η μετρούμενη τιμή είναι από τις υψηλότερες που έχουν αναφερθεί για δομικά TEG με βάση τον άνθρακα που κατασκευάζονται μέσω εκτύπωσης [3, 1, 4, 5] καθώς και [6, 7]. Η πραγματική συσκευή που κατασκευάστηκε, (εφεξής θα καλείται GFRP-GTEG), από το ερευνητικό προσωπικό του Εργαστηρίου Ευφυών Σύνθετων Υλικών και αναπαραστήθηκε αριθμητικά στα πλαίσια της παρούσας διατριβής εμφανίζεται στο **Σχήμα: 4.4**.

4.2.2 Γεωμετρικά χαρακτηριστικά - Μοντελοποίηση

Ομοίως με τις προηγούμενες συσκευές, η απόδοση της παρούσας συσκευής προσομοιώθηκε χρησιμοποιώντας διακριτοποιήσεις FEM. Η ακριβής γεωμετρία του κατασκευασμένου δομικού GFRP-GTEG αναπαράχθηκε αριθμητικά. Το βασικό δομικό στοιχείο ήταν μια συσκευή με δεκαέξι (16) θερμοηλεκτρικά στοιχεία (**Σχήμα 4.5**). Επιπλέον, χρησιμοποιώντας την παραπάνω γεωμετρία, προσομοιώθηκε συσκευή με 464 θερμοστοιχεία, χρησιμοποιώντας 29 δομικές μονάδες-συσκευές σε σειρά ($464/16=29$). Για τη



Σχήμα 4.4: Διαδικασία κατασκευής δομικών σύνθετων GFRP εκτυπωμένων με βάση το γραφένιο και δυνατότητα TEG. (α) Αρχιτεκτονική μονάδα TEG με μάσκα σε υπόστρωμα υφάσματος από ίνες γυαλιού, (β) διαστάσεις των θερμοστοιχείων της συσκευής GTEG, (γ) GFRP-GTEG αρχιτεκτονική συσκευής, (δ) η αρχή λειτουργίας της μονάδας GFRP-GTEG, (ε) το πλήρως τυπωμένο GFRP-GTEG με βάση τον άνθρακα [2]



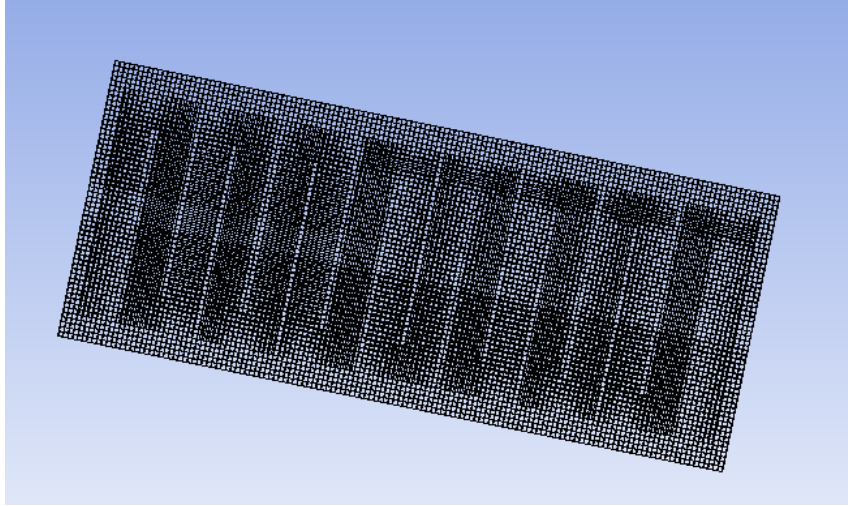
Σχήμα 4.5: Διακριτοποιημένο μοντέλο.

επίλυση των καταστατικών μερικών διαφορικών εξισώσεων που διέπουν τα θερμοηλεκτρικά φαινόμενα με τις κατάλληλες συνοριακές συνθήκες χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων.

Η δομική μοναδιαία συσκευή TEG και οι διακριτοί τομείς των μεμονωμένων εξαρτημάτων της διακριτοποιήθηκαν ακολουθώντας τις αντίστοιχες πειραματικές γεωμετρικές τους διαστάσεις x , y , z .

Σε κάθε στρώμα θερμοηλεκτρικής γεννήτριας φιλοξενούνται 16 στοιχεία ημιαγωγών, οκτώ (8) τύπου p και οκτώ (8) τύπου n σε εναλλασσόμενη σειρά, με μεμονωμένες διαστάσεις 25 mm (ενεργή διάσταση) $\times 4\text{ mm} \times 5\text{ }\mu\text{m}$, τοποθετημένα σε επίπεδο υπόστρωμα GF με διαστάσεις $33\text{ mm} \times 81\text{ mm} \times 0.26\text{ mm}$.

Το προαναφερθέν υπόστρωμα GF παίζει το ρόλο του ηλεκτρικού μονωτή μεταξύ των επαναλαμβανόμενων στρωμάτων κατά την κατεύθυνση z . Το πραγματικό γεωμετρικό πλέγμα περιελάμβανε τις περιοχές πλάκας αλουμινίου όπου τοποθετείται το δομικό σύνθετο πολυστρωματικό υλικό GFRP-GTEG με δυνατότητα TEG για τη δημιουργία της θερμοκρασιακής βαθμίδας. Η προαναφερθείσα διαδικασία διακριτοποίησης δημιούργησε περίπου συνολικά 350,000 κόμβους με 50,000 πραγματικά στοιχεία (Σχήμα

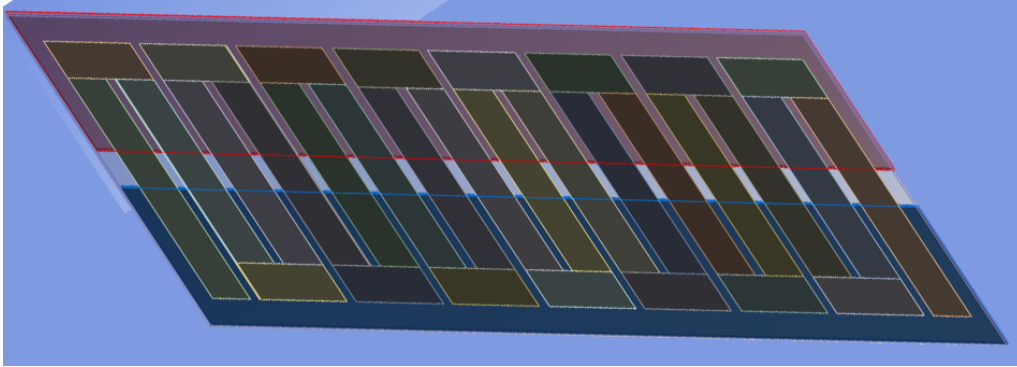


Σχήμα 4.6: Διακριτοποιημένο δομικό σύνθετο πολυστρωματικό GFRP-GTEG με δυνατότητα TEG με τέσσερα (4) στρώματα TE όπου κάθε στρώμα φιλοξενεί 16 στοιχεία ημιαγωγών (οκτώ (8) τύπου p και οκτώ (8) τύπου n σε εναλλασσόμενη σειρά) μαζί με το υπόστρωμα GF

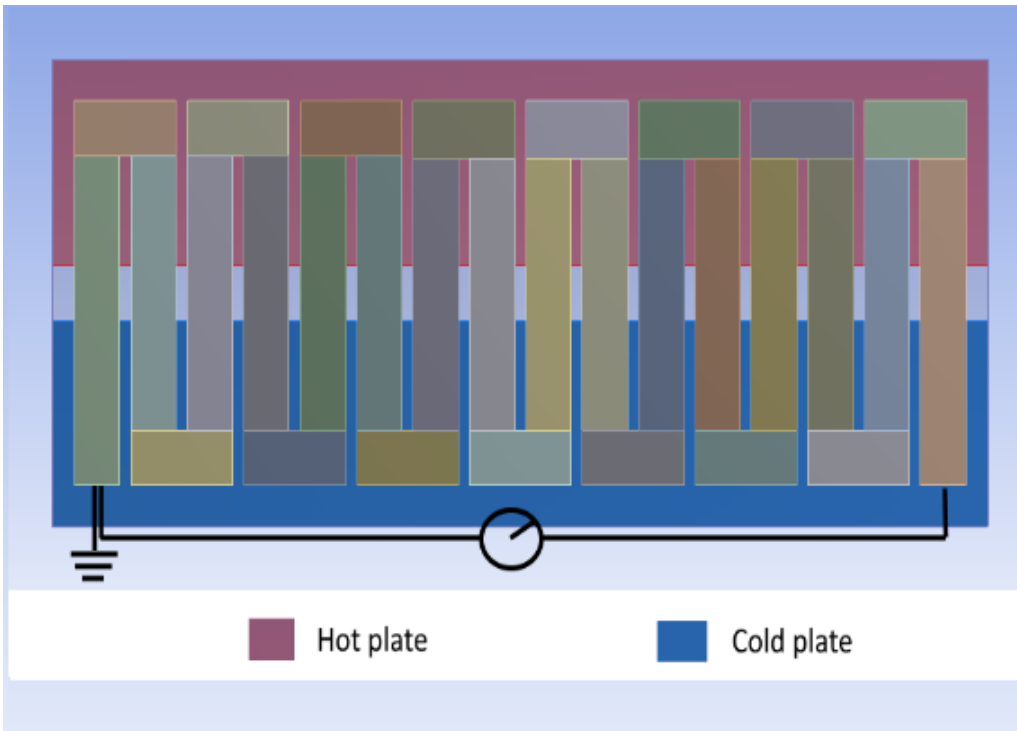
4.6).

Η λεπτή πολυμερική ρητίνη, η οποία χρησιμεύει ως συγκολλητικό μεταξύ των διαδοχικών στρωμάτων GF και ημιαγωγών μοντελοποιήθηκε ξεχωριστά. Διαμορφώθηκε ως επαφή με ιδανική συμπεριφορά, (θερμική αγωγιμότητα $\kappa = 10^7 W/(mK)$, ηλεκτρική αγωγιμότητα ($\sigma = 10^{-7} \Omega^{-1} m^{-1}$), για να επιτρέψει την απαραίτητη μεταφορά θερμικής ενέργειας χωρίς απώλειες, αποτρέποντας ταυτόχρονα την ανεπιθύμητη ηλεκτρική μεταφορά μέσω της διεπαφής των διαδοχικών στρωμάτων, προσομοιώνοντας με αυτόν τον τρόπο τις συνθήκες λειτουργίας του σύνθετου πολυστρωματικού υλικού.

Η «ψυχρή» βάση αλουμινίου που βρίσκεται στην «αριστερή» πλευρά της συσκευής TEG διατηρήθηκε στους $25^\circ C$. Η «δεξιά» πλευρά της συσκευής ήταν σε επαφή με την «θερμή» πλάκα αλουμινίου. Ο πρώτος ημιαγωγός κάθε στρώματος είχε τάση $0V$ (γειωμένο), για να κατευθύνει τη ροή ρεύματος της ηλεκτρικής ενέργειας που παράγεται από τη διαφορά θερμοκρασίας ΔT . Οι προαναφερθείσες φυσικές συνθήκες χρησιμεύουν ως



(α) Τρισδιάστατη όψη μοντέλου συσκευής.



(β) Εφαρμοζόμενες συνοριακές συνθήκες.

Σχήμα 4.7: Μια τρισδιάστατη (3D) όψη (α) μαζί με τις εφαρμοζόμενες συνοριακές συνθήκες (β). Το σημείο γείωσης εμφανίζεται στην κάτω αριστερή γωνία. Τα σημεία A και B είναι αντιπροσωπευτικά και ενδεικτικά για τις περιοχές θερμής και ψυχρής πλάκας αλουμινίου που αντιπροσωπεύονται με κόκκινο και μπλε χρώμα, αντίστοιχα.

οι εφαρμοζόμενες συνοριακές συνθήκες για τη διαδικασία μοντελοποίησης του προβλήματος της οριακής τιμής και δόθηκαν οδηγίες - επιβλήθηκαν στον επιλυτή FEM. Οι συνοριακές συνθήκες του μοντέλου φαίνονται στο **Σχήμα 4.7**.

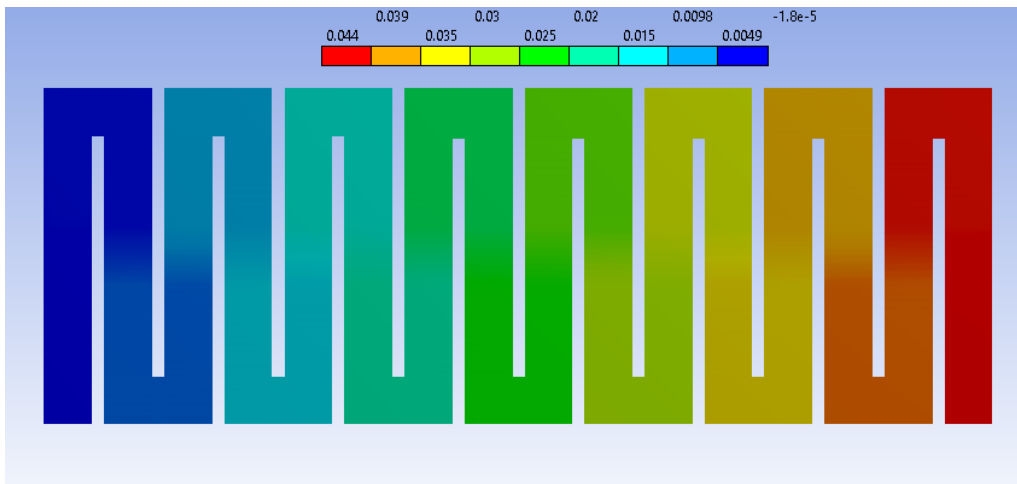
Η πραγματική τάση εξόδου της συσκευής TE μετρήθηκε ως η διαφορά ηλεκτρικού δυναμικού μεταξύ του πρώτου και του τελευταίου TE σε κάθε στρώμα (**Σχήμα 4.8**).

4.2.3 Ανάλυση της Θερμοηλεκτρικής συσκευής με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων

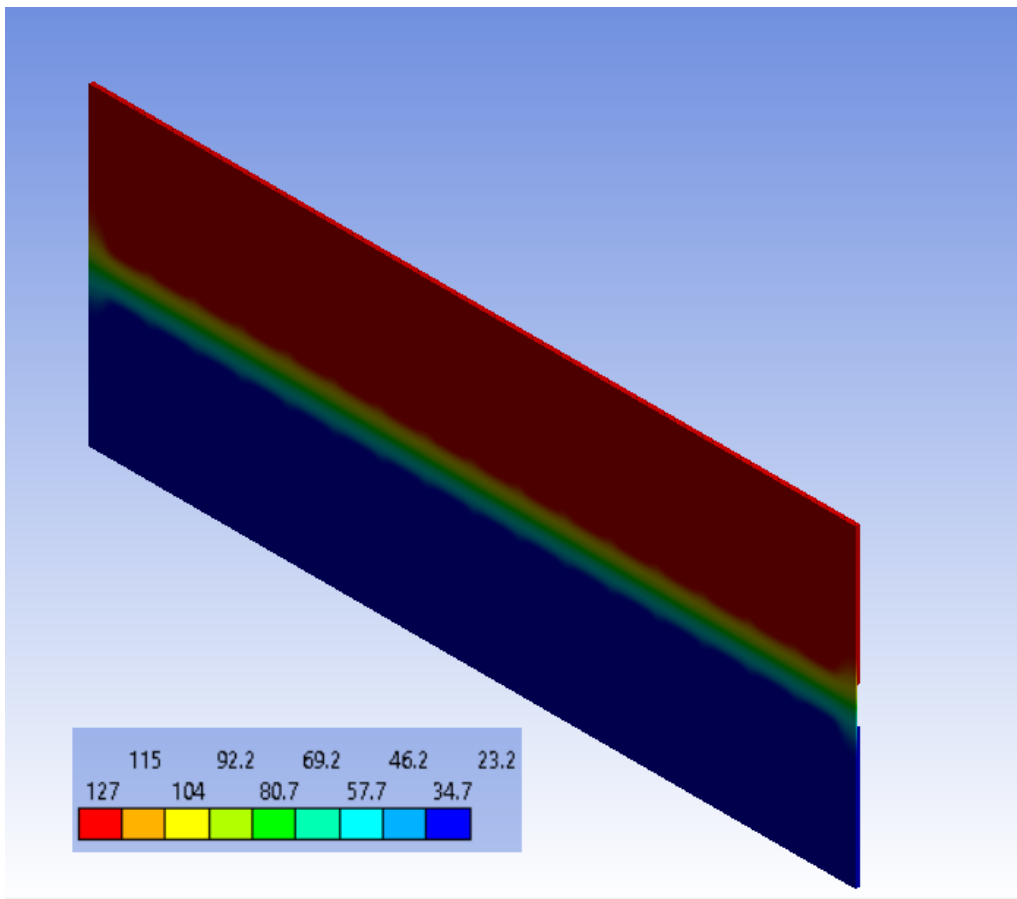
Έγιναν λεπτομερείς προσομοιώσεις των πραγματικών χαρακτηριστικών λειτουργίας της κατασκευασμένης συσκευής σε διαφορετικές θερμοκρασιακές διαφορές. Οι κατανομές θερμοκρασίας και ηλεκτρικού δυναμικού παρακολούθηθηκαν στον εσωτερικό και εξωτερικό χώρο της συσκευής των $8\ p-n$ ζευγών **Σχήμα 4.8**.

Αντιπροσωπευτικές κατανομές θερμοκρασίας αποτυπώνονται στο **Σχήμα 4.8**. Οι αριθμητικά υπολογισμένες θερμοκρασίες δείχνουν μια ομαλή κατανομή μεταξύ του «ψυχρού» και του «θερμού» σε όλα τα στρώματα. Η διάδοση της θερμότητας κατά μήκος της διαδοχικής στοίβαξης στρώσεων της συσκευής οδηγεί στην ομαλή μείωση της θερμοκρασίας. Στο **Σχήμα 4.8**, παρουσιάζεται η υπολογιζόμενη κατανομή ηλεκτρικού δυναμικού σε όλη τη συσκευή.

Η πτώση τάσης δημιουργείται καθώς τα ηλεκτρόνια κινούνται μέσα από τους συνδεδεμένους ημιαγωγούς τύπου p και n. Η διαφορά ηλεκτρικού δυναμικού μεταξύ του πρώτου και του τελευταίου (ελάχιστο και υψηλότερο, αντίστοιχα) σχετίζεται στενά με την τάση ανοιχτού κυκλώματος της συσκευής TEG και μπορεί να υπολογιστεί έγκαιρα για διαφορετικές διαφορές θερμοκρασίας, επιτρέποντας την προσομοίωση διαφορετικών συνθηκών λει-



(α) Ηλεκτρικό Δυναμικό.



(β) Κατανομή θερμοκρασίας.

Σχήμα 4.8: Αποτελέσματα προσομοίωσης για το μοντέλο 8 p/n ζευγών του σύνθετου πολυστρωματικού υλικού GFRP-GTEG με τη χρήση αριθμητικής διαδικασίας ανάλυσης πεπερασμένων στοιχείων σε $\Delta T=100\text{ }^{\circ}\text{C}$ Επάνω (α): Κατανομή ηλεκτρικού δυναμικού του GFRP-GTEG και (β) Κατανομή θερμοκρασίας.

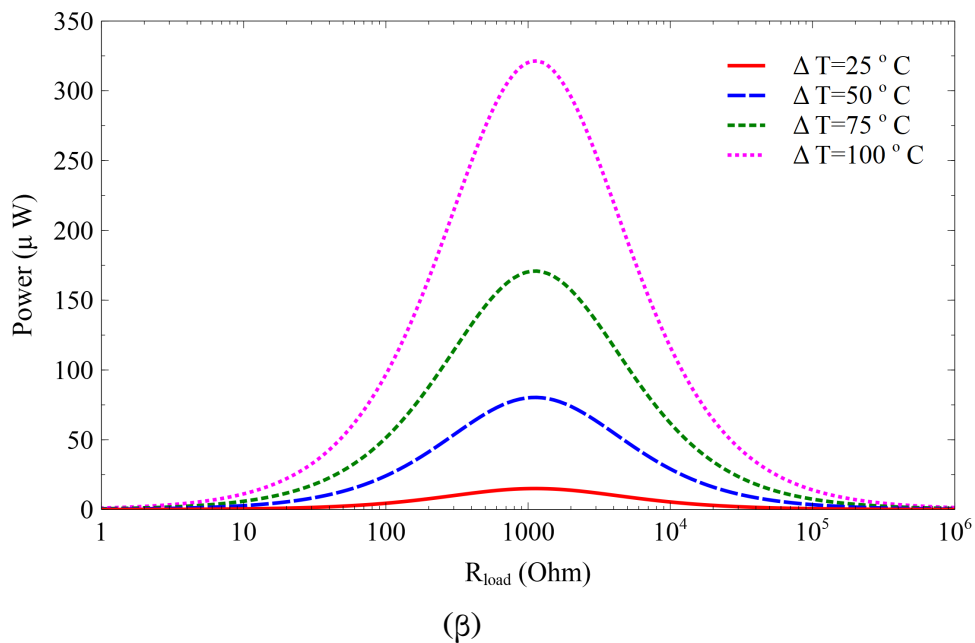
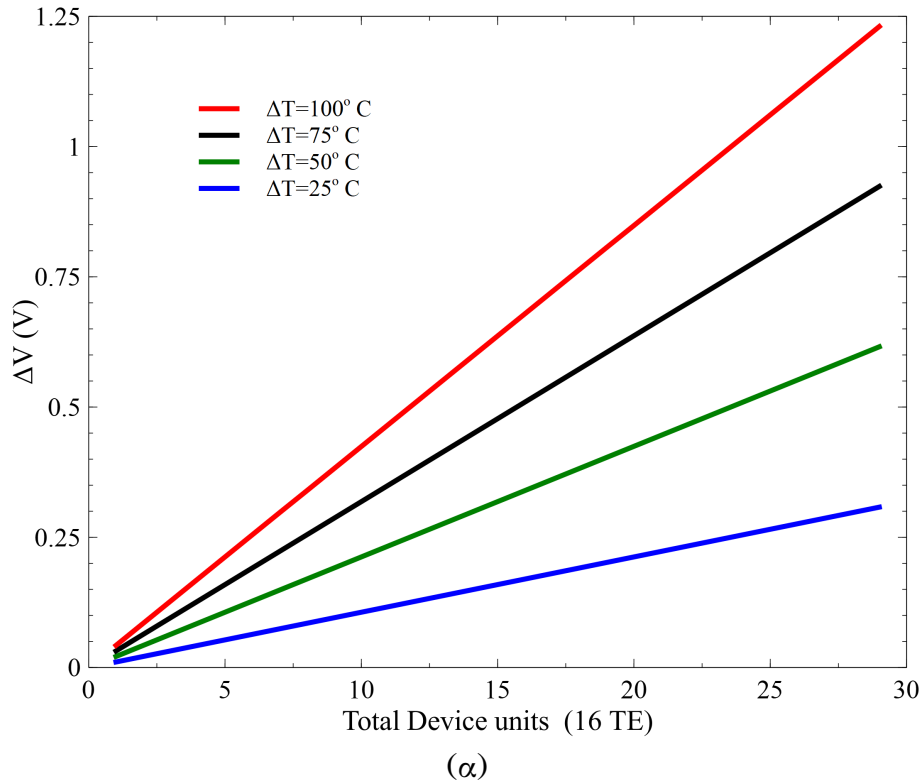
τουργίας. Το εύρος θερμοκρασίας που χρησιμοποιήθηκε στις αριθμητικές προσομοιώσεις ήταν ($\Delta T = 25, 50, 75, 100^\circ\text{C}$) Η διαφορά τάσης ΔV μεταβάλλεται γραμμικά με τη διαφορά θερμοκρασίας ΔT , όπως αναμενόταν θεωρητικά (συντελεστής συσχέτισης 1 για τα δεδομένα προσομοίωσης) με την κλίση να είναι ίση με $440 \mu\text{V/K}$. Η παραγόμενη ισχύς υπολογίστηκε για τη συσκευή των 464 θερμοστοιχείων για διαφορά θερμοκρασίας 100°C που υπολογίστηκε περίπου στα $320 \mu\text{W}$ που είναι η μέγιστη θεωρητική τιμή χωρίς απώλειες.

Μια χονδροειδής εκτίμηση που επικαλείται την τοπική περιγραφή του φαινομένου Seebeck $|\Delta V(T)| = |S\Delta T|$ μπορεί να εκτελεστεί για να συσχετίσει τους πειραματικούς συντελεστές Seebeck των ημιαγωγών τύπου p και n που χρησιμοποιούνται στη συσκευή TE με τον συντελεστή Seebeck $S_{sim} = 440.00 \mu\text{V/K}$ που εξήχθη από τα δεδομένα της προσομοίωσης.

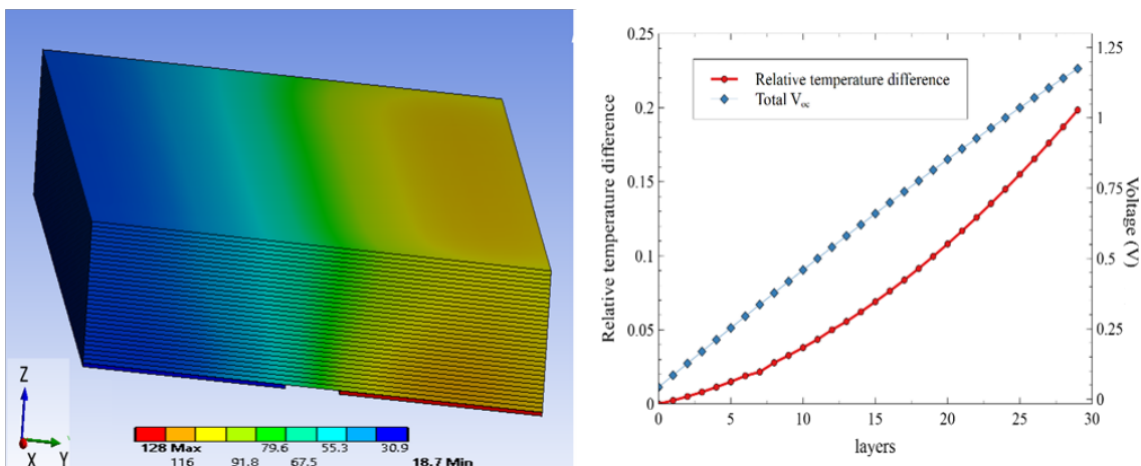
Πέρα από τις προαναφερθείσες χονδροειδείς εκτιμήσεις, οι τάσεις εξόδου που υπολογίζονται από την ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων είναι σε λογική συμφωνία με τις μετρούμενες τάσεις όπως φαίνεται στο Σχήμα 4.8 και λαμβάνοντας υπόψη τις θερμικές και ηλεκτρικές απώλειες που υπάρχουν στην πειραματική διαδικασία. Η συμφωνία μεταξύ των δεδομένων προσομοίωσης και των πειραματικών μετρήσεων αποδεικνύει τη συνέπεια της μεθοδολογίας προσομοίωσης.

Η δομική συσκευή με δυνατότητα TEG αποτελείται από 16 σειριακά διασυνδεδεμένα θερμοστοιχεία, με αποτέλεσμα $R_{TEG} = 40.96 \text{ Ohm}$ συνολική αντίσταση Ohm . Το θεώρημα μεταφοράς μέγιστης ισχύος δηλώνει ότι για να ληφθεί μέγιστη εξωτερική ισχύς από μια πηγή με πεπερασμένη εσωτερική αντίσταση, η αντίσταση του φορτίου πρέπει να ισούται με την αντίσταση της πηγής όπως φαίνεται από τους ακροδέκτες εξόδου της.

Από το θεώρημα μεταφοράς μέγιστης ισχύος, η πραγματική μέγιστη ισχύς P_{max} μπορεί να υπολογιστεί. Η μέγιστη θεωρητική ισχύς της συσκευής



Σχήμα 4.9: Τάση ανοιχτού κυκλώματος (V_{oc}) για προσέγγιση μοντέλου 464 θερμοστοιχείων (232 θερμοζεύγη, 29 μονάδες συσκευής) που εκτίθενται σε διαβαθμίσεις θερμοκρασίας 25,50,75,100 °K (α) και αντίστοιχη παραγωγή ισχύος (β).



Σχήμα 4.10: Απεικόνιση των θερμοκρασιών για συσκευή 29 στοιχειωδών συσκευών (εξωτερική επιφάνεια).

είναι ίση με $P_{max} = (V_{TEG}^2)/(4R_{TEG})$, όπου V_{TEG} είναι η πραγματική τάση ανοιχτού κυκλώματος (V_{oc}).

Η τάση και η ισχύς εξόδου του GFRP με δυνατότητα TEG 16 στρώσεων ως συνάρτηση της διαφοράς θερμοκρασίας έχουν υπολογιστεί και φαίνονται στο Σχήμα 4.9 αντίστοιχα.

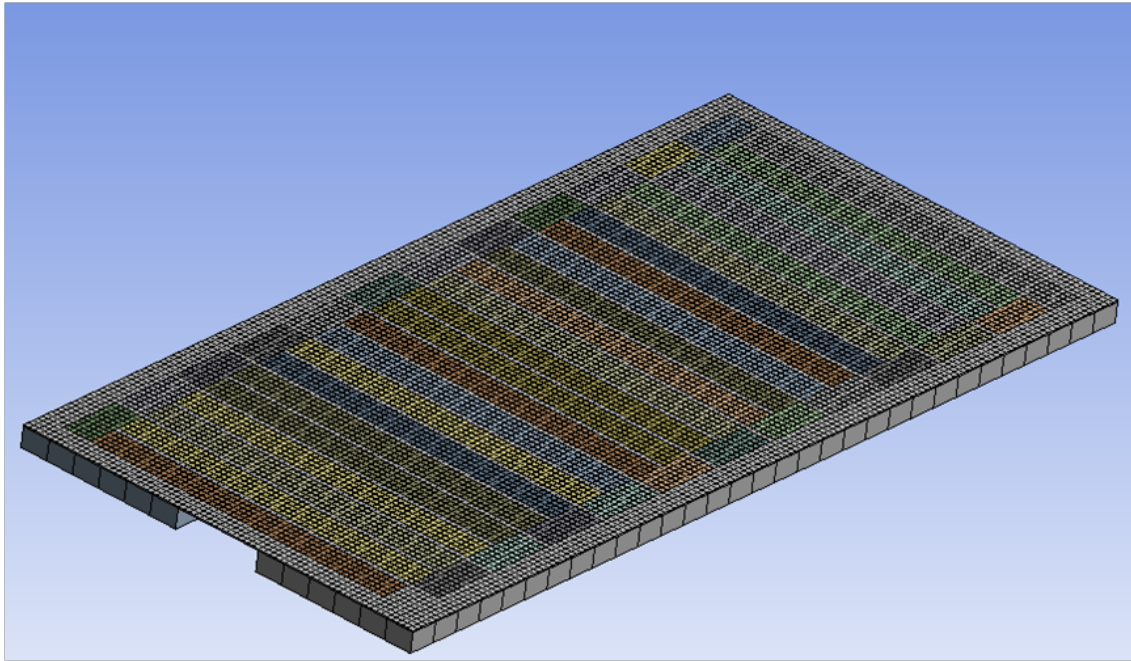
Στην συνέχεια έγινε μελέτη απόδοσης της συσκευής σε περίπτωση πολλαπλών στοιχειωδών 16-ply TEG-enabled GFRP συσκευών σε περίπτωση που λόγω σχεδιασμού υπάρχει στενότητα χώρου για την επίπεδη λύση. Λόγω του ότι η απόδοση κάθε στρώματος εξαρτάται από την βαθμίδα θερμοκρασίας και λόγω θερμικής αντίστασης του κάθε στρώματος αλλά και της εκπομπής προς το περιβάλλον που έχει μείωση της θερμοκρασίας ΔT καθώς προσθέτουμε στρώματα (συσκευές). Είναι προφανές ότι έχουμε πτώση της βαθμίδας της θερμοκρασίας καθώς αυξάνονται τα στρώματα, η οποία ακολουθεί έναν τετραγωνικό νόμο Σχήμα 4.10. Για 20 στοιχειώδες μονάδες μια απώλεια στο V_{oc} περίπου 10% ενώ σε 30 στρώματα καταγράφεται απώλεια $\approx 25\%$.

4.3 Θερμοηλεκτρική συσκευή με εκτυπωμένο να- νοδομημένο υλικό με βάση τον άνθρακα και 24 θερμοστοιχεία

4.3.1 Γεωμετρικά χαρακτηριστικά - Μοντελοποίηση

Όπως έχει αναφερθεί οι έξυπνες δομές αντιπροσωπεύουν ένα εξαιρετικά ενδιαφέρον πεδίο έρευνας για τη επιστήμη και τεχνολογία των συνθέτων λόγω της δυνατότητάς τους να εκτελούν περισσότερες από μία συγκεκριμένες λειτουργίες, όπως π.χ παρακολούθηση της δομικής υγείας, ανίχνευση καταπόνησης ή βλάβης, έλεγχος θερμοκρασίας και συγκομιδή ενέργειας. Στα πλαίσια αυτά, ένα πολυλειτουργικό σύνθετο πολυμερές ενισχυμένο με ίνες και δυνατότητα TEG κατασκευάστηκε από τα μέλη της ερευνητικής ομάδας του Εργαστηρίου Μηχανικής Σύνθετων και Ευφυών Υλικών του ΤΜΕΥ. Η ικανότητα συγκομιδής θερμικής ενέργειας της σύνθετης δομής οφείλεται στην ελεγχόμενη εναπόθεση νανοϋλικών επάνω στις ενισχυτικές ίνες.

Η αρχιτεκτονική του πολυλειτουργικού σύνθετου υλικού σχεδιάστηκε ώστε να μπορεί να εκμεταλλεύεται την αναξιόποιγη θερμική ενέργεια με βάση το θερμοηλεκτρικό φαινόμενο. Θερμοηλεκτρικά μελάνια ημιαγώγιμου χαρακτήρα τύπου p, n ενσωματώθηκαν στη σύνθετη δομή που εναποτέθηκε στα υαλώδη (GFRP) στρώματα με τη μέθοδο drop casting, σχηματίζοντας μια ενιαία αγώγιμη διαδρομή. Τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά αυτού του αγώγιμου σχεδίου σχεδιάστηκαν έτσι ώστε τα θερμοστοιχεία τύπου p και n να διασυνδέονται ηλεκτρικά σε σειρά και θερμικά παράλληλα. Τέλος, τα ενισχυτικά στρώματα γυάλινων υφασμάτων εμποτίστηκαν με χρήση εποξειδικής ρητίνης για να σχηματιστεί μια σταθερή δομή, που χαρακτηρίζεται ως πολυλειτουργικό σύνθετο με χαρακτηριστικά συσκευής θερμοηλεκτρικής



Σχήμα 4.11: Η διακριτοποιημένη γεωμετρία της θερμοηλεκτρικής διάταξης (πιστό αντίγραφο της κατασκευασμένης πειραματικά) που χρησιμοποιείται στην αριθμητική διαδικασία πεπερασμένων στοιχείων για την συσκευή GF με δυνατότητα TEG.

γεννήτριας [8].

Η θερμοηλεκτρική συσκευή μοντελοποιήθηκε και μελετήθηκε με FEM έτσι ώστε να προσεγγιστεί η συμπεριφορά της υλοποιημένης στο πειραματικό εργαστήριο συσκευής που αποτελούνταν από δώδεκα (12) ζεύγη p,n ημιαγωγούς και Glass-Fiber (GF). Η συσκευή και τα επιμέρους τμήματά της - διακριτοί τομείς διακριτοποιήθηκαν ακολουθώντας, τις πειραματικές γεωμετρικές (xyz)-διαστάσεις, τους που ήταν για στρώματα τύπου p, n: $60\text{ mm} \times 5\text{ mm} \times 0.075\text{ mm}$ υιοθετώντας ένα μήκος διακριτοποίησης 0.9 mm . Επίσης η ύαλος είχε πραγματικές διαστάσεις $151\text{ mm} \times 78\text{ mm} \times 0.26\text{ mm}$ με μήκος διακριτοποίησης 2 mm και οι πλάκες αλουμινίου που χρησιμοποιούνται για την δημιουργία βαθμίδας θερμοκρασίας έχουν διαστάσεις $151\text{ mm} \times 29\text{ mm} \times 3.4\text{ mm}$ και μήκος διακριτοποίησης 5 mm . Η προαναφερθείσα διαδικασία διακριτοποίησης δημιούργησε συνολικά 185,500 κόμβους με 25,000 πραγματικά στοιχεία Σχήμα 4.11.

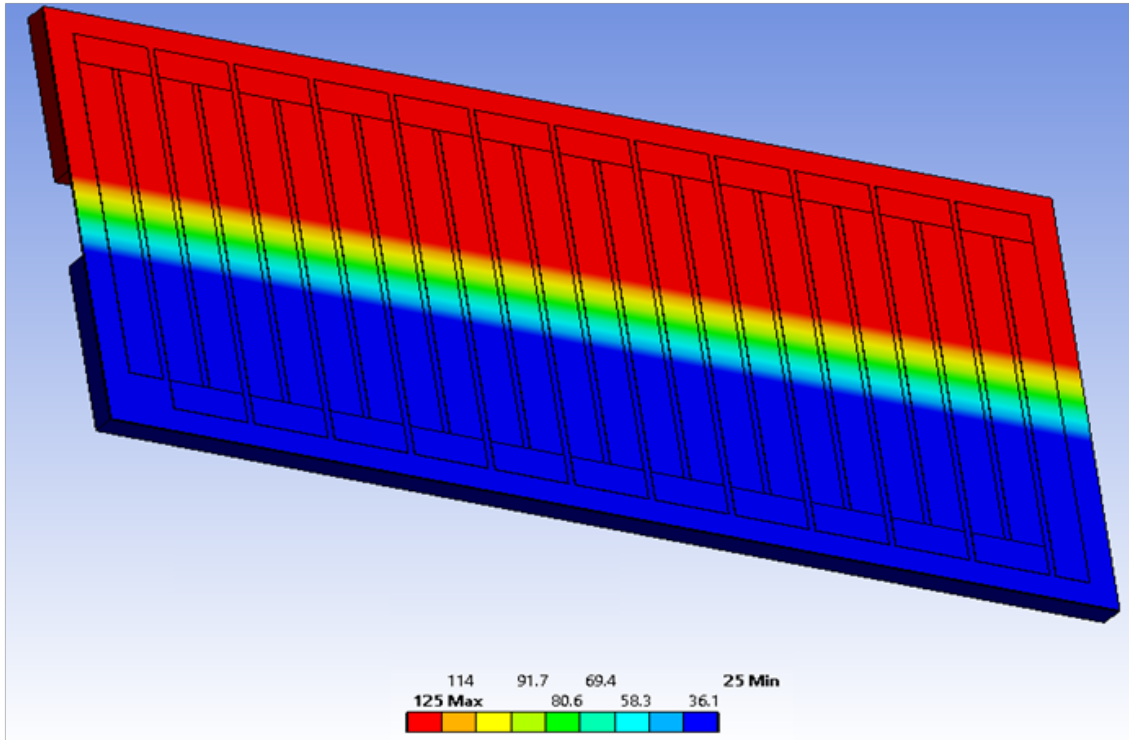
Όμοια με τις προηγούμενες συσκευές η λεπτή πολυμερική ρητίνη που χρησιμεύει ως συγκολλητικό μεταξύ των διαδοχικών στρωμάτων GF και ημιαγωγών μοντελοποιήθηκε ως επαφή που έχει ιδανική συμπεριφορά με υψηλή θερμική αγωγιμότητα ($\approx 10^7 W/(m^{\circ}C)$) και πολύ χαμηλή ηλεκτρική αγωγιμότητα ($\approx 10^{-7} \Omega^{-1}m^{-1}$). Έτσι διασφαλίζεται η απαραίτητη μεταφορά θερμικής ενέργειας δεν επιτρέπεται η ανεπιθύμητη μεταφορά ηλεκτρικού φορτίου μέσω των διεπαφών των διαδοχικών στρωμάτων.

Σε ό,τι αφορά στις συνοριακές συνθήκες η ψυχρή πλάκα αλουμινίου διατηρήθηκε σε θερμοκρασία $25^{\circ}C$ ενώ στη θερμή πλάκα αλουμινίου εφαρμόστηκαν διάφορες θερμοκρασίες προκειμένου να επιτευχθούν οι επιθυμητές θερμοκρασιακές κλίσεις. Τέλος η δεξιά πλευρά του πρώτου στρώματος ημιαγωγού τύπου n είχε τάση $0.0 V$ (γειωμένη) προκειμένου να κατευθύνει τη ροή ρεύματος που παράγεται από τη διαφορά θερμοκρασίας ΔT . Η πραγματική τάση εξόδου της συσκευής TE μετρήθηκε ως η διαφορά ηλεκτρικού δυναμικού μεταξύ του πρώτου και τελευταίου στρώματος ημιαγωγού. Οι ιδιότητες των υλικών η μοντελοποίηση για την προσομοίωση της συσκευής TE όπως θερμικές, ηλεκτρικές αγωγιμότητες, συντελεστές Seebeck υπαγορεύτηκαν από τις μετρούμενες τιμές (ενδεικτικά p τύπος $S_p = 26.0 \mu V/K$, n τύπος $S_n = -31.0 \mu V/K$).

4.3.2 Ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων

Οι κατανομές θερμοκρασίας και ηλεκτρικού δυναμικού είναι οι ποσότητες που ενδιαφέρουν και μελετήθηκαν στον διακριτοποιημένο χώρο της συσκευής. Αντιπροσωπευτικές κατανομές θερμοκρασίας φαίνονται για τη συσκευή στο Σχήμα 4.12. Οι αριθμητικά υπολογισμένες θερμοκρασίες δείχνουν μια ομαλή κατανομή μεταξύ της ψυχρής και της θερμής πλάκας αλουμινίου.

Το υπολογιζόμενο ηλεκτρικό δυναμικό και η σχετική κατανομή σε όλη τη συσκευή εμφανίζεται στο Σχήμα 4.13. Ερμηνεύοντας την πτώση τάσης



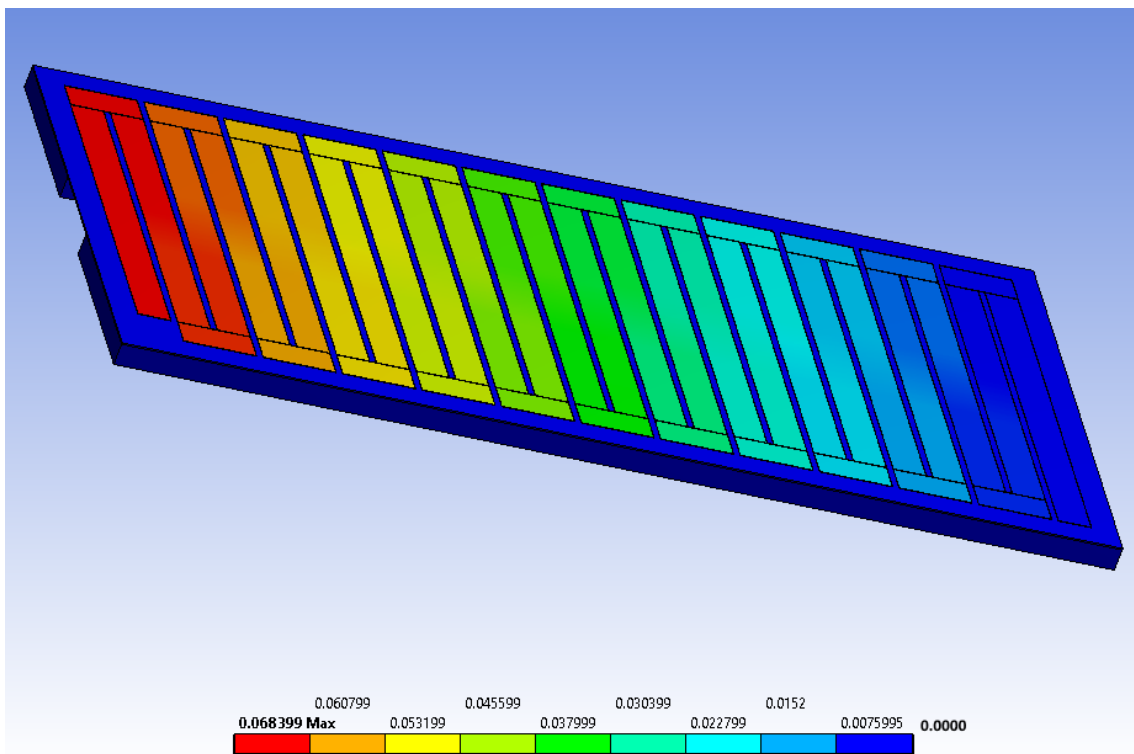
Σχήμα 4.12: Κατανομές θερμοκρασίας στη δομική συσκευή TEG όπως λαμβάνονται από αριθμητικούς υπολογισμούς FEM όπου οι τιμές θερμοκρασίας που εμφανίζονται στη γραμμή χρώματος είναι σε βαθμούς Κελσίου.

είναι ξεκάθαρη καθώς τα ηλεκτρόνια κινούνται μέσα από τα σειριακά συνδεδεμένα στρώματα ημιαγωγών n, p τύπου. Η διαφορά ηλεκτρικού δυναμικού μεταξύ του πρώτου και του τελευταίου ημιαγωγού (ελάχιστο και υψηλότερο, αντίστοιχα δυναμικό) ισοδυναμεί με την τάση ανοιχτού κυκλώματος της συσκευής TEG και μπορεί να υπολογιστεί για διάφορες θερμοκρασίες επιτρέποντας την προσομοίωση διαφορετικών συνθηκών λειτουργίας. Το εύρος θερμοκρασίας που χρησιμοποιήθηκε στις αριθμητικές προσομοιώσεις ήταν από 25 °C έως 100 °C ενώ οι πειραματικές μετρήσεις έγιναν σε δύο θερμοκρασιακές διαφορές $\Delta T=75, 100$ °C. Μια σύγκριση των αποτελεσμάτων φαίνεται στον Πίνακα 4.1.

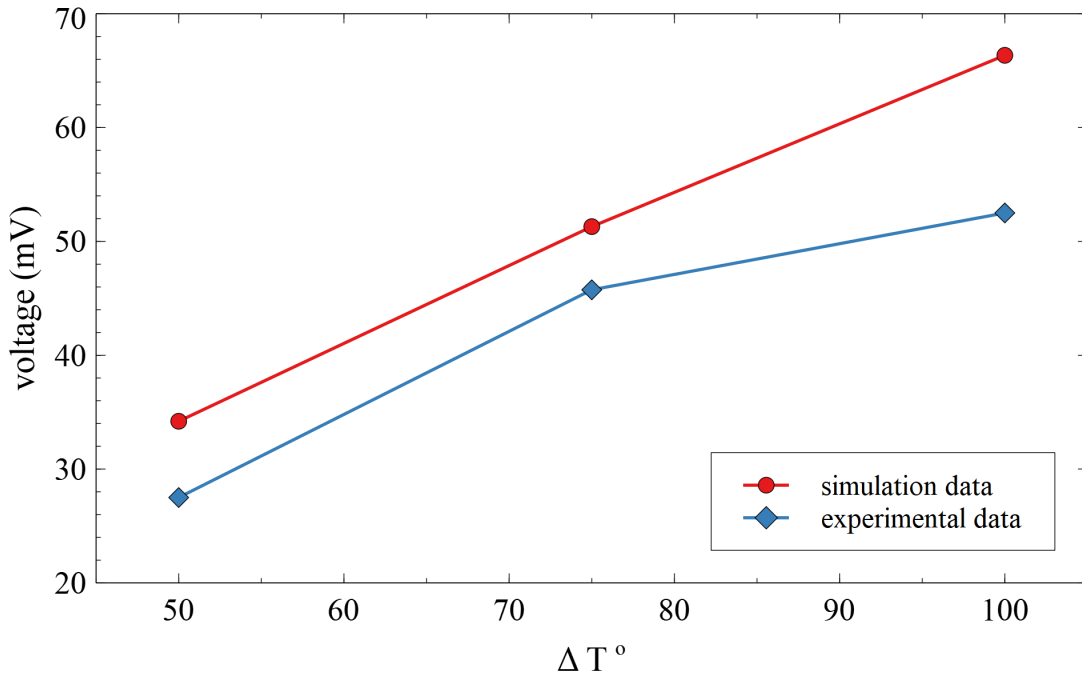
Η διαφορά τάσης ΔV κλιμακώνεται γραμμικά με διαφορά θερμοκρασίας ΔT , όπως αναμενόταν θεωρητικά (συντελεστής συσχέτισης ≈ 1 για τα δεδομένα προσομοίωσης) με την κλίση να είναι ίση με $6.77 \times 10^{-4} V^{\circ}C^{-1}$

T_{cold} °C	T_{hot} °C	ΔT °C	ΔV_{sim} Volt	ΔV_{exp} Volt
25	125	100	0.06635	0.05250
25	100	75	0.05130	0.04575
25	75	50	0.03420	0.0275

Πίνακας 4.1: Σύγκριση πειραματικών και υπολογιζόμενων τάσεων ανοιχτού κυκλώματος.



Σχήμα 4.13: Κατανομές ηλεκτρικού δυναμικού που λαμβάνονται από αριθμητικούς υπολογισμούς FEM όπου οι τιμές διαφοράς δυναμικού που εμφανίζονται στη γραμμή χρώματος είναι σε Volt.



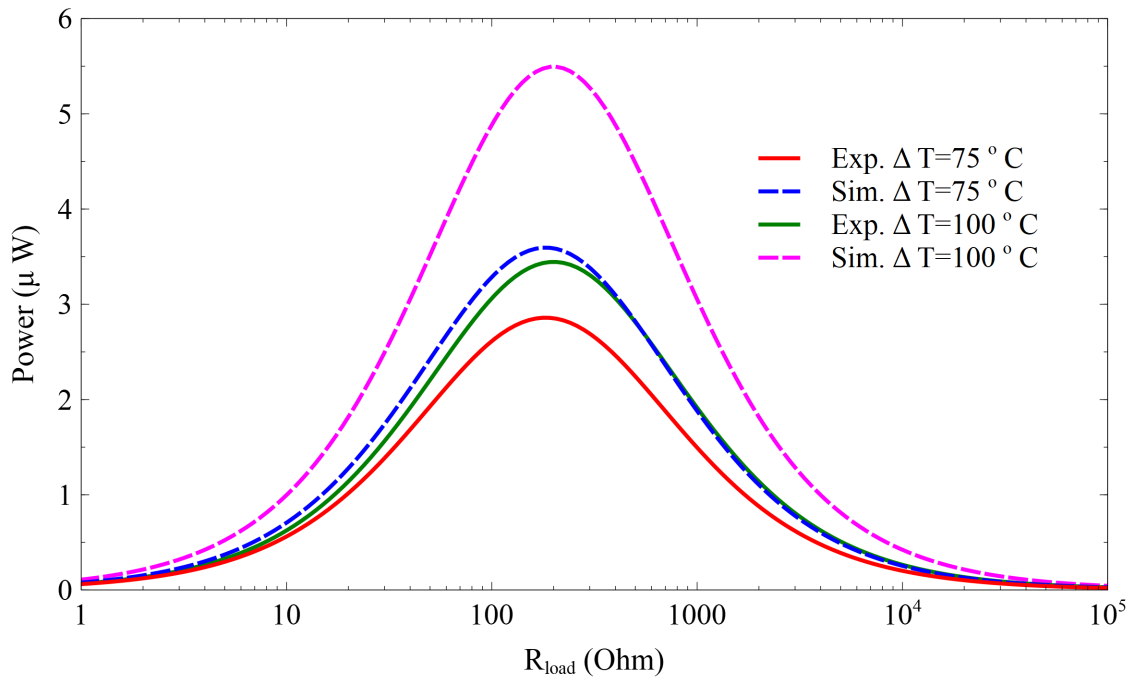
Σχήμα 4.14: Σύγκριση των τάσεων εξόδου της δομικής συσκευής TEG ως συνάρτηση των διαφορών θερμοκρασίας από τα δεδομένα προσομοίωσης FEM και τις πειραματικές μετρήσεις δεδομένων.

(677.00μV/K).

Δεδομένου ότι η συσκευή με 24 θερμοστοιχεία (αποτελούμενη από 12 p-,n-τύπου ζεύγη ημιαγωγών) , ο συντελεστής Seebeck για ένα ζεύγος p-n είναι ίσος με $5.64 \times 10^{-5} V^{\circ}C^{-1}$ ($56.40\mu V/K$) που είναι κοντά στην μέγιστη θεωρητικά υπολογισμένη τιμή του ζεύγους $|S_{p,npair}| = |S_{p-type}| + |S_{n-type}| = (2.6 + 3.1) \times 10^{-5} V^{\circ}C^{-1} = 5.710^{-5} V^{\circ}C^{-1}$ ($570\mu V/K$). Οι τιμές $S_p = 2.6 \times 10^{-5} V^{\circ}C^{-1}$, $S_n = 3.1 \times 10^{-5} V^{\circ}C^{-1}$ ελήφθησαν από τις πειραματικά μετρούμενες.

Πέρα από τις προαναφερθείσες εκτιμήσεις, οι τάσεις εξόδου που υπολογίζονται από την ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων είναι σε συμφωνία με τις μετρούμενες τάσεις όπως φαίνεται στο **Σχήμα 4.14** λαμβάνοντας υπόψη τις θερμικές και ηλεκτρικές απώλειες που υπάρχουν στην πειραματική διαδικασία.

Όπως αναφέρθηκε η θερμοηλεκτρική συσκευή, αποτελείται από 24 σειριακά διασυνδεδεμένα θερμοστοιχεία, με αποτέλεσμα να μετράται $R_{TEG}=200.00$



Σχήμα 4.15: Ισχύς εξόδου της δομικής συσκευής TEG ως συνάρτηση της διαφοράς θερμοκρασίας (ΔT $\Delta T=75-100^{\circ}C$) που προκύπτει από τις αριθμητικές προσομοιώσεις FEM και τις πειραματικές μετρήσεις. Οι τιμές μέγιστης ισχύος εμφανίζονται όταν το R_{Load} ταιριάζει με την εσωτερική αντίσταση TEG (R_{TEG}) των 183 και 200 Ohm (πειραματικά μετροημένα στις θερμοκρασίες των $100^{\circ}C$ και $125^{\circ}C$ αντίστοιχα).

($125^{\circ}C$) και $R_{TEG}=183.00\ Ohm$ ($100^{\circ}C$) συνολική ωμική αντίσταση. Για να ληφθεί η μέγιστη εξωτερική ισχύς από μια πηγή με πεπερασμένη εσωτερική αντίσταση, σύμφωνα με το θεώρημα μεταφοράς μέγιστης ισχύος, η αντίσταση του φορτίου πρέπει να ισούται με την αντίσταση της πηγής. Η μέγιστη ισχύς της προτεινόμενης συσκευής είναι ίση με $P_{max}=(V_{TEG}^2)/(4R_{TEG})$ όπου V_{TEG} είναι η πραγματική τάση ανοιχτού κυκλώματος (V_{oc}) ή η διαφορά τάσης ΔV . Η υπολογιζόμενη ισχύς εξόδου της συσκευής ως συνάρτηση της διαφοράς θερμοκρασίας παρουσιάζονται στο Σχήμα 4.15 μαζί με τις πειραματικές μετρήσεις. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης βρίσκονται σε καλή συμφωνία με τις πειραματικές μετρήσεις.

Βιβλιογραφία

- [1] G. Karalis, L. Tzounis, K. Tsirka, C. K. Mytafides, A. Voudouris Itskaras, M. Liebscher, E. Lambrou, L. N. Gergidis, N.-M. Barkoula, and A. S. Paipetis, “Advanced glass fiber polymer composite laminate operating as a thermoelectric generator: A structural device for micropower generation and potential large-scale thermal energy harvesting,” *ACS Applied Materials & Interfaces*, vol. 13, no. 20, pp. 24138–24153, 2021.
- [2] C. K. Mytafides, L. Tzounis, G. Karalis, K. Tsirka, M. Liebscher, E. Lambrou, L. Gergidiss, and A. S. Paipetis, “A hierarchically modified fibre-reinforced polymer composite laminate with graphene nanotube coatings operating as an efficient thermoelectric generator.” unpublished, 2024.
- [3] J. L. Blackburn, A. J. Ferguson, C. Cho, and J. C. Grunlan, “Carbon-Nanotube-Based thermoelectric materials and devices,” *Adv Mater*, vol. 30, Jan. 2018.
- [4] G. Karalis, L. Tzounis, C. K. Mytafides, K. Tsirka, P. Formánek, M. M. Stylianakis, E. Kymakis, and A. S. Paipetis, “A high performance flexible and robust printed thermoelectric generator based on hybridized te nanowires with pedot:pss,” *Applied Energy*, 2021.
- [5] G. Karalis, L. Tzounis, E. Lambrou, L. N. Gergidis, and A. S. Paipetis, “A carbon fiber thermoelectric generator integrated as a lamina within an 8-ply laminate epoxy composite: Efficient thermal energy harvesting by advanced structural materials,” *Applied Energy*, vol. 253, p. 113512, 2019.
- [6] H. Wang, J.-H. Hsu, S.-I. Yi, S. L. Kim, K. Choi, G. Yang, and C. Yu, “Thermally driven large N-Type voltage responses from hybrids of carbon nanotubes and poly(3,4-ethylenedioxythiophene) with

tetrakis(dimethylamino)ethylene,” *Adv Mater*, vol. 27, pp. 6855–6861, Oct. 2015.

- [7] C.-K. Mai, B. Russ, S. L. Fronk, N. Hu, M. B. Chan-Park, J. J. Urban, R. A. Segalman, M. L. Chabinyk, and G. C. Bazan, “Varying the ionic functionalities of conjugated polyelectrolytes leads to both p- and n-type carbon nanotube composites for flexible thermoelectrics,” *Energy Environ. Sci.*, vol. 8, pp. 2341–2346, 2015.
- [8] A. Voudouris-Itskarar, G. Karalis, L. Koutsotolis, K. Tsirka, E. Lambrou, L. N. Gergidis, and A. S. Paipetis, “Fiber reinforced polymer composites with self-powered sensing capabilities an experimental and simulation study,” in *Proc. Lausanne, Composite Construction Laboratory European Conference on Composite Materials (ECCM20)* (A. Vassilopoulos and V. Michaud, eds.), vol. 6, pp. 201–207, EPFL Lausanne, Composite Construction Laboratory, Nov. 2022.

Κεφάλαιο 5

Θεωρία Διήθησης - Υπολογισμός

θερμικών και ηλεκτρικών

αγωγιμοτήτων σε μέσο και μακρο

κλίμακα

5.1 Percolation Theory σε τυχαίο υλικό

Με τον όρο διήθηση (percolation) ορίστηκε αρχικά η κίνηση - φιλτράρισμα ρευστών μέσω πορωδών υλικών, όπως τα κοκκώδη υλικά. Περιγράφεται από το νόμο του Darcy, ο οποίος δηλώνει ότι ο ρυθμός ροής ενός ρευστού μέσω πορώδους μέσου είναι ανάλογος της βαθμίδας πίεσης στο ρευστό [1]. Με άλλα λόγια, η διήθηση συμβαίνει όταν ένα υγρό κινείται αργά μέσα από ένα μέσο που έχει πολύ μικρές τρύπες σε αυτό.

Δημιουργείται λοιπόν το εξής: αν υποθεθεί ότι υγρό χύνεται πάνω από κάποιο πορώδες υλικό, θα μπορέσει το υγρό να κάνει το δρόμο του από πόρο σε πόρο και να φτάσει στην βάση του υλικού; Αυτή η φυσική ερώτηση μοντελοποιείται μαθηματικά ως ένα τρισδιάστατο δίκτυο $n \times n \times n$ κορυφών,

που ονομάζονται θέσεις, στις οποίες η άκρη ή οι δεσμοί μεταξύ κάθε δύο γειτόνων μπορεί να είναι ανοιχτοί (επιτρέποντας στο υγρό να περάσει) με πιθανότητα p , ή κλειστά με πιθανότητα $1 - p$, και θεωρείται ότι είναι ανεξάρτητα.

Επομένως η μαθηματικά ισοδύναμη ερώτηση γίνεται: για ένα δεδομένο p , ποια είναι η πιθανότητα να υπάρχει ανοιχτό μονοπάτι από την κορυφή μέχρι την βάση του υλικού;. Το πρόβλημα που αναφέρθηκε και ονομάζεται διήθηση δεσμών (bond percolation), εισήχθη στη μαθηματική βιβλιογραφία από τους Broadbent & Hammersley (1957) [2] και έχει μελετηθεί εντατικά. Η συμπεριφορά για μεγάλα n έχει μεγάλο ενδιαφέρον διότι προσομοιάζει τα πραγματικά υλικά που χρησιμοποιούνται στις ανθρώπινες εφαρμογές. Σε ένα ελαφρώς διαφορετικό μαθηματικό μοντέλο για την περιγραφή το υλικού, μια τοποθεσία είναι κατειλημμένη με πιθανότητα p ή κενή με πιθανότητα $1 - p$. Το αντίστοιχο πρόβλημα ονομάζεται διήθηση τοποθεσίας (site percolation). Το ερώτημα είναι το ίδιο: για ένα δεδομένο p , ποια είναι η πιθανότητα να υπάρχει ένα μονοπάτι μεταξύ πάνω και κάτω πλευράς; Η ίδια ερώτηση, δηλαδή ποια η κρίσιμη πιθανότητα κατάληψης όπου έχουμε διάδοση ενός υγρού από την άνω επιφάνεια προς την κάτω, είναι δυνατό να τεθεί για οποιαδήποτε διάσταση πλέγματος.

Στην πράξη είναι πιο εύκολο να εξεταστούν άπειρα δίκτυα παρά απλά μεγάλα. Σε αυτή την περίπτωση το φυσικό ερώτημα γίνεται: υπάρχει ένα άπειρο ανοιχτό σύμπλεγμα; Δηλαδή υπάρχει μια διαδρομή συνδεδεμένων σημείων απεριόριστου μήκους μέσω του δικτύου; Σύμφωνα με τον νόμο μηδέν – ένα του Kolmogoroff [3], για κάθε δεδομένο p , η πιθανότητα ύπαρξης μιας άπειρης συστάδας είναι είτε μηδέν (0) είτε ένα (1). Εφόσον αυτή η πιθανότητα είναι μια αυξανόμενη συνάρτηση του p , υπάρχει ένα κρίσιμο p_c κάτω από την οποία η πιθανότητα είναι πάντα 0 και πάνω από την οποία η πιθανότητα είναι πάντα 1.

Η πρώιμη εργασία των Flory-Stockmayer [4], [5], μπορεί να ενταχθεί στο γενικότερο πλαίσιο της percolation αφού είναι δυνατό να αναχθεί στο πως από δομικά στοιχεία (π.χ. πολυμερή) και μέσω τυχαίων διεργασιών οδηγείται στο σχηματισμό μεγαλύτερων οντοτήτων και στο δίκτυο που αυτά σχηματίζουν (ζελατινοποίηση).

Το 1949 η Rosalind Franklin [6], από την έρευνα που πραγματοποίησε για την πυκνότητα και το πορώδες του άνθρακα, έδειξε ότι οι πόροι του άνθρακα αποτελούνται από μικρο δομές διαφόρων μηκών που λειτουργούν ως ένα μικροσκοπικό κόσκινο για τη διάκριση των αερίων. Ανακάλυψε επίσης ότι το μέγεθος αυτών των δομών εξαρτάται από τη θερμοκρασία της ενανθράκωσης κατά την παραγωγή άνθρακα.

Στα μέσα της δεκαετίας του 1950, ο S. Broadbent μελέτησε το ερώτημα πώς ένα ρευστό μπορεί να διαχέεται στους πόρους του άνθρακα, διαμορφωμένο ως ένας τυχαίος λαβύρινθος από ανοιχτές ή κλειστές σήραγγες. Οι Broadbent και Hammersley εισήγαγαν στο άρθρο τους του 1957 [2] ένα μαθηματικό μοντέλο για να μοντελοποιήσουν το φαινόμενο percolation. Στις επόμενες δεκαετίες που ακολούθησαν ένα μεγάλο πλήθος εργασιών με θέμα την διήθηση δημοσιεύθηκαν.

Για τα περισσότερα γραφήματα άπειρου πλέγματος, το p_c δεν μπορεί να υπολογιστεί ακριβώς (μέσω αναλυτικών μεθόδων), αν και σε ορισμένες περιπτώσεις το p_c υπάρχει μια ακριβής τιμή. Για το τετράγωνο πλέγμα σε δύο διαστάσεις, $p_c = 1/2$, και τη διήθηση δεσμών, [7]. Για τη διήθηση θέσης, η τιμή του p_c δεν έχει υπολογιστεί αναλυτικά αλλά μόνο μέσω προσομοιώσεων μεγάλων πλεγμάτων και μια αποδεκτή τιμή είναι η 0.59274621 [8].

5.2 Βασικές Έννοιες

Η θεωρία της διήθησης (percolation theory) προέκυψε από την ανάγκη ανάπτυξης μιας θεωρίας που ομαδοποιεί τα φαινόμενα μετασχηματισμών φάσης. Στη στατιστική φυσική και τα μαθηματικά, η percolation theory περιγράφει τη συμπεριφορά ενός δικτύου όταν προστίθενται κόμβοι ή σύνδεσμοι. Περιγράφεται έτσι μια μετάβασης φάσης, καθώς σε ένα κρίσιμο κλάσμα p_c το δίκτυο των μικρών, αποσυνδεδεμένων συστάδων clusters συγχωνεύεται σε σημαντικά μεγαλύτερες συνδεδεμένες, τα λεγόμενα spanning clusters. Είναι μια από τις απλούστερες στατιστικές προσεγγίσεις που επιλύει προβλήματα σχετικά με κρίσιμα φαινόμενα. Παραδείγματα τέτοιων παραμέτρων είναι η θερμική ηλεκτρική αγωγιμότητα, η μαγνητική επιδεκτικότητα, το μέτρο του Young, η ροή υγρών σε πορώδη μέσα, η διάδοση μεταδιδόμενων ασθενειών στον πληθυσμό, και φυσικά η μετάβαση από τη μονωτική στην αγώγιμη φάση σε σύνθετα και νανοσύνθετα υλικά σε σύναρτηση με την συγκέντρωση ενός μείγματος - σύνθετου υλικού.

Στον επιστημονικό τομέα της θεωρίας percolation τα προβλήματα που επιλύονται ακολουθούν μια σχετικά απλή φυσική αρχή. Η συμπεριφορά όμως του φυσικού συστήματος εξαρτάται από ένα πολύ μεγάλο πλήθος φυσικών παραμέτρων και μεταβλητών όπου καθιστά εξαιρετικά δύσκολη την επίτευξη της πραγματικής λύσης εκτός εάν επινοηθούν έξυπνες μεθοδολογίες [9]. Η σχετική θεωρία percolation έχει αναπτυχθεί σε τρεις βασικές παραλλαγές: δεσμών, θέσεων και διήθηση συνεχούς. Οι δεσμοί και οι θέσεις χρησιμοποιούνται στην διήθηση πλεγμάτων ενώ η αντίστοιχη του συνεχούς χρησιμοποιείται στην προσομοίωση περισσότερο πραγματικών φυσικών συστημάτων.

Τα κατώφλια διήθησης, δηλαδή η κρίσιμη τιμή της φυσικής παραμέτρου όπου το σύστημα αλλάζει συμπεριφορά, μελετήθηκαν αρχικά από τους Broadbent και Hammersley [2] όπου εισήγαγαν μοντέλα πλέγματος για

τη ροή ενός υγρού μέσω ενός στατικού τυχαίου μέσου. Με την υιοθέτηση ενός φορμαλιστικού πλαισίου έδειξαν ότι δεν θα ρέει υγρό από την άνω πλευρά προς την κάτω πλευρά ενός μέσου εάν η συγκέντρωση του δραστικού παράγοντα (στην συγκεκριμένη περίπτωση πορώδες) είναι μικρότερη από μια κρίσιμη οριακή τιμή. Εισήγαγαν επίσης την έννοια της πιθανότητας percolation, η οποία ορίζει και την κρίσιμη πιθανότητα με την οποία οποιαδήποτε περιοχή του μέσου είναι επαρκώς συνδεδεμένη με το υπόλοιπο μέσο ώστε να επιτευχθεί αγωγιμότητα στο σύνολο του μέσου. Αργότερα δείχθηκε ότι κοντά την περιοχή της μετάβασης η ιδιότητα που μεταβάλλεται (π.χ. ηλεκτρική, θερμική αγωγιμότητα), εμφανίζει έντονα μη γραμμική συμπεριφορά που εκφράζεται μέσω της **Εξίσωσης 5.1** (**Σχήμα 5.1**).

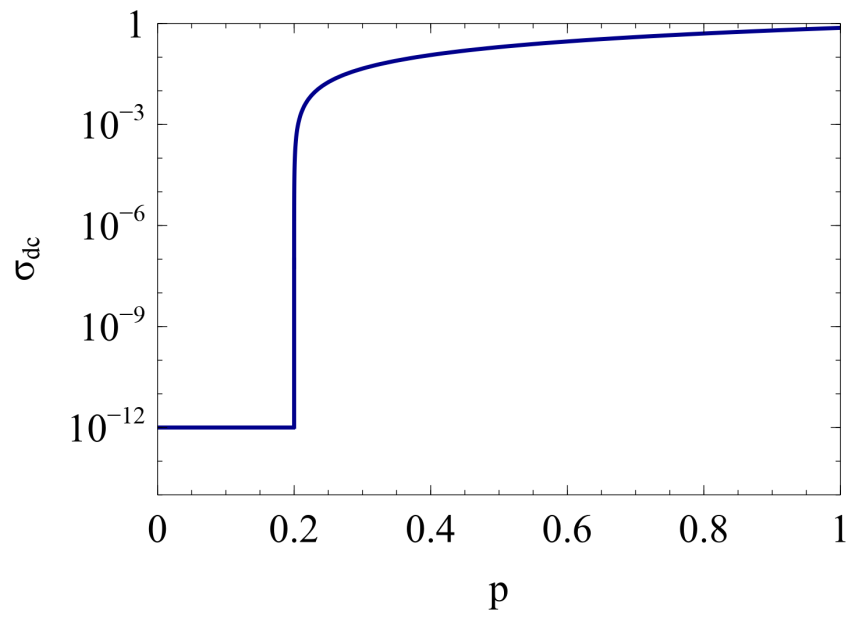
$$\sigma \propto (p - p_c)^t \quad (5.1)$$

Όπου p και p_c είναι η συγκέντρωση και το κατώφλι percolation αντίστοιχα, του αγωγίμου εγκλείσματος. Ανάλογη είναι η συμπεριφορά και άλλων ιδιοτήτων όπως η διηλεκτρική σταθερά:

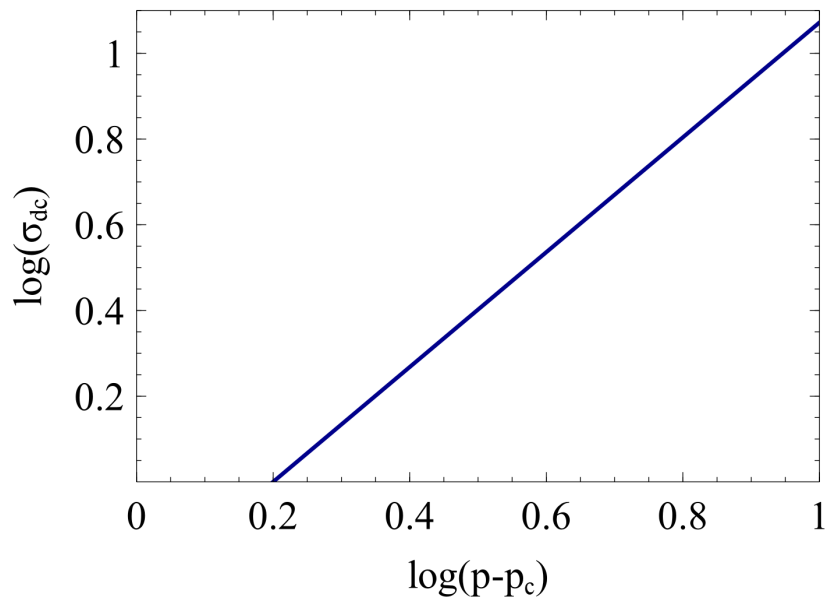
$$\epsilon_r \propto (p - p_c)^{-s} \quad (5.2)$$

Οι εκθέτες t και s ονομάζονται κρίσιμοι εκθέτες και εξαρτώνται μόνο από τη διαστατικότητα του δικτύου [10] (2D, 3D), και υπολογίζονται από τα διαγράμματα log-log (**Σχήμα 5.2**).

Ο θεωρητικός - αναλυτικός υπολογισμός του κατωφλιού διήθησης συνθέτων που αποτελούνται από μια μονωτική μήτρα και από αγωγίμα εγκλείσματα ποικίλων σχημάτων (σφαιρικά, κυλινδροειδή, επίπεδα δισκία, κ.τ.λ.), έχει επιχειρηθεί μέσω διάφορων προσεγγίσεων οι οποίες στηρίζονται στη θεωρία ενεργού μέσου (mean-field theory), στη θεωρία του απο-



Σχήμα 5.1: Μοντέλο αγωγιμότητας.



Σχήμα 5.2: Μοντέλο αγωγιμότητας σε $\log(\sigma_{dc})\log(p - p_c)$ διάγραμμα.

κλειόμενου όγκου (excluded volume theory), καθώς και σε άλλες εμπειρικές μεθόδους. Μεταξύ αυτών των τριών προσεγγίσεων, εκείνη η οποία προσεγγίζει καλύτερα τις πειραματικές τιμές, είναι η θεωρία του αποκλειόμενου όγκου [11].

Η επίλυση του προβλήματος percolation επιλύεται επίσης και αριθμητικά με την βοήθεια της μεθόδου Monte Carlo. Σύμφωνα με αυτή δημιουργούνται τυχαία δείγματα με ένα συγκεκριμένο κλάσμα όγκου και για κάθε δείγμα κατασκευάζονται συνθετικά σωματίδια στις δύο (2) ή τρεις (3) διαστάσεις. Εξετάζεται στην συνέχεια εάν υπάρχει ένα συσσωμάτωμα το οποίο να εκτείνεται από την μια πλευρά προς την απέναντί της. Από τις διάφορες τυχαίες υλοποιήσεις υπολογίζεται η μέση συμπεριφορά πόσα δηλαδή δείγματα είναι θετικά. Οι αλγόριθμοι που έχουν σχεδιαστεί ειδικά για να διαπιστωθεί εάν υπάρχει ένα συσσωμάτωμα (cluster), που να εκτείνεται ανάμεσα από δυο πλευρές είναι οι ακόλουθες:

- Ο αλγόριθμος Hoshen & Kopelman - (HK) αναφέρεται επίσης ως Cluster multiple labeling technique [12, 13] που προέρχεται από η θεωρία γραφημάτων,
- Depth first search (DFS) και Breath first search (BFS) χρησιμοποιούνται επίσης για την εύρεση συσσωματωμάτων σε ένα δίκτυο και,
- Burning αλγόριθμος που μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε προβλήματα percolation και σε τρεις διαστάσεις (3D) για ανεξάρτητη διήθηση φάσης [10].

Οι παραπάνω αλγόριθμοι χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των κατανομών των πιθανοτήτων και παρέχουν ακριβείς υπολογισμούς για την κρίσιμη πιθανότητα percolation p_c . Επιπρόσθετα οι αλγόριθμοι αυτοί είναι εξαιρετικά αποτελεσματικοί όσον αφορά τη χρήση μνήμης και την υπολογιστική ταχύτητα.

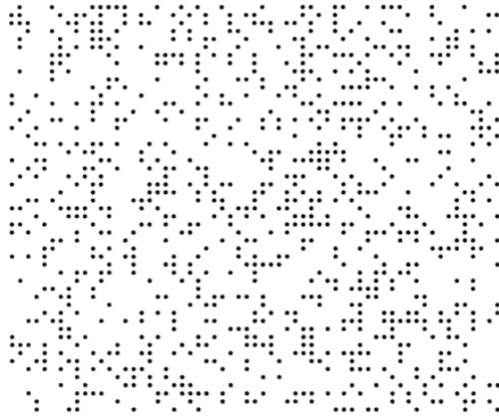
5.2.1 Κρίσιμη Πιθανότητα

Όταν ερευνώνται οι μεταβολές φάσεων το ζητούμενο είναι να διαπιστωθεί πως γίνεται η μετάβαση από τη μία κατάσταση στην άλλη. Ξεκινώντας από πιθανότητα κατάληψης ($p = 0.0$), και αυξάνοντας την, κάποιες θέσεις θα καταληφθούν και ήδη από μικρές τιμές της p θα εμφανιστούν τα πρώτα συμπλέγματα μεταξύ κοντινών γειτόνων. Περαιτέρω αύξηση της πιθανότητας οδηγεί σε ακόμη μεγαλύτερα συμπλέγματα, μέχρι που για κάποια τιμή της, την p_c , θα δημιουργηθεί ένα σύμπλεγμα που θα ξεκινά από το ένα άκρο του πλέγματος και θα φτάνει μέχρι το άλλο (percolating - infinite cluster / άπειρο σύμπλεγμα). Η πιθανότητα p_c ονομάζεται κρίσιμη (critical probability) και έχει συγκεκριμένη τιμή για κάθε είδος πλέγματος.

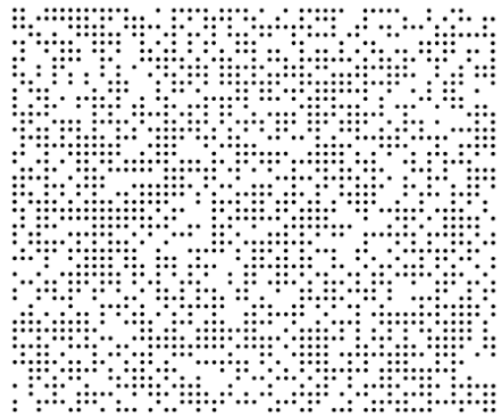
Η ύπαρξη μίας ποσότητας που χαρακτηρίζεται ως κρίσιμη έχει ιδιαίτερη σημασία από φυσικής άποψης αφού αυτή αποτελεί διαχωριστικό σημείο για διαφορετικές φάσεις του συστήματος. Η p_c αποτελεί ουσιαστικά ένα κατώφλι πάνω από το οποίο μεταβάλλονται οι ιδιότητες του συστήματος. Αν για παράδειγμα μελετάται η διάδοση ηλεκτρικού ρεύματος τότε, κάτω από την p_c το υλικό θα συμπεριφέρεται ως μονωτής, ενώ πάνω από αυτή ως αγωγός.

5.2.2 Ασυνεχές Μοντέλο

Στο «Ασυνεχές Μοντέλο» και ειδικότερα το «κατάληψης θέσεων» ένα υλικό προσομοιάζεται ως τυχαίες θέσεις σε ένα πλέγμα. Έχει μελετηθεί εντατικά και μπορεί να δώσει την πιθανότητα διήθησης από μια πλευρά στην απέναντι παρέχοντας ποιοτικές κυρίως αλλά και ποσοτικές πληροφορίες μέσω των σχέσεων κλιμάκωσης για ιδιότητες υλικού όπως ηλεκτρικές αγωγιμότητα ή διαπερατότητα μεταξύ άλλων [10]. Για τη λύση του προβλήματος, το μέσο χωρίζεται ιδανικά σε στοιχειώδες τμήματα που α-

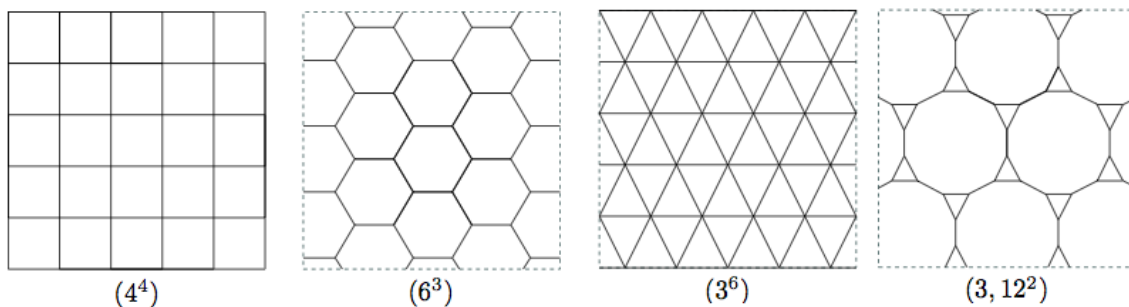


(α). $p=0.3$.



(β). $p=0.6$.

Σχήμα 5.3: Για την (α) δεν υπάρχει percolation ενώ για την (β) υπάρχει ένα σύμπλεγμα το οποίο διατρέχει το μέσο από την πάνω έως την κάτω πλευρά.



Σχήμα 5.4: Τα 4 συχνότερα χρησιμοποιούμενα Αρχιμήδεια Πλέγματα, στα οποία όλα τα πολύγωνα είναι κανονικά και κάθε κορυφή περιβάλλεται από την ίδια ακολουθία πολυγώνων. Ο συμβολισμός “ $(3,12^2)$ ”, για παράδειγμα, σημαίνει ότι κάθε κορυφή περιβάλλεται από ένα τρίγωνο και δύο δωδεκάγωνα [15].

ντιπροσωπεύουν ένα γεωμετρικό πλέγμα. Στη βιβλιογραφία μια σειρά από τύπους πλεγμάτων χρησιμοποιούνται (τριγωνικό, τετράγωνο, Kagome) Σχήμα 5.4, προκειμένου να προσομοιάσουν πραγματικά υλικά ή να απλοποιήσουν αναλυτικούς υπολογισμούς [14] για το πρόβλημα της percolation.

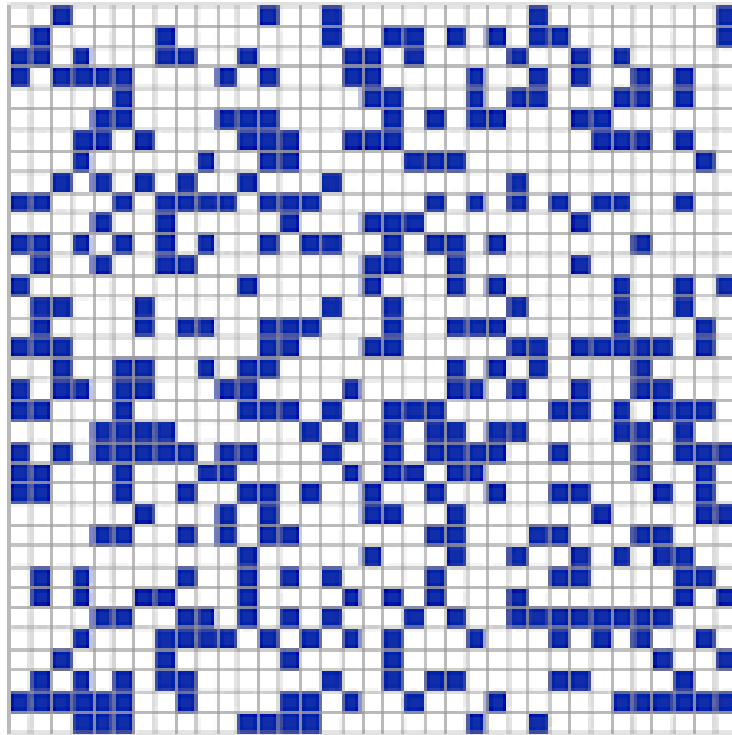
Υπάρχουν δύο κατηγορίες για το ασυνεχές τετραγωνικό μοντέλο:

- θέσεων και
- δεσμών.

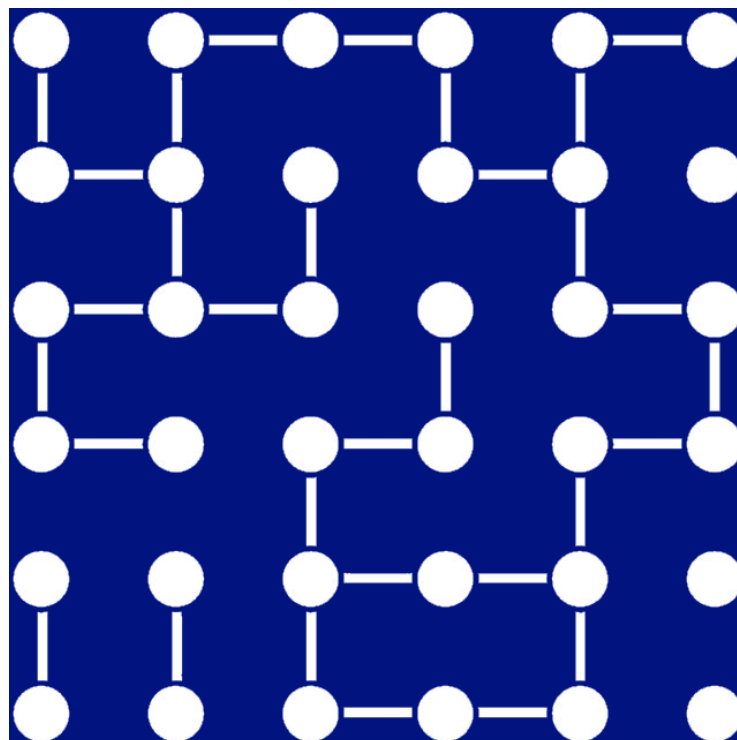
Στην πρώτη κατηγορία καταλαμβάνονται οι θέσεις εντός του πλέγματος (Σχήμα 5.5.α) ενώ στη δεύτερη καταλαμβάνονται δεσμοί μεταξύ των θέσεων Σχήμα 5.5.β [10].

Αφού αναπαρασταθεί το μέσο ως θέσεις σε πλέγμα, συνήθως ως πιθανότητα κατάληψης μια θέσης, στην συνέχεια εξετάζεται εάν υπάρχει διαδρομή διήθησης που ενώνει την επάνω πλευρά με την κάτω πλευρά του. Οι γειτονικές θέσεις που συμμετέχουν στην διάδοση είναι τέσσερις (επάνω, κάτω αριστερά και δεξιά) Σχήμα 5.6.α. Είναι δυνατό να συμμετέχουν και οι διαγώνιοι γείτονες όμως η κρίσιμη πιθανότητα αλλάζει Σχήμα 5.6.β.

Θα πρέπει να αναφερθεί ότι μέχρι σήμερα δεν έχει βρεθεί ακριβής αναλυτική λύση για το πρόβλημα της percolation σε τετράγωνο πλέγμα με

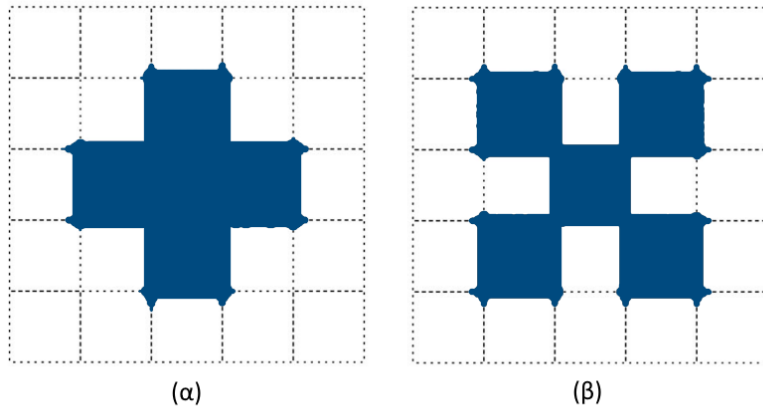


α. Ασυνεχές Μοντέλο κατάληψης θέσεων - τετραγωνικό πλέγμα.



β. Ασυνεχές Μοντέλο κατάληψης δεσμών.

Σχήμα 5.5: Ασυνεχές Μοντέλο κατάληψης θέσεων και κατάληψης δεσμών.



Σχήμα 5.6: Τέσσερις πλησιέστεροι γείτονες (α) και επόμενων-πλησιέστερων γειτόνων (β).

μοντέλο κατάληψης θέσεων. Η λύση δίνεται μόνο αριθμητικά - με πολύ καλή προσέγγιση. Σύμφωνα με τους Suding και Ziff [14] αλλά και τον Jacobsen [16], η κρίσιμη πιθανότητα διήθησης για το τετράγωνο πλέγμα κατάληψης θέσεων (για άπειρο μέσο) είναι περίπου $p_c \approx 0.5927$ ενώ για τις τρεις διαστάσεις σε κυβική τοποθεσία η γεωμετρία είναι $p_c \approx 0.31160$ (Lorenz and Ziff [17], Koza and Pola [18]).

Αν και αρχικά θεωρήθηκε ότι η διήθηση απλώς συνδυάζει τμήματα διαφόρων μαθηματικών θεωριών όπως η συνδυαστική ανάλυση και η θεωρία πιθανοτήτων, σύντομα έγινε σαφές πως πρόκειται για ένα αντικείμενο με μεγάλο βάθος. Ως αποτέλεσμα τα τελευταία 60 χρόνια πολλοί φυσικοί και μαθηματικοί ασχολήθηκαν με το θεωρητικό υπόβαθρο και την πρακτική διερεύνηση των δυνατοτήτων της θεωρίας percolation. Η ανάγκη υπολογιστικής επιβεβαίωσης των συμπερασμάτων τους οδήγησε στην ανάπτυξη πολύ ισχυρών τεχνικών προσομοίωσης, οι οποίες σήμερα αποτελούν αναπόσπαστο κομμάτι της έρευνας στο συγκεκριμένο πεδίο.

5.2.3 Μεταβάσεις Φάσεων

Στο σύγχρονο σχήμα ταξινόμησης, οι μεταβάσεις φάσεων χωρίζονται σε δύο μεγάλες κατηγορίες, που ονομάζονται παρόμοια με τις τάξεις Ehrenfest [19] πρώτης και δεύτερης τάξης. Οι μεταβάσεις φάσης πρώτης τάξης είναι αυτές που περιλαμβάνουν λανθάνουσα θερμότητα. Κατά τη διάρκεια μιας τέτοιας μετάβασης, ένα σύστημα είτε απορροφά είτε απελευθερώνει μια σταθερή ποσότητα ενέργειας ανά όγκο. Κατά τη διάρκεια αυτής της διαδικασίας, η θερμοκρασία του συστήματος θα παραμείνει σταθερή καθώς προστίθεται θερμότητα. Το σύστημα βρίσκεται σε ένα καθεστώς, μικτής φάσης στο οποίο ορισμένα μέρη του συστήματος έχουν ολοκληρώσει τη μετάβαση και άλλα όχι. Γνωστά παραδείγματα είναι το λιώσιμο του πάγου ή ο βρασμός του νερού. Οι μεταβάσεις φάσης πρώτης τάξης εξαρτώνται από τις μικροσκοπικές λεπτομέρειες του συστήματος, επομένως δεν μαθαίνουμε πολλές πληροφορίες από την ανάλυση του.

Οι μεταβάσεις φάσης δεύτερης τάξης ονομάζονται επίσης συνεχείς μεταβάσεις φάσης. Χαρακτηρίζονται από μια αποκλίνουσα επιδεκτικότητα, ένα άπειρο μήκος συσχέτισης και μια αποσύνθεση του νόμου δύναμης (power law) κοντά στην κρίσιμότητα. Παραδείγματα μεταβάσεων φάσης δεύτερης τάξης είναι η σιδηρομαγνητισμός, η υπεραγωγιμότητα, ο ηλεκτρισμός καθώς και η μετάβαση σε υπερ-ρευστό. Οι μικροσκοπικές λεπτομέρειες χάνονται λόγω του αποκλίνοντος μήκους συσχέτισης. Αναμένεται λοιπόν ότι οι συνεχείς μεταβάσεις φάσης θα ταξινομηθούν σε κατηγορίες καθολικότητας. Δηλαδή στο κρίσιμο σημείο, οι ιδιότητες ακολουθούν την σχέση δύναμης με ορισμένους κρίσιμους εκθέτες σε σχέση με την παράμετρο. Μπορούν να χρησιμοποιηθούν καθιερωμένες τεχνικές όπως η επανακανονικοποίηση για την εξαγωγή πληροφοριών των κρίσιμων εκθετών των κρίσιμων σημείων [20].

Στην παρούσα εργασία μελετώνται οι συνεχείς μεταβάσεις όπου δια-

κρίνονται κοντά στο κρίσιμο σημείο η υποκρίσιμη και το κρίσιμο σημείο

Στην υποκρίσιμη φάση, αρχικά για μικρές συγκεντρώσεις ($p < p_c$) το ποσοστό συγκέντρωσης των σωματιδίων στο μεγαλύτερο cluster είναι οριακά πάνω από το μηδέν. Αυτό συμβαίνει διότι για μικρές συγκεντρώσεις, υπάρχουν πολλά μικρά clusters. Όσο η συγκέντρωση μεγαλώνει, σχηματίζονται όλο και περισσότερα clusters μικρού μεγέθους. Για κάποια πιθανότητα συγκέντρωσης, θα υπάρχουν κάποια σημεία που όταν καλυφθούν θα ενώσουν δύο ή και περισσότερα clusters. Έτσι βλέπουμε ότι το spanning cluster σχηματίζεται πολύ απότομα στην κρίσιμη περιοχή. Από την κρίσιμη πιθανότητα και πάνω το μεγαλύτερο cluster είναι και το spanning cluster, άρα η πιθανότητα ένα καινούργιο σωματίδιο να προσκολληθεί στο spanning cluster αυξάνει και αυτή πολύ απότομα. Έτσι η καμπύλη αυξάνεται απότομα. Το κύριο γεγονός στην υποκρίσιμη φάση είναι η «εχθετική αποσύνθεση». Δηλαδή, όταν $p < p_c$, η πιθανότητα ένα συγκεκριμένο σημείο (π.χ. η αρχή) να περιέχεται σε ένα ανοιχτό σύμπλεγμα μεγέθους r μειώνεται στο μηδέν εκθετικά. Αυτό αποδείχθηκε για διήθηση σε τρεις και περισσότερες διαστάσεις [21],[22]. Σε δύο διαστάσεις, αποτέλεσε μέρος της απόδειξης από τον Kesten [7] ότι $p_c = 1/2$.

Στο κρίσιμο σημείο $p = p_c$ πολλές ιδιότητες υπακούν σε κάποιο νόμο δύναμης (power law). Η θεωρία κλιμάκωσης προβλέπει την ύπαρξη κρίσιμων εκθετών, ανάλογα με τον αριθμό των διαστάσεων (d), που καθορίζουν την κλάση του προβλήματος. Για παράδειγμα η μαγνήτιση σε όλα τα τρισδιάστατα μαγνητικά υλικά περιγράφεται από τον ίδιο κρίσιμο εκθέτη β , ασχέτως των άλλων παραγόντων που επηρεάζουν π.χ. των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των σπίν.

5.2.4 Νόμος Δύναμης - Power law

Στη στατιστική, ένας νόμος δύναμης είναι μια σχέση μεταξύ δύο ποσοτήτων, όπου μια ποσότητα μεταβάλλεται ως δύναμη της άλλης. Πολλά φυσικά φαινόμενα μεταβάλλονται ως νόμος δύναμης η οποία έχει τις παρακάτω ιδιότητες:

Η σταθερότητα της κλίμακας

Ένα χαρακτηριστικό της κατανομής νόμου δύναμης είναι η σταθερότητα της κλίμακας. Αν ισχύει $f(x) = ax^k$, για τον υπολογισμό της συνάρτησης με τη μεταβλητή x πολλαπλασιασμένη κατά ένα σταθερό παράγοντα c παρατηρούμε ότι δημιουργείται απλά μία ανάλογη απεικόνιση της ίδιας της συνάρτησης. Δηλαδή $f(cx) = a(cx)^k = c^k f(x)$.

Επομένως, ο πολλαπλασιασμός του x με ένα σταθερό πραγματικό αριθμό c πολλαπλασιάζει απλώς την αρχική συνάρτηση της κατανομής νόμου δύναμης με τη σταθερά c^k . Αυτή η συμπεριφορά παράγει τη γραμμική σχέση όταν απεικονίζονται σε λογαριθμική κλίμακα και τα δύο μέρη της συνάρτησης f . Στα πραγματικά δεδομένα, η γραμμική σχέση είναι αναγκαστική, αλλά όχι και ικανή συνθήκη για δεδομένα που συνδέονται με κατανομή νόμου δύναμης.

Καθολικότητα

Σε πολλά φυσικά συστήματα όπως οι μεταβάσεις φάσεων σε θερμοδυναμικά συστήματα συνδέονται με την εμφάνιση των κατανομών νόμου δύναμης ορισμένων ποσοτήτων, οι εκθέτες των οποίων αναφέρονται ως κρίσιμοι εκθέτες του συστήματος.

Διάφορα συστήματα με τους ίδιους κρίσιμους εκθέτες μπορεί να δειχθεί, με τη θεωρία συνόλων επανακανονικοποίησης, ότι έχουν τις ίδιες δυναμικές. Για παράδειγμα, η συμπεριφορά του νερού και του CO_2 στα

σημεία βρασμού τους εμπίπτουν στην ίδια κλάση καθολικότητας, επειδή έχουν παρόμοιους κρίσιμους εκθέτες. Στην πραγματικότητα, σχεδόν όλες οι μεταβάσεις φάσεων των υλικών περιγράφονται από ένα μικρό σύνολο καθολικών κλάσεων. Παρόμοιες παρατηρήσεις έχουν γίνει, αν και όχι τόσο εκτενώς, για διάφορα κρίσιμα συστήματα που αυτο-οργανώνονται και στα οποία το κρίσιμο σημείο του συστήματος είναι ένας ελκυστής. Η κοινή χρήση των δυναμικών αναφέρεται ως καθολικότητα, και τα συστήματα με τους ίδιους ακριβώς εκθέτες δηλώνουν ότι ανήκουν στην ίδια κλάση καθολικότητας.

Η αρχή της καθολικότητας δηλώνει ότι η αριθμητική τιμή του p_c καθορίζεται από την τοπική δομή, ενώ η συμπεριφορά κοντά στο κρίσιμο όριο, p_c , χαρακτηρίζεται από καθολικούς κρίσιμους εκθέτες. Για παράδειγμα, η κατανομή του μεγέθους των συστάδων στην γειτονιά της κρίσιμης συγκέντρωσης μειώνεται ως νόμος δύναμης (power law) με τον ίδιο εκθέτη για όλα τα δισδιάστατα πλέγματα [23]. Αυτή η καθολικότητα σημαίνει ότι για μια δεδομένη διάσταση, η κλασματική διάσταση των συστάδων στην γειτονιά p_c είναι ανεξάρτητη από τον τύπο του πλέγματος (τριγωνικό, τετραγωνικό) και τον τύπο percolation (π.χ. δεσμός ή θέση) [24]. Ωστόσο, πρόσφατα υπολογίστηκε διήθηση σε επίπεδο στοχαστικό πλέγμα (WPSL) και διαπίστωσε ότι παρόλο που η διάσταση του WPSL συμπίπτει με τη διάσταση του χώρου όπου είναι ενσωματωμένο, η κατηγορία καθολικότητας του είναι διαφορετική από αυτή όλων των γνωστών επίπεδων πλεγμάτων [25].

5.3 Εφαρμογές

Η Percolation Theory έχει χρησιμοποιηθεί σε ένα μεγάλο πλήθος επιστημών όπως η βιολογία όπου έχει χρησιμοποιηθεί για την επιτυχή πρόβλεψη

του κατακερματισμού των κελυφών ιών όπως της ηπατίτιδας [26]. Στην οικολογία έχει εφαρμοστεί σε μελέτες σχετικά με τον τρόπο με τον οποίο ο κατακερματισμός του περιβάλλοντος επηρεάζει τα ενδιαιτήματα των ζώων [27] και σε μοντέλα για το πώς εξαπλώνονται τα βακτήρια (π.χ. πανώλης). Από τις κλασικές εφαρμογές περιλαμβάνονται η γεωμετρία διαταραγμένων μέσων, μελέτη ιδιοτήτων όπως θερμική, ηλεκτρική αγωγιμότητα, δομικές, μηχανικές, ρεολογικές ιδιότητες καθώς και μελέτη της θραύσης των υλικών [23], [24].

Επίσης χρησιμοποιήθηκε για την μελέτη κλασματικότητας των ακτών [28], δίκτυα [29], μαγνητικά μοντέλα [30],[31], κολλοειδή [32], μοντέλα ανάπτυξης [31], ικανότητα συγκράτησης και λεκάνες απορροής υδάτων [33], [34], η spin quantum Hall μετάβαση [35] και SU(3) θεωρία μετρητή πλέγματος [36]. Από μαθηματική άποψη η διήθηση εμφανίζει σχέσεις μεταξύ πιθανοτικών και αλγεβρικών / τοπολογικών ιδιοτήτων των γραφημάτων. Αν και έχει γίνει σημαντικός αριθμός εργασιών στον τομέα, υπάρχουν ακόμη πολλά άλυτα προβλήματα [37].

5.4 Τεχνικές

Παρόλο που ο ορισμός του προβλήματος είναι εξαιρετικά απλός εντούτοις η επίλυσή του δύσκολη έως αδύνατη με αναλυτικές μεθόδους για τις περισσότερες περιπτώσεις. Τα προβλήματα επιλύονται συνήθως με προσομοιώσεις όπου ένα μικρό τμήμα επιλύεται θεωρώντας ομοιογένεια δημιουργώντας αντιπροσωπευτικές περιπτώσεις με τυχαίο τρόπο. Επειδή η αριθμητική τιμή των αποτελεσμάτων στις προσομοιώσεις εξαρτάται από το μέγεθος, η λύση ανάγεται στο άπειρο μέσο.

Η πιο πετυχημένη έως σήμερα (με την έννοια της αποτελεσματικότητας) τεχνική για την εύρεση της percolation σε ένα πλέγμα είναι ο αλγόριθμος

1			2		
	2	2	2	2	
		2			
4	4		5	5	
		5	5		7
				7	7

Σχήμα 5.7: Εφαρμογή του αλγορίθμου HK.

Hoshen – Kopelman -HK [12]. Είναι ένας απλός και αποτελεσματικός αλγόριθμος για την εύρεση συστάδων σε ένα πλέγμα, όπου το πλέγμα είναι ένα κανονικό δίκτυο κελιών, με τα κελιά να είναι είτε κατειλημμένα είτε μη (τετραγωνικό πλέγμα με percolation θέσεων). Αυτός ο αλγόριθμος βασίζεται στο γνωστό αλγόριθμο εύρεσης - ένωσης (find - union). Ο αλγόριθμος περιγράφηκε αρχικά από τους J. Hoshen και R. Kopelman.

Περίληπτικά σε αυτόν τον αλγόριθμο, σαρώνεται το πλέγμα αναζητώντας κατειλημμένα κελιά και επισημαίνοντας τα με ετικέτες συμπλέγματος (cluster). Η διαδικασία σάρωσης ονομάζεται Raster Scan. Ο αλγόριθμος ξεκινά με τη σάρωση του πλέγματος κελί ανά κελί και ελέγχει εάν το κελί είναι κατειλημμένο ή όχι. Εάν το κελί είναι κατειλημμένο, τότε πρέπει να επισημανθεί με ετικέτα συμπλέγματος. Αυτή η ετικέτα συμπλέγματος προκύπτει με βάση τους γείτονες αυτού του κελιού. Εάν το κελί δεν έχει κατειλημμένους γείτονες, τότε, εκχωρείται μια νέα ετικέτα στο κελί.

Άλλες τεχνικές για την εύρεση ενός μονοπατιού σε ένα πλέγμα είναι παραδοσιακές μέθοδοι αναζήτησης γραφημάτων -δένδρων όπως οι Breath

First Search (BFS) καθώς και Depth First Search (DFS).

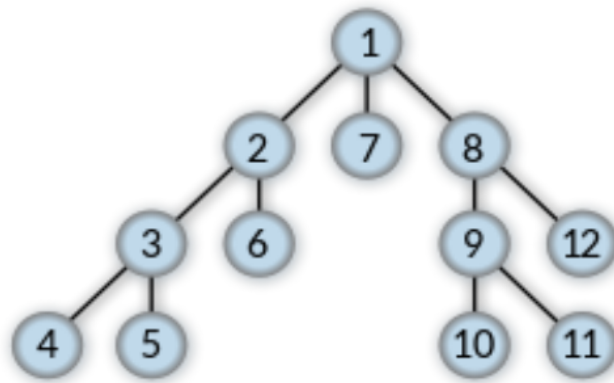
5.4.1 Αλγόριθμοι αναζήτησης: Depth First Search Algorithm και Breath First Search

Μία πρώτη έκδοση του Depth First Search Algorithm (DFS), - αναζήτηση κατά βάθος σχεδιάστηκε τον 19ο αιώνα από τον Γάλλο μαθηματικό Charles Pierre Trémaux ως α στρατηγική για την επίλυση λαβύρινθων [38]. Ένας λαβύρινθος μπορεί να παριστάνεται ως παράσταση εξετάζοντας το καθένα τομή του λαβύρινθου ως κόμβος και κάθε εσωτερική διαδρομή ως άκρη [39].

Ο αλγόριθμος (DFS) πετυχαίνει την αναζήτηση σε δέντρο ή γράφο. Ξεκινά από τον ριζικό κόμβο και εξερευνά όσο το δυνατόν περισσότερο κατά μήκος κάθε κλάδου πριν από την αναδρομή. Βοηθητικά στην υλοποίηση απαιτείται επιπλέον μνήμη, συνήθως μια στοίβα, για να παρακολουθεί τους κόμβους που έχουν ανακαλυφθεί μέχρι τώρα κατά μήκος ενός καθορισμένου κλάδου που βοηθά στην ανάδρομη παρακολούθηση του γραφήματος 5.8.

Η αρχή λειτουργίας του είναι η εκτέλεση αναζήτησης ωμής δύναμης (brute force) που ξεκινά με την εξέταση του πρώτου θυγατρικού κόμβου του δέντρου αναζήτησης που εμφανίζεται και συνεχίζει βαθιά μέσα στο δέντρο μέχρι να βρεθεί ο επιθυμητός κόμβος ή μέχρι να φτάσει σε έναν κόμβο που δεν έχει κατιόντες (αδιέξοδο). Η αναζήτηση συνεχίζει στον πιο πρόσφατο ανεξερεύνητο κόμβο.

Σε μη αναδρομική υλοποίηση, όλοι οι νέοι ανεξερεύνητοι κόμβοι τοποθετούνται πάνω από μια στοίβα και η αναζήτηση συνεχίζεται με ένα από αυτά. Η παρούσα μεθοδολογία χρησιμοποιεί τον αλγόριθμο (DFS) ο οποίος είναι αρκετά γρήγορος ενώ είναι μέτρια η κατανάλωση μνήμης. Επίσης ο αλγόριθμος Breath First Search χρησιμοποιήθηκε με επιτυχία σε συγκεκρι-



Σχήμα 5.8: Εφαρμογή του αλγορίθμου DFS [40].

μένες περιπτώσεις για λόγους σύγκρισης και ελέγχου συνέπειας.

Η αναζήτηση κατά πλάτος (BFS), είναι παρόμοια με την αναζήτηση κατά βάθος η και χρησιμοποιείται ως γενική τεχνική για την διάσχιση ενός γράφου. Ξεκινά από τη ρίζα του γράφου, δένδρου και εξερευνά όσο το δυνατόν περισσότερο κατά πλάτος του κάθε κλαδιού του δέντρου μέχρι αυτό φτάνει σε αδιέξοδο οπότε συνεχίζει σε βάθος του κλαδιού.

Η ανάλυση χρόνου και χώρου του DFS διαφέρει ανάλογα με την περιοχή εφαρμογής του. Στη θεωρητική επιστήμη των υπολογιστών, το DFS χρησιμοποιείται συνήθως για τη διέλευση ενός ολόκληρου γραφήματος και απαιτεί χρόνο $O(|V| + |E|)$, [41] όπου V είναι ο αριθμός των κορυφών και E των άκρων. Είναι δηλαδή γραμμικό ως προς το μέγεθος του γραφήματος. Σε αυτές τις εφαρμογές χρησιμοποιείται χώρος $O(|V|)$ στη χειρότερη περίπτωση για να αποθηκευθεί στη στοίβα κορυφών η τρέχουσα διαδρομή αναζήτησης καθώς και το σύνολο κορυφών που έχουν ήδη επισκεφθεί.

Τα χρονικά και χωρικά όρια είναι τα ίδια με αυτά της αναζήτησης κατά πλάτος και η επιλογή του ποιος από αυτούς τους δύο αλγόριθμους θα χρησιμοποιηθεί εξαρτάται λιγότερο από την πολυπλοκότητά τους και περισσότερο από τις διαφορετικές ιδιότητες των διατάξεων κορυφών που παράγουν οι δύο αλγόριθμοι [41].

5.4.2 Monte Carlo

Η μέθοδος Monte Carlo είναι μια στοχαστική αριθμητική προσέγγιση που βρίσκει πολλές εφαρμογές σε διάφορους επιστημονικούς τομείς με χρήση τυχαίων αριθμών και αρχές στατιστικής. Η βασική ιδέα είναι η χρήση της τυχειότητας για την επίλυση προβλημάτων που μπορεί να είναι ντετερμινιστικά. Συχνά χρησιμοποιείται σε φυσικά και μαθηματικά προβλήματα όπου είναι δύσκολο ή αδύνατο να χρησιμοποιηθούν άλλες προσεγγίσεις. Σε προβλήματα που σχετίζονται με τη φυσική, η μέθοδος Monte Carlo είναι χρήσιμη για την προσομοίωση συστημάτων με πολλούς συζευγμένους βαθμούς ελευθερίας, όπως ρευστά, διαταραγμένα υλικά, ισχυρά συζευγμένα στερεά, συστήματα αλληλεπιδρώντων σωματιδίων, κινητικά μοντέλα αερίων. Εισήχθη για πρώτη φορά στο πρωτοποριακό έργο των Metropolis et al. [42] και επεκτάθηκε από τον Hastings [43].

Στην παρούσα εργασία η στατιστική δειγματοληψία πραγματοποιείται χρησιμοποιώντας τη μεθοδολογία Monte Carlo, οι δε τυχαία δημιουργούμενες ακολουθίες πεπερασμένων RSE βοηθούν στον υπολογισμό των μέσων τιμών που σχετίζονται με εγγενείς φυσικές ιδιότητες. Η κατασκευή μεμονωμένων RSE επιτυγχάνεται με την τοποθέτηση απλών σχημάτων πληρωτικού σε τυχαίες θέσεις, τυχαία μεγέθη (τα δείγματα θα πρέπει να ικανοποιούν μια θεωρητική κατανομή πιθανοτήτων, π.χ. Gauss, ομοιόμορφη) και τυχαίο ή μή προσανατολισμό. Αφού ολοκληρωθεί το RSE εξετάζεται εάν η ύπαρξη διήθησης ή όχι και αυτό γίνεται σε έναν αρκετά μεγάλο αριθμό παραγόμενων RSE, έτσι υπολογίζεται η πραγματική μέση τιμή της πιθανότητας διήθησης των RSE.

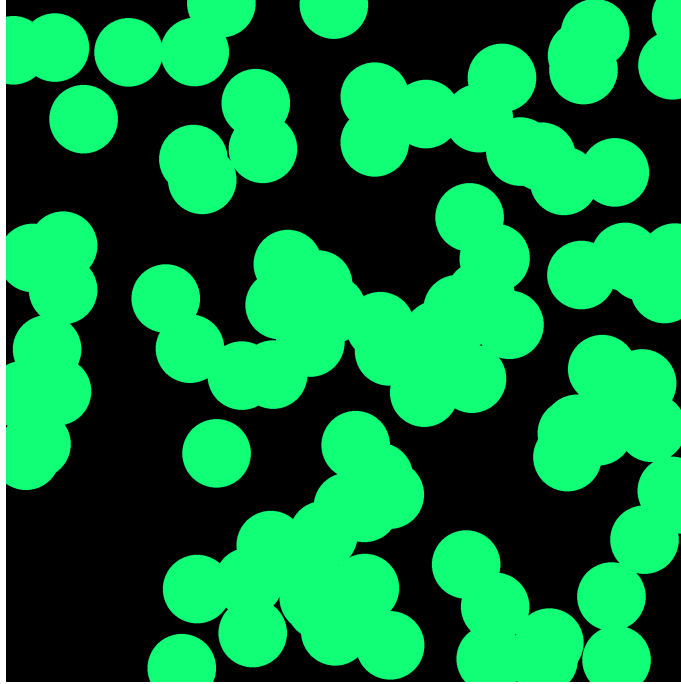
5.5 Percolation theory του συνεχούς

Η θεωρία συνεχούς percolation είναι ένας κλάδος των μαθηματικών που επεκτείνει τη θεωρία διακριτής percolation (ασυνεχές μοντέλο) στον συνεχή Ευκλείδειο χώρο. Πιο συγκεκριμένα, όπως αναφέρθηκε, τα σημεία στην διακριτής percolation τοποθετούνται τυχαία σε ένα πλέγμα ενώ στην διήθηση συνεχούς τα συστατικά που μαθηματικά αναπαρίστανται ως απλά σχήματα (κύκλοι, ελλείψεις, παραλληλόγραμμα) τοποθετούνται τυχαία σε κάποιο συνεχή χώρο (random point process). Τα τυχαία σχήματα επικαλύπτονται συχνά μεταξύ τους για να σχηματίσουν συστάδες. Όπως και στη διακριτή διήθηση, αυτό που τελικά ερευνάται είναι οι συνθήκες εμφάνισης άπειρου (για άπειρο μέσο) ή γιγαντιαίου συσσωματώματος [44]. Υπάρχουν κοινές έννοιες και τεχνικές ανάλυσης σε αυτούς τους δύο τύπους θεωρίας percolation καθώς και στη μελέτη τυχαίων γραφημάτων και τυχαίων γεωμετρικών γραφημάτων.

Για κάθε σημείο, ένα τυχαίο σχήμα τοποθετείται συχνά σε αυτό και τα σχήματα επικαλύπτονται μεταξύ τους για να σχηματίσουν συστάδες (Σχήμα 5.9). Όπως και στη διακριτή διήθηση, ερευνώνται οι συνθήκες εμφάνισης για άπειρες ή γιγάντιες συστάδες [44]. Υπάρχουν κοινές έννοιες και τεχνικές σε αυτούς τους δύο τύπους. Η διήθηση συνεχούς προέκυψε από ένα πρώιμο μαθηματικό μοντέλο για ασύρματα δίκτυα [45], το οποίο, με την άνοδο αρκετών τεχνολογιών ασύρματων δικτύων τα τελευταία χρόνια, έχει γενικευτεί και μελετηθεί προκειμένου να καθοριστούν τα θεωρητικά όρια χωρητικότητας και απόδοσης πληροφοριών σε ασύρματα δίκτυα.

Εκτός από ασύρματα δίκτυα η συνεχής διήθηση έχει βρίσκει εφαρμογή και σε άλλους κλάδους, συμπεριλαμβανομένης της βιολογίας, της γεωλογίας και της φυσικής, όπως η μελέτη πορώδους υλικού και ημιαγωγών, ενώ έγινε από μόνη της θέμα μαθηματικού ενδιαφέροντος [46].

Η διήθηση συνεχούς προέκυψε σαν ένα μαθηματικό μοντέλο ως ανάγκη



Σχήμα 5.9: Απόσπασμα συνεχούς percolation για κυκλικά συστατικά.

για να την επίλυση κάλυψης ασύρματων δικτύων [45] το οποίο, με την άνοδο αρκετών τεχνολογιών ασύρματων δικτύων τα τελευταία χρόνια, έχει γενικευτεί. Εκτός από αυτή τα ασύρματα δίκτυα, η συνεχής διήθηση έχει αποκτήσει εφαρμογή και σε άλλους κλάδους, συμπεριλαμβανομένης της βιολογίας, της γεωλογίας και της φυσικής, όπως η μελέτη πορώδους υλικού και ημιαγωγών, ενώ έχει γίνει από μόνη της θέμα μαθηματικού ενδιαφέροντος. [46].

5.6 Εκτίμηση θερμικών - Ηλεκτρικών Ιδιοτήτων Υλικών

Μια από τις χρήσεις της θεωρίας percolation είναι για υπολογισμό των θερμικών αλλά και ηλεκτρικών ιδιοτήτων σε ένα υλικό που θεωρείται ότι αποτελείται μη αγώγιμη μήτρα και αγώγιμα (νανο) εγκλείσματα.

Όταν τα νάνο-εγκλείσματα δημιουργούν ένα αγώγιμο δίκτυο μέσα στο

σύνθετο, επέρχονται δραματικές αλλαγές στις φυσικές ιδιότητες των σύνθετων, ειδικά όταν η διαφορά μεταξύ ιδιοτήτων των φάσεων είναι μεγάλη. Γενικά οι ιδιότητες των σύνθετων εμφανίζουν μια σχέση αναλογίας της μορφής:

$$\chi = |\Phi - \Phi_c|^e \quad (5.3)$$

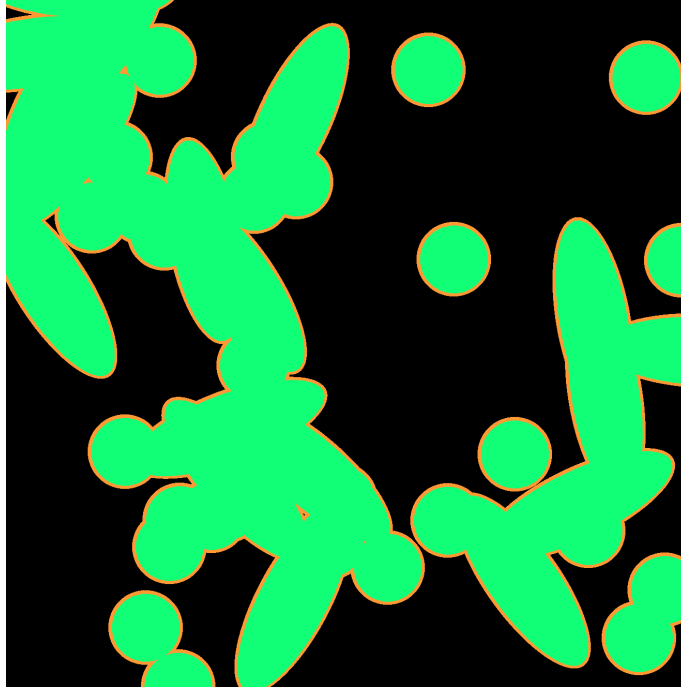
Όπου χ είναι η παράμετρος (θερμική, ηλεκτρική αγωγιμότητα, μαγνητική επιδεκτικότητα κ.α.) e είναι συγκεκριμένη για την κάθε ιδιότητα.

Το κατώφλι διήθησης Φ_c (percolation threshold) το οποίο επηρεάζεται κυρίως από γεωμετρικές παραμέτρους όπως το μέγεθος των σωματιδίων, η αναλογία μήκους, το σχήμα και ο προσανατολισμός τους. Για παράδειγμα, στην περίπτωση των μεταλλικών νάνο εγκλεισμάτων, και καθώς το σχήμα αλλάζει από σφαιρικό σε ελλειψοειδές η τιμή του Φ_c μειώνεται κατά ένα μεγάλο ποσοστό διότι τα ελλειψοειδή εγκλείσματα συνδέονται μεταξύ τους σε μικρότερες συγκεντρώσεις (Πίνακας 5.1).

Σχήμα εγκλεισμάτων	Φ_c
Δίσκοι, $a/b = 1$	0.67634831(2), [47]
Έλλειψη, $a/b = 2$	0.63, [48]
Έλλειψη, $a/b = 10$	0.30, [49]
Έλλειψη, $a/b = 100$	0.0417, [50]
Έλλειψη, $a/b = 1000$	0.0043, [50]

Πίνακας 5.1: Κρίσιμη συγκέντρωση Φ_c για εγκλείσματα διαφόρων σχημάτων κύκλος - ελλείψεις.

Τα αγώγιμα σωματίδια, συνδέονται όχι μόνο γεωμετρικά αλλά και ηλεκτρικά μέσω του φαινομένου σήραγγας (tunneling). Στην πράξη συνεισφέρει κυρίως το (tunneling) μεταξύ γειτονικών σωματιδίων, καθώς η συνεισφορά του μεταξύ όλων των άλλων μη-κοντινών γειτόνων είναι αμελητέα λόγω του ότι η ικανότητα να κινούνται ηλεκτρόνια μέσω μη αγώγιμων μέσων μειώνεται εκθετικά. Στην πράξη προκειμένου να προσομοιωθεί αυτή η συμπεριφορά θεωρούμε ότι υπάρχει μια μεταβατική ζώνη ή οποία είναι



Σχήμα 5.10: Απόσπασμα συνεχούς percolation με ελλειπτικά συστατικά και φαινόμενο σήραγγας.

αγώγιμη και περιβάλλει το νάνο έγκλεισμα (Σχήμα 5.10).

Η ισοδύναμη ή δρώσα (effective) ηλεκτρική αγωγιμότητα ενός σύνθετου υλικού με αγώγιμα εγκλείσματα σε μη αγώγιμη μήτρα κοντά στο Φ_c , ακολουθεί τον νόμο:

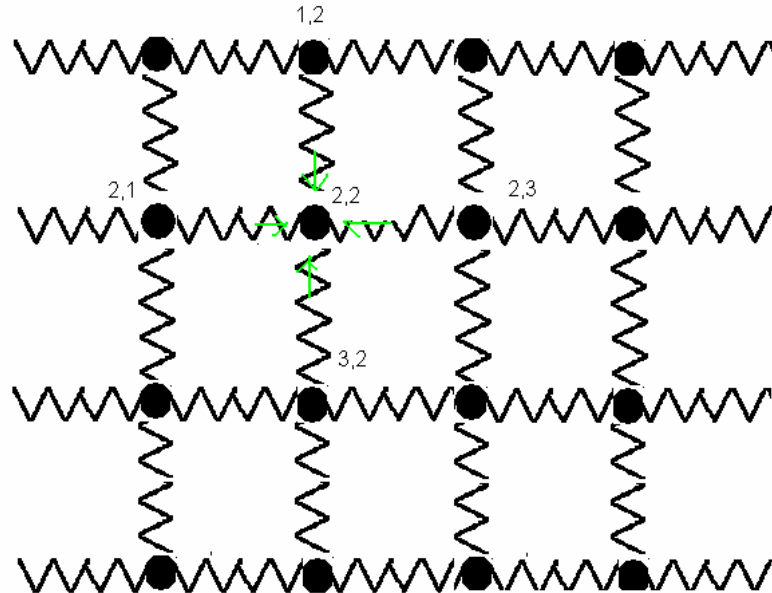
$$\sigma_{eff} = \sigma_0(\Phi - \Phi_c)^t \quad (5.4)$$

όπου ο παράγοντας t εξαρτάται από τις διαστάσεις: ≈ 1.30 για διάσταση $d = 2$ και $t \approx 2.0$ για διάσταση $d = 3$ [51].

5.6.1 Το μοντέλο δικτύου αντιστάσεων

Το μοντέλο του δικτύου αντιστάσεων (resistor network) απεικονίζεται στο Σχήμα 5.11 και είναι ένα υπολογιστικό μοντέλο διήθησης δεσμών, το οποίο έχει χρησιμοποιηθεί επιτυχημένα στην μοντελοποίηση σύνθετων υλικών [52]. Εκτός από τη βασική του εφαρμογή που είναι η προσομοίωση των ηλεκτρικών ιδιοτήτων των σύνθετων υλικών, έχει εφαρμοστεί με επιτυχία

και στην πρόβλεψη των μαγνητικών ιδιοτήτων των υλικών αλλά και την πρόβλεψη του πορώδους. Σε ότι αφορά την εφαρμογή για την εύρεση των



Σχήμα 5.11: Απεικόνιση δικτύου αντιστάσεων με όλους τους δεσμούς.

ηλεκτρικών ιδιοτήτων ενός υλικού, το μοντέλο δικτύου αντιστάσεων ουσιαστικά κατασκευάζεται σαν ένα δισδιάστατο ή τρισδιάστατο πλέγμα από αντιστάσεις. Οι αντιστάσεις και οι κόμβοι του δικτύου μπορούν να παριστάνουν αγωγίμα και μονωτικά υλικά, σπιν, μαγνητική ροπή ανάλογα με την ιδιότητα που πρόκειται να υπολογιστεί.

Στο παραπάνω δίκτυο η τάση εφαρμόζεται σε όλα τα άκρα αριστερά και δεξιά. Σε ότι αφορά την εύρεση της συνολικής αγωγιμότητας στο σύστημα, η θεωρία που έχει προταθεί [53] στηρίζεται στο ότι η Λαπλασιανή του συστήματος είναι ένας πίνακας όπου τα στοιχεία της κύριας διαγωνίου του είναι οι αγωγιμότητες g_{ij} που υπάρχουν ανάμεσα στους κόμβους.

Περίληπτικά αναφέρεται ότι αν θεωρηθεί ένα resistor network το οποίο έχει N κόμβους οι οποίοι αριθμούνται με $i = 1, 2, \dots, N$ και ας θεωρηθεί επίσης ότι $r_{ij} = r_{ji}$ είναι η αντίσταση ανάμεσα σε ένα ζεύγος κόμβων i και j . Αν V_i το ηλεκτρικό δυναμικό σε ένα κόμβο i και το I_i το ρεύμα που διαρρέει

αυτό τον κόμβο, τότε εφαρμόζοντας τον πρώτο νόμο του Kirchhoff ισχύει:

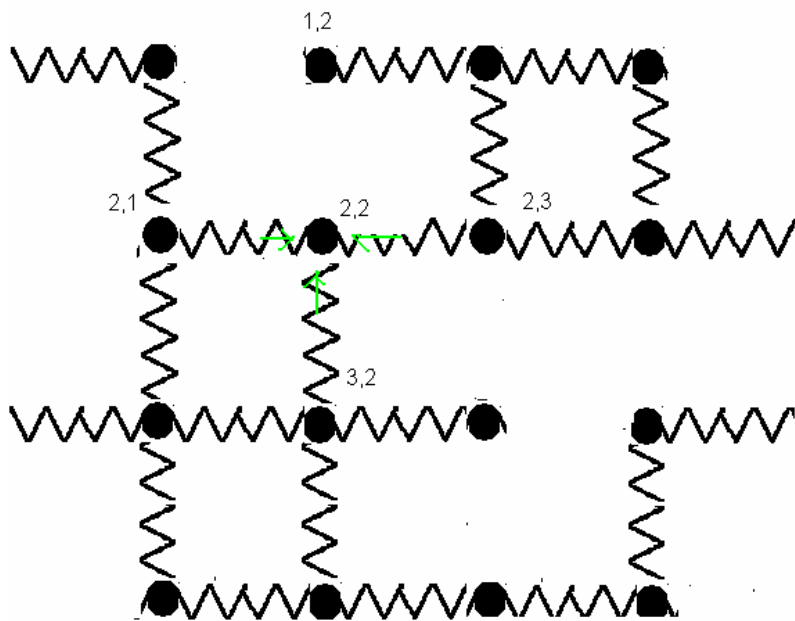
$$\sum_{i=0}^N I_i = 0 \quad (5.5)$$

Επίσης, από το δεύτερο νόμο του Kirchhoff ισχύει:

$$\sum_{j=0}^N g_{ij}(V_i - V_j) = I_i \quad (5.6)$$

ή υπό μορφή πινάκων

$$L\vec{V} = \vec{I} \quad (5.7)$$



Σχήμα 5.12: Απεικόνιση δικτύου αντιστάσεων μή πλήρης.

Αντίστοιχη θεώρηση γίνεται και όταν το κύκλωμα δεν είναι πλήρες. Θεωρώντας το δίκτυο αντιστάσεων σαν ένα μοντέλο διήθησης δεσμών, εφαρμόζεται αρχικά ο αλγόριθμος Hoshen - Kopelman [13] για να υπολογιστεί το cluster διήθησης (spanning cluster). Όμως, πρέπει να αφαιρεθούν οι αντιστάσεις οι οποίες θα ανήκουν στο spanning cluster αλλά δε θα διαρρέονται από ρεύμα (κόμβος 1,2 στο Σχήμα 5.12).

Η υλοποίηση ενός τέτοιου αλγορίθμου είναι μια αρκετά επίπονη διαδικασία η οποία απαιτεί μεγάλους υπολογιστικούς πόρους.

Βιβλιογραφία

- [1] A. Verruijt, *Darcy's Law*, pp. 6–13. London: Macmillan Education UK, 1970.
- [2] S. R. Broadbent and J. M. Hammersley, “Percolation processes: I. crystals and mazes,” *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 53, no. 3, p. 629–641, 1957.
- [3] A. Kolmogoroff, *Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung*. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1st ed., 1933.
- [4] P. J. Flory, “Molecular size distribution in three dimensional polymers i. gelation,” *Journal of the American Chemical Society*, vol. 63, pp. 3083–3090, 1941.
- [5] W. H. Stockmayer, “Theory of Molecular Size Distribution and Gel Formation in Branched-Chain Polymers,” *Jcp*, vol. 11, pp. 45–55, Feb. 1943.
- [6] R. E. Franklin, “A study of the fine structure of carbonaceous solids by measurements of true and apparent densities. part ii.—carbonized coals,” *Transactions of The Faraday Society*, vol. 45, pp. 668–682, 1949.
- [7] H. Kesten, *Percolation theory for mathematicians*. Birkhäuser Boston, MA, 1982.
- [8] M. E. J. Newman and R. M. Ziff, “Efficient monte carlo algorithm and high-precision results for percolation.,” *Physical review letters*, vol. 85 19, pp. 4104–7, 2000.
- [9] G. Grimmett, S. Grimmett, S. Chern, B. Eckmann, and H. Hironaka, *Percolation*. Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften in Einzeldarstellungen, Springer, 1999.

- [10] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction To Percolation Theory*. Taylor & Francis, 1994.
- [11] A. Celzard, E. McRae, C. Deleuze, M. Dufort, G. Furdin, and J. F. Marêché, “Critical concentration in percolating systems containing a high-aspect-ratio filler,” *Phys. Rev. B*, vol. 53, pp. 6209–6214, Mar 1996.
- [12] J. Hoshen and R. Kopelman, “Percolation and cluster distribution. i. cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm,” *Physical Review B*, vol. 14, no. 8, p. 3438, 1976.
- [13] J. Hoshen, R. Kopelman, and E. M. Monberg, “Percolation and cluster distribution. ii. layers, variable-range interactions, and exciton cluster model,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 19, no. 3, pp. 219–242, 1978.
- [14] P. N. Suding and R. M. Ziff, “Site percolation thresholds for archimedean lattices,” *Phys. Rev. E*, vol. 60, pp. 275–283, 1999.
- [15] R. Parviainen, *Connectivity Properties of Archimedean and Laves Lattices*. Phd dissertation, Matematiska institutionen, Stockholm, Sweden, 2004. <https://urn.kb.se/resolve?urn=urn:nbn:se:uu:diva-4251>.
- [16] J. L. Jacobsen, “Critical points of potts and $o(n)$ models from eigenvalue identities in periodic temperley–lieb algebras,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 48, no. 45, p. 454003, 2015.
- [17] C. D. Lorenz and R. M. Ziff, “Universality of the excess number of clusters and the crossing probability function in three-dimensional percolation,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 31, no. 40, p. 8147, 1998.
- [18] Z. Koza and J. Poła, “From discrete to continuous percolation in di-

mensions 3 to 7,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2016, no. 10, p. 103206, 2016.

- [19] G. Jaeger, “The ehrenfest classification of phase transitions: Introduction and evolution,” *Archive for History of Exact Sciences*, vol. 53, pp. 51–81, May 1998.
- [20] L. P. Kadanoff, “Scaling laws for ising models near T_c ,” *Physics Physique Fizika*, vol. 2, pp. 263–272, Jun 1966.
- [21] M. Menshikov, “Coincidence of critical points in percolation problems,” *Soviet Mathematics - Doklady*, vol. 33, p. 856–859, 1986.
- [22] M. Aizenman and D. J. Barsky, “Sharpness of the phase transition in percolation models,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 108, pp. 489–526, Sept. 1987.
- [23] M. Sahini and M. Sahimi, *Applications Of Percolation Theory (Rev. 2nd ed.)*. Taylor & Francis, 2003.
- [24] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction To Percolation Theory Second Edition (2nd ed.)*. Taylor & Francis, 1992.
- [25] K. Hassan, “Percolation on a multifractal scale-free planar stochastic lattice and its universality class,” *Physical Review e*, vol. Phys. Rev. E 92, 040101(R), 10 2015.
- [26] N. E. Brunk, L. S. Lee, J. A. Glazier, W. Butske, and A. Zlotnick, “Molecular jenga: the percolation phase transition (collapse) in virus capsids,” *Physical Biology*, vol. 15, p. 056005, jun 2018.
- [27] G. P. Boswell, N. F. Britton, and N. R. Franks, “Habitat fragmentation, percolation theory and the conservation of a keystone species,” *Proceed-*

ings of the Royal Society of London. Series B: Biological Sciences, vol. 265, no. 1409, pp. 1921–1925, 1998.

- [28] B. Sapoval, A. Baldassarri, and A. Gabrielli, “Self-stabilized fractality of seacoasts through damped erosion,” *Phys Rev Lett*, vol. 93, p. 098501, Aug 2004.
- [29] D. S. Callaway, M. E. Newman, S. H. Strogatz, and D. J. Watts, “Network robustness and fragility: percolation on random graphs,” *Phys Rev Lett*, vol. 85, pp. 5468–5471, Dec. 2000.
- [30] V. S. Dotsenko, M. Picco, P. Windey, G. Harris, E. Martinec, and E. Marinari, “Self-avoiding surfaces in the 3d ising model,” *Nuclear Physics B*, vol. 448, no. 3, pp. 577–620, 1995.
- [31] Saberi, A. A. and Dashti-Naserabadi, H., “Three-dimensional ising model, percolation theory and conformal invariance,” *EPL*, vol. 92, no. 6, p. 67005, 2010.
- [32] S. G. Anekal, P. Bahukudumbi, and M. A. Bevan, “Dynamic signature for the equilibrium percolation threshold of attractive colloidal fluids,” *Phys. Rev. E*, vol. 73, p. 020403, Feb 2006.
- [33] C. L. Knecht, W. Trump, D. ben Avraham, and R. M. Ziff, “Retention capacity of random surfaces,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, p. 045703, Jan 2012.
- [34] K. J. Schrenk, N. A. M. Araújo, R. M. Ziff, and H. J. Herrmann, “Retention capacity of correlated surfaces,” *Phys. Rev. E*, vol. 89, p. 062141, Jun 2014.
- [35] I. A. Gruzberg, A. W. W. Ludwig, and N. Read, “Exact exponents for the

spin quantum hall transition,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 82, pp. 4524–4527, May 1999.

[36] G. Endrődi, C. Gatteringer, and H.-P. Schadler, “Fractality and other properties of center domains at finite temperature: $Su(3)$ lattice gauge theory,” *Phys. Rev. D*, vol. 89, p. 054509, Mar 2014.

[37] N. Araújo, P. Grassberger, B. Kahng, K. J. Schrenk, and R. M. Ziff, “Recent advances and open challenges in percolation,” *The European Physical Journal Special Topics*, vol. 223, pp. 2307–2321, Oct. 2014.

[38] S. Even, *Graph algorithms*. Cambridge University Press, 2011.

[39] R. Sedgewick, *Algorithms in C, Part 5, Graph algorithms 3rd edn Reading*. MA: Addison-Wesley, 2002.

[40] Depth-first search, “Depth-first search — Wikipedia, the free encyclopedia,” 2022. [Online; accessed 10-September-2022].

[41] T. Cormen, C. Leiserson, R. Rivest, and C. Stein, *Introduction to Algorithms, third edition*. Computer science, MIT Press, 2009.

[42] N. Metropolis and S. Ulam, “The monte carlo method,” *Journal of the American statistical association*, vol. 44, no. 247, pp. 335–341, 1949.

[43] W. K. Hastings, “Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications,” *Biometrika*, vol. 57, pp. 97–109, 04 1970.

[44] R. Meester and R. Roy, *Continuum Percolation*. Cambridge Tracts in Mathematics, Cambridge University Press, 1996.

[45] E. N. Gilbert, “Random plane networks,” *Journal of the society for industrial and applied mathematics*, vol. 9, no. 4, pp. 533–543, 1961.

- [46] I. Balberg, “Recent developments in continuum percolation,” *Philosophical Magazine, Part B*, vol. 56, pp. 991–1003, Dec. 1987.
- [47] S. Mertens and C. Moore, “Continuum percolation thresholds in two dimensions,” *Phys. Rev. E*, vol. 86, p. 061109, Dec 2012.
- [48] P.-H. Xiang, Y. Kinemuchi, H. Kaga, and K. Watari, “Fabrication and thermoelectric properties of $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9/\text{Ag}$ composites,” *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 454, pp. 364–369, 04 2008.
- [49] W. Xia and M. Thorpe, “Percolation properties of random ellipses,” *Physical Review A*, vol. 38, no. 5, p. 2650, 1988.
- [50] Y. B. Yi and A. Sastry, “Analytical approximation of the percolation threshold for overlapping ellipsoids of revolution,” *Proceedings of the Royal Society of London Series A*, vol. 460, pp. 2353–2380, Aug. 2004.
- [51] S. Torquato, *Random Heterogeneous Materials*, vol. 16. Springer-Verlag New York, 2002.
- [52] S. Kirkpatrick, “Percolation and conduction,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 45, pp. 574–588, Oct 1973.
- [53] F. Y. Wu, “Theory of resistor networks: the two-point resistance,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 37, p. 6653, jun 2004.

Κεφάλαιο 6

Υπολογιστική μέθοδος με βάση την ψηφιοποίηση σωματιδίων για τη μελέτη της διήθησης συνεχούς

6.1 Περίληψη

Στη παρούσα διατριβή αναπτύχθηκε ένα νέο θεωρητικό μοντέλο και η υπολογιστική του εφαρμογή σε δύο διαστάσεις (2D) για τη μελέτη φαινομένων διήθησης συνεχούς. Στόχος ήταν η ανάπτυξη ενός μοντέλου που να έχει εγγενή ομοιότητα με τη διήθηση του πλέγματος. Το φυσικό μέσο προσομοιώνεται ως ένα (άπειρο) πλέγμα που αποτελείται από αντιπροσωπευτικά επιφανειακά στοιχεία (RSEs). Υποθέτοντας την ομοιογένεια του μέσου, η μέση πιθανότητα διάδοσης του RSE μπορεί να ερμηνευτεί και να γενικευτεί ως η πιθανότητα κατάληψης για το άπειρο μέσο. Τα RSE προκύπτουν από μια επαναληπτική διαδικασία Monte Carlo που περιλαμβάνει τη δημιουργία μικρών δειγμάτων και η ικανότητα διάδοσής σε αυτά ελέγχεται μεμονωμένα από το πάνω προς το κάτω μέρος τους. Η διάδοση στο πραγματικό φυσικό μέσο λαμβάνει χώρα όταν η υπολογισμένη πιθανότητα (p) είναι

μεγαλύτερη από την κρίσιμη πιθανότητα διάδοσης ($p_c \approx 0.5927$). Η προτεινόμενη μέθοδος αντιμετωπίζει το σύστημα υλικού χαμηλών διαστάσεων ως ένα 2D άπειρο ομογενοποιημένο μέσο το οποίο μπορεί να μειωθεί περαιτέρω οδηγώντας σε μια χαρτογράφηση σε ένα τετράγωνο πλέγμα με κατάληψη θέσης. Ο προτεινόμενος αριθμητικός αλγόριθμος θεωρεί τα σωματίδια στο RSE ως ψηφιοποιημένα χρησιμοποιώντας pixel χωρίς επαφές. Ακολουθώντας τη διαδικασία ψηφιοποίησης, εμπλέκονται παραδοσιακές υπολογιστικές μέθοδοι όπως το Depth First Search για τον εντοπισμό πιθανών διαδρομών διάδοσης στα τυχαία επιλεγμένα τετράγωνα δείγματα. Για την επιβεβαίωση του θεωρητικού μοντέλου καθώς και του αλγορίθμου χρησιμοποιήθηκαν προβλήματα γνωστά από τη βιβλιογραφία και διαπιστώθηκε ότι ανεξαρτήτως μικροδομής στην κρίσιμη συγκέντρωση Φ_c η πιθανότητα διήθησης στο RSE συγκλίνει στην αναμενόμενη τιμή $p_c \approx 0.5927$. Επιπλέον, τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την προτεινόμενη μεθοδολογία συγκρίνονται και είναι σε συμφωνία με διαθέσιμες προβλέψεις στη βιβλιογραφία. Αναφέρονται νέα αποτελέσματα που καλύπτουν ένα ευρύ φάσμα γεωμετρικών τύπων σωματιδίων (κυκλικά, ελλειπτικά, ορθογώνια) και επιφανειακά κλάσματα σε συστήματα πλήρωσης μήτρας που αποδεικνύουν την ευρωστία και εφαρμοσιμότητα της προτεινόμενης μεθοδολογίας.

6.2 Εισαγωγή

Στην παρούσα διατριβή αναπτύχθηκε πρωτότυπη μεθοδολογία προκειμένου να εξεταστούν η διήθηση - μετάβαση στο τυχαίο συνεχές. Χωρίζεται σε δύο επίπεδα: ένα επίπεδο της μικροδομής και ένα αρκετά μεγαλύτερο της μακροδομής. Ένα πραγματικό υλικό προσομοιάζεται ως άπειρο ή με πολύ μεγάλες διαστάσεις ως προς τις διαστάσεις της μικροδομής. Προκειμένου να μελετηθεί διαιρείται σε πεπερασμένα αντιπροσωπευτικά επιφανειακά

στοιχεία-δείγματα (Representative Surface Elements-RSEs) διαστάσεων της τάξεως της μικροδομής και εξετάζεται η διήθηση μέσω (site percolation) και ειδικότερα η διήθηση με τέσσερις (4) πλησιέστερες γειτονικές - θέσεις χρησιμοποιείται. Για τον χειρισμό των συνθετικών σωματιδίων υιοθετείται η διαδικασία της ψηφιοποίησης των σωματιδίων. Αυτό είναι δυνατό στις μέρες μας λόγω αυξημένης υπολογιστικής ισχύος και φυσικής μνήμης των υπολογιστών οι οποίοι προσφέρουν νέες προοπτικές για την επίλυση προβλημάτων percolation με χρήση ψηφιοποίησης σωματιδίων.

Στα προτερήματα της προτεινόμενης μεθοδολογίας μπορούν να αναφερθούν το γεγονός πως παράγει αποτελέσματα με ακρίβεια συγκρίσιμη με τις υπάρχουσες υπολογιστικές μεθόδους και επιπλέον πως έχει αυξήσει τις δυνατότητες επίλυσης προβλημάτων αφού επιτρέπει την προσομοίωση πολυφασικών σωματιδιακών συστατικών - και μειγμάτων που αποτελούνται από ανόμοια σωματίδια και έχουν ένα ευρύ φάσμα λόγων μορφής (aspect ratio) ($a_R \in [1, 100]$). Μπορούν επίσης να μελετηθούν προβλήματα percolation, που εμπίπτουν στο τύπο προβλημάτων swiss chesse, σε συστήματα πολλαπλών υλικών πλήρωσης μήτρας όπου τα πληρωτικά μπορεί να είναι διαφορετικά γεωμετρικά σωματίδια. Στη συνέχεια θα παρουσιαστούν οι λεπτομέρειες υλοποίησης, η στρατηγική επίλυσης καθώς και τα χαρακτηριστικά απόδοσης της προτεινόμενης υπολογιστικής μεθοδολογίας. Κάποια πραγματικά προβλήματα θα επιλυθούν προκειμένου να συγκριθεί η παρούσα μεθοδολογία με άλλες μεθόδους της διεθνούς βιβλιογραφίας.

Σε κάποιο βαθμό, το προτεινόμενο μοντέλο στηρίζεται στην αναπόδεικτη υπόθεση ότι η διήθηση πλέγματος (ασυνεχές μοντέλο) και η διήθηση συνεχούς ανήκουν στην ίδια τάξη καθολικότητας (universality class) [1, 2, 3]. Η αντιμετώπιση της συνεχούς percolation μέχρι στιγμής ήταν ότι πως το μέσο θεωρείται αυτό-όμοιο σε δύο επίπεδα [3] (μικροδομή και δομή μεγαλύτερη της μικροδομής) λαμβάνοντας υπόψη μια αυτό - όμοια ιεραρχική

κατασκευή.

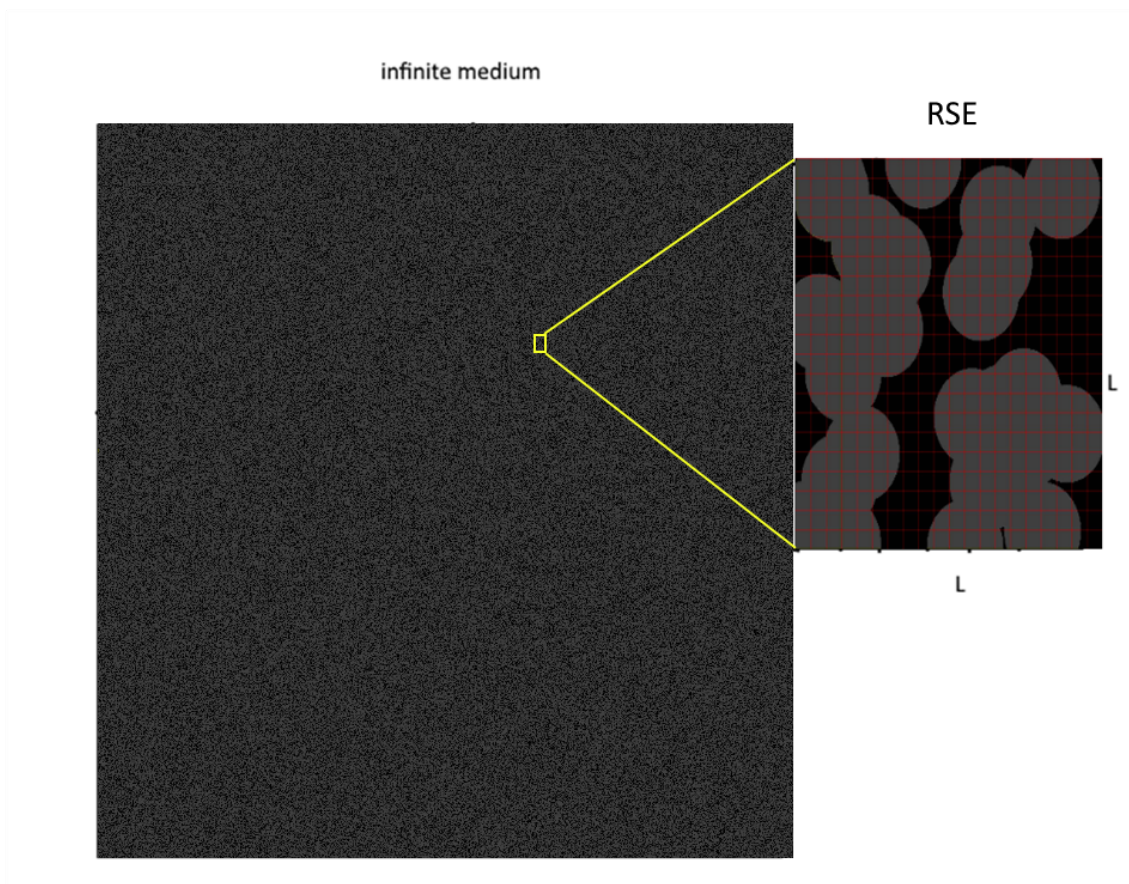
Στην παρούσα διατριβή δεν θεωρείται η αυτό-ομοιότητα σε όλες τις κλίμακες. Αντίθετα, εξετάζονται δύο διαφορετικές κλίμακες χώρου. Αρχικά, το χαμηλότερο επίπεδο κλίμακας χώρου (μικροδομή) μοντελοποιείται με τη χρήση αντιπροσωπευτικών επιφανειακών στοιχείων-δειγμάτων (RSEs). Τα RSEs απεικονίζουν την πραγματική μικροδομή του σύνθετου υλικού και ένας επαρκής αριθμός από RSE δημιουργείται χρησιμοποιώντας μια επαναληπτική διαδικασία Monte Carlo (MC) έτσι ώστε να απεικονιστούν διάφορα κομμάτια του μέσου. Για τα RSEs, η μέση πιθανότητα διάδοσης p_{RSEs} υπολογίζεται και ανάγεται σε ένα ανώτερο επίπεδο κλίμακας χώρου ως πιθανότητα κατάληψης (p) των θέσεων για μια ίδια μαθηματική κατασκευή, τυχαίας τετραγωνικής γεωμετρίας θέσεων του οποίου η κρίσιμη πιθανότητα percolation είναι γνωστή $p_c = 0.5927$ [4, 5]. Στο υλικό θεωρείται ότι υπάρχει διήθηση (σε δισδιάστατη τετραγωνική γεωμετρία θέσεων) που προσομοιάζεται με άπειρο μέσο αν $p_{RSEs} = p \geq 0.5927$. Επομένως, από κατασκευής, το τετραγωνικό πλέγμα της μαθηματικής και η διήθηση συνεχούς βρίσκονται στην ίδια κατηγορία καθολικότητας. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι μια θέση στο πλέγμα του άπειρου πλέγματος είναι τυχαία και κατά συνέπεια δεν επηρεάζεται από τις γειτονικές θέσεις και τα τοπικά μεγέθη (π.χ. αγωγιμότητα) σε σχέση με μια συγκεκριμένη θέση δεν υπαγορεύονται ούτε επηρεάζονται από τις γειτονικές θέσεις. Για τον προαναφερθέντα συλλογισμό, οι διαδρομές διάδοσης εντός του RSE εξετάζονται χωρίς να εφαρμόζονται περιοδικές οριακές συνθήκες. Επιπλέον, θα πρέπει να τονιστεί ότι στην υψηλότερη κλίμακα το μέσο θεωρείται ομοιογενές και ισότροπο, παρότι τοπικά ανισότροπο.

Η υπόθεση της ομοιογένειας είναι κοινή και έχει χρησιμοποιηθεί εκτενώς σε προβλήματα μικρομηχανικής και σε ετερογενή υλικά, όπως σύνθετα υλικά, αφροί, πολύ - κρύσταλλοι που αποτελούνται από διακριτά συστατικά

(ή φάσεις) και παρουσιάζουν διαφορετικές μηχανικές και φυσικές ιδιότητες [6]. Ακολουθώντας τις βασικές αρχές της ομογενοποίησης, στόχος είναι να βρεθεί ένα συνεχές ανάλογο του οποίου η μακροσκοπικά μέση απόκριση είναι ισοδύναμη με αυτήν του αρχικού υλικού [7, 8, 6]. Στο Σχήμα 6.1 το άπειρο μέσο μαζί με το πεπερασμένο αντιπροσωπευτικό επιφανειακό στοιχείο (RSE) απεικονίζεται για σύστημα με ελλειπτικά σωματίδια.

Για να υπάρχει διάδοση στο άπειρο μέσο, σύμφωνα με την υπόθεση ομοιογένειας, η πιθανότητα κατάληψης τοποθεσίας p στο άπειρο θα πρέπει να είναι $p > p_c$ με $p_c \approx 0.5927$ να είναι η κρίσιμη πιθανότητα percolation σε δύο διαστάσεις. Η κρίσιμη συγκέντρωση Φ_c για όλες τις περιπτώσεις μέσω (διάφορες γεωμετρίες) προκύπτει όταν η μέση πιθανότητα percolation στο RSE είναι ίση με την κρίσιμη πιθανότητα percolation (≈ 0.5927) ανεξάρτητα από τη γεωμετρία. Για την τιμή της Φ όπου επιτυγχάνεται $p_{RSE} = 0.5927$ ισχύει $\Phi = \Phi_c$ και αναφέρεται στο άπειρο μέσο. Επομένως, η προτεινόμενη μέθοδος επικεντρώνεται μόνο στη μέση πιθανότητα διάδοσης του p_{RSE} που ερμηνεύεται και γενικεύεται ως η πιθανότητα κατάληψης για το άπειρο μέσο.

Παρόμοιο σκεπτικό μπορεί να υιοθετηθεί και στην περίπτωση του μοντέλου κατάληψης δεσμών όπου η διήθηση λαμβάνει χώρα όταν $p > p_c = 0.50$. Θα πρέπει όμως και η αναπαράσταση του χαμηλότερου επιπέδου (μικροδομή) να συμφωνεί με την αναπαράσταση του υψηλότερου επιπέδου. Δηλαδή η ψηφιοποίηση των συστατικών να λαμβάνει χώρα είτε σε κατάληψη δεσμών είτε σε κατάληψη θέσεων και το μοντέλο αναπαράστασης του άπειρου μέσου θα πρέπει να συμφωνεί με αυτό της μικροδομής, με όρια percolation $p_c \approx 0.5927$ για διήθηση μέσο με κατάληψη θέσεων και $p_c = 0.5$ για διήθηση σε μέσο με κατάληψη δεσμών.



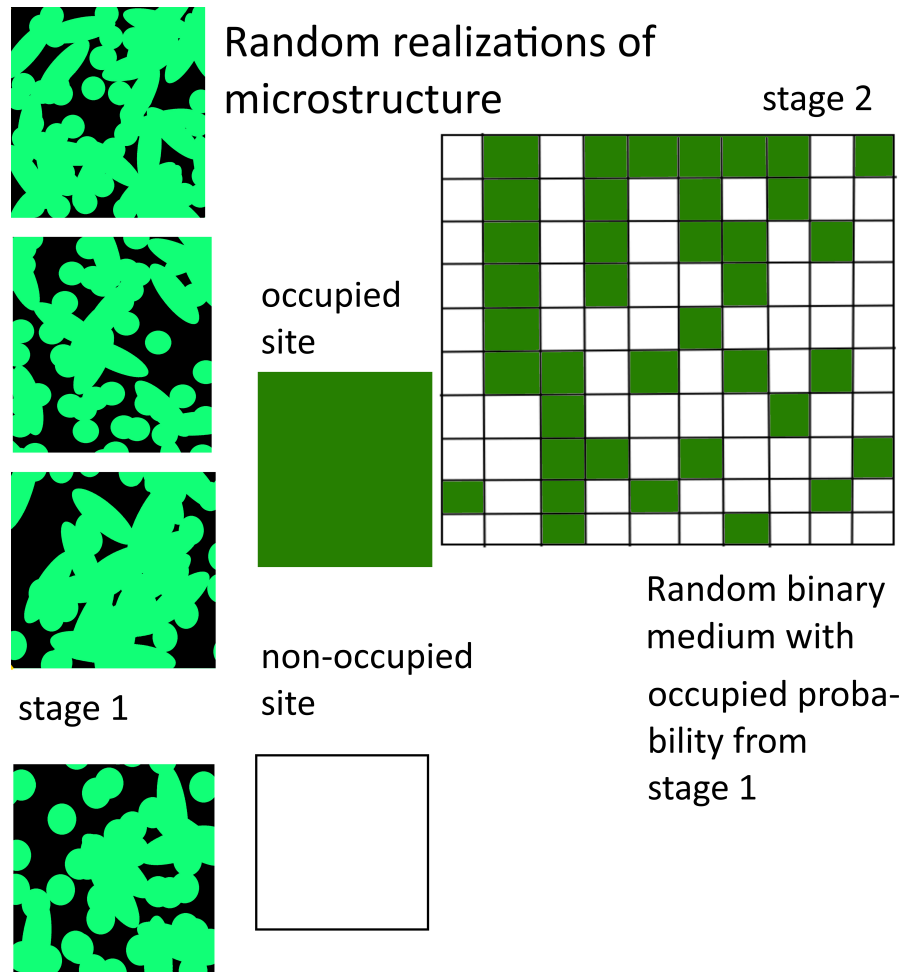
Σχήμα 6.1: Άπειρο Μέσο (μεγάλη εικόνα) και μικροδομή (μεγεθυμένη εικόνα).

6.3 Προτεινόμενος Αλγόριθμος

Όπως αναφέρθηκε, η προτεινόμενη αριθμητική μεθοδολογία αφορά μόνο στην αντιπροσωπευτική πεπερασμένη περιοχή (RSE) του μέσου αντί για το άπειρο μέσο. Για να επιτευχθεί διάδοση στο άπειρο μέσο η πιθανότητα διάδοσης στο πεπερασμένο RSE πρέπει να είναι $p > p_c$ ($p_c \approx 0.5927$ σε δύο διαστάσεις και για διήθηση τοποθεσίας τετραγωνικού πλέγματος). Για να εξεταστεί η διήθηση σε επίπεδο RSE απαιτείται κατ' αρχήν η κατασκευή και η ψηφιοποίηση του RSE. Η ψηφιοποίηση ενός συνεχούς μέσου για τις ανάγκες της θεωρίας percolation, δεν είναι νέα, έχει προταθεί σε ένα πλήθος προηγούμενων δημοσιεύσεων. Στην εργασία του Day και συνεργατών [9] χρησιμοποιείται αυτή η ιδέα και γίνεται προσπάθεια να υπολογιστούν οι τα μέτρα ελαστικότητας (Young, διάτμησης) μιας μήτρας που περιέχει κυκλικές οπές κάνοντας χρήση εξαγωνικό πλέγμα με διήθηση τοποθεσιών.

Οι Garboczi και συνεργάτες [10] υιοθέτησαν την ψηφιοποίηση για τον υπολογισμό της ηλεκτρικής αγωγιμότητας σε ένα επίπεδο αγωγίμο υλικό που περιέχει τυχαίες οπές (κενά) σε συνδυασμό με τον αλγόριθμο Blind Ant. Στο ερευνητικό έργο των Soltani και Sadeghnejadin [11] χρησιμοποιήθηκε η ψηφιοποίηση του μέσου για τον υπολογισμό του ακριβούς εμβαδού των σωματιδίων. Σε τρεις διαστάσεις (3D) ο Garboczi [12] επίλυσε πολυφασικά υλικά με τη βοήθεια του μοντέλου bond percolation και επεξεργασίας εικόνας.

Στην παρούσα ερευνητική προσπάθεια καταρχάς υιοθετείται η ψηφιοποίηση ως το πρώτο στάδιο, για την επίλυση του γενικού percolation προβλήματος. Η βασική ιδέα της επίλυσης είναι η αναζήτηση και εύρεση ενός συνεχούς μονοπατιού στο ψηφιοποιημένο υπόβαθρο όπου η κάθε στοιχειώδης τοποθεσία μπορεί να είναι κατειλημμένη ή μη. Η διαδικασία σχηματικά έχει ως εξής: Αρχικά, δημιουργούνται σχήματα με τυχαίες θέσεις από μια ομοιογενής διαδικασία σημείου Poisson (Poisson point proces)



Σχήμα 6.2: Προτεινόμενος Αλγόριθμος: Αριστερά το επίπεδο της μικροδομής. Με την διαδικασία Monte Carlo δημιουργούνται πολλά τυχαία δείγματα και εξετάζεται αν υπάρχει percolation. Στην συνέχεια υπολογίζεται η πιθανότητα σε ένα τυχαίο RSE να υπάρχει percolation. Δεξιά το επίπεδο της μακροδομής: Δημιουργείται ένα πλέγμα θέσεων με πιθανότητα κατάληψης την πιθανότητα από το προηγούμενο στάδιο.

για κάθε συστατικό. Τα παραγόμενα σχήματα προσομοιάζουν σωματίδια στην στοιχειώδη επιφάνεια RSE έχοντας χαρακτηριστικές γεωμετρικές διαστάσεις (πλάτος \times ύψος). Κύκλοι ελλείψεις καθώς και παραλληλόγραμμα μοντελοποιούνται με ή χωρίς κλίση. Τα παραπάνω γεωμετρικά σχήματα επιλέχθηκαν αφού μπορούν να προσομοιάσουν ένα μεγάλο αριθμό από πραγματικούς τύπους σωματιδίων. Για την υλοποίηση της μεθοδολογίας υπολογιστικά θα πρέπει να τονιστούν ορισμένα σημαντικά χαρακτηριστικά.

Εάν ένα μέρος του σχήματος - σωματιδίου που ψηφιοποιείται βρίσκεται

έξω από το παράθυρο RSE, αυτό αποκόπτεται. Κάθε σωματίδιο ψηφιοποιείται στο πλέγμα RSE μετά από προσαρμογή μεγέθους (εξωτερικά) μέσω του κατάλληλου παράγοντα $factor = \frac{min\ size}{ppms}$ προκειμένου το δείγμα να έχει την απαιτούμενη λεπτομέρεια και παράλληλα να περιέχει το δυνατό περισσότερα σωματίδια. Το ελάχιστο χαρακτηριστικό μέγεθος που είναι κοινό για όλα τα στοιχεία του μέσου συμβολίζεται ως *min size*. Η ποσότητα pixel ανά ελάχιστο μέγεθος (pixel per minimum size-ppms) εισάγεται εξωτερικά και στην πράξη περιγράφει πόσες θέσεις - pixels αντιπροσωπεύουν το ελάχιστο χαρακτηριστικό μέγεθος (π.χ. για τα ελλειπτικά σωματίδια το ελάχιστο χαρακτηριστικό μέγεθος είναι ο μικρός ημιάξονας). Η τιμή *ppms* δίνεται ως παράμετρος εισόδου στον υπολογιστικό κώδικα. Για παράδειγμα, εάν η τιμή των 100 *ppms* χρησιμοποιείται για την αναπαράσταση κύκλων και τη σταθερή τους διάμετρος είναι 1 μm , τότε η διάμετρος του κύκλου θα καταλαμβάνει μήκος 100 pixel στις συνθετικές ψηφιακές εικόνες.

Μια σημαντική λεπτομέρεια για την ολοκλήρωση της ψηφιοποίησης είναι και η περίπτωση όπου υπάρχει επικάλυψη μεταξύ του νεοεισαχθέντες σωματιδίου με τα υπάρχοντα σωματίδια του ίδιου ή διαφορετικού τύπου. Σε αυτήν την περίπτωση η επικάλυψη του εμβადού δεν πρέπει να επαναμετράται. Η διαδικασία συνεχίζεται μέχρι το συστατικό το οποίο μελετάται να φτάσει στην επιθυμητό επιφανειακό κλάσμα.

Είναι επίσης δυνατό να συμπεριληφθεί στο μοντέλο μια ακτίνα πέρα από το υλικό συστατικό όπου οι φορείς φυσικών ιδιοτήτων (π.χ. ηλεκτρόνια για την ηλεκτρική αγωγιμότητα), είναι δυνατό να διαδοθούν χωρίς φυσική επαφή, το οποίο προσομοιώνει το γνωστό φαινόμενο σήραγγας (tunnel effect). Στην περίπτωση του φαινομένου της σήραγγας, η ψηφιοποιημένη περιοχή αναπαρίσταται ως κατειλημμένη αλλά δεν θεωρείται ως μια επιπλέον περιοχή στο κλάσμα της επιφανείας. Τελικά, ένας πίνακας (ο οποίος μπορεί να οπτικοποιηθεί ως εικόνα) δημιουργείται με ενεργοποιημένες ή

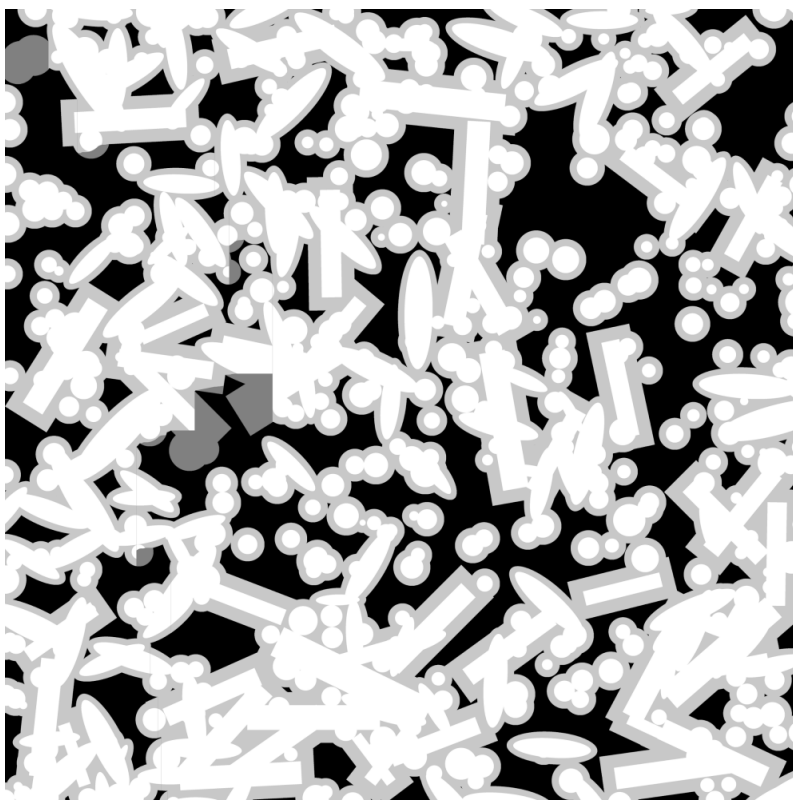


Σχήμα 6.3: Μοντελοποίηση κυκλικών επικαλυπτόμενων σωματιδίων με διάδοση και εφαρμογή του Depth First Search για την εύρεση της διαδρομής διάδοσης (σκούρο γκρι).

όχι "θέσεις" ή "pixels". Σε αυτό τον πίνακα ο αλγόριθμος (DFS) εφαρμόζεται για να βρεθεί μια διαδρομή διάδοσης όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.3 για ένα σύστημα κυκλικών σωματιδίων.

Δεδομένου ότι το άπειρο μέσο έχει χωριστεί σε μικρές αντιπροσωπευτικές επιφάνειες, σε σχέση με ένα πραγματικό μέσο, τα αποτελέσματα από τις RSE θα πρέπει να γενικευθούν στο άπειρο μέσο. Για να επιτευχθεί αυτό, θα πρέπει να δημιουργηθεί μεγάλος αριθμός δειγμάτων RSE και να εξεταστεί σε ένα δεύτερο επίπεδο η διήθηση. Η πιθανότητα κατάληψης των δεσμών σε αυτό το δεύτερο επίπεδο προκύπτει ως πιθανότητα percolation από το προηγούμενο επίπεδο. Έτσι, η παραπάνω διαδικασία που εφαρμόστηκε στα RSE επαναλαμβάνεται σε μια δεύτερη κλίμακα ακολουθώντας την μεθοδολογία Monte Carlo ώστε να υπολογιστεί η μέση πιθανότητα διάδοσης για αυτή την επιφανειακή σύνθεση ή κλάσμα.

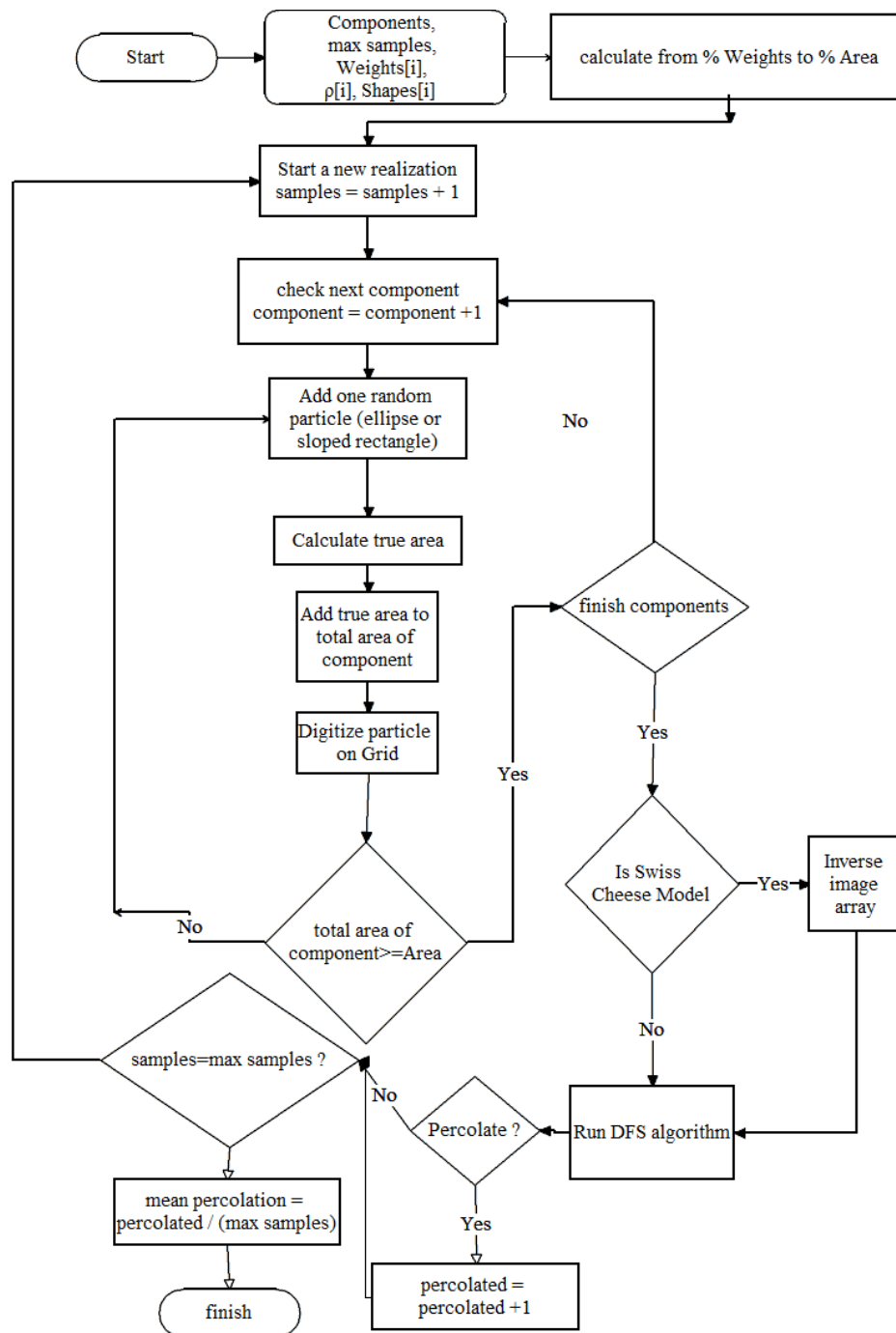
Η παρούσα μέθοδος είναι γενική και μπορεί να καλύψει ένα μεγάλο



Σχήμα 6.4: Μοντελοποίηση επικάλυψης κυκλικών - ελλειπτικών - παραλληλογράμμων σωματιδίων που έχουν διαφορετικά μεγέθη και διάδοση σήραγγας.

αριθμό σχημάτων, μεγεθών και μπορεί απεικονίσει επιτυχώς το φαινόμενο σήραγγας δίνοντας έτσι ικανότητα μοντελοποίησης μεγάλου αριθμού πραγματικών προβλημάτων και συνθηκών. Στο Σχήμα 6.4 απεικονίζεται ενδεικτικό RSE μέσου που αποτελείται από κύκλους, παραλληλόγραμμα, και με διαφορετικές ακτίνες, γραμμικές διαστάσεις, λόγους διαστάσεων λαμβάνοντας υπόψη φαινόμενα σήραγγας.

Ο αλγόριθμος παρουσιάζεται σε ένα διάγραμμα ροής στο Σχήμα 6.5. Για κάθε συστατικό πληρωτικό, που προσομοιάζεται ως απλό γεωμετρικό σχήμα δημιουργούνται ελλείψεις ή ορθογώνια με ή χωρίς κλίση ακολουθώντας την προαναφερθείσα ομοιογενή Poisson διαδικασία για κάθε περίπτωση τεχνητού RSE. Σε αυτή τη διαδικασία η μέγιστη διάσταση καθώς και η γωνία κλίσης μπορούν να είναι μεταβλητά ακολουθώντας μια κατανομή.



Σχήμα 6.5: Διάγραμμα ροής του προτεινόμενου αλγορίθμου.

Κατά την παραπάνω διαδικασία ψηφιοποίησης, για το νεοεισαχθέν σωματίδιο υπολογίζεται το εμβαδόν επικάλυψης με υπάρχοντα σωματίδια-γεωμετρικά σχήματα μαζί με την πραγματική (ψηφιοποιημένη) περιοχή του.

$$A_{n+1}^{Component} = A_n^{Component} + (DA - OA)_{n+1} \quad (6.1)$$

όπου η συνολική περιοχή για το συστατικό υπολογίζεται απο την **Εξίσωση 6.1**, Πιο συγκεκριμένα: $A_{n+1}^{component}$ είναι η συνολική περιοχή που προκύπτει από τα $n + 1$ σωματίδια, $A_n^{component}$ το σύνολο της περιοχής από τα n σωματίδια, DA_{n+1} είναι η ψηφιοποιημένη περιοχή του $(n + 1)$ - σωματιδίου, OA_{n+1} είναι η επικαλυπτόμενη περιοχή του $(n + 1)$ - σωματιδίου με τα συνολικά υπάρχοντα σωματίδια. Η διαδικασία συνεχίζεται έως ότου το υπολογισμένο στοιχείο φτάσει στο επιθυμητό κλάσμα επιφάνειας στόχου.

Η συνέχεια της προαναφερθείσας επαναληπτικής διαδικασία για όλα τα συστατικά δημιουργεί έναν διδιάστατο πίνακα που περιέχει τιμές που κωδικοποιούν την κατάληψη των θέσεων. Η εφαρμογή του αλγορίθμου (DFS) καθορίζει την ύπαρξη ή όχι μονοπατιών διάδοσης. Η διαδικασία τερματίζεται όταν εξαντληθεί ο αριθμός των επαναλήψεων MC. Η μέση πιθανότητα διάδοσης υπολογίζεται με απλό τρόπο χρησιμοποιώντας τον αριθμό των RSE όπου υπάρχει διάδοση διαιρούμενο με τον συνολικό αριθμό των RSE που δημιουργούνται:

$$p = \frac{RSE_{percolated}}{RSE_{total}} \quad (6.2)$$

6.4 Ψηφιοποίηση των γεωμετρικών συστατικών στην αντιπροσωπευτική επιφάνεια

Ένα από τα πιο σημαντικά βήματα για την επίλυση του προβλήματος της percolation είναι η ψηφιοποίηση σωματιδίων στο πλέγμα. Η παρούσα ερ-

γασία παρουσιάζει μεθοδολογίες για την ψηφιοποίηση ελλείψεων και παραλληλόγραμμων, αλλά η μεθοδολογία μπορεί να επεκταθεί και σε άλλα ιδανικά μαθηματικά σχήματα.

Μια σημαντική λεπτομέρεια στη διαδικασία ψηφιοποίησης, σχετίζεται με τη πυκνότητα της δειγματοληψίας (density) η οποία παίζει σημαντικό ρόλο και χρησιμοποιείται για να περιγράψει πόσες φορές διασχίζονται οι χαρακτηριστικές διαστάσεις a, b της έλλειψης ή του ορθογωνίου. Σκοπός είναι να ληφθούν και μη ακέραια σημεία στο πλέγμα έτσι ώστε κατά την εφαρμογή της γεωμετρικής περιστροφής να μην υπάρχουν κενά μέσα στο γεωμετρικό σχήμα.

Ο αλγόριθμος για την ψηφιοποίηση της έλλειψης μπορεί να παρουσιαστεί γραφικά στο Σχήμα 6.6 και έχει ως εξής: Αρχικά, εξετάζεται εάν πρόκειται για κύκλο (οι δύο ημιάξονες a, b ίσοι). Εάν συμβαίνει αυτό, τότε η πυκνότητα δειγματοληψίας γίνεται ίση με 1 διαφορετικά της καταχωρείται η τιμή 2. Ένα ορθογώνιο με διάσταση $[density \times (a+2)] \times [density \times (b+2)]$ ορίζεται και κάθε σημείο του του παραλληλόγραμμου εξετάζεται εάν είναι εσωτερικό στη μη κεκλιμένη έλλειψη (οι συντεταγμένες x, y ικανοποιούν την εξίσωση της έλλειψης).

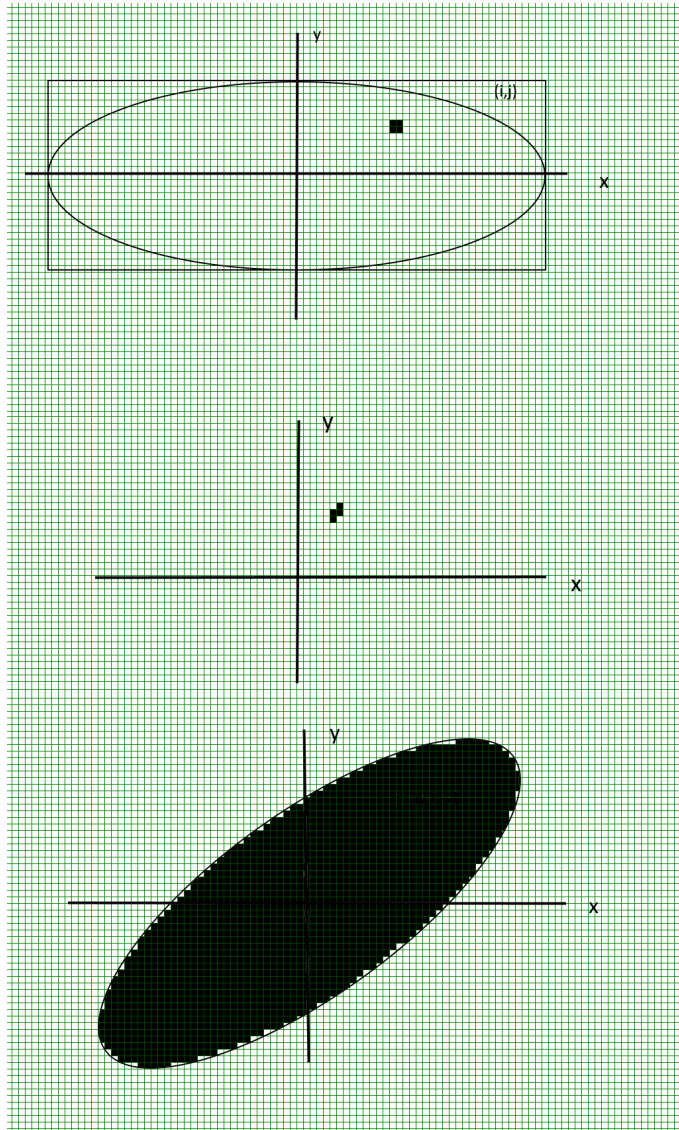
Εάν είναι κεκλιμένη έλλειψη ($a \neq b$) το σημείο περιστρέφεται κατά τη γνωστή γωνία θ της έλλειψης σύμφωνα με τον μετασχηματισμό:

$$\begin{aligned} x' &= x \cdot \cos(\theta) + y \cdot \sin(\theta) \\ y' &= -x \cdot \sin(\theta) + y \cdot \cos(\theta) \end{aligned} \tag{6.3}$$

και τελικά το σημείο x', y' μεταφέρεται κατά (x_0, y_0) , όπου (x_0, y_0) το κέντρο της έλλειψης

$$\begin{aligned} x'' &= x' + x_0 \\ y'' &= y' + y_0 \end{aligned} \tag{6.4}$$

Το σημείο που παράγεται από τους προαναφερθέντες διαδοχικούς μετα-



!η

Σχήμα 6.6: Γραφική αναπαράσταση της διαδικασίας ψηφιοποίησης. Το επάνω σχήμα δείχνει ένα pixel που χαρακτηρίζεται από (i, j) ζεύγος ακεραίων αριθμών που ελέγχεται εάν βρίσκεται εντός του ελλειπτικού τομέα. Εφόσον το σημείο βρίσκεται μέσα, περιστρέφεται (μεσαίο σχήμα) και μετά μετατοπίζεται. Η ίδια διαδικασία επαναλαμβάνεται για όλα τα pixel (κάτω σχήμα).

σχηματισμούς με συντεταγμένες (x'', y'') εξετάζεται εάν είναι κατειλημμένο ή όχι και αν είναι, αν υπάρχει πραγματικό υλικό ή το σημείο αυτό επιτρέπει την διάδοση μέσω φαινομένου σήραγγας, οπότε αυξάνεται η πραγματική επιφάνεια του συστατικού ανάλογα. Παρόμοια είναι η διαδικασία ψηφιοποίησης ενός ορθογώνιου παραλληλογράμμου σέ τετραγωνικό πλέγμα. Η μόνη διαφορά από την παραπάνω διαδικασία είναι ο έλεγχος αν το σημείο βρίσκεται μέσα στο μη κεκλιμένο ορθογώνιο.

Ο αλγόριθμος αναπτύχθηκε ως κώδικας που υλοποιήθηκε σε γλώσσα προγραμματισμού C++. Αναπτύχθηκαν δύο ξεχωριστά προγράμματα που αντιμετωπίζουν τις τρεις (3) και δύο (2) διαστάσεις αντίστοιχα. Οι επιλύσεις των προβλημάτων πραγματοποιήθηκαν σε υπολογιστή εξοπλισμένο με επεξεργαστή Intel I5 4690 και 32 GB R.A.M.. Ο έλεγχος της μεθόδου προσανατολίστηκε στη δισδιάστατη υλοποίηση κυρίως για λόγους οπτικοποίησης της μεθόδου και για ευκολότερη αποσφαλμάτωση (debuging).

6.5 Αποτελέσματα

6.5.1 Αριθμητικές προβλέψεις για συστήματα υλικών με ένα υλικό πλήρωσης

Τα αποτελέσματα της μεθόδου προέκυψαν με 2000 επαναλήψεις και σχετικά μικρά μεγέθη RSE (από 2000×2000 pixels έως 12000×12000 pixels) για ένα φυσικό σύστημα δύο συστατικών: αγωγός και μη αγωγίμο πληρωτικό και παρουσιάζονται στον Πίνακα 6.1. Σημειώνεται ότι ο όρος αγωγιμότητα δεν περιορίζεται μόνο στην ηλεκτρική. Χρησιμοποιείται για να περιγράψει τα πιο γενικά φυσικά φαινόμενα συνδέονται με την έννοια της «αγωγιμότητας». Τα σωματίδια του αγωγίμου υλικού θεωρείται ότι έχουν ελλειπτικό σχήμα. Οι στήλες του Πίνακα 6.1 φιλοξενούν τις τιμές του

Πίνακας 6.1: Προβλέψεις μεθόδου για 2D, κρίσιμη πιθανότητα percolation (p_c^{sim}) και κρίσιμο κλάσμα επιφάνειας (Φ_c^{sim}). Δίνονται οι κρίσιμες συγκεντρώσεις (Φ_c^{liter} , (που χρησιμοποιείται ως είσοδος) και αναφέρονται στη βιβλιογραφία. Δίνονται επίσης οι λόγοι διαστάσεων (a_R) για τα ελλειπτικά σωματίδια, μεγέθη RSE σε pixel. Θεωρητική δισδιάστατη πιθανότητα κρίσιμης percolation $p_c^{theory} = 0.5927$. Οι επαναλήψεις στο MC ήταν μεγαλύτερες από 4000.

a_R	$\Phi_c^{liter}(input)$	Φ_c^{sim}	Φ_c^{tanh}	p_c^{sim}	RSE grid size	ppms
1	0.6763475 [13]	0.677	0.678	0.593	2000 × 2000	250
2	0.6287945 [14]	0.628	0.631	0.590	2000 × 2000	200
5/3	0.65 [15]	0.650	0.649	0.590	2000 × 2000	120
10	0.301 [1]	0.301	0.301	0.5927	5000 × 5000	150
20	0.178 [1]	0.181	0.180	0.594	7000 × 7000	90
50	0.0819[1]	0.082	0.081	0.592	8000 × 8000	70
100	0.0417 [1]	0.043	0.043	0.593	8000 × 8000	50

Πίνακας 6.2: Προβλέψεις μεθόδου για προσομοιώσεις σε δισδιάστατα συστήματα για κρίσιμη πιθανότητα percolation (p_c^{sim}) και κρίσιμο κλάσμα επιφάνειας (Φ_c^{sim}). Δίνονται επίσης οι κρίσιμες συγκεντρώσεις (Φ_c^{liter} , που χρησιμοποιείται ως είσοδος) και αναφέρονται στη βιβλιογραφία, καθώς επίσης και οι λόγοι διαστάσεων a_R για τα ορθογώνια σωματίδια, μεγέθη RSE σε pixel. Θεωρητική δισδιάστατη πιθανότητα κρίσιμης percolation $p_c^{theory} = 0.5927$. Οι επαναλήψεις MC ξεπέρασαν τις 4000

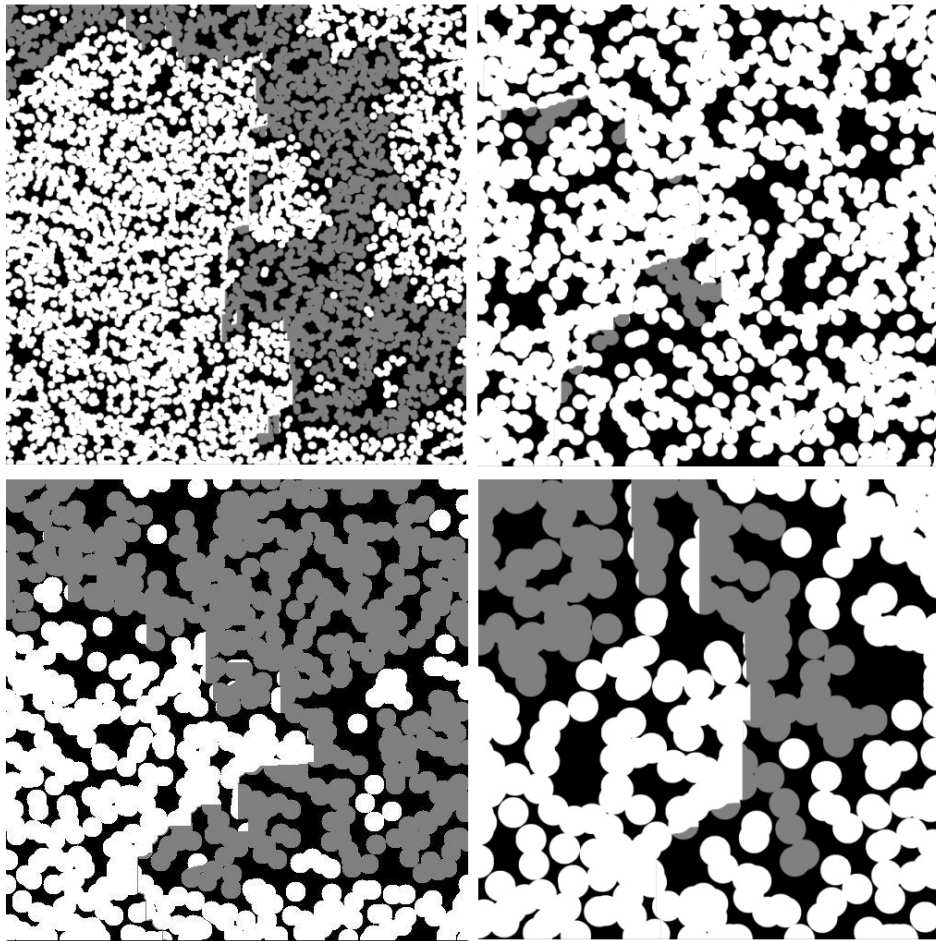
a_R	$\Phi_c^{liter}(input)$	Φ_c^{sim}	Φ_c^{tanh}	p_c^{sim}	RSE grid size	ppms
1	0.62554075 [2]	0.626	0.626	0.583	2000 × 2000	250
10	0.315 [16]	0.321	0.320	0.560	4000 × 4000	120

λόγου μορφής των ελλείψεων a_R , την κρίσιμη συγκέντρωση όπως βρίσκεται στη βιβλιογραφία Φ_c^{liter} , την πιθανότητα percolation που προκύπτει με την παρούσα μέθοδο για $\Phi = \Phi_c^{liter}$, πρόβλεψη της κρίσιμης συγκέντρωσης Φ_c^{sim} , το μέγεθος του πλέγματος, RSE grid size, και τις τιμές των ppms. Η κρίσιμη συγκέντρωση επιφάνειας Φ_c είναι η τιμή συγκέντρωσης στην επιφάνεια που δίνει πιθανότητα διάδοσης ίση με $p_c \approx 0.5927$, στην κλίμακα της μικροδομής ($p_{RSE} = p = p_c \approx 0.5927$). Για την εκτίμηση του Φ_c χρησιμοποιήθηκαν πέντε έως έξι σημεία (Φ, p) γύρω από την τιμή της κρίσιμης πιθανότητας διάδοσης (p_c) και στη συνέχεια με παρεμβολή προέκυψε η αντίστοιχη τιμή Φ_c σε $\Phi_c = 0.5927$. Επιπλέον, η συνάρτηση *sigmoid – tanh* χρησιμοποιήθηκε επίσης

για την εκτίμηση της τιμής Φ_c^{tanh} . Πρέπει να τονιστεί ότι μετά τον υπολογισμό της κρίσιμης επιφανειακής συγκέντρωσης σε επίπεδο μικροδομής, δεν απαιτείται περαιτέρω υπολογισμός για την αναγωγή του αποτελέσματος στο άπειρο μέσο (τουλάχιστον για μια δυαδική ποσότητα που περιέχει την πληροφορία percolation ή όχι), καθώς είναι γνωστή για το άπειρο δυαδικό τυχαία κατειλημμένο μέσο ότι η καμπύλη $p(\Phi)$ ακολουθεί τη συνάρτηση βήματος μονάδας, η οποία για πιθανότητα κατάληψης $p \approx 0.5927$ [4, 5] δίνει το άπειρο συσσωμάτωμα (cluster). Επομένως, τεχνικές όπως το σχήμα κλιμάκωσης πεπερασμένου μεγέθους (finite-size scaling scheme) ή η μέθοδος ομάδας επανακανονικοποίησης (renormalization-group method) [17, 18] δεν είναι απαραίτητο να εφαρμοστούν.

Είναι προφανές ότι τα αποτελέσματα της παρούσας προτεινόμενης μεθόδου είναι ικανοποιητικά και πολύ κοντά στη θεωρητική τιμή του $p \approx 0.5927$ ακόμη και για σχετικά μικρό αριθμό επαναλήψεων MC και μέγεθος πλέγματος RSE σε σύγκριση με τα διαθέσιμα αποτελέσματα που αναφέρονται στη σχετική βιβλιογραφία [14, 15, 13, 1].

Μια βασική ιδέα στη μέθοδο που αναπτύχθηκε είναι η παράμετρος "pixels ανά ελάχιστο μέγεθος" (pixels per minimum size -ppms) που σχετίζεται στενά με το επίπεδο μεγέθυνσης. Οι μεγάλες τιμές ppms συσχετίζονται με υψηλή μεγέθυνση, όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.7 για μέσο που αποτελείται από κυκλικά σωματίδια και για διάσταση RSE 3000×3000 pixel. Στην ιδανική περίπτωση, ένας πολύ μεγάλος αριθμός ppms θα περιέγραφε με ακρίβεια τα συστατικά ως προς το σχήμα και το εμβαδόν της περιοχής. Η αύξηση του μεγέθους ppms αναπόφευκτα εμποδίζει την εφαρμογή μεγάλων μεγεθών δειγμάτων RSE διότι η αύξηση της μεγέθυνσης αυξάνει σημαντικά το υπολογιστικό κόστος. Εάν αυξηθεί σημαντικά η παράμετρος ppms ενώ το μέγεθος του δείγματος $L \times L$ διατηρηθεί σταθερό, τότε μπορεί να εμφανιστεί ένα μη αντιπροσωπευτικό δείγμα που εισάγει σφάλματα

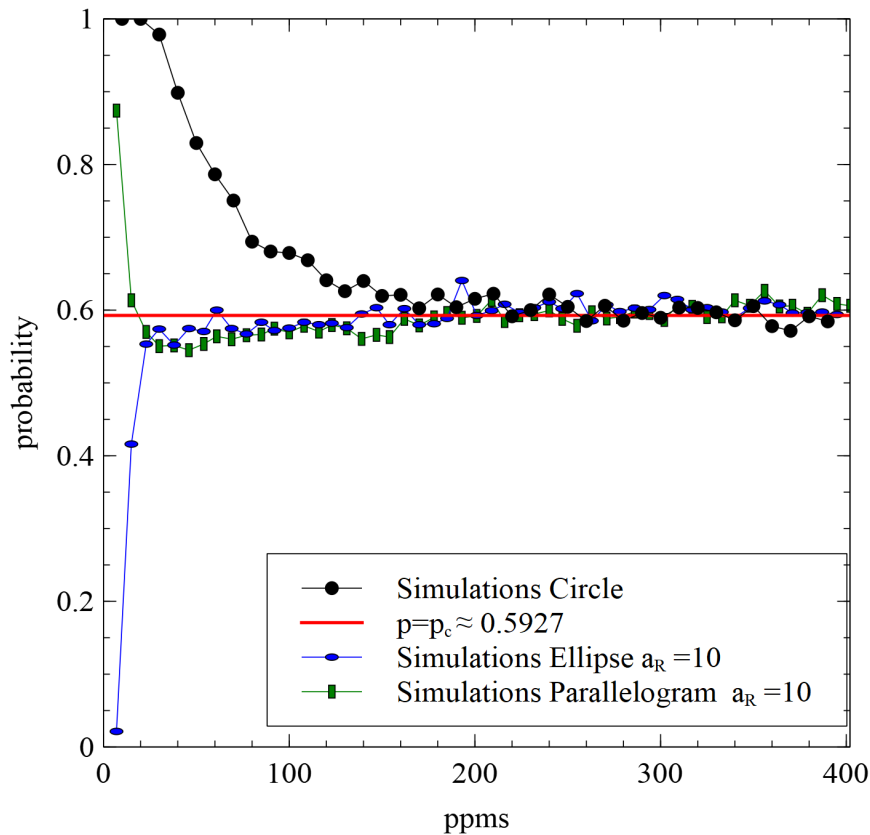


Σχήμα 6.7: Δείγμα RSE με διαφορετικές τιμές παραμέτρου $prms$ (50, 100, 150, 200) για ίδια μεγέθη RSE (3000×3000 pixel). Η τιμή του επιφανειακού κλάσματος είναι σταθερός και ίσος με $\Phi = 0.70$.

μεγέθους συστήματος. Η παρούσα ερευνητική προσπάθεια επιχειρεί να μελετήσει τις επιπτώσεις $prms$, $width(L) \times height(L)$ ή ισοδύναμα η διάσταση πλέγματος (L) σχετικά με την ακρίβεια της λύσης αρχικά. Μελετώνται επίσης ενδεικτικά οι επιπτώσεις στον υπολογιστικό χρόνο.

Στην Σχήμα 6.8 εμφανίζεται η % πιθανότητα percolation σε σχέση με το $prms$ για τρία διαφορετικά συστήματα:

- για κυκλικό συστατικό πλήρωσης σε συγκέντρωση $\Phi = \Phi_c = 0.6763475$ (μια τιμή που ελήφθηκε από την βιβλιογραφία [13])
- για ελλειπτικό πληρωτικό που έχει $a_R=10$ σε $\Phi=0.303$ (η τιμή λαμ-

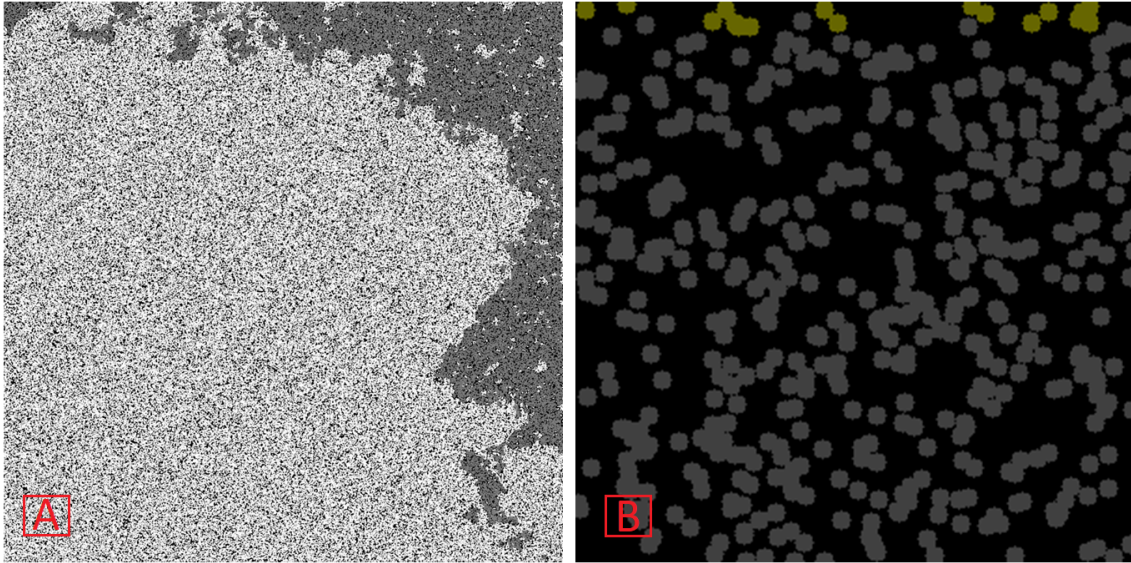


Σχήμα 6.8: Επίδραση της παραμέτρου $ppms$ στην ακρίβεια της μεθόδου που αναπτύχθηκε για τρεις διαφορετικές γεωμετρίες πληρωτικών. Για το κυκλικό υλικό πλήρωσης με $\Phi=0.676347$. Για ελλειπτικό πληρωτικό με τα σωματίδια να έχουν $a_R=10$ το επιφανειακό κλάσμα ήταν $\Phi=0.301$, και για παραλληλόγραμμο πληρωτικό με $a_R=10$, υπολογίστηκε $\Phi=0.32$. Για όλα τα προσομοιωμένα συστήματα χρησιμοποιήθηκαν 2000 επαναλήψεις MC. Μεγέθη πλέγματος RSE με 5000×5000 εικονοστοιχεία χρησιμοποιήθηκαν για τα ελλειπτικά και τα παραλληλόγραμμο πληρωτικά ενώ για το κυκλικό υλικό πλήρωσης 3000×3000 pixel.

βάνεται από την εργασία [1])

- για πληρωτικό παραλληλόγραμμο σχήματος με $a_R=10$ στο $\Phi=0.315$ (λήφθηκε από την εργασία [16])

Για τα ελλειπτικά και παραλληλόγραμμο πληρωτικά χρησιμοποιήθηκε ένα μέγεθος πλέγματος που αποτελείται από 5000×5000 pixels ενώ για το κυκλικό το πλέγμα ήταν 3000×3000 pixels. Επιπλέον, έχουν πραγματοποιηθεί 2000 επαναλήψεις MC για τα προαναφερθέντα συστήματα. Η ανάλυση



Σχήμα 6.9: Εμφάνιση σχεδόν τυχαίας μη συνεχούς percolation που δημιουργείται από πολύ μικρές τιμές $ppms = 2$, για την περίπτωση του κυκλικού στοιχείου (αριστερό πλαίσιο A). Μικρές τιμές $ppms$ που οδηγούν σε κακή αναπαράσταση κυκλικού τύπου συστατικών (δεξιό πλαίσιο B).

της υπολογισμένης πιθανότητας σε σχέση με το $ppms$ δείχνει σύγκλιση στο θεωρητικά αναμενόμενο p_c ακόμη και με την υιοθέτηση σχετικών μικρών τιμών $ppms$ όπως μπορεί να φανεί στο Σχήμα 6.8. Ειδικότερα, η σύγκλιση στην τιμή της πιθανότητας percolation επιτυγχάνεται για $ppms > 150$ σε κυκλικά σωματίδια. Τα συστήματα με συστατικά πληρωτικά ελλειπτικών και παραλληλόγραμμων σχημάτων με λόγο μορφής $a_R = 10$ συγκλίνουν στην κρίσιμη τιμή της πιθανότητας ακόμη και για τιμές $ppms < 100$. Είναι σαφές ότι τα συγκεκριμένα ελλειπτικά και παραλληλόγραμμα πληρωτικά παρουσιάζουν σύγκλιση για χαμηλότερες τιμές $ppms$ σε σύγκριση με τα κυκλικά πληρωτικά. Οι επιμήκεις (υψηλοί λόγοι μορφής) γεωμετρίες μπορούν να ψηφιοποιηθούν και αναπαρασταθούν με μεγαλύτερη ακρίβεια ακόμη και για χαμηλές τιμές $ppms$ (οριακά η αναπαράσταση χαμηλής ανάλυσης μοιάζει με ραβδί) βοηθώντας έτσι την δειγματοληψία σε σύγκριση με τις κυκλικές γεωμετρίες. Τα κυκλικά σωματίδια που ψηφιοποιηθήκαν χρησιμοποιώντας μεγέθυνση χαμηλής ανάλυσης ($40 < ppm < 70$) έχουν αναπόφευκτα μειωμένη ποιότητα περιγραφής για το RSE. Αυτό εκφυλίζει τις

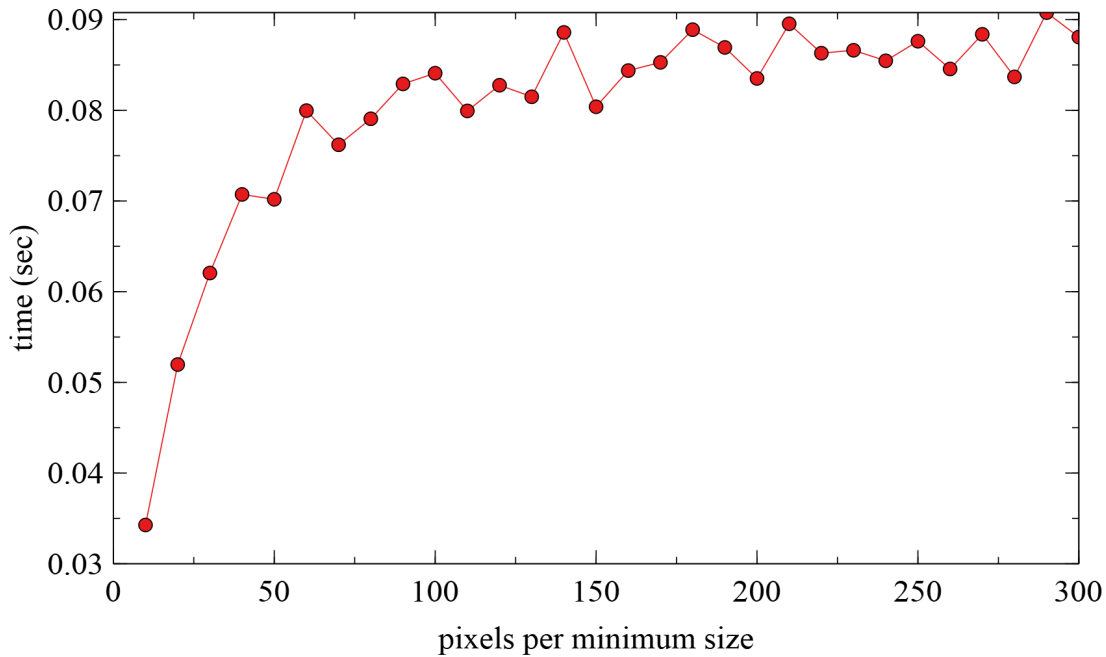
συστοιχίες κύκλων σε σχεδόν τυχαία μη συνεχής διάδοση όπου απεικονίζεται στο **Σχήμα 6.9** και δίνει λανθασμένα αυξημένες πιθανότητες διάδοσης ($0.65 < p < 0.9$) όπως μπορεί να φανεί στο **Σχήμα 6.8**.

Έχοντας διεξάγει εκτενείς αριθμητικές προσομοιώσεις αποκαλύφθηκε ένας ευρετικός κανόνας ώστε να μπορούν να ληφθούν ακριβέστερα αποτελέσματα (που να συμφωνούν με άλλες μεθόδους της βιβλιογραφίας) ο οποίος είναι $ppms \geq ppms_{critical}^{circle} = 4\sqrt{L}$ για το πρόβλημα των κυκλικών πληρωτικών. Ακολουθώντας απλά γεωμετρικά επιχειρήματα η παραπάνω σχέση είναι ισοδύναμη (παραβλέποντας τη συνέπεια των φυσικών μονάδων) με τη

$$A > 4\pi L, \quad (6.5)$$

όπου A είναι η κυκλική περιοχή ενός σωματιδίου. Απευθείας επέκταση εφαρμογή της **Εξίσωσης 6.5** για το ελλειπτικό σωματίδιο με εμβαδόν A και λόγο μορφής $a_R = a/b$ (με το a, b να είναι ο μεγάλος και ο μικρός ημιάξονας της έλλειψης, αντίστοιχα) υπαγορεύουν την επιλογή του $ppms$ σύμφωνα με $ppms \geq ppms_{critical}^{elliptic} = \sqrt{\frac{16L}{a_R}}$ που αποδείχθηκε ιδιαίτερος χρήσιμη και έγκυρη.

Το $ppms$ όπως αναφέρθηκε, είναι μια κρίσιμη παράμετρος για τη συνολική απόδοση του αναπτυγμένου αριθμητικού αλγορίθμου και των επιμέρους σταδίων του. Η επίδραση των τιμών $ppms$ στον μέσο χρόνο εκτέλεσης του (DFS) για κάθε επανάληψη MC για σταθερές διαστάσεις πλέγματος (5000×5000) διερευνήθηκε. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο **Σχήμα 6.10** καταδεικνύοντας πως ότι δεν υπάρχει σημαντική εξάρτηση για τον υπολογιστικό χρόνο σε σχέση με το $ppms$ πέρα από την σχεδόν αρχική γραμμική αύξησή του. Ο υπολογιστικός χρόνος εκτέλεσης του (DFS) σταθεροποιείται εμφανίζοντας μια επίπεδη περιοχή plateau που αναπτύσσεται για $ppms > 150$. Αυτό μπορεί να αποδοθεί στην εσωτερική δομή του υλικού του RSE, η οποία αντιπροσωπεύεται επαρκώς μόνο για μεγαλύτερα

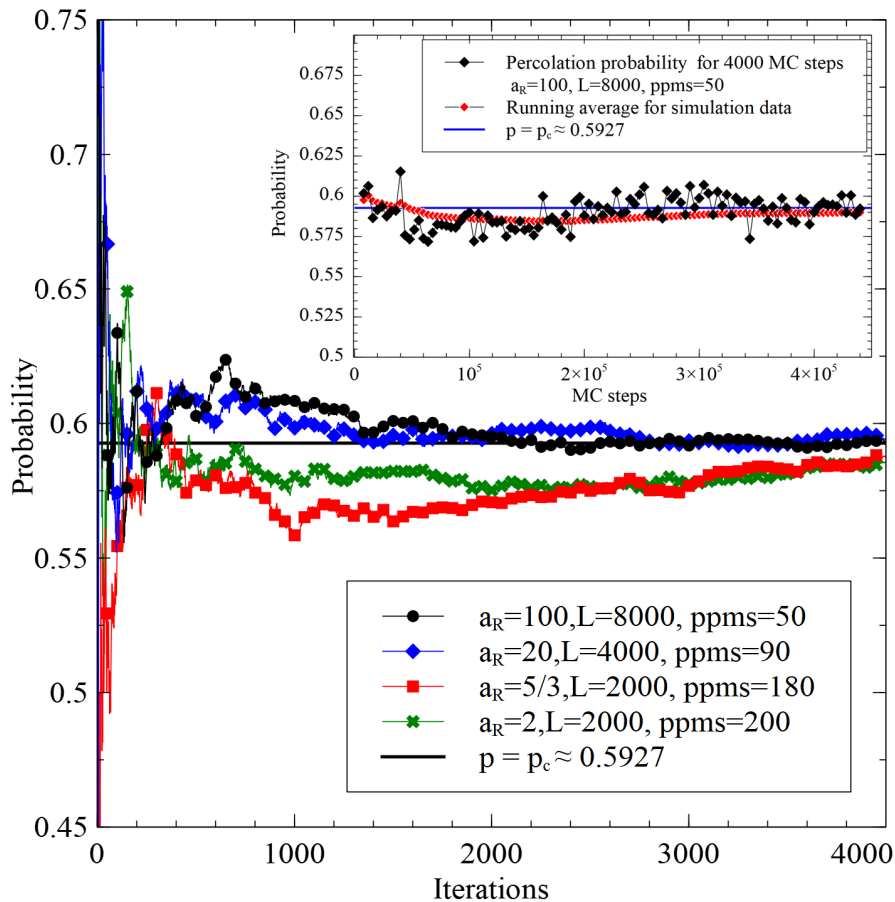


Σχήμα 6.10: επίδραση του $prms$ στον υπολογιστικό χρόνο για ένα βήμα MC για κυκλικό στοιχείο στα $\Phi_c = 0.6763$ και μέγεθος RSE 5000×5000 .

τιμές $prms$ (> 100). Η απόδοση του αλγορίθμου (DFS) επηρεάζεται από το πραγματικό μέγεθος του RSE και δεύτερον από το επιφανειακό κλάσμα των συστατικών του υλικού. Για μικρές τιμές $prms$ επίσης χαμηλοί είναι και οι χρόνοι εκτέλεσης, όπως αναμενόταν, αλλά η ψηφιοποιημένη περιγραφή του στα δείγματα δεν είναι αντιπροσωπευτική και στερείται ακρίβειας και λεπτομέρειας (όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.9) κάτι που οδηγεί τελικά σε αποτελέσματα με μειωμένη ακρίβεια.

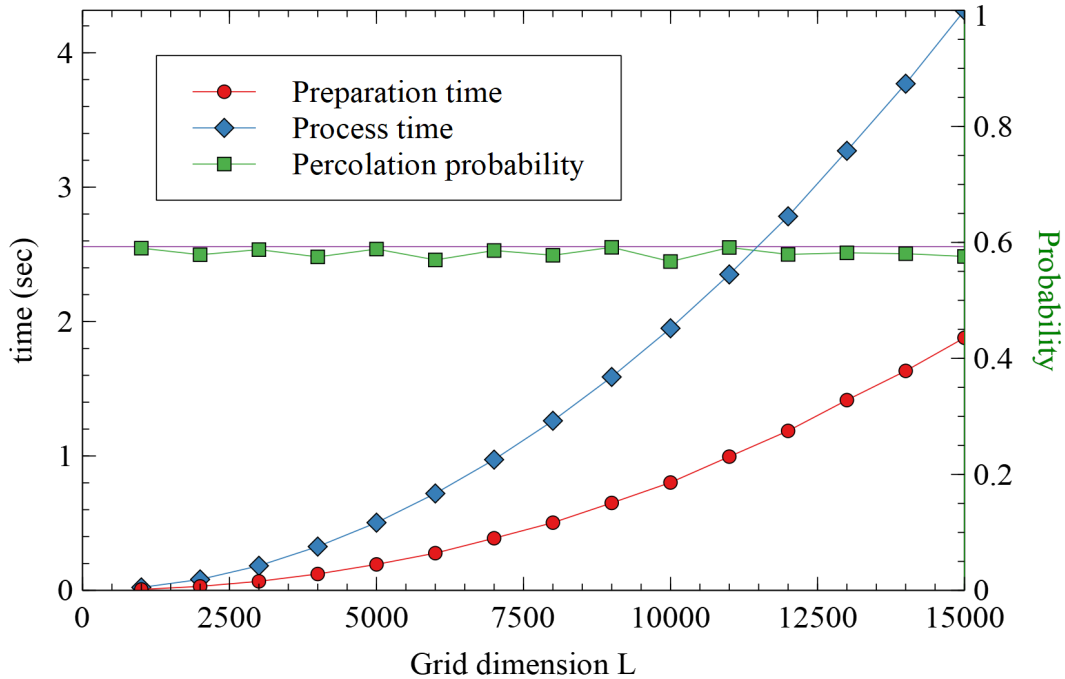
Η πιθανότητα percolation για διαφορετικά ελλειπτικά πληρωτικά σωματίδια με λόγους μορφής (a_R) που κυμαίνονται από 2 έως 100 ως συνάρτηση των επαναλήψεων MC φαίνεται στο Σχήμα 6.11. Είναι σαφές ότι η μέθοδος συγκλίνει στη θεωρητική αναμενόμενη τιμή $p_c \approx 0.5927$ ακόμη και για μικρό αριθμό επαναλήψεων MC. Το στατιστικό σχετικό σφάλμα της μεθόδου είναι μικρό και περίπου 2.5% στο Φ_c . Το ένθετο στο Σχήμα 6.11 δείχνει τη συμπεριφορά της πιθανότητας (και τη σύγκλιση) αποτυπώνοντας

έναν πολύ μεγαλύτερο αριθμό επαναλήψεων MC που εκτείνεται έως στα 4.5×10^5 βήματα MC.



Σχήμα 6.11: Πιθανότητα percolation ως συνάρτηση των επαναλήψεων του MC. Η οριζόντια γραμμή υποδηλώνει την κρίσιμη πιθανότητα percolation $p_c = 0.5927$. Ένθετο Σχήμα: τρέχων μέσος όρος της πιθανότητας για σωματίδια ελλειπτικού πληρωτικού που έχουν $a_R = 100$ σε Φ_c ως συνάρτηση των επαναλήψεων του MC.

Ένας άλλος παράγοντας που έχει μελετηθεί είναι η διάσταση του πλέγματος (L) που σχετίζεται άμεσα με το πραγματικό μέγεθος πλέγματος RSE ($L \times L$). Μεγέθη πλέγματος που κυμαίνονται από 2000×2000 έως 15000×15000 χρησιμοποιήθηκαν για κυκλικά σωματίδια πλήρωσης. Η πιθανότητα διάδοσης και ο σχετικός χρόνος υπολογισμού που δαπανάται στα διαφορετικά στάδια του αλγορίθμου υπολογίστηκαν προκειμένου να βρεθεί μια αποδοτικό σχήμα. Η τιμή των επαναλήψεων MC επιλέχθηκε σε 4000. Από τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στο Σχήμα 6.12 είναι σαφές ότι

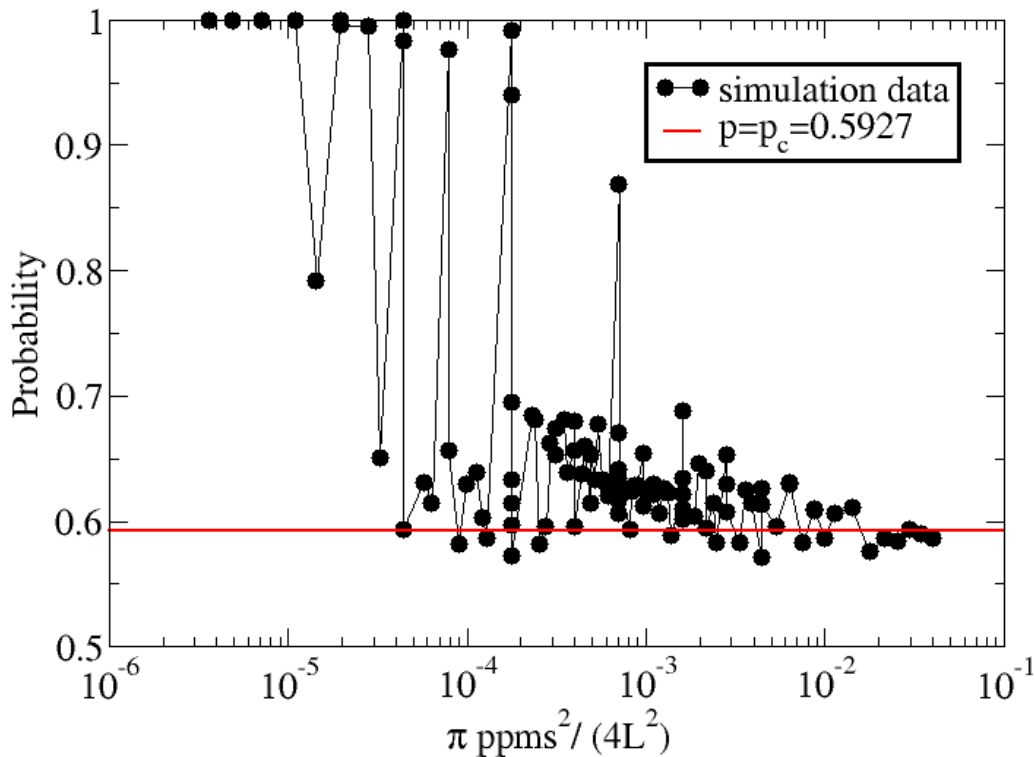


Σχήμα 6.12: Επίδραση της διάστασης πλέγματος L και κατά συνέπεια του μεγέθους πλέγματος $L \times L$ στην ακρίβεια και τον υπολογιστικό χρόνο. Ο χρόνος προετοιμασίας αναφέρεται στο στάδιο ψηφιοποίησης του αλγορίθμου. Οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν για 4000 επαναλήψεις MC και επιφανειακό κλάσμα $\Phi = 0.676347$. Η οριζόντια γραμμή αντιστοιχεί σε $p = p_c = 0.5927$.

η μέθοδος μπορεί να εφαρμοστεί με επιτυχία για διαστάσεις πλέγματος που φιλοξενεί 2000×2000 θέσεις. Σημαντικά μεγαλύτερα μεγέθη δεν επηρεάζουν την υπολογισμένη πιθανότητα και δημιουργούνται μόνο μικρές αποκλίσεις ($< 5\%$). Τα υψηλότερα μεγέθη πλέγματος RSE επηρεάζουν τους χρόνους προετοιμασίας και επεξεργασίας (Σχήμα 6.10) αυξάνοντας έτσι τον μέσο υπολογιστικό χρόνο ανά επανάληψη MC. Η αύξηση ακολουθεί νόμο δύναμης τετραγώνου.

Με βάση τα δεδομένα προσομοίωσης, η ποσότητα $\frac{prrms^2}{(4L^2)}$ που αντιπροσωπεύει το επιφανειακό κλάσμα ενός απλού κυκλικού σωματιδίου σε σχέση με την περιοχή RSE υπολογίστηκε για 2000 επαναλήψεις MC και το διάγραμμα πιθανότητας percolation σε σχέση με την παραπάνω ποσότητα εμφανίζεται στο Σχήμα 6.13. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι ο παράγο-

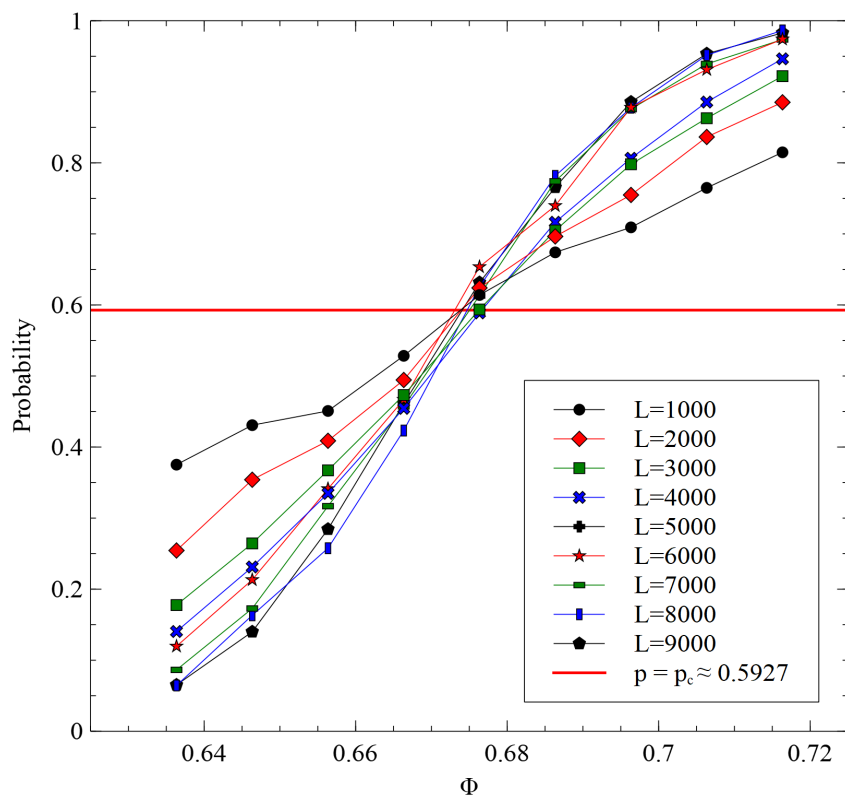
ντας $\frac{\pi p r p m s^2}{4L^2}$ έχει υπολογιστεί χρησιμοποιώντας επτά (7) διαφορετικές διαστάσεις πλέγματος που κυμαίνονται από $L = 1000$ έως 7000 και δέκα (10) διαφορετικές τιμές $p r p m s$ ($p r p m s = 15, 30, 45, 75, 105, 130, 145, 175, 205, 235$) δημιουργώντας ένα διάγραμμα που του $p(\frac{\pi p r p m s^2}{4L^2})$ για τα 70 σημεία που προκύπτουν. Η πιθανότητα percolation συγκλίνει σε p_c όταν η τιμή του παράγοντα $\pi p r p m s^2 / (4L^2)$ υπερβαίνει το 0.01. Αυτό δείχνει ότι η πραγματική επιμέρους περιοχή σωματιδίων θα πρέπει να επιλεγεί εκατό φορές χαμηλότερη από την περιοχή του δείγματος και είναι σύμφωνη με την εμπειρική εκτίμηση που παρέχεται από τη σχέση ανισότητας $A > 4\pi L$.



Σχήμα 6.13: Επίδραση του παράγοντα $\pi p r p m s^2 / (4L^2)$ στην ακρίβεια πιθανότητας percolation για κυκλικό συστατικό. Η οριζόντια γραμμή αντιστοιχεί σε $p = p_c = 0.5927$.

Η πιθανότητα διάδοσης σε συνάρτηση με το επιφανειακό κλάσμα Φ υπολογίστηκε επίσης για να κατασκευαστεί η καμπύλη που παρέχει την κρίσιμη πιθανότητα διάδοσης p_c . Στις αριθμητικές προσομοιώσεις χρησιμοποιήθηκαν διαφορετικά μεγέθη πλέγματος RSE, προκειμένου να μελετη-

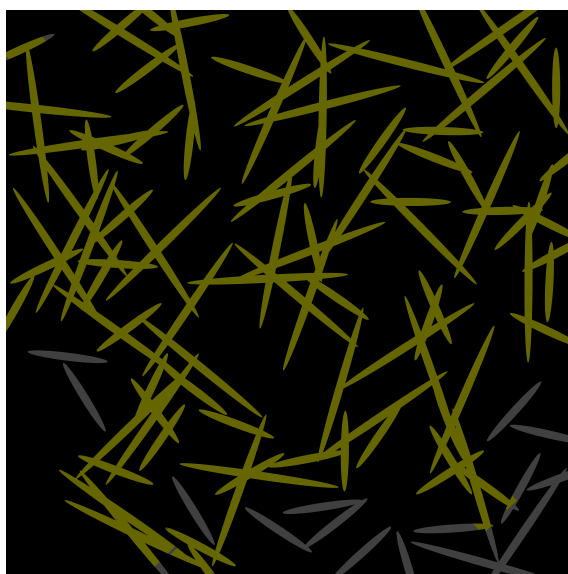
θεί η επίδραση του μεγέθους του πλέγματος. Όπως μπορεί να φανεί στο Σχήμα 6.14 οι προσομοιώσεις δείχνουν ότι όσο αυξάνεται το μέγεθος του πλέγματος, η καμπύλη γίνεται πιο απότομη. Η παρατηρούμενη συμπεριφορά είναι συνεπής με τα ευρήματα και τα αποτελέσματα του Essam [19] που προβλέπει ότι σε ένα άπειρο μέσο η συμπεριφορά τείνει να ακολουθεί το βηματική συνάρτηση Heaviside. Οι καμπύλες τέμνονται στο σημείο $(0.67634, 0.5935)$ όπως αναμένεται, το οποίο είναι το σημείο καμπής για κάθε καμπύλη $p(\Phi)$.



Σχήμα 6.14: Πιθανότητα percolation p για κυκλικά πληρωτικά ως συνάρτηση του κλάσματος επιφάνειας Φ για διαφορετικά μεγέθη RSE, 2500 επαναλήψεις MC και 300 $ppms$. Η κόκκινη οριζόντια γραμμή αντιπροσωπεύει την τιμή πιθανότητας percolation $p_c = 0.5935$ και εμφανίζεται για αναφορά.

6.5.2 Διήθηση σε συστήματα με πολλαπλά υλικά πλήρωσης

Πρόσθετα προβλήματα που δείχνουν την ευελιξία και τις δυνατότητες της προτεινόμενης αριθμητικής μεθοδολογίας μπορούν να αντιμετωπιστούν με την προσομοίωση συστημάτων υλικών με πολλαπλά αγώγιμα στοιχεία που διαφέρουν ως προς τα γεωμετρικά τους σχήματα και χαρακτηριστικά. Το φαινόμενο της σήραγγας μπορεί επίσης να ληφθεί υπόψη.



Σχήμα 6.15: Επίλυση του προβλήματος percolation για σύστημα που αποτελείται από δύο ελλειπτικά σωματίδια πλήρωσης με $a_R=10, 20$ και επιφανειακά κλάσματα $\Phi = 0.10$ και 0.12 , αντίστοιχα. Άλλες παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν στις αριθμητικές προσομοιώσεις ήταν $ppms = 85$, μέγεθος πλέγματος RSE 6000×6000 pixel και 2000 επαναλήψεις MC. Η υπολογισμένη πιθανότητα διάδοσης για το συγκεκριμένο σύστημα είναι $p = 0.624 > p_c$ σηματοδοτώντας ένα μέσο με διήθηση.

Στην Σχήμα 6.15 παρουσιάζεται η διήθηση για ένα μείγμα υλικού που φιλοξενεί δύο ελλειπτικά συστατικά. Οι λόγοι μορφής ήταν $a_R=10$ και 20 και τα κλάσματα επιφάνειας Φ ήταν 0.10 και 0.12 , αντίστοιχα και το φαινόμενο της σήραγγας δεν ελήφθη υπόψη. Η υπολογισμένη τιμή πιθανότητας percolation για αυτήν την περίπτωση είναι κοντά στο 0.624 . Η άμεση σύγκριση $p = 0.624 > p_c \approx 0.5927$ υπαγορεύει ότι σε αυτή την περίπτωση

το αντίστοιχο άπειρο μέσο είναι αγώγιμο.

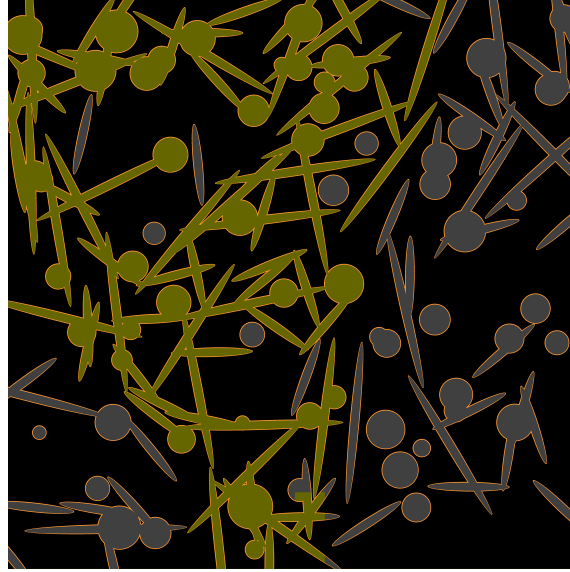
Η ευελιξία και οι δυνατότητες της προτεινόμενης μεθόδου μπορεί να αποδειχθεί περαιτέρω με προσομοίωση συστημάτων υλικών με τρία αγώγιμα στοιχεία που αποτελούνται από δύο ελλειπτικά σχήματα και ένα κυκλικό παρουσιάζεται δε στο Σχήμα 6.16. Το φαινόμενο σήραγγας εξετάστηκε σε απόσταση μήκους 5 nm. Κάθε στοιχείο θεωρείται ότι έχει κλάσμα επιφάνειας $\Phi = 0.10$. Τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των πληρωτικών δίνονται στον Πίνακα 6.3.

a (nm)	b (nm)	a_R	tunnel dimension (nm)	Φ
250	25	10	5	0.10
500	25	20	5	0.10
90	90	1	5	0.10

Πίνακας 6.3: Πρόβλημα με φαινόμενο σήραγγας: τρία (3) συστατικά (δύο ελλειπτικά και ένα κυκλικό) στο ίδιο κλάσμα επιφάνειας Φ .

Συγκεκριμένα, το κυκλικό στοιχείο έχει μέση ακτίνα $\bar{R} = 90$ nm και κατανέμεται με κανονική κατανομή στο διάστημα $R \in [\bar{R} - 0.25\bar{R}, \bar{R} + 0.25\bar{R}]$. Το πλέγμα αποτελείται από τοποθεσίες 6000×6000 , οι επαναλήψεις MC ήταν 1000 και η παράμετρος $ppms$ ήταν ίση με 85. Η υπολογισμένη μέση πιθανότητα διάδοσης για αυτή την περίπτωση είναι $p = 0.535 < p_c \approx 0.5927$ και το αντίστοιχο άπειρο μέσο είναι μη αγώγιμο.

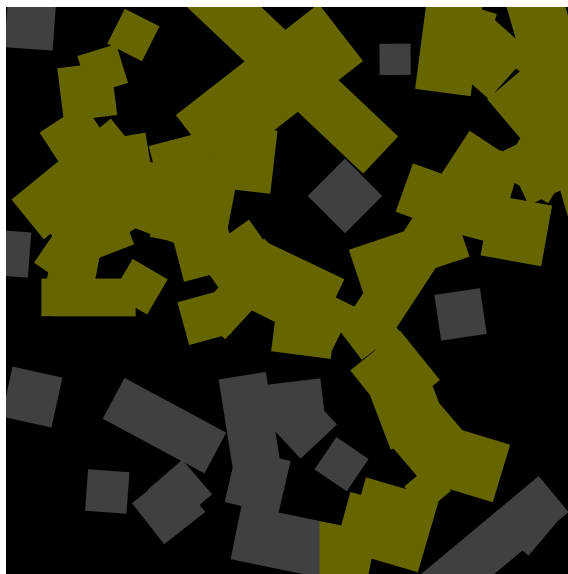
Τέλος, μελετήθηκε ένα σύστημα με τρία (3) ορθογώνια στοιχεία με $a_R = 5, 2.5, 1$ και κλάσματα επιφάνειας $\Phi = 0.10, 0.20$ και 0.20 , αντίστοιχα. Το σύστημα που υιοθετήθηκε (ένα τυχαία επιλεγμένο RSE εμφανίζεται στην Σχήμα 6.17) και οι παράμετροι προσομοίωσης ήταν: μέγεθος πλέγματος RSE 4000×4000 pixel, 2000 επαναλήψεις MC και $ppms=30$. Η υπολογισμένη πιθανότητα για το συγκεκριμένο σύστημα είναι $p = 0.303 < p_c$ που υπονοεί ένα μη διηθητικό άπειρο μέσο.



Σχήμα 6.16: Πρόβλημα percolation για ένα σύστημα που αποτελείται από τρεις τύπους σωματιδίων πλήρωσης με $a_R = 20, 10, 1$ και κλάσμα επιφάνειας $\Phi = 0.10$ για κάθε συστατικό. Εφαρμόζεται το φαινόμενο σήραγγας σε απόσταση 5×10^{-9} nm για όλα τα συστατικά. Πρόσθετες παράμετροι προσομοίωσης: Το RSE αντιπροσωπεύτηκε με 6000×6000 , $ppms=85$ και χρησιμοποιήθηκαν 2000 επαναλήψεις MC. Η υπολογισμένη πιθανότητα διάδοσης για το συγκεκριμένο σύστημα είναι $p = 0.535 < p_c$.

6.5.3 Το πρόβλημα των κενών (Swiss Cheese Problem - voids)

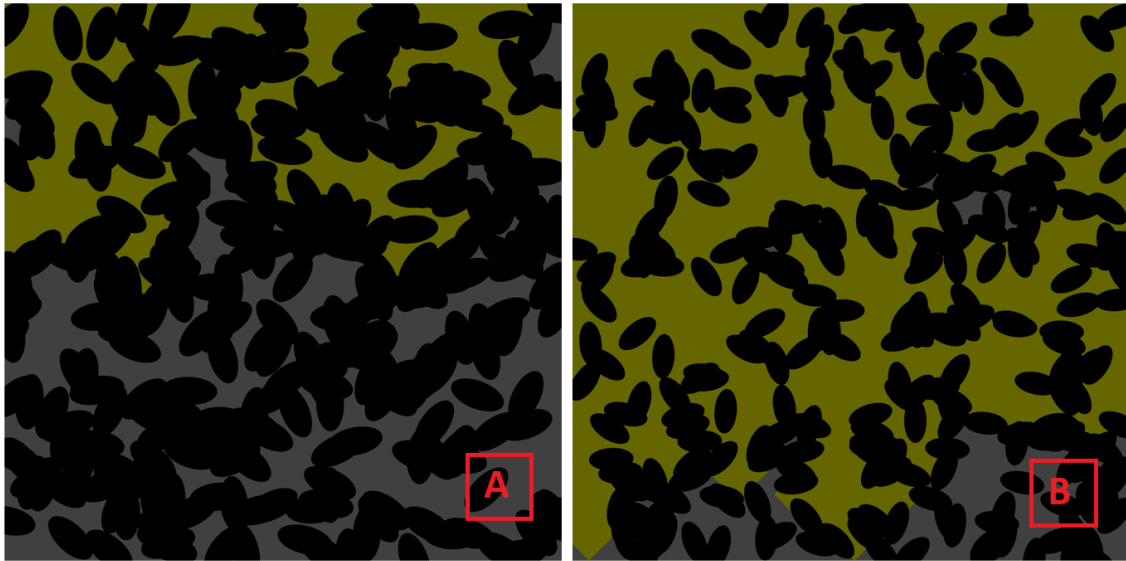
Ως τελική εφαρμογή της τρέχουσας προτεινόμενης μεθοδολογίας επιλύθηκε το πρόβλημα της διήθησης κενών (void percolation). Περιληπτικά περιγράφεται από ένα μέσο που αποτελείται από μια αγωγίμη μήτρα και μη αγωγίμα ελλειπτικά κενά. Οι ελλείψεις έχουν αφαιρεθεί από το σύστημα και η γεωμετρία μοιάζει με ελβετικό τυρί. Το δείγμα του μέσου παρουσιάζεται στο Σχήμα 6.18 και το αγωγίμο το υλικό αναπαρίσταται με γκρι χρώμα ενώ οι μη αγωγίμες οπές εμφανίζονται με μαύρο χρώμα. Μελετώνται δύο αντιπροσωπευτικά συστήματα που έχουν κλάσματα επιφάνειας: (A) $\Phi = 0.6763$ και (B) $\Phi = 0.50$. Ο λόγος μορφής της έλλειψης είναι $a_R=2$. Η αλγοριθμική διαδικασία ακολουθεί τα ήδη παρουσιασμένα αλγοριθμικά βήματα: τυχαία εισαγωγή του μη αγωγίμου συστατικού που



Σχήμα 6.17: Πρόβλημα percolation για ένα σύστημα που αποτελείται από τρία ορθογώνια πληρωτικά με $a_R = 5, 2.5, 1$ και κλάσματα επιφάνειας $\Phi = 0.10, 0.20$ και 0.20 , αντίστοιχα. Χρησιμοποιήθηκαν οι εξής παράμετροι προσομοίωσης: Μέγεθος πλέγματος RSE 4000×4000 pixel, 2000 επαναλήψεις MC και $ppms=30$. Η υπολογισμένη πιθανότητα διάδοσης για το συγκεκριμένο σύστημα είναι $p = 0.303 < p_c$ συνεπώς είναι μη αγώγιμο μέσο. Το συγκεκριμένο RSE επιλέχθηκε σκόπιμα για να έχει μια διαδρομή διάδοσης.

ακολουθείται από την ψηφιοποίηση των εισαχθέντων σωματιδίων. Στις θέσεις του αγώγιμου μέσου εκχωρείται η τιμή 1 ενώ για τις μη αγώγιμες ελλειπτικές θέσεις η τιμή 0 δημιουργώντας με αυτόν τον τρόπο μια συστοιχία που φιλοξενεί ενεργοποιημένες και μη θέσεις. Οι DFS, BFS αλγόριθμοι εφαρμόζονται (κυρίως για λόγους συνέπειας και πληρότητας) για να βρεθούν οι διαδρομές διάδοσης, όπως μπορεί να φανεί στο Σχήμα 6.18 για δύο αντιπροσωπευτικές περιπτώσεις.

Για το πρώτο σύστημα με κλάσμα επιφάνειας κενών $\Phi = 0.6763$ χρησιμοποιήθηκε ένα δείγμα που αποτελείται από 2000×2000 pixel με $ppms = 200$. Η χρήση αλγορίθμων DFS, BFS και 8000 MC επαναλήψεων έδωσε μια συγκλίνουσα τιμή πιθανότητας $p = 0.206 < p_c$ ενδεικτική για μη διηθητικό σύστημα. Αντίθετα, το δεύτερο σύστημα στο $\Phi = 0.5$ το οποίο μοντελοποιείται χρησιμοποιώντας τις ίδιες τιμές μεγέθους δείγματος, επαναλήψεις

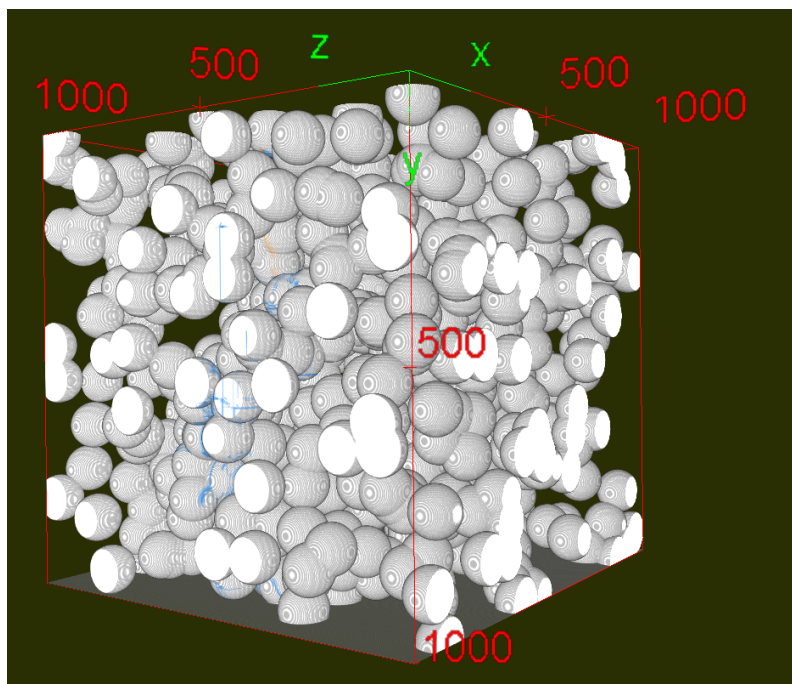


Σχήμα 6.18: Πρόβλημα των κενών (Swiss Cheese Problem) Στιγμιότυπα RSE: A. χωρίς διήθηση (αριστερά), B. διήθηση (δεξιά). Οι κίτρινες περιοχές επισημαίνουν τους τομείς αναζήτησης.

ppms και MC με την υιοθέτηση των αλγορίθμων (DFS) και BFS έδωσε μια πιθανότητα percolation $p = 0.8835 > p_c$ ενδεικτική για ένα διηθητικό μέσο. Στο Σχήμα 6.18 οι διαδρομές percolation (ή μη) εμφανίζονται στα διαφορετικά RSE μαζί με τους πραγματικούς τομείς αναζήτησης.

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι θα ήταν πολύ ενδιαφέρον να επεκταθεί η παρούσα μεθοδολογία ως προς την πρόβλεψη των αγώγιμων ιδιοτήτων των υλικών [20, 21, 22] κάτι που γίνεται στο επόμενο κεφάλαιο. Αναμφίβολα, η μέθοδος υπολογισμού των ιδιοτήτων ενός υλικού θα πρέπει να αναθεωρηθεί προκειμένου να ληφθεί υπόψη η πιθανότητα percolation και όχι μόνο η τιμή για την ιδιότητα ενδιαφέροντος στο RSE (ή στο αντιπροσωπευτικό Στοιχείο Όγκου- RVE σε τρεις διαστάσεις). Τα προαναφερθέντα είναι απαραίτητα για τον σωστό υπολογισμό και την αναγωγή των τιμών των φυσικών ιδιοτήτων στο πραγματικό μέσο και όχι σε αντιπροσωπευτικά στοιχεία επιφάνειας ή όγκου όπως τα RSE ή RVE αντίστοιχα.

Πέραν των παραπάνω που αναφέρθηκαν, η προτεινόμενη μεθοδολογία επεκτάθηκε σε τρεις διαστάσεις (3D) με τις κατάλληλες προσαρμογές και



Σχήμα 6.19: Επίλυση σε τρεις διαστάσεις σφαιρών σε πλέγμα διαστάσεων $1000 \times 1000 \times 1000$, $\Phi = 0.30$, $ppms = 101$ όπου υπάρχει percolation. Με άσπρο χρώμα εμφανίζονται τα αγώγιμα σωματίδια με μπλέ το μονοπάτι διάδοσης και με μαύρο η μή αγώγιμη μήτρα.

τροποποιήσεις. Η διαδικασία ψηφιοποίησης για τα συστατικά του υλικού σε τρεις διαστάσεις πραγματοποιήθηκε χρησιμοποιώντας voxel ακολουθώντας παρόμοια βήματα με τις δύο διαστάσεις και λαμβάνοντας υπόψη τον σωστό αριθμό γειτόνων. Οι αλγόριθμοι 3D-DFS ή 3D-BFS μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την ανίχνευση διαδρομών διάδοσης. Η διήθηση επιτυγχάνεται όταν η μέση πιθανότητα διάδοσης που υπολογίζεται από μια επαναληπτική διαδικασία Monte Carlo που δημιουργεί αντιπροσωπευτικά στοιχεία όγκου RVEs χρησιμοποιείται με αναγωγή στην υψηλότερη κλίμακα χώρου ως πιθανότητα κατάληψης για το απλό κυβικό πλέγμα τοποθεσίας που υπερβαίνει την κρίσιμη πιθανότητα p_c (≈ 0.3116) για απλά κυβικά πλέγματα θέσεων. Στην **Εικόνα 6.19** παρουσιάζεται ένα σύνθετο υλικό που αποτελείται από αγώγιμα σφαιρίδια σε μη αγώγιμη μήτρα με συγκέντρωση κατ' όγκο 0.30% σε ένα πλέγμα διαστάσεων $1000 \times 1000 \times 1000$ ήτοι 1.000.000.000 θέσεων όπου παρατηρείται percolation (υπάρχει το

μπλέ μονοπάτι απο την άνω πλευρά προς την κάτω). Επίσης η πιθανότητα percolation των RVEs υπολογίστηκε $\approx 0.502 > 0.3116$, σε σύνολο 400 επαναλήψεων, γεγονός που σημαίνει ότι στο άπειρο μέσο σε αυτήν την συγκέντρωση υπάρχει percolation.

Βιβλιογραφία

- [1] E. T. Gawlinski and H. E. Stanley, “Continuum percolation in two dimensions: Monte carlo tests of scaling and universality for non-interacting discs,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 14, no. 8, pp. 291–299, 1981.
- [2] S. Mertens and C. Moore, “Continuum percolation thresholds in two dimensions,” *Phys. Rev. E*, vol. 86, p. 061109, Dec 2012.
- [3] S. Torquato, *Random Heterogeneous Materials*, vol. 16. Springer-Verlag New York, 2002.
- [4] P. N. Suding and R. M. Ziff, “Site percolation thresholds for archimedean lattices,” *Phys. Rev. E*, vol. 60, pp. 275–283, 1999.
- [5] J. L. Jacobsen, “Critical points of potts and $o(n)$ models from eigenvalue identities in periodic temperley–lieb algebras,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 48, no. 45, p. 454003, 2015.
- [6] S. Nemat-Nasser, M. Hori, and J. Achenbach, *Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials*. ISSN, Elsevier Science, 2013.
- [7] U. Hornung, *Homogenization and porous media*, vol. 6. Springer Science & Business Media, 1996.
- [8] W. R. Bielski and J. J. Telega, *Effective properties of geomaterials: rocks and porous media*. Polska Akademia Nauk, Instytut Geofizyki, 1997.
- [9] A. Day, K. Snyder, E. Garboczi, and M. Thorpe, “The elastic moduli of a sheet containing circular holes,” *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 40, no. 5, pp. 1031 – 1051, 1992.

- [10] E. Garboczi, M. Thorpe, M. DeVries, and A. R. Day, “Universal conductivity curve for a plane containing random holes,” *Physical Review A*, vol. 43, no. 12, p. 6473, 1991.
- [11] A. Soltani and S. Sadeghnejad, “Scaling and critical behavior of lattice and continuum porous media with different connectivity configurations,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 508, pp. 376–389, 2018.
- [12] E. Garboczi, “Percolation phase diagrams for multi-phase models built on the overlapping sphere model,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 442, pp. 156–168, 09 2016.
- [13] R. M. Ziff, C. R. Scullard, J. C. Wierman, and M. R. Sedlock, “The critical manifolds of inhomogeneous bond percolation on bow-tie and checkerboard lattices,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 45, no. 49, p. 494005, 2012.
- [14] E. N. Gilbert, “Random plane networks,” *Journal of the society for industrial and applied mathematics*, vol. 9, no. 4, pp. 533–543, 1961.
- [15] W. Xia and M. Thorpe, “Percolation properties of random ellipses,” *Physical Review A*, vol. 38, no. 5, p. 2650, 1988.
- [16] J. Lin and H. Chen, “Measurement of continuum percolation properties of two-dimensional particulate systems comprising congruent and binary superellipses,” *Powder Technology*, vol. 347, pp. 17 – 26, 2019.
- [17] W. Xu, X. Su, and Y. Jiao, “Continuum percolation of congruent overlapping spherocylinders,” *Phys. Rev. E*, vol. 94, p. 032122, Sep 2016.
- [18] W. Xu, Z. Zhu, Y. Jiang, and Y. Jiao, “Continuum percolation of congruent overlapping polyhedral particles: Finite-size-scaling analysis and

renormalization-group method,” *Physical Review E*, vol. 99, p. 032107, 03 2019.

[19] J. W. Essam, “Percolation theory,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 43, no. 7, p. 833, 1980.

[20] W. Xu and Y. Jiao, “Theoretical framework for percolation threshold, tortuosity and transport properties of porous materials containing 3d non-spherical pores,” *International Journal of Engineering Science*, vol. 134, pp. 31–46, 2019.

[21] W. Xu, Y. Zhang, J. Jiang, Z. Liu, and Y. Jiao, “Thermal conductivity and elastic modulus of 3d porous/fractured media considering percolation,” *International Journal of Engineering Science*, vol. 161, p. 103456, 2021.

[22] W. Xu, P. Lan, Y. Jiang, D. Lei, and H. Yang, “Insights into excluded volume and percolation of soft interphase and conductivity of carbon fibrous composites with core-shell networks,” *Carbon*, vol. 161, pp. 392–402, 2020.

Κεφάλαιο 7

Μοντέλα επίλυσης θερμικής - ηλεκτρικής αγωγιμότητας

7.1 Εύρεση της ηλεκτρικής αγωγιμότητας σε ένα 3-διάστατο μοντέλο

Στο παρόν κεφάλαιο θα παρουσιαστεί, για πρώτη φορά, η ηλεκτρική - θερμική αγωγιμότητα ενός σύνθετου τυχαίου υλικού να συσχετίζεται με τον αριθμό των αγώγιμων διαδρομών, το μέσο μήκος και το μέσο ενεργό πλάτος διαδρομής που μετρήθηκε σε αντιπροσωπευτικό στοιχείο επιφάνειας (RSE) με δειγματοληψία Monte Carlo. Το κεφάλαιο οργανώθηκε σε δύο μέρη. Ο θεωρητικός υπολογισμός πραγματοποιείται στο πρώτο μέρος για τη συσχέτιση των αγώγιμων διαδρομών υιοθετώντας τρεις προσεγγίσεις (αυξητική ως προς την ακρίβεια και την πολυπλοκότητα) με βάση: α) ευθύγραμμες διαδρομές ενός συστατικού, β) τεθλασμένες διαδρομές ενός συστατικού, γ) τεθλασμένες διαδρομές πολλαπλών συστατικών. Στο δεύτερο μέρος αναπτύσσεται μια νέα αριθμητική μεθοδολογία για τον υπολογισμό της αγωγιμότητας του (RSE), με τη βοήθεια των αγώγιμων διαδρομών, του μέσου μήκους διαδρομής και του μέσου ενεργού πλάτους διαδρομής για το

γενικό μοντέλο μονοπατιών πολλαπλών συστατικών τεθλασμένης γραμμής που βασίζεται στο νόμο του Ohm. Επιπλέον, προτείνεται μια μεθοδολογία που ανάγει την υπολογιζόμενη αγωγιμότητα από τη μικροκλίμακα στη μακροκλίμακα, η οποία λαμβάνει υπόψη την πιθανότητα διήθησης για πεπερασμένα μεγέθη και τη μέση τιμή της αγωγιμότητας από τα δείγματα στα οποία εμφανίζεται διήθηση.

Μετά τα απαραίτητα βήματα επαλήθευσης της μεθόδου και της εφαρμογής σε συστήματα τυχαίων δυαδικών υλικών, εφαρμόζεται περαιτέρω για την επίλυση συνθετικών προβλημάτων συνεχούς διήθησης σε μικροκλίμακα και μακροκλίμακα. Τα αποτελέσματα και η ακρίβεια των υπολογισμών που πραγματοποιήθηκαν είναι σε συμφωνία με τα υπάρχοντα μοντέλα. Η ταχύτητα υπολογισμών καθώς και οι απαιτήσεις μνήμης είναι καλύτερες σε σύγκριση με μεθόδους προβλημάτων συνοριακών τιμών όπως η τεχνική πεπερασμένων στοιχείων (FE) ή πεπερασμένων διαφορών (FD) καθώς και δικτύων αντιστάσεων. Η ηλεκτρική (DC) και η θερμική αγωγιμότητα ακολουθούν ακριβώς την ίδια συμπεριφορά και η προτεινόμενη μεθοδολογία μπορεί να υπολογιστεί στο ίδιο στάδιο χωρίς πρόσθετο υπολογιστικό κόστος. Σε τυχαίο δυαδικό υλικό οι προσομοιώσεις έδειξαν ότι η αγωγιμότητα ακολουθεί νόμο δύναμης με εκθέτη ≈ 1.3 . Επιπλέον, ο αριθμός των αγώγιμων διαδρομών, το μέσο μήκος των μονοπατιών και το ενεργό πλάτος ακολουθεί τον νόμο κλιμάκωσης με εκθέτες 1.44 ± 0.01 , -0.25 ± 0.01 και -0.39 ± 0.01 αντίστοιχα. Το πρόβλημα επιλύεται στις δύο διαστάσεις (2D) και τα αποτελέσματα αυτά παρουσιάζονται στην παρούσα διατριβή. Πρέπει να σημειωθεί πως η συγκεκριμένη μεθοδολογία έχει επεκταθεί και στις τρεις διαστάσεις με ιδιαίτερη επιτυχία αλλά είναι εκτός του αρχικού πλαισίου της παρούσης διδακτορικής διατριβής.

7.2 Εισαγωγή

Το πρόβλημα της εύρεσης των ηλεκτρικών, θερμικών και μηχανικών ιδιοτήτων ενός σύνθετου υλικού σε σχέση με την το κλάσμα επιφάνειας ή όγκου και την τοπολογία κάθε συστατικού είναι κρίσιμης σημασίας για εφαρμογές μηχανικής. Στη βιβλιογραφία έχουν προταθεί διαφορετικά μοντέλα με στόχο τον υπολογισμό της ηλεκτρικής, της θερμικής αγωγιμότητας και του συντελεστή Young ετερογενών υλικών, χρησιμοποιώντας θεωρητικές-αναλυτικές, αριθμητικές ή πειραματικές προσεγγίσεις [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7].

Αναλυτικές εκφράσεις για τις προαναφερθείσες ιδιότητες εξελιχθεί από τους πρώιμους κανόνες των μειγμάτων [8], [9], [10] μέσω των Αποτελεσματικών Θεωριών Μέσων Effective Media Theories-(EMT) [8], [9], [10] και μεταγενέστερα μοντέλα διήθησης [11], [12]. Η εξίσωση φαινομενολογικής διήθησης ενός εκθέτη Single Exponent Phenomenological Percolation Equation-(SEPPE) ή Γενική Εξίσωση Αποτελεσματικών Μέσων General Effective Media Equation-(GEM) [10] υιοθετείται ευρέως από τη σχετική επιστημονική κοινότητα. Η εξίσωση φαινομενολογικής διήθησης δύο εκθέτων Two Exponent Phenomenological Percolation Equation-TEPPE [13], ανάγεται στις εξισώσεις διήθησης [11], [12] στα όρια όπου το κλάσμα όγκου είναι κοντά στο 0 και το 1 καθώς και όταν βρίσκεται στο κρίσιμο κλάσμα όγκου. Οι προσεγγίσεις της μοντελοποίησης και προσομοίωσης είναι αποτελεσματικές και χαμηλού κόστους εναλλακτικές σε πειράματα που στοχεύουν στη μελέτη θερμικής και ηλεκτρικής αγωγιμότητας σύνθετων υλικών που ενσωματώνουν μικρομηχανική, προσομοιώσεις Μοντε Άρλο, μοντέλο δικτύου αντίστασης και τεχνικές επεξεργασίας εικόνας [14].

Οι αριθμητικές μέθοδοι προσομοίωσης (FE, FD, προσομοιώσεις Monte Carlo) έχουν εφαρμοστεί σε μια σειρά επιστημονικών προσπαθειών για μελέτες αγωγιμότητας σύνθετων υλικών με εγκλείσματα, τυχαίων σύνθετων υλικών, πολυμερών νανοσύνθετων με βάση το γραφένιο μεταξύ άλλων υλι-

κών [5, 15, 16, 17, 18, 19]. Επιπλέον, η μέθοδος του Δικτύου Αντίστασης έχει χρησιμοποιηθεί για τη διερεύνηση της αγωγιμότητας με βάση τη διήθηση σε τέτοια συστήματα [1, 20] αλλά οι υπολογιστικοί πόροι που απαιτούνται για την επίλυση προβλημάτων μεγάλης κλίμακας είναι τεράστιοι ή ακόμη και απαγορευτικοί.

Η θεωρία percolation έχει χρησιμοποιηθεί για την εκτίμηση των ιδιοτήτων τυχαίων υλικών και είναι μια από τις απλούστερες προσεγγίσεις πιθανοτήτων. Αυτή η θεωρία όπως έχει αναφερθεί και στα προηγούμενα κεφάλαια, είναι μια από τις απλούστερες προσεγγίσεις πιθανοτήτων που επιλύει προβλήματα σχετικά με κρίσιμα φαινόμενα και έχει εφαρμοστεί με επιτυχία για να περιγράψει την ηλεκτρική συμπεριφορά σύνθετων συστημάτων στα οποία παρατηρείται μια απότομη μετάβαση μονωτή-αγωγού με αυξανόμενο κλάσμα πλήρωσης. Τα κατώφλια διήθησης μελετήθηκαν επίσημα πρώτα από τους Broadbent και Hammersley [21] οι οποίοι εισήγαγαν μοντέλα πλέγματος για τη ροή ενός υγρού.

Η θεωρία έχει χρησιμοποιηθεί για την εκτίμηση των ιδιοτήτων τυχαίων υλικών. Αυτή η θεωρία όπως έχει αναφερθεί και στα προηγούμενα κεφάλαια, είναι μια από τις απλούστερες προσεγγίσεις πιθανοτήτων που επιλύει προβλήματα σχετικά με κρίσιμα φαινόμενα και έχει εφαρμοστεί με επιτυχία για να περιγράψει την ηλεκτρική συμπεριφορά σύνθετων συστημάτων στα οποία παρατηρείται μια απότομη μετάβαση μονωτή-αγωγού με αυξανόμενο κλάσμα πλήρωσης. Στο παρόν θα γίνει μια προσπάθεια απάντησης στο ερώτημα της ποσοτικοποίησης των ιδιοτήτων ενός πολυφασικού τυχαίου υλικού. Θα χρησιμοποιηθεί η θεωρία percolation σε συνδυασμό με μια νέα θεωρία υπολογισμού αγωγιμότητας για την επίλυση προβλημάτων τόσο σε επίπεδο μικροδομής όσο και σε διαστάσεις πραγματικών πολυφασικών υλικών. Τα αποτελέσματα της μεθοδολογίας δείχνουν ότι στην πράξη είναι εξίσου ακριβής με τις αριθμητικές μεθόδους

επίλυσης (FE, FD) των αντίστοιχων προβλημάτων συνοριακών τιμών που περιγράφουν την ηλεκτρική ή θερμική διάδοση στο συνεχές χωρίς όμως να απαιτεί τους υπολογιστικούς πόρους των παραπάνω.

Στο κλασικό πλαίσιο της θεωρίας percolation η ηλεκτρική αγωγιμότητα του σύνθετου υλικού επιτυγχάνεται όταν η επιφάνεια (2D) ή το κλάσμα όγκου (3D) του αγωγίμου πληρωτικού είναι πάνω από μια κρίσιμη τιμή. Σε επίπεδο μακροκλίμακας το μοντέλο General Effective Medium-(GEM) υιοθετείται ευρέως για τη μελέτη των ηλεκτρικών ιδιοτήτων των σύνθετων υλικών, καθώς επιτρέπει τον αξιόπιστο υπολογισμό της ηλεκτρικής αγωγιμότητας για πολλαπλά συστήματα πλήρωσης ακόμη και σε υψηλές συγκεντρώσεις πληρωτικού. Σε επίπεδο μικροκλίμακας, διάφορες τεχνικές λύσεις έχουν υιοθετηθεί και εφαρμοστεί για την ηλεκτρική - θερμική αγωγιμότητα για σύνθετα υλικά με βάση FE, FD και δίκτυα αντιστάσεων. Εκτός από τις κλασικές μέθοδοι που αναφέρονται παραπάνω, οι οποίες έχουν χρησιμοποιηθεί ευρέως, έχουν αναπτυχθεί αρκετές παραλλαγές.

Στη σχετική βιβλιογραφία, οι Mezdoor και συνεργάτες [22] χρησιμοποίησαν την προσέγγιση του δικτύου αντιστάσεων για να εκτιμήσουν την ηλεκτρική αγωγιμότητα των σύνθετων υλικών ενώ το μέγεθος και το μήκος του πληρωτικού είχαν διάφορες παραμέτρους. Ο υπολογισμός τους βασίστηκε στον προσδιορισμό των αγωγίμων μονοπάτιων μέσω της μονωτικής μήτρας. Τα μονοπάτια αυτά θεωρήθηκαν ως αντιστάσεις σε παράλληλη σύνδεση. Απλοποιήσεις εισήχθησαν υποθέτοντας ότι όλες οι ίνες έχουν το ίδιο μέγεθος και προσανατολισμό προς όλες τις πιθανές κατευθύνσεις.

Στην εργασία των Aryanfar και συνεργατών [23] μια υπολογιστική μέθοδο με βάση τη θεωρία percolation, βασίζεται σε υπολογισμό της συντομότερης διαδρομής επαναληπτικά για ελλειψοειδή σωματίδια για να προβλέψουν την θερμική αγωγιμότητα τέτοιων σύνθετων υλικών σε στοχαστικά ανεπτυγμένα κανάλια. Ανέλυσαν το ρόλο του σχήματος και του λόγου δια-

στάσεων των σωματιδίων και προβλέπουν την έναρξη percolation με βάση την πυκνότητα και τις διαστάσεις των σωματιδίων.

Σε προηγούμενη εργασία μας [24], αναπτύχθηκε μια μέθοδος ποιοτικού ελέγχου διήθησης μικροκλίμακας και μακροκλίμακας με τη βοήθεια διήθησης δύο επιπέδων. Ειδικότερα ένα θεωρητικό μοντέλο (που έχει εγγενή ομοιότητα με τη διήθηση του πλέγματος) και η αριθμητική του εφαρμογή έχουν αναπτυχθεί σε 2D ενσωματώνοντας διαφορετικές γεωμετρίες πλήρωσης και εύρη επιφανειακών κλασμάτων. Η μεθοδολογία επικεντρώνεται στο RSE και όχι σε ολόκληρο το μέσο, μεταμορφώνοντας έτσι το πρόβλημα 2D συνεχούς σε ισοδύναμο πρόβλημα διήθησης δικτυωτού πλέγματος 2D. Το κύριο πλεονέκτημα της προαναφερθείσας μεθοδολογίας είναι η σχετική ευκολία στην απόκτηση λύσεων για διηθητικά ή μη μέσα με αυθαίρετο αριθμό των πληρωτικών αρκεί να μπορούν να αναπαρασταθούν με απλά γεωμετρικά σχήματα.

Στο παρών κεφάλαιο, η θεωρία percolation θα χρησιμοποιηθεί σε συνδυασμό με μια νέα αριθμητική προσέγγιση για την επίλυση επίπεδων προβλημάτων αγωγιμότητας σε μικροκλίμακα και μακροκλίμακα για πολυφασικά τυχαία υλικά. Η μεθοδολογία που αναπτύχθηκε είναι σχεδόν τόσο ακριβής όσο οι αριθμητικές μέθοδοι FE - FD που χρησιμοποιούνται για την επίλυση του αντίστοιχου προβλήματος συνοριακής τιμής συνεχούς (BVP) αλλά χωρίς να απαιτούνται οι αυξημένοι υπολογιστικοί τους πόροι. Επιπλέον, η μεθοδολογία παρακάμπτει την αναγκαιότητα των FE-FD την ύπαρξη εξωτερικών πεδίων την απόκριση του υλικού και την περαιτέρω επίκληση των αρχών της αιτιότητας. Η νέα αυτή μεθοδολογία εφαρμόζεται για τον υπολογισμό της ηλεκτρικής (DC) και της θερμικής αγωγιμότητας από σύνθετα υλικά που γεφυρώνοντας τη μικροκλίμακα με τη μακροκλίμακα. Στη μικροκλίμακα η μέθοδος Monte Carlo υιοθετείται για τη δημιουργία τυχαίων RSE. Ο αριθμός των αγωγίμων διαδρομών σε κάθε PSE υπολο-

γίξεται στην συνέχεια με τον αλγόριθμο Depth-First Search (DFS), ο οποίος επιτρέπει περαιτέρω τον υπολογισμό της αντίστασης κάθε διαδρομής και συνεπώς την αντίσταση-αγωγιμότητα της αντιπροσωπευτικής επιφάνεια. Η απαραίτητη αναγωγή στο επίπεδο μακροκλίμακας επιτυγχάνεται λαμβάνοντας υπόψη την πιθανότητα percolation σε επίπεδο μικροκλίμακας και τον μέσο όρο της τιμής της ιδιοτήτας από τα δείγματα όπου η διήθηση συμβαίνει εφαρμόζοντας τον νόμο του Ohm καθώς και τον κανόνα των μιγμάτων στην περίπτωση συστήματος όπου ο «μονωτής» έχει αγωγιμότητα συγκρίσιμη με αυτό του αγώγιμου μέσου υπολογίζοντας έτσι τις αγωγιμότητες ενός τυχαίου σύνθετου υλικού.

7.2.1 Έννοιες και θεωρητική μοντελοποίηση

Ο νόμος του Ohm χρησιμοποιείται σε επίπεδο μικροδομής προκειμένου να υπολογιστεί η αντίσταση - αγωγιμότητα σε ένα αγώγιμο μονοπάτι. Η ηλεκτρική αντίσταση ενός ομοιόμορφου αγωγού δίνεται από την **Εξίσωση 7.1**

$$R = \rho \frac{l}{A} = \frac{l}{\sigma A}, \quad (7.1)$$

όπου l είναι το μήκος του αγωγού, A είναι η επιφάνεια της διατομής και ρ , σ είναι η ειδική αντίσταση και αγωγιμότητα του υλικού υλικού αντίστοιχα. Επίσης για την θερμότητα ισχύει η **Εξίσωση 7.2**

$$R_t = \frac{l}{\kappa A}, \quad (7.2)$$

όπου R_t είναι η θερμική αντίσταση και κ είναι η ειδική αγωγιμότητα του υλικού. Από τις **Εξισώσεις 7.1, 7.2** είναι ξεκάθαρη η αναλογία των φαινομένων για τους σκοπούς αυτής της εργασίας και θα αντιμετωπίζονται ως ακριβώς το ίδιο φαινόμενο.

Στην επιστήμη των υλικών, ο κανόνας των μιγμάτων είναι ένας σταθμι-

σμένος μέσος όρος που χρησιμοποιείται για την πρόβλεψη διαφόρων ιδιοτήτων ενός σύνθετου υλικού [25]. Παρέχει ένα θεωρητικό άνω και κάτω όριο σε ιδιότητες όπως ο συντελεστής ελαστικότητας, η θερμική και η ηλεκτρική αγωγιμότητα. Για κάποια υλική ιδιότητα χ , ο κανόνας των μειγμάτων δηλώνει ότι η συνολική τιμή της στην κατεύθυνση παράλληλα προς τις ίνες ισούται με $\chi_c = \chi_{upper}$

$$\chi_c = f\chi_f + (1 - f)\chi_m, \quad (7.3)$$

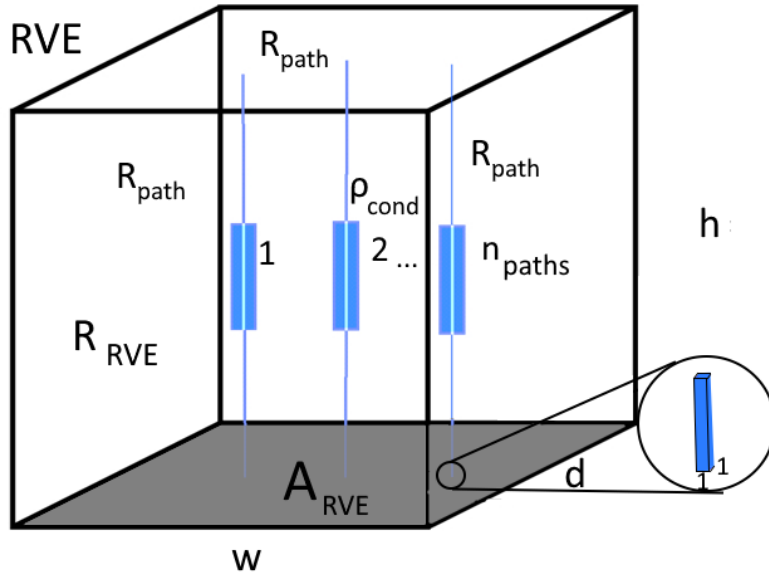
όπου $f = \frac{V_f}{V_f + V_m}$ είναι το κλάσμα όγκου των ινών, χ_f είναι η υλική ιδιότητα των ινών, χ_m είναι η υλική ιδιότητα του μήτρας V_f , V_m ο όγκος των ινών και της μήτρας αντίστοιχα.

Τρία θεωρητικά μοντέλα εφαρμόζονται για τη μελέτη του προβλήματος ηλεκτρικής-θερμικής αγωγιμότητας σε σύνθετο υλικό. Το πρώτο μοντέλο προσομοιώνει ένα τυχαίο διφασικό υλικό με ευθεία μονοπάτια και είναι ενδεικτική για τις έννοιες και την προσέγγιση που υιοθετείται. Ένα δεύτερο μοντέλο για διφασικό υλικό με μη γραμμικές διαδρομές αναπτύσσεται ως βελτίωση του προηγούμενου. Τέλος, ένα τρίτο και γενικότερο μοντέλο αναπτύσσεται για πολυφασικό υλικό με μη γραμμικά μονοπάτια.

Μοντέλο διφασικού συνθέτου με εύθειες αγωγίμες διαδρομές

Θεωρούμε μια ορθογώνια γεωμετρία που έχει πλάτος (w), ύψος (h), βάθος (d) (οι διαστάσεις σε pixels) που αποτελείται από α) μονωτικό και β) σωματίδια αγωγού υλικού αυθαίρετου σχήματος.

Προσομοιώνουμε την αγωγιμότητα του υλικού με n_{paths} διαδρομές από γραμμικούς αγωγούς που εκτείνονται από πάνω προς τα κάτω με ρ_{matrix} να είναι η ειδική αντίσταση του μονωτή και ρ_{cond} η αντίστοιχη του αγωγίμου συστατικού (Εικόνα:7.1). Υποθέτοντας ότι βλέπουμε τον στοιχειώδη ορθογωνίου παραλληλεπίπεδου σε μια κλίμακα f_s , όπου $min\ size$ είναι το



Σχήμα 7.1: Μοντέλο ευθυγράμμων αγωγών

ελάχιστο χαρακτηριστικό μήκος και f_s ορίζεται η

$$f_s = \frac{\text{min size}}{\text{ppms}}, \quad (7.4)$$

τότε το πραγματικό μήκος l είναι ίσο με:

$$l = hf_s \quad (7.5)$$

Ας υποθέσουμε ότι η ηλεκτρική αγωγιμότητα λαμβάνει χώρα με n_{paths} αγωγούς διατομής (1 pixel \times 1 pixel) και μήκος ίσο με το ύψος του κυβοειδούς h . Τότε σύμφωνα με την **Εξίσωση 7.1** η αντίσταση ενός αγωγού είναι ίση με:

$$R_{path} = \rho_{cond} \frac{l}{A} \quad (7.6)$$

Όπου

$$A = f_s^2 \quad (7.7)$$

Επομένως

$$R_{path} = \rho_{cond} \frac{h}{f_s}. \quad (7.8)$$

Εάν η αγωγιμότητα αποτελείται από n_{path} ευθύγραμμους αγωγούς, τότε η ισοδύναμη αντίσταση (R_{RVE}) που προκύπτει είναι

$$\frac{1}{R_{RVE}} = \frac{n_{paths}}{R_{path}} \Rightarrow R_{RVE} = \frac{\rho_{cond} h}{n_{paths} f_s}. \quad (7.9)$$

Ισχύει όμως και:

$$\rho_{RVE} = R_{RVE} \frac{A}{l} = \frac{\rho_{cond} h w d f_s^2}{n_{paths} f_s h f_s} = \frac{\rho_{cond}}{n_{paths}} w d \quad (7.10)$$

ή

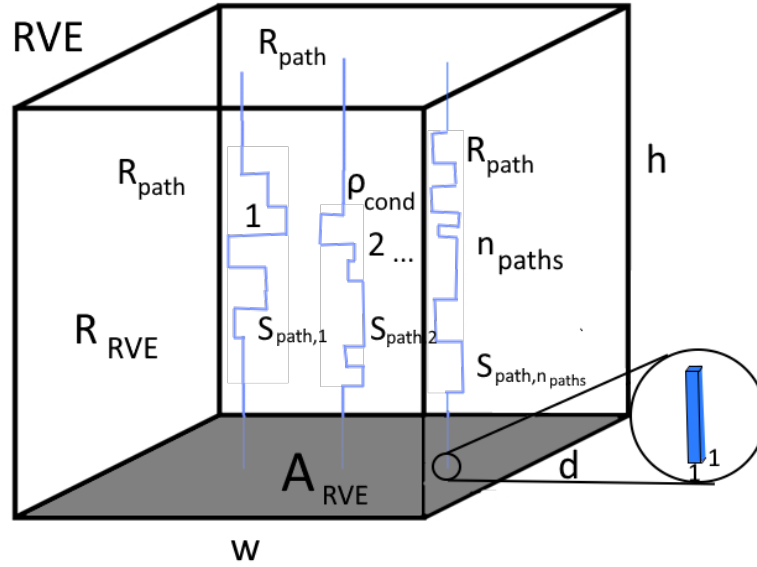
$$\sigma_{RVE} = \frac{1}{\rho_{RVE}} = \frac{n_{paths}}{w d \rho_{cond}} \quad (7.11)$$

Από την παραπάνω εξίσωση είναι δυνατός ο υπολογισμός της αγωγιμότητας του υλικού (Εξίσωση 7.11) ή ειδικής αντίστασης (Εξίσωση 7.10) μόνο από τον αριθμό των αγώγιμων διαδρομών ενός όγκου, τις διαστάσεις του όγκου και την αντίσταση του αγωγού.

Μοντέλο διφασικού σύνθετου και τεθλασμένων αγώγιμων διαδρομών

Η απλοποιημένη περίπτωση της προηγούμενης παραγράφου δεν αντικατοπτρίζει ακριβώς την πραγματικότητα με την έννοια ότι η διαδρομή είναι εξαιρετικά απίθανο να είναι ευθύγραμμη από το ένα άκρο προς το άλλο. Στην πραγματικότητα το μονοπάτι αλλάζει πορεία και το μήκος του δεν είναι ίσο με το ύψος του αντιπροσωπευτικού όγκου. Αν υποθέσουμε ότι μπορούμε να αναγνωρίσουμε n_{path} αγώγιμα μονοπάτια με μήκος $S_{path,i}$ (Εικόνα:7.2), τότε η Εξίσωση ;; θα πρέπει να τροποποιηθεί για να ληφθεί υπόψη η απόκλιση από την ευθεία γραμμή του μονοπατιού $path, i$.

$$\sigma_{RVE} = \frac{1}{\rho_{RVE}} = \sum_{i=1}^{n_{paths}} \frac{h}{w d \rho_{cond} S_{path,i}} \quad (7.12)$$



Σχήμα 7.2: Μοντέλο μη-ευθυγράμμων αγωγών

Μοντέλο πολλαπλών φάσεων και τεθλασμένων αγωγίμων διαδρομών

Στη γενική περίπτωση τριών ή περισσότερων φάσεων με μη γραμμικούς αγωγούς, ο υπολογισμός της ηλεκτρικής αγωγιμότητας διαφέρει ελαφρώς από την προηγούμενη περίπτωση δύο συστατικών, επειδή η αντίσταση κατά μήκος της διαδρομής πρέπει να υπολογιστεί η οποία δεν είναι σταθερή αλλά εξαρτάται από τον τύπο των αγωγίμων φάσεων που συναντά:

$$\frac{1}{\rho_{RVE}} = \sum_{i=1}^{n_{paths}} \frac{1}{\rho_{cond,i}} \frac{h}{w d S_{path,i}}, \quad (7.13)$$

Όπου η αγωγιμότητα της διαδρομής $\rho_{path,i}$ υπολογίζεται θεωρώντας κάθε στοιχειώδες τμήμα της διαδρομής - pixel να συμμετέχει ως αντίσταση σε σειρά:

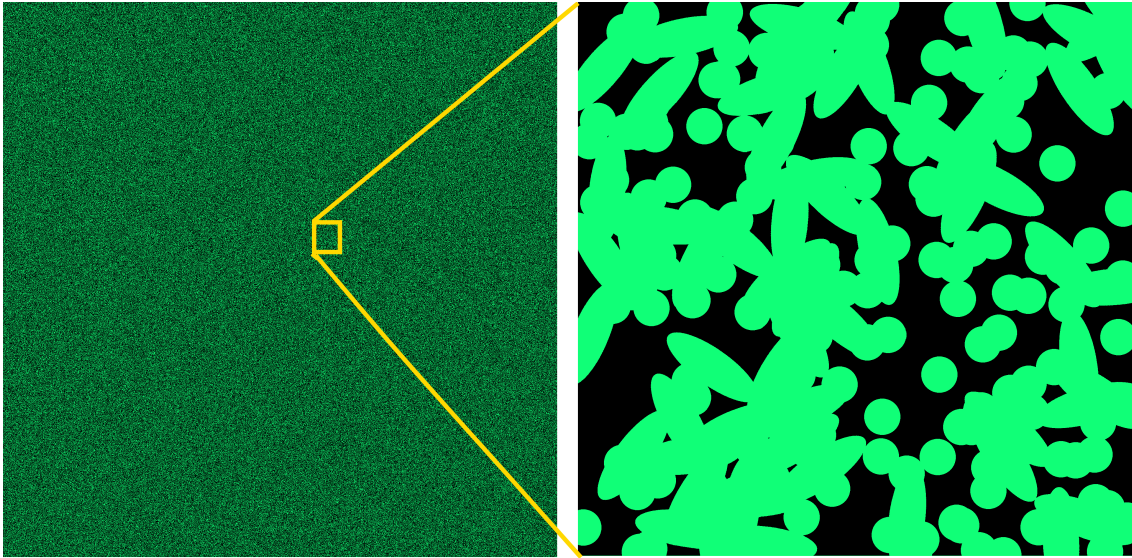
$$R_{cond,i} = \sum_{j=1}^{S_{path,i}} \rho_{cond,j} \quad (7.14)$$

$$\rho_{cond,i} = \frac{\sum_{j=1}^{S_{path,i}} \rho_{cond,j}}{S_{path,i}} \quad (7.15)$$

7.2.2 Υπολογισμός της αγωγιμότητας RVE

Οι παραπάνω σχέσεις μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την εκτίμηση της αγωγιμότητας (θερμικής ή ηλεκτρικής) μιας μονάδας όγκου ή επιφάνειας χωρίς να υποβληθεί σε κανένα πεδίο (ηλεκτρικό ή θερμικό). Σε αντίθεση με τις υπάρχουσες τεχνικές όπως τα πεπερασμένα στοιχεία, ή πεπερασμένες διαφορές που για να υπολογιστεί μια μακροσκοπική ιδιότητα όπως η αγωγιμότητα, το δείγμα (RVE, RSE) υποβάλλεται σε εξωτερικό πεδίο, η συμπεριφορά του υλικού μελετάται σε πολλά σημεία για να βρεθεί η μέση συμπεριφορά.

Ωστόσο, ο αντιπροσωπευτικός όγκος συχνά δεν εκφράζει το μέσο όρο της συμπεριφοράς του υλικού σε μάκρο κλίμακα (οριακά σε άπειρο μέσο **Σχήμα 7.3**). Σύμφωνα με προηγούμενη εργασία [24], εάν η πιθανότητα percolation των αντιπροσωπευτικών όγκων - επιφανειών είναι μικρότερη από $p < p_c = 0.3116$ (3D) (ή $p < p_c = 0.5927$ σε 2D) τότε δεν υπάρχει percolation στο άπειρο μέσο. Η μέση τιμή της ιδιότητας για διαφορετικούς στοιχειακούς όγκους έχει νόημα μόνο εάν η πιθανότητα percolation αυτών των όγκων είναι πολύ κοντά στο 1, δηλαδή σέ όλους σχεδόν τους αντιπροσωπευτικούς όγκους υπάρχει percolation. Διαφορετικά, εάν η πιθανότητα percolation όγκων είναι μεγαλύτερη από κρίσιμη ≈ 0.3116 (3D) και μικρότερη από 1 (δηλαδή υπάρχουν τυχαίοι όγκοι στους οποίους δεν υπάρχει διάδοση από το ένα άκρο στο άλλο) τότε η μέση τιμή της ιδιότητας υπολογίζεται μόνο από όγκους που έχουν διαφύγει (percolated). Στην συνέχεια εάν είναι απαραίτητος ο υπολογισμός μιας ιδιότητας σε διαστάσεις πολύ μεγαλύτερες από αυτές του αντιπροσωπευτικού όγκου, όπου αυτός εξαρτάται από την γεωμετρία των υπο μελέτη συστατικών καθώς και τους διαθέσιμους υπολογιστικούς πόρους, εφαρμόζεται μια διαδικασία Monte Carlo όπου προσομοιώνεται ένα μικρό τμήμα του υλικού. Στην συνέχεια είναι απαραίτητο ένα δεύτερο επίπεδο μελέτης όπου τα σημεία θα κατα-



Σχήμα 7.3: Λύση δύο σταδίων: μάκρο κλίμακα (μεγάλη εικόνα) και μικρο κλίμακα (μεγεθυμένος τομέας).

νέμονται τυχαία με πιθανότητα κατάληψης καθώς και με τιμή της ιδιότητας που προκύπτει από το προηγούμενο επίπεδο (της μονάδας όγκου). Με αυτόν τον τρόπο ενσωματώνονται οι πληροφορίες του πρώτου επιπέδου και το αποτέλεσμα ανάγεται σε πολύ μεγαλύτερο μέγεθος.

7.2.3 Διόρθωση λόγω percolation (διόρθωση μακροκλίμακας)

Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, η μέση τιμή της ιδιότητας για διαφορετικούς όγκους είναι ακριβής στην περίπτωση που η πιθανότητα percolation RVE, RSE είναι περίπου ίση με 1, που σημαίνει ότι όλα τα δείγματα αντιπροσωπευτικών όγκων - επιφανειών από τη διαδικασία Monte Carlo έχουν διαδρομές διάδοσης. Εάν είναι κοντά στο p_c τότε σε φυσικά μέσα (μακροκλίμακα) οι αγώγιμες διαδρομές δεν είναι σχεδόν ευθείες και δεν είναι όλοι οι αντιπροσωπευτικοί όγκοι αγώγιμοι, επομένως η αγωγιμότητα πρέπει να διορθωθεί (αναχθεί) λόγω αυτού του γεγονότος. Με το σκεπτικό των δύο επιπέδων που αναπτύχθηκαν στην προηγούμενη εργασία μας [24] θεωρε-

ίται ότι ολόκληρο το μέσο αποτελείται από τετράγωνα (2D) ή κύβοι (3D) των οποίων η μέση ηλεκτρική αγωγιμότητα προσδιορίζεται από το προηγούμενο στάδιο (μικροκλίμακα) και η πυκνότητα κατάληψης είναι ίση με την πιθανότητα percolation της μικροκλίμακας.

7.3 Αριθμητικοί υπολογισμοί ηλεκτρικής - θερμικής αγωγιμότητας για δύο διαστάσεις

7.3.1 Παρουσίαση αλγόριθμου υπολογισμού

Τα βήματα που απαιτούνται για την επίλυση του προβλήματος του υπολογισμού μεγεθών όπως η θερμική και η ηλεκτρική αγωγιμότητα σε πολυφασικά μείγματα σύνθετων σε δύο διαστάσεις είναι τα εξής:

1. Δημιουργία αντιπροσωπευτικού στοιχείου επιφάνειας, RSE.
2. Ψηφιοποίηση μεμονωμένων στοιχείων.
3. Για κάθε RSE εύρεση εάν υπάρχει percolation ή όχι.
4. Εύρεση του αριθμού των αγωγίμων διαδρομών και υπολογισμός των θερμικών ή/και ηλεκτρικών αντιστάσεων.
5. Υπολογισμός της ενεργού θερμικής ή/και ηλεκτρικής αγωγιμότητας του RSE
6. Επανάληψη των παραπάνω βημάτων (1-5) για όλα τα δείγματα.

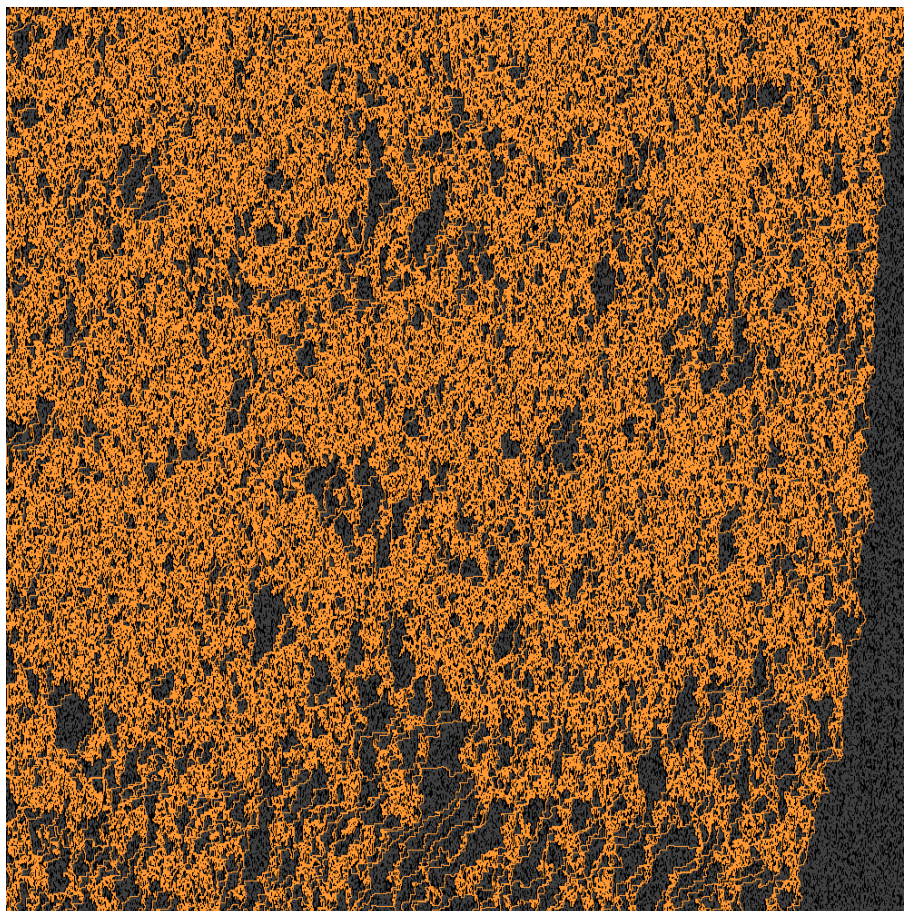
Ένα από τα πιο σημαντικά βήματα για την επίλυση του προβλήματος της percolation είναι η ψηφιοποίηση των συστατικών στο πλέγμα. Στην περίπτωση των δύο διαστάσεων, υιοθετείται η μεθοδολογία που περιγράφηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο όπως περιγράφεται στην εργασία [24].

Ο προσδιορισμός του αν υπάρχει percolation ή όχι γίνεται στην ψηφιοποιημένη αντιπροσωπευτική επιφάνεια ή όγκου με τη βοήθεια του αλγορίθμου DFS σε δύο ή τρεις διαστάσεις αντίστοιχα. Εάν δεν υπάρχει percolation από την κορυφή προς το κάτω μέρος του RSE, δεν πραγματοποιείται περαιτέρω εξέταση για τον προσδιορισμό των αγωγίμων οδών και η διαδικασία συνεχίζεται σε άλλη πραγματοποίηση μέχρι να εξαντληθούν όλα τα δείγματα.

Μαθηματικά η εύρεση των αγωγίμων μονοπατιών είναι ένα αόριστο σύστημα. Για την εύρεση της λύσης θα πρέπει να προστεθούν επιπλέον κριτήρια - κανόνες ώστε να περιοριστούν οι δυνατές λύσεις. Το κριτήριο που επιλέχθηκε είναι η μεγιστοποίηση του αριθμού των αγωγίμων διαδρομών και για να συμβεί αυτό προστέθηκε ένας κανόνας στην διαδικασία αναζήτησης που είναι ότι στην περίπτωση των δύο διαστάσεων η αναζήτηση έχει μια προτίμηση προς τα αριστερά (μικρότερα x). Αυτό είναι εμφανές στο Σχήμα 7.4.

Για τον απλό υπολογισμό του αριθμού των διαδρομών, εξετάζονται όλες οι θέσεις της άνω γραμμής (L) εάν υπάρχει συνδετικό μονοπάτι από αυτό το σημείο προς την κάτω γραμμή με βάση τον αλγόριθμο DFS (με προτίμηση προς τα αριστερά). Ο αλγόριθμος ΔΦΣ αριστερής προτίμησης ελέγχει για κάθε κατειλημμένη θέση εάν είναι πρώτα η αριστερή θέση κατειλημμένη, μετά η κάτω, η πάνω και η δεξιά και, στη συνέχεια, εφαρμόζεται αναδρομικά μέχρι να φτάσει στο τελευταία σειρά. Εάν υπάρχει μια διάδοση από την πάνω γραμμή στην κάτω, ο αριθμός των μονοπατιών αυξάνεται κατά ένα ($n_{path} = n_{path} + 1$) και η αρχή και το τέλος της διαδρομής διατηρούνται για να βρεθεί σε επόμενο βήμα το μήκος και η αντίστασή της. Στη συνέχεια εξετάζεται το επόμενο σημείο για όλα τα κατειλημμένα σημεία της άνω γραμμής (Σχήμα 7.3).

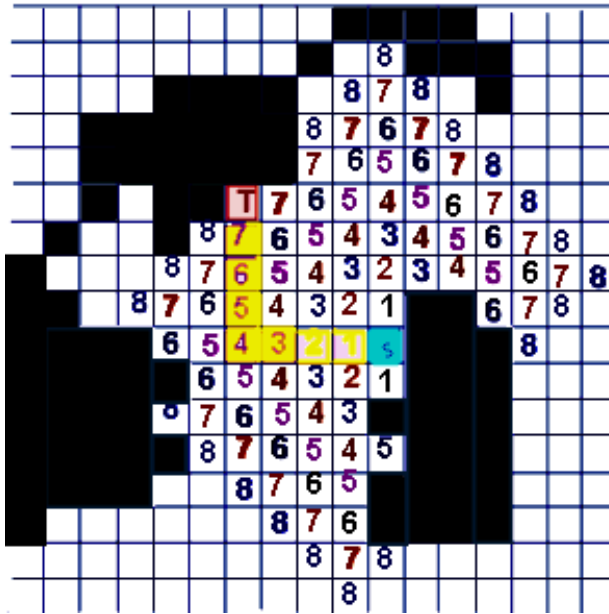
Σε περίπτωση που η αγωγίμη διαδρομή θεωρείται τεθλασμένη, απαιτε-



Σχήμα 7.4: Αναζήτηση αγώγιμων διαδρομών σε τυχαίο υλικό που χαρακτηρίζεται από πιθανότητα κατάληψης ίση με 0.69. Οι διαστάσεις του πλέγματος είναι 1000×1000 . Βρέθηκαν συνολικά 88 αγώγιμες διαδρομές για το συγκεκριμένο υλικό στιγμιότυπο RSE.

ίται ο υπολογισμός του μήκους της διαδρομής με δεδομένη την αρχή και το τέλος της διαδρομής. Για να υπολογιστεί αυτό, αναπτύχθηκε μια μέθοδος παραλλαγής που στηρίζεται στο Lee Algorithm [26] σύμφωνα με τον οποίο υπολογίζεται το ελάχιστο μήκος μεταξύ δύο σημείων σε έναν λαβύρινθο (Σχήμα 7.5). Ο αλγόριθμος στηρίζεται στην τεχνική αναζήτησης Breath Search First [26].

Καθώς προχωράμε από σημείο σε σημείο την αγώγιμη διαδρομή αυξάνουμε κατά 1 το μήκος της (απόσταση Manhattan), και ανάλογα με τη φάση που συναντάμε η αντίσταση (θερμική και ηλεκτρική) της διαδρομής αυξάνεται με την αντίσταση που αντιστοιχεί στο σημείο μέχρι να φτάσου-

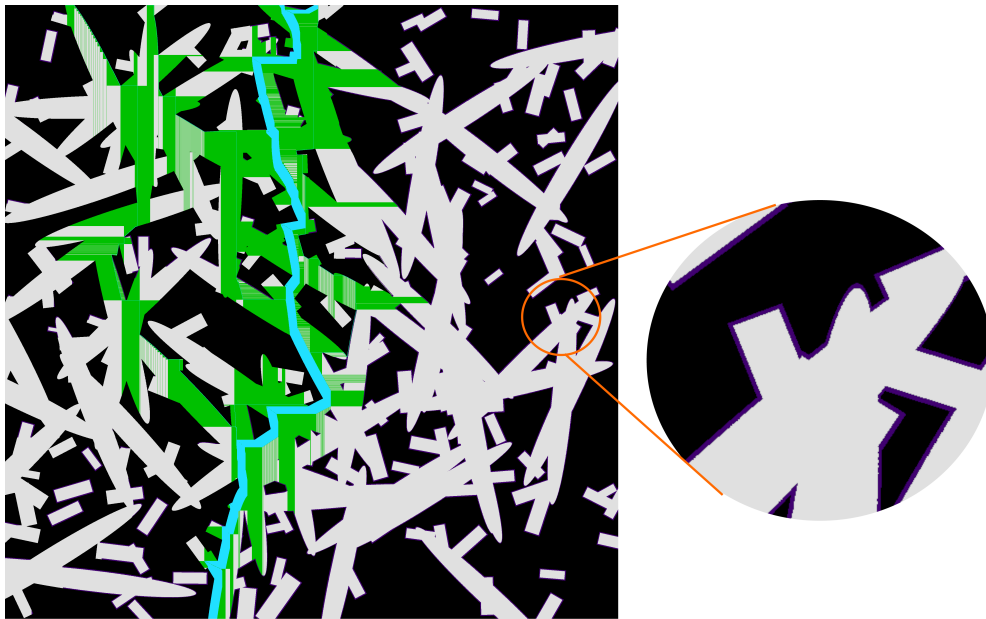


Σχήμα 7.5: Αλγόριθμος Lee.

με στο τελικό σημείο λογίζοντας την συνολική αντίσταση ως αντίσταση εν σειρά επί μέρους σημείων. Όμως η αντίσταση του μονοπατιού δεν είναι ακριβώς αυτή. Για κάθε σημείο της διαδρομής $R_{point,i}$, τα γειτονικά σημεία (κατεύθυνση y στην περίπτωση τοπικής οριζόντιας διαδρομής καθώς και κατεύθυνση x σε τοπική κατακόρυφη διαδρομή) σαρώνονται και οι αντιστάσεις αυτές (Σχήματα 7.7, 7.6) θεωρείται ότι συμμετέχουν στην αντίσταση του σημείου του μονοπατιού. Έτσι η συνολική αντίσταση για το υπό εξέταση σημείο λαμβάνεται ως αντιστάσεις εν παραλλήλω. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται για όλα τα σημεία του ελάχιστου μήκους διαδρομής. Τέλος όπως αναφέρθηκε, η συνολική αντίσταση του μονοπατιού υπολογίζεται λαμβάνοντας υπόψη όλα τα σημεία του ως αντιστάσεις σε σειρά.

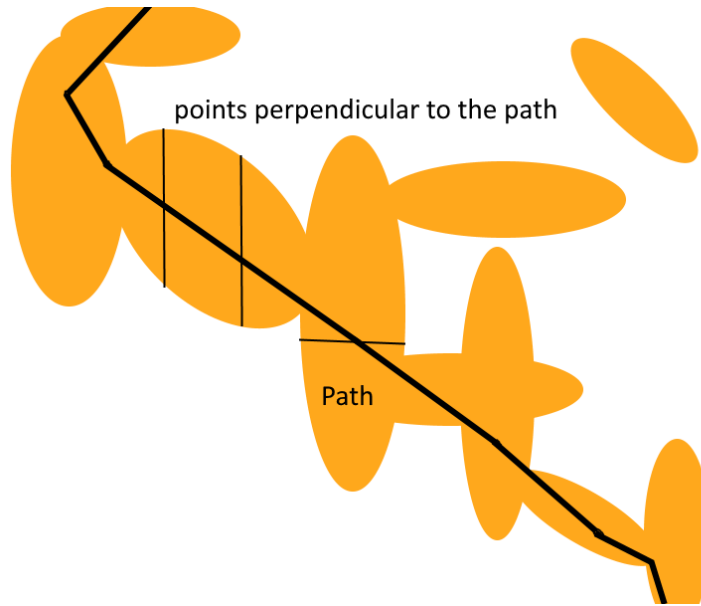
$$R_{path} = \sum_{i=1}^{length} R_{point,i} \quad (7.16)$$

Μόλις ολοκληρωθεί ο υπολογισμός της αντίστασης κάθε αγωγίμου μονοπατιού, μπορεί να υπολογιστεί η μέση αντίσταση του RSE, υπολογίζοντας τον μέσο όρο της αντίστασης των μονοπατιών. Τέλος σε περίπτωση που



Σχήμα 7.6: Επίλυση 3-Φασικού συστήματος. Με ανοιχτό μπλε παρουσιάζονται τα αγωγή μονοπάτια, πράσινο τα σημεία κάθετα στο αγωγή μονοπάτι που συμμετέχουν στην αγωγιμότητα, ανοιχτό γκρι τα αγωγή σωματίδια, μαύρο η μη αγωγή μήτρα και με μοβ το φαινόμενο σήραγγας.

το σύστημα δεν είναι σύστημα μονωτή - αγωγού(ών) εφαρμόζεται ο κανόνας των μειγμάτων (Εξίσωση 7.3 για τον υπολογισμό της αγωγιμότητας της αντιπροσωπευτικής επιφάνειας με βάση τον αριθμό των αγωγίμων μονοπατιών. Εξυπακούεται ότι αν μελετάται σύστημα αγωγού(ων) πληρωτικού(ων) - μονωτικής μήτρας δεν είναι απαραίτητη η εφαρμογή του κανόνα των μειγμάτων. Η αγωγιμότητά του είναι ίση με την αγωγιμότητα που προκύπτει από τον υπολογισμό της αγωγίμης φάσης . Ως γνωστό ο κανόνας των μειγμάτων είναι προσεγγιστικός. Αν είναι απαραίτητη μια πολύ καλή ακρίβεια ανεξαρτήτως υπολογιστικού κόστους για ένα σύστημα αγωγού(ων) πληρωτικού(ων) - αγωγίμης μήτρας τότε θα πρέπει να γίνουν δύο προσομοιώσεις: μια για το σύστημα των αγωγών και μία την μήτρα θεωρώντας και τα δύο βρίσκονται σε μη αγωγή μήτρα και υπολογίζονται οι αγωγιμότητες τους ξεχωριστά. Στην συνέχεια η συνολική αγωγιμότητα ισούται με το άθροισμα των αγωγιμοτήτων των δύο (αγωγίμων φάσεων) δηλαδή:

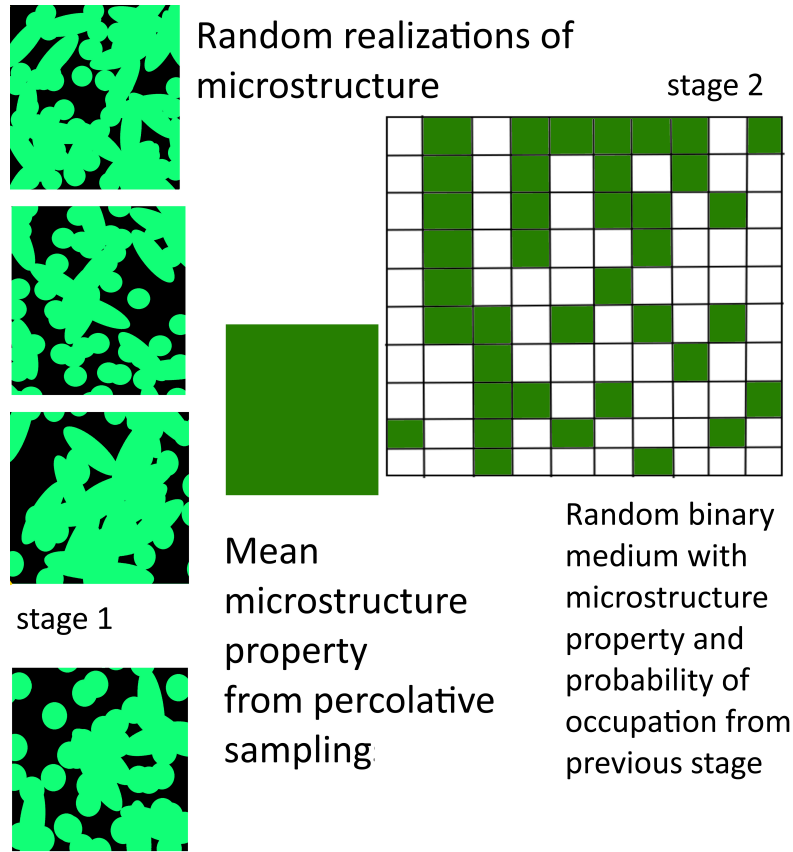


Σχήμα 7.7: Αγωγιμότητα διαδρομής.

$$\chi_c = \chi_f + \chi_m \quad (7.17)$$

όπου χ_c : μέση ηλεκτρική (θερμική) αγωγιμότητα του συνθέτου, χ_f : ηλεκτρική (θερμική) αγωγιμότητα πληρωτικού, χ_m : ηλεκτρική (θερμική) αγωγιμότητα μήτρας.

Εάν οι διαστάσεις του υπό μελέτη φυσικού μέσου είναι πολύ μεγαλύτερες από το RSE, τότε τα αποτελέσματα που λαμβάνονται από το επίπεδο RSE θα πρέπει να αναχθούν σε μάκρο κλίμακα (Σχήμα 7.8). Επομένως, θα πρέπει να κατασκευασθεί ένα νέο νοητό 'μέσο' το οποίο είναι ένα πλέγμα πολύ μεγάλων διαστάσεων $L \times L$ σε δύο διαστάσεις ή $L \times L \times L$ σε τρεις (ενδεικτικές τιμές από $10.000 < L < 100.000$ και $1.000 < L < 10.000$ αντίστοιχα) με πιθανότητα κατάληψης των θέσεων ίση με την πιθανότητα percolation του προηγούμενου σταδίου και τιμή της θερμικής - ηλεκτρικής αγωγιμότητας των κατελημένων θέσεων ίση με την μέση τιμή των percolated δειγμάτων του προηγούμενου σταδίου. Στην συνέχεια το μέσο αυτό θα πρέπει να επιλυθεί ως πλέγμα θέσεων και να υπολογιστεί ο αριθμός των αγωγίμων διαδρομών καθώς και το μήκος τους. Η διαδικασία αυτή



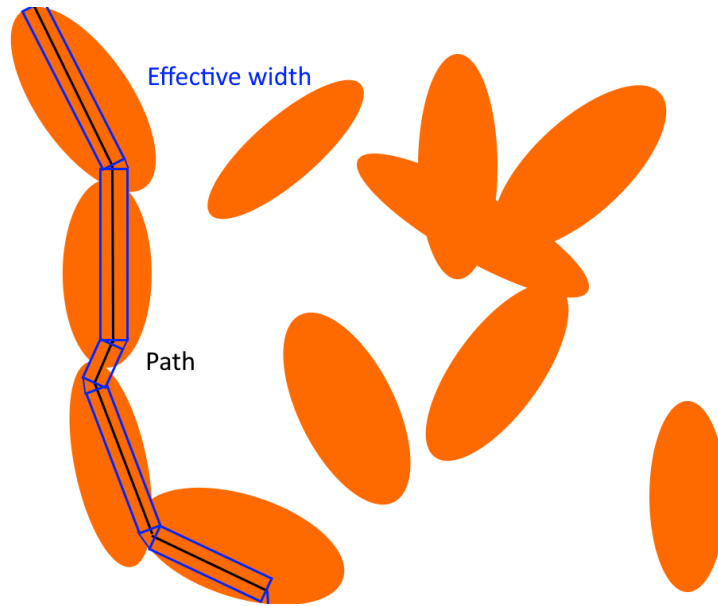
Σχήμα 7.8: Παρουσίαση του αλγορίθμου δύο σταδίων μικροδομής και μακροδομής για τον υπολογισμό θερμικής - ηλεκτρικής αγωγιμότητας.

μπορεί να φαίνεται υπολογιστικά απαιτητική όμως το δεύτερο στάδιο θα είναι το ίδιο για όλα τα προβλήματα ανεξαρτήτου μικροδομής με μοναδική παράμετρο της πιθανότητα κατάληψης. Εάν το πλέγμα έχει διαστάσεις $L \times L$ και ο συνολικός αριθμός των αγωγίμων διαδρομών είναι n_{path} και το μήκος των διαδρομών $S_{grid,i}$, τότε η διόρθωση που πρέπει να εφαρμοστεί στην ηλεκτρική αγωγιμότητα είναι:

$$\sigma_V = \frac{1}{\rho_V} = \sum_{i=1}^{n_{paths}} \frac{1}{L\rho_{cond}S_{path,i}} \quad (7.18)$$

όπου η αγωγιμότητα του αγωγίμου μονοπατιού ρ_{cond} υπολογίζεται ως μέση τιμή των τιμών των RVEs-(RSEs) όπου υπάρχει περσολατιον (N_{total}).

$$\rho_{cond} = \frac{\sum_{j=1}^{N_{total}} \rho_{RVE}}{N_{total}} \quad (7.19)$$



Σχήμα 7.9: Η έννοια του ενεργού πάχους μονοπατιού.

Στην πράξη μπορεί να χρησιμοποιηθεί και η σχέση κλιμάκωσης δεδομένου ότι όπως θα δειχθεί η αριθμητική επίλυση της Εξίσωσης 7.18 συμφωνεί με την σχέση κλιμάκωσης με $t \approx 1.3$ (2D) και $t \approx 2$ (3D) τιμές οι οποίες είναι βιβλιογραφικά αποδεκτές [4]. Δηλαδή

$$\rho_V = \rho_{RVE}(p - p_c)^t \quad (7.20)$$

$$\rho_S = \rho_{RSE}(p - p_c)^t \quad (7.21)$$

όπου $p_c \approx 0.5927$ (2D) και $p_c \approx 0.3116$ (3D).

7.4 Αποτελέσματα

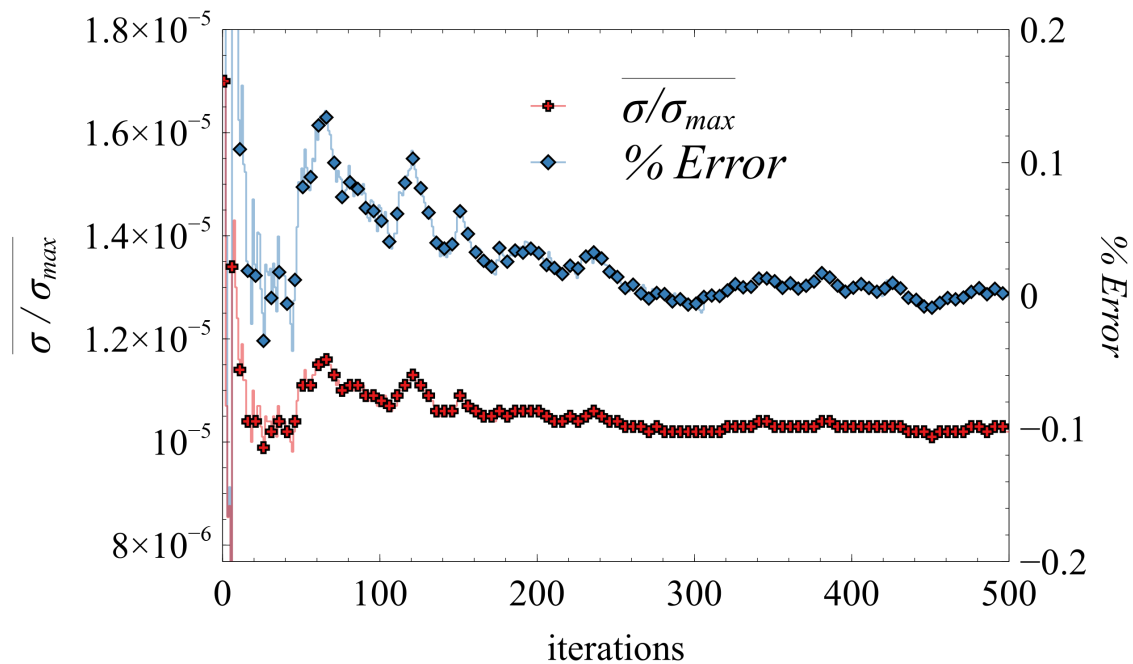
Τα αποτελέσματα από την εφαρμογή της παραπάνω μεθοδολογίας για την εύρεση αγωγιμοτήτων παρουσιάζονται σε αυτήν την ενότητα. Στο σημείο αυτό θα πρέπει να αναφέρουμε πως τα αποτελέσματα επικεντρώνονται σε συστήματα δύο διαστάσεων περισσότερο για λόγους συνέπειας και επικύρωσης της μεθόδου. Η μέθοδος έχει αναπτυχθεί και περιγράφει συ-

στήματα τριών διαστάσεων αλλά η παρουσίαση αυτών των αποτελεσμάτων είναι εκτός του αρχικού πλαισίου έρευνας στα πλαίσια της παρούσης διδακτορικής διατριβής. Για τους απαραίτητους ελέγχους συνέπειας επιλέχθηκε αρχικά για να λυθεί το πρόβλημα του δυαδικού τυχαίου συστήματος όπου είναι γνωστό ότι η ηλεκτρική - θερμική αγωγιμότητα υπακούει στο γνωστό νόμο κλιμάκωσης $\sigma, \rho \propto (\Phi - \Phi_c)^t$ όπου $t = 1.3$ [4].

Η σύγκλιση διερευνήθηκε σε σχέση με τον αριθμό των επαναλήψεων που απαιτούνται για τη σταθεροποίηση της υπολογιζόμενης τιμής. Μια καλή σύμπτωση των αποτελεσμάτων θα υποστήριζε το γεγονός ότι η υπολογιστική προσέγγιση αντιστοιχεί σε έγκυρο μοντέλο. Επίσης η μεταβολή της εξάρτησης της αγωγιμότητας σε σχέση με το επιφανειακό κλάσμα είναι απαραίτητη για την αναγωγή των αποτελεσμάτων σε μάκρο κλίμακα από αυτή της μικροδομής.

Στην συνέχεια επιλύθηκαν δύο διφασικά συνεχή συστήματα: (μήτρα - κυκλικά σωματίδια, μήτρα - ελλειπτικά σωματίδια) για μικροδομή και μακροκλίμακα, υπολογίζοντας την ηλεκτρική αγωγιμότητα ως συνάρτηση του επιφανειακού κλάσματος και επιλύθηκε ένα τριφασικό σύστημα που αποτελείται από κύκλους και ελλείψεις για διαφορετικά μεμονωμένα εξαρτήματα κλάσματα όγκου.

Μελετήθηκε η ηλεκτρική και θερμική αγωγιμότητα ως προς τον αριθμό των επαναλήψεων. Στο **Σχήμα 7.10** παρουσιάζεται η εξέλιξη της μέσης τιμής της κανονικοποιημένης αγωγιμότητας ($\overline{\sigma/\sigma_{max}}$) υπολογίζοντας το σχετικό σφάλμα ως την απόκλιση από την τιμή μετά από 500 επαναλήψεις. Μετά από 200 επαναλήψεις το σφάλμα % *Error* μειώνεται σε ανεκτά σχετικά επίπεδα και η τιμή των 200 επαναλήψεων χρησιμοποιήθηκε ως τιμή για τη μελέτη των διαφόρων περιπτώσεων. Επιπλέον επαναλήψεις δεν θα βελτίωναν σημαντικά την εκτίμηση της ηλεκτρικής αγωγιμότητας, αλλά θα βοηθούσαν στον ακριβέστερο υπολογισμό της πιθανότητας percolation η ο-



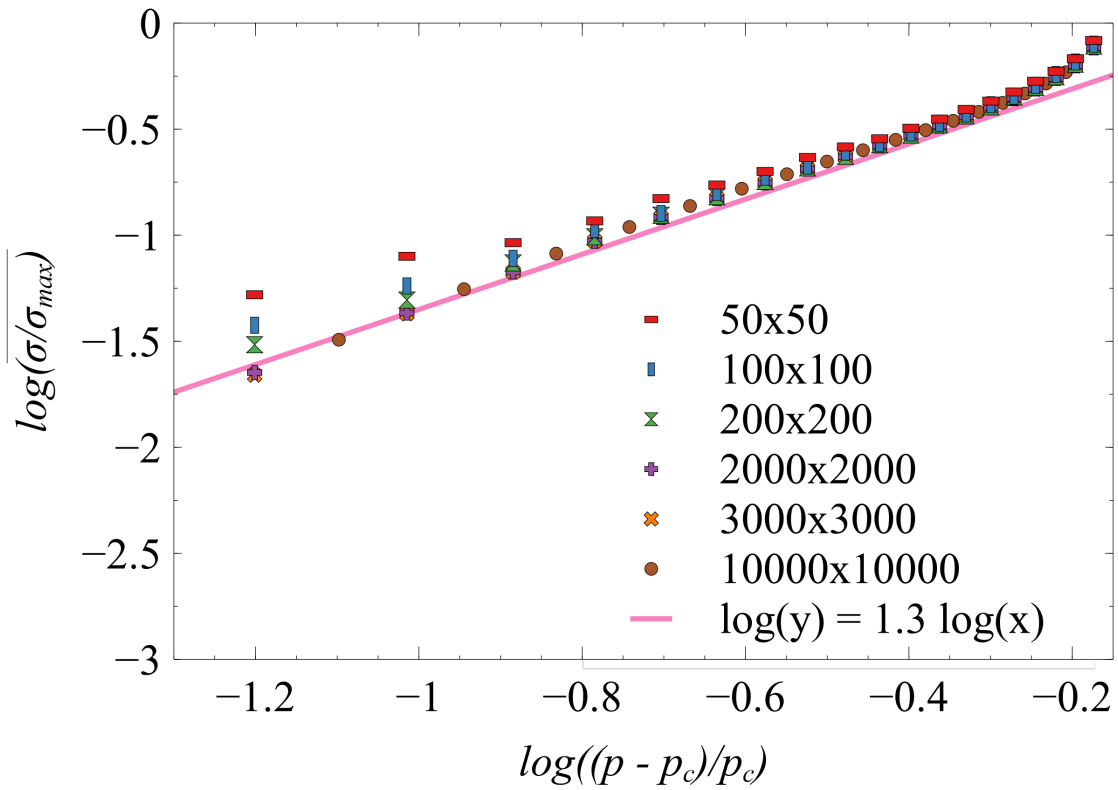
Σχήμα 7.10: Σύγκλιση της μεθόδου. Μέση τιμή ηλεκτρικής αγωγιμότητας και % σφάλμα ως συνάρτηση των επαναλήψεων.

ποία είναι χρήσιμη στην περίπτωση αναγωγής της ηλεκτρικής - θερμικής αγωγιμότητας σε άπειρο μέσο.

7.4.1 Υπολογισμός αριθμού και μέσου μήκους αγώγιμων διαδρομών σε ένα πλέγμα για διαφορετικές πιθανότητες κατάληψης.

Το δυαδικό τυχαίο πλέγμα επιλύθηκε με παράμετρο την πιθανότητα κατάληψης Φ και για διαφορετικά μεγέθη πλέγματος: από 50×50 έως 10000×10000 .

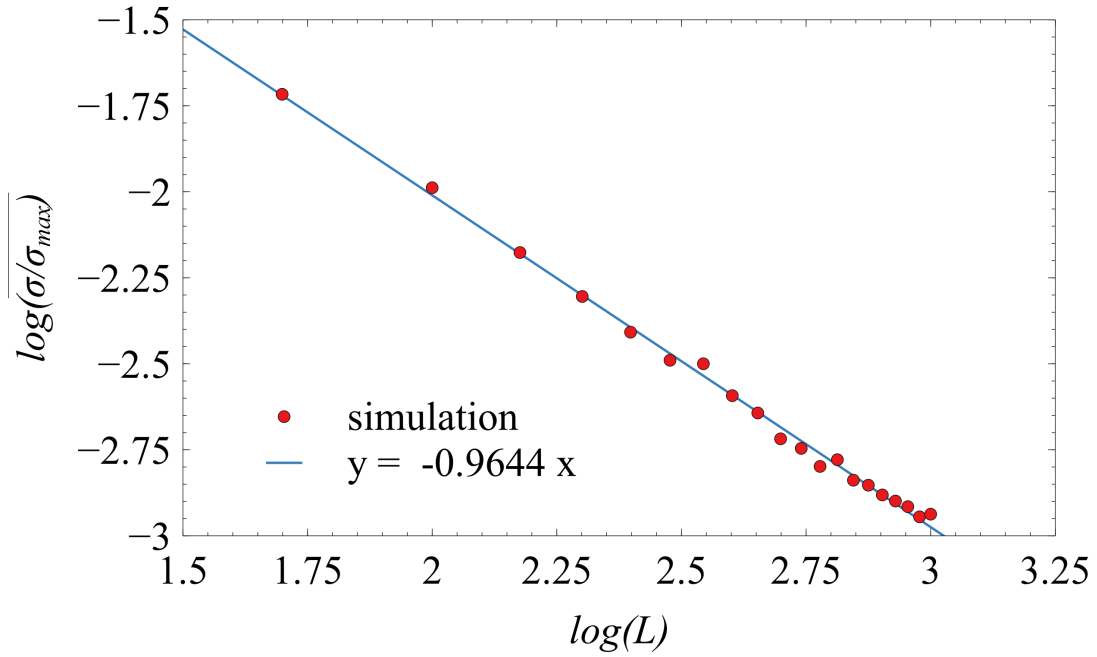
Το Σχήμα 7.11 δείχνει τις κανονικοποιημένες τιμές ηλεκτρικής (ή θερμικής) αγωγιμότητας για διαφορετικές πιθανότητες κατάληψης για τα προαναφερθέντα πλέγματα, γεγονός που οδηγεί σε πολύ καλή συμφωνία των τιμών με τη θεωρητική τιμή της σχέσης δυνάμεως ακόμη και για μικρό α-



Σχήμα 7.11: Συσχετισμός μεταξύ $\log(\sigma/\sigma_{max})$ και $\log((\Phi - \Phi_c)/\Phi_c)$ για πλέγματα από 50×50 έως 10000×10000 . Επίσης παρουσιάζεται και νόμος δύναμης με εκθέτη $t=1.3$.

ριθμό δειγμάτων (200). Οι τιμές που προκύπτουν είναι πολύ κοντά στη σχεδόν αμελητέα απόκλιση λόγω της στατιστικής φύσης του προβλήματος και υποδεικνύουν ανεξαρτησία για το μέγεθος του προβλήματος τουλάχιστον για $\frac{\log(\Phi - \Phi_c)}{\Phi_c} > -1$. Για μικρότερες τιμές υπάρχει μια απόκλιση σε σχέση με την ιδανική συμπεριφορά. Αυτή η συμπεριφορά είναι αναμενόμενη και μάλιστα είναι εξαρτώμενη από το μέγεθος του προβλήματος. Όσο μικρότερο το μέγεθος του προβλήματος τόσο μεγαλύτερη η απόκλιση από την ιδανική συμπεριφορά.

Ο αριθμός των αγωγίμων διαδρομών καθώς και το μέσο μήκος τους αναλύθηκαν περαιτέρω προκειμένου να εξεταστεί η συμπεριφορά τους. Από το Σχήμα 7.13 φαίνεται ότι και οι δύο ποσότητες υπακούουν στη σχέση κλιμάκωσης με συντελεστές περίπου 1.44 ± 0.01 και -0.25 ± 0.01 αντίστοιχα.



Σχήμα 7.12: Συσχέτιση μεταξύ $\log(L)$ (L : γραμμική διάσταση του πλέγματος) και $\log(\sigma/\sigma_{max})$ για πλέγματα από 50×50 έως 1000×1000 στην κρίσιμη συγκέντρωση για τον υπολογισμό του t' .

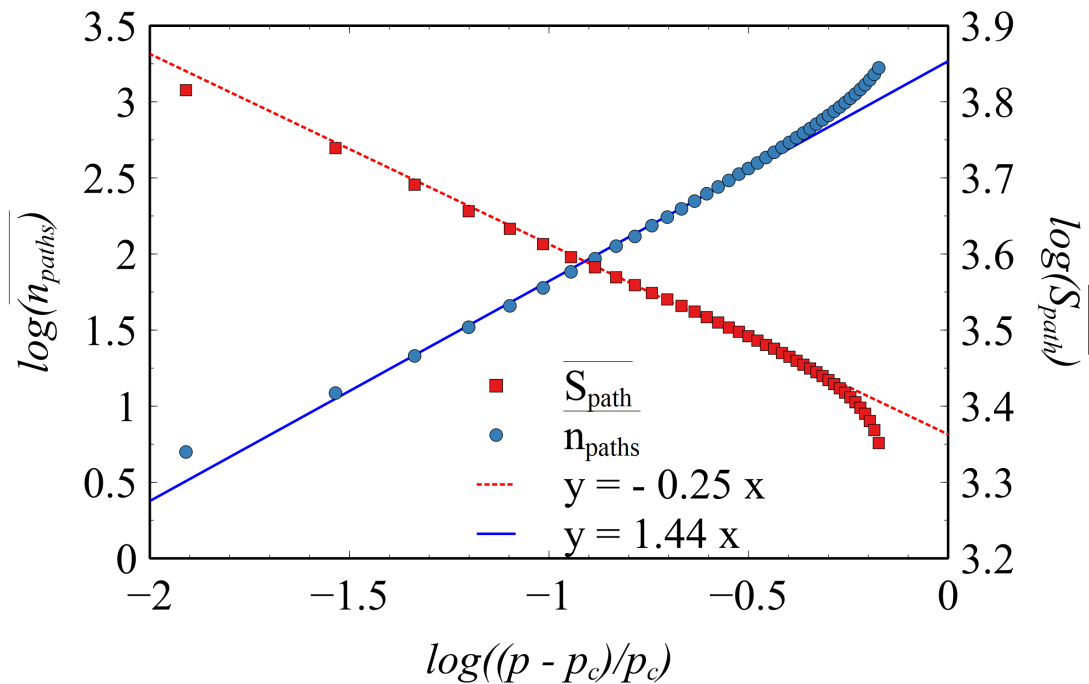
Εάν η αγωγιμότητα υποτεθεί ότι είναι ανάλογη με τον αριθμό των διαδρομών, αντιστρόφως ανάλογη με το μέσο μήκος των μονοπατιών και ανάλογη με το ενεργό πλάτος του μονοπατιού (νόμος του Ohm), τότε το γινόμενο τους πρέπει να ικανοποιεί τη σχέση κλιμάκωσης με τον εκθέτη γ να ισούται περίπου με 1.3, συνεπώς ο εκθέτης του τρίτου όρου θα πρέπει να είναι ίσος με -0.39.

$$\sigma \propto n_{paths} \left(\frac{\overline{S_{path}}}{L} \right)^{-1} W_{eff} \quad (7.22)$$

Από τις προσομοιώσεις φαίνεται ότι το $\overline{\sigma/\sigma_{max}}$, $\overline{n_{paths}}$, $\overline{L_{path}}$ ικανοποιεί τη σχέση κλιμάκωσης επομένως και το W_{eff} ικανοποιεί τη σχέση κλιμάκωσης με τον εκθέτη -0.39 (Εξίσωση 7.23).

$$W_{eff} \propto \left(\frac{\Phi - \Phi_c}{\Phi_c} \right)^{-0.39} \quad (7.23)$$

Επιπρόσθετα έγινε προσπάθεια υπολογισμού του συντελεστή t' (t/ν) στο



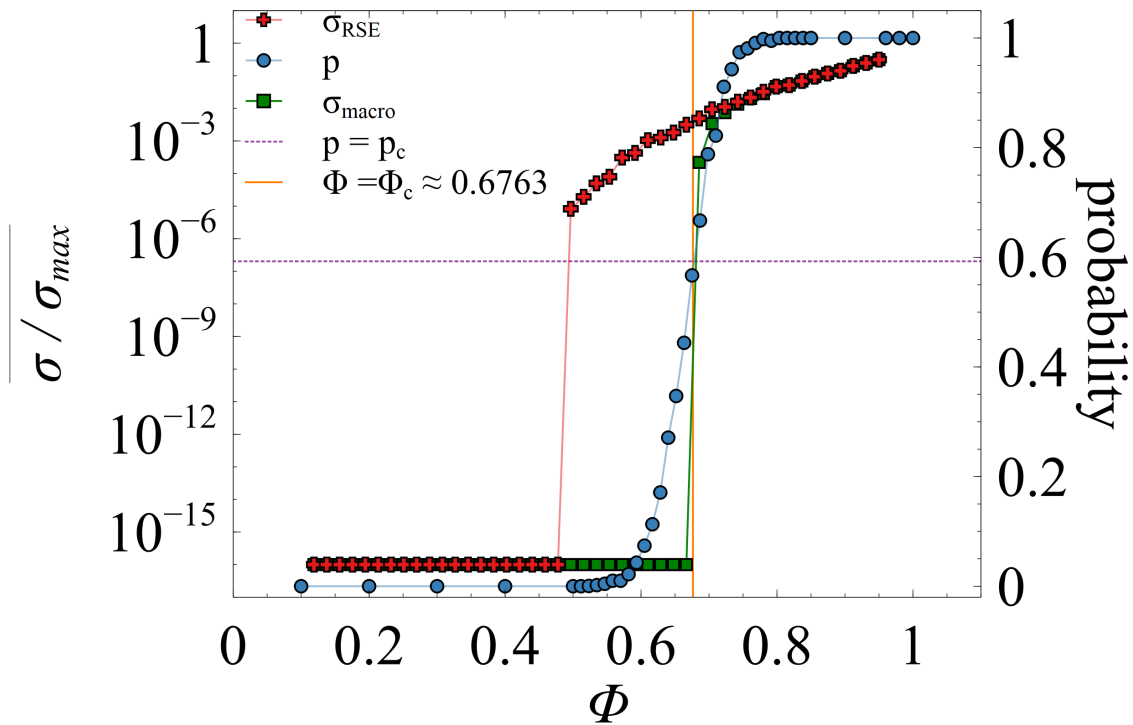
Σχήμα 7.13: Συνολικές διαδρομές και μέσο μήκος διαδρομής για διάφορα επιφανειακά κλάσματα σε πλέγμα 2000×2000 . Επίσης παρουσιάζονται και οι σχέσεις κλιμάκωσης.

κλάσμα της κρίσιμης επιφάνειας. Για το λόγο αυτό, η κανονικοποιημένη αγωγιμότητα σ/σ_{max} υπολογίστηκε ως συνάρτηση της γραμμικής διάστασης του RSE (L) για δείγματα διαστάσεων από 50 έως 1000, ανά 50, προκειμένου να υπολογιστεί ο συντελεστής (Σχήμα 7.12). Ο συντελεστής -0.965 υπολογίστηκε με γραμμική παλινδρόμηση, η οποία βρίσκεται σε πολύ καλή συμφωνία με τους υπάρχοντες υπολογισμούς -0.977 στο [27] και -0.9479 στο [28].

7.4.2 Διφασικό σύστημα με κυκλικό υλικό πλήρωσης

Πραγματοποιήθηκε προσομοίωση για δύο συστατικά (μήτρα, υλικό πλήρωσης) για διάφορες αναλογίες w_{filler}/w_{matrix} που κυμαίνονται από 0.0 - 0.98. Το υλικό πλήρωσης είχε κυκλικό σχήμα, οι διαστάσεις του πλέγματος ήταν

2000×2000 και το επίπεδο μεγέθυνσης 210 ppm. Υπολογίστηκαν η ηλεκτρική αγωγιμότητα του RSE, η πιθανότητα percolation καθώς και η ηλεκτρική αγωγιμότητα σε διάσταση πολύ μεγαλύτερη από την αντιπροσωπευτική επιφάνεια (Σχήμα 7.14). Στο διάγραμμα απεικονίζεται τόσο η ηλεκτρική όσο και θερμική αγωγιμότητα. Γίνεται η υπόθεση ότι το υλικό πλήρωσης είναι καλός αγωγός ηλεκτρικής ενέργειας - θερμότητας με τιμή 1 (κανονικοποιημένη) και η μήτρα - ρητίνη είναι κακός αγωγός με σχεδόν μηδενική αγωγιμότητα (10^{-16} Siemens ή W/mK^0). Δεν θεωρείται μηδενική η αγωγιμότητα για λόγους αναπαράστασης και μόνον διότι χρησιμοποιούνται διαγράμματα $\log(x) - \log(y)$.



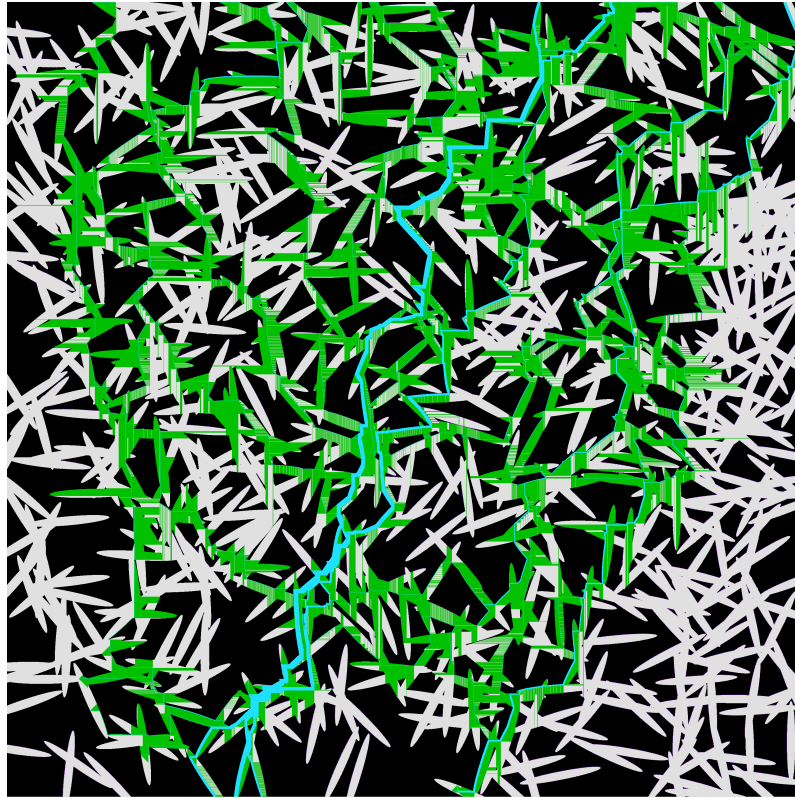
Σχήμα 7.14: Ηλεκτρική αγωγιμότητα σύνθετου με υλικό γεωμετρίας κύκλου.

Στο Σχήμα 7.14 εμφανίζονται τρεις διαφορετικές περιοχές. α) $0 < \Phi < 0.6763$ όπου δεν υπάρχει διάδοση μακροκλίμακας β) $0.6763 < \Phi < 0.8$ όπου υπάρχει διάδοση στη μακροκλίμακα, αλλά η αγωγιμότητα που υπο-

λογίζεται σε RSE πρέπει να αναχθεί για να εκφράζει ένα μέσο μεγάλων διαστάσεων και γ) για επιφανειακά κλάσματα $\Phi > 0.8$ όπου υπάρχει σύμπτωση μεταξύ της αγωγιμότητας που προκύπτει από τις δύο κλίμακες (μικροδομή / μακροδομή).

7.4.3 Σύστημα δύο φάσεων με ελλειπτικό υλικό πλήρωσης

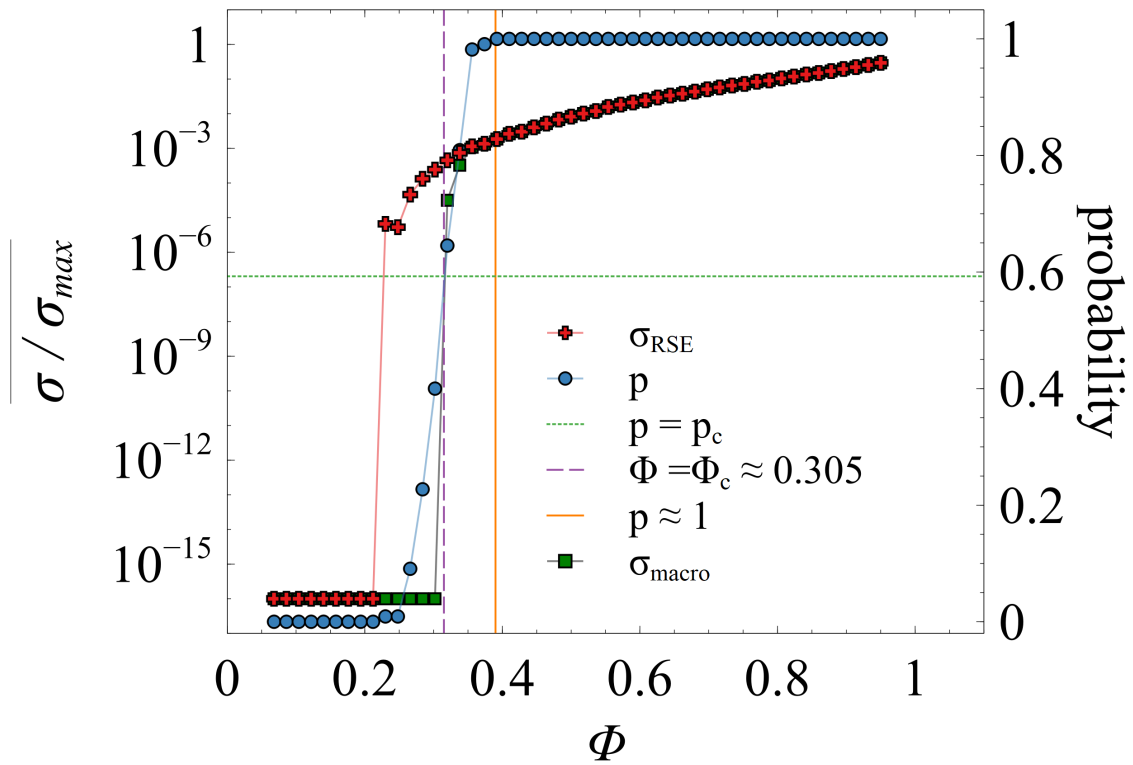
Η ίδια διαδικασία ακολουθήθηκε στην περίπτωση ενός ελλειπτικού πληρωτικού με αναλογία ημιαξόνων (a_R) ίσο με 10. Οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν για μεγάλο εύρος Φ (0.0-0.98) η αγωγιμότητα υπολογίστηκε τόσο στο επίπεδο της αντιπροσωπευτικής επιφάνειας όσο και σε μακροκλίμακα. Το πλέγμα είχε διάσταση 3000×3000 και υιοθετήθηκαν 200 επαναλήψεις. Το επίπεδο μεγέθυνσης ήταν τα 31 *ppms* και ένα δείγμα μιας αντιπροσωπευτικής επιφάνειας φαίνεται στο (Σχήμα 7.15) όπου τονίζονται τα γωγίμα μονοπάτια. Το Σχήμα 7.16 δείχνει σε λογαριθμική κλίμακα την κανονικοποιημένη ειδική ηλεκτρική αγωγιμότητα σ του σύνθετου υλικού σε σχέση με το επιφανειακό κλάσμα του ελλειπτικού πληρωτικού. Παρόμοια συμπεριφορά με την προηγούμενη που μελετήθηκε, εμφανίζεται στην περίπτωση του ελλειπτικού στοιχείου. Τρεις διακριτές περιοχές είναι εμφανείς $0 < \Phi < 0.305$ όπου δεν υπάρχει διάδοση μακροκλίμακας. Στην περιοχή $0.305 < \Phi < 0.39$ υπάρχει διάδοση μακροκλίμακας, αλλά η αγωγιμότητα που υπολογίζεται σε έναν RSE πρέπει να μειωθεί για να εκφραστεί ένα μέσο μεγάλων διαστάσεων. Για επιφανειακά κλάσματα $\Phi > 0.39$ υπάρχει μια σύμπτωση μεταξύ της αγωγιμότητας που προκύπτει από τα δύο επίπεδα (μικροδομή / μακροδομή).



Σχήμα 7.15: Αγωγή μονοπάτια σε περίπτωση ελλειπτικού πληρωτικού σε μη αγώγιμη μήτρα με $a_R=10$, $prms=31$, $L=3000$, $\Phi=0.5$ και σταθερό μέγεθος. Το ανοιχτό μπλε δείχνει τις αγώγιμες διαδρομές, το πράσινο τα σημεία κάθετα στην αγώγιμη διαδρομή που συμμετέχουν στην αγωγιμότητα, το ανοιχτό γκρι τα αγώγιμα σωματίδια και το μαύρο τη μη αγώγιμη μήτρα.

7.4.4 Σύστημα τριών φάσεων με κυκλικό και ελλειπτικό πληρωτικό

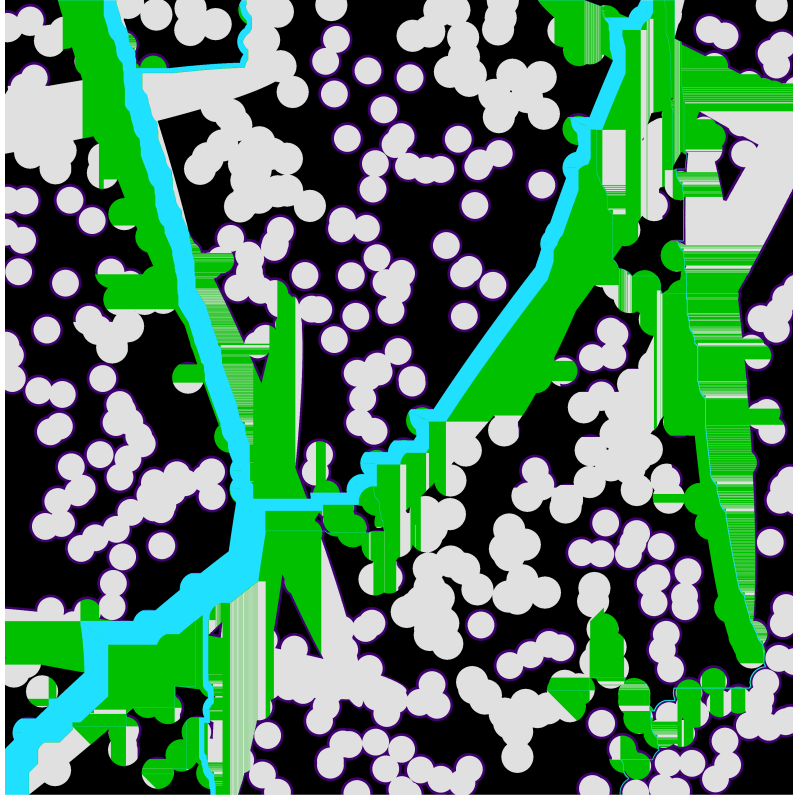
Για να δειχθεί η ικανότητα επίλυσης πολυφασικών συστημάτων επιλέχθηκε για μελέτη ένα τριφασικό σύστημα. Το σύνθετο υλικό αποτελούταν από ένα ελλειπτικό συστατικό με αναλογία $a_R=10$ και ένα κυκλικό στοιχείο μέσα σε μια μη αγώγιμη μήτρα. Συγκεκριμένα, οι χαρακτηριστικές διαστάσεις ήταν: διάμετρος κύκλου 10 nm , άξονες έλλειψης 10 nm και 100 nm . Πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις για αναλογία επιφάνειας μεγάλου εύρους $\Phi \in (0.05-0.5)$ για κάθε στοιχείο και η αγωγιμότητα υπολογίστηκε σε επίπεδο RSE. Το πλέγμα είχε διάσταση 4000×4000 και χρησιμοποιήθηκαν 200 επαναλήψεις. Η ηλεκτρική - θερμική αγωγιμότητα θεωρήθηκε ίση με 1



Σχήμα 7.16: Ηλεκτρική αγωγιμότητα ελλειπτικού πληρωτικού με $a_R = 10$ για RSE και αγωγιμότητα μακροκλίμακας.

(κανονικοποιημένη) για το ελλειπτικής γεωμετρίας δισδιάστατο σωματίδιο και 0.5 για το συστατικό με τη γεωμετρία κύκλου. Το επίπεδο μεγέθυνσης ήταν 31 ppm (Σχήμα 7.17).

Το Σχήμα 7.18 δείχνει σε λογαριθμική κλίμακα την κανονικοποιημένη ειδική ηλεκτρική αγωγιμότητα (σ/σ_{max}) του τριφασικού σύνθετου υλικού σε σχέση με το επιφανειακό κλάσμα του ελλειπτικού και κυκλικού πληρωτικού για διαφορετικές συγκεντρώσεις. Το κρίσιμο κλάσμα επιφάνειας για το κυκλικό συστατικό μειώνεται καθώς το επιφανειακό κλάσμα του ελλειπτικού συστατικού αυξάνεται σε περίπου 0.25 όπου έχουμε percolation ανεξάρτητα από τη συγκέντρωση του κυκλικού υλικού που απλώς αυξάνει την αγωγιμότητα με αυξανόμενο το επιφανειακό κλάσμα.

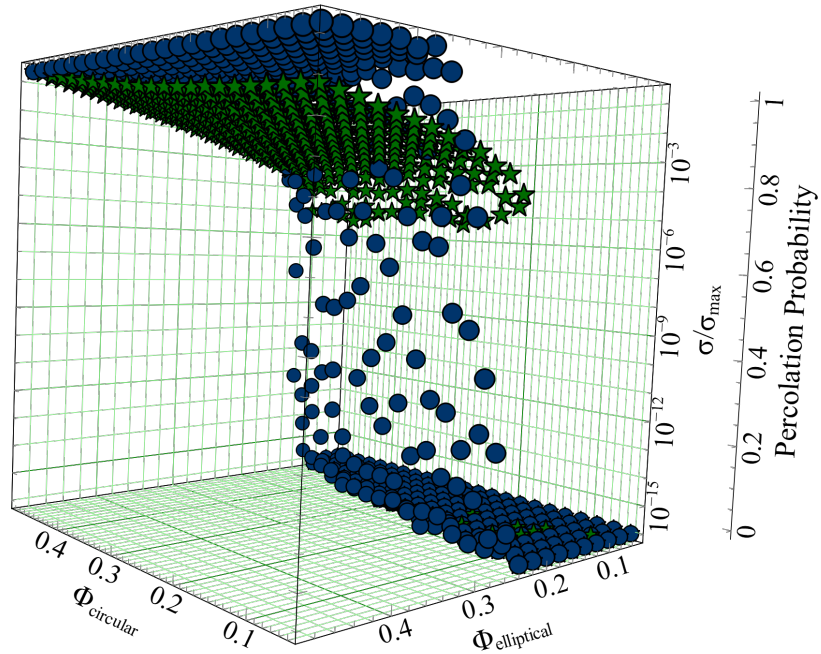


Σχήμα 7.17: Αγωγή μονοπάτια σε περίπτωση τριφασικού συστήματος με δύο πληρωτικά: ένα ελλειπτικό με $a_R=10$ και ένα κυκλικό. Σε αυτήν την υλοποίηση $\phi_{elliptic} = 0.21$ και $\phi_{circle} = 0.33$. Το ανοιχτό μπλε δείχνει τις αγωγίμες διαδρομές, το πράσινο τα σημεία κάθετα στην αγωγή διαδρομή που συμμετέχουν στην αγωγιμότητα, το ανοιχτό γκρι τα αγωγή σωματίδια, και το μαύρο τη μη αγωγή μήτρα.

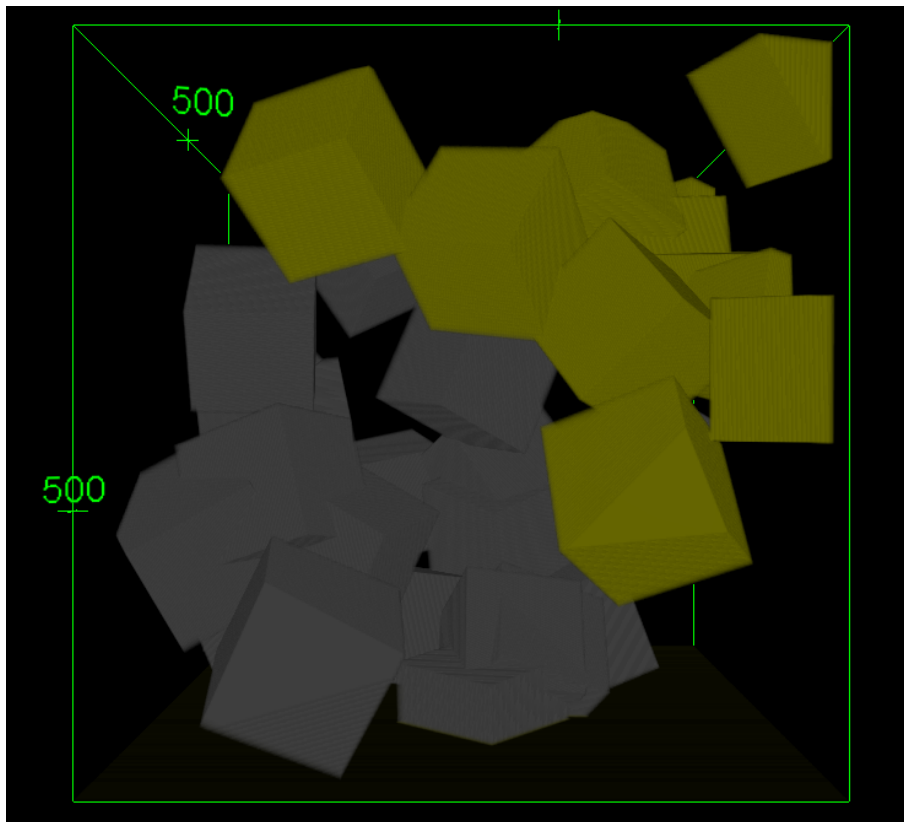
7.4.5 Τρεις διαστάσεις

Η παραπάνω μεθοδολογία που αναπτύχθηκε για τις δύο διαστάσεις επεκτάθηκε και στην περίπτωση τριών διαστάσεων όπου αναπτύχθηκε ανάλογος κώδικας, όπου μπορεί να επιλύσει πολυφασικά υλικά (σύνθετα), με διάφορες θερμικές - ηλεκτρικές ιδιότητες.

Τα αποτελέσματα αν και δεν έχουν δημοσιευθεί σε κάποιο διεθνές επιστημονικό περιοδικό με κριτές είναι σύμφωνα με την διεθνή βιβλιογραφία. Για λόγους επίδειξης και μόνο παρουσιάζεται απόσπασμα ενός συνθέτου που αποτελείται από τυχαίους κύβους, όπου γίνεται υπολογισμός των αγωγιμοτήτων με επιτυχία.



Σχήμα 7.18: Αγωγιμότητα σ_{RSE} τριών συστατικών που αποτελείται από ελλειπτική συστατικό με $a_R = 10$ και κυκλικό υλικό πλήρωσης.



Σχήμα 7.19: Σύνθετο υλικό αποτελούμενο από τυχαίους κύβους.

Βιβλιογραφία

- [1] S. Kirkpatrick, “Percolation and conduction,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 45, pp. 574–588, Oct 1973.
- [2] G. E. Pike and C. H. Seager, “Percolation and conductivity: A computer study. i,” *Phys. Rev. B*, vol. 10, pp. 1421–1434, Aug 1974.
- [3] S. Torquato, “Effective electrical conductivity of two-phase disordered composite media,” *Journal of Applied Physics*, vol. 58, no. 10, pp. 3790–3797, 1985.
- [4] S. Torquato, *Random Heterogeneous Materials*, vol. 16. Springer-Verlag New York, 2002.
- [5] W. B. Spanos P., Elsbernd P. and K. T., “Estimation of the physical properties of nanocomposites by finite-element discretization and monte carlo simulation,” *Phil. Trans. R. Soc. A.*, vol. 371, Jun 2013.
- [6] J. Zhang and M. Tanaka, “Systematic study of thermal properties of cnt composites by the fast multipole hybrid boundary node method,” *Engineering Analysis with Boundary Elements*, vol. 31, no. 5, pp. 388–401, 2007. Innovative Numerical Methods for Micro and Nano Mechanics and Structures - Part I.
- [7] D. S. McLachlan, “The percolation exponents for electrical and thermal conductivities and the permittivity and permeability of binary composites,” *Physica B: Condensed Matter*, vol. 606, p. 412658, 2021.
- [8] R. E. Meredith and C. W. Tobias, “Conductivities in emulsions,” *Journal of The Electrochemical Society*, vol. 108, p. 286, mar 1961.
- [9] R. Landauer, “Electrical conductivity in inhomogeneous media,” *AIP Conference Proceedings*, vol. 40, pp. 2–45, 04 1978.

- [10] D. S. McLachlan, M. Blaszkiwicz, and R. E. Newnham, “Electrical resistivity of composites,” *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 73, no. 8, pp. 2187–2203, 1990.
- [11] J. Clerc, G. Giraud, J. Laugier, and J. Luck, “The electrical conductivity of binary disordered systems, percolation clusters, fractals and related models,” *Advances in Physics*, vol. 39, no. 3, pp. 191–309, 1990.
- [12] D. Bergman and D. Stroud, “Physical properties of macroscopically inhomogeneous media,” *Solid State Physics - Advances in Research and Applications*, vol. 46, no. C, pp. 147–269, 1992.
- [13] J. Wu and D. S. McLachlan, “Scaling behavior of the complex conductivity of graphite-boron nitride percolation systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 58, pp. 14880–14887, Dec 1998.
- [14] R. Taherian, “11 - developments and modeling of electrical conductivity in composites,” in *Electrical Conductivity in Polymer-Based Composites* (R. Taherian and A. Kausar, eds.), *Plastics Design Library*, pp. 297–363, William Andrew Publishing, 2019.
- [15] E. J. Garboczi and J. G. Berryman, “Elastic moduli of a material containing composite inclusions: effective medium theory and finite element computations,” *Mechanics of Materials*, vol. 33, pp. 455–470, 2001.
- [16] E. J. Garboczi and P. Lura, “Local elastic moduli of simple random composites computed at different length scales,” *Materials and Structures*, vol. 53, pp. 1–16, 2020.
- [17] A. Manta, M. Gresil, and C. Soutis, “Predictive model of graphene based polymer nanocomposites: Electrical performance,” *Applied Composite Materials*, vol. 24, pp. 281–300, Apr 2017.

- [18] E. Garboczi, “Finite element and finite difference programs for computing the linear electric and elastic properties of digital images of random materials,” 1998-12-01 1998.
- [19] P. H. Winterfeld, L. E. Scriven, and H. T. Davis, “Percolation and conductivity of random two-dimensional composites,” *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 14, pp. 2361–2376, 1981.
- [20] J. Koplik, “On the effective medium theory of random linear networks,” *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 14, pp. 4821–4837, nov 1981.
- [21] S. R. Broadbent and J. M. Hammersley, “Percolation processes: I. crystals and mazes,” *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 53, no. 3, p. 629–641, 1957.
- [22] D. Mezdour and S. Sahli, “A simulation study of electrical fiber composite conductivity,” *AIP Conference Proceedings*, vol. 1060, no. 1, pp. 55–58, 2008.
- [23] A. Aryanfar, S. Medlej, A. Tarhini, S. R. Damadi, A. R. Tehrani B., and W. A. Goddard III, “3d percolation modeling for predicting the thermal conductivity of graphene-polymer composites,” *Computational Materials Science*, vol. 197, p. 110650, 2021.
- [24] E. Lambrou and L. N. Gergidis, “A particle digitization-based computational method for continuum percolation,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 590, p. 126738, 2022.
- [25] M. Alger, *Polymer science dictionary*. Springer Netherlands, 2017.
- [26] C. Y. Lee, “An algorithm for path connections and its applications,”

IRE Transactions on Electronic Computers, vol. EC-10, no. 3, pp. 346–365, 1961.

[27] W. Cen, D. Liu, and B. Mao, “Molecular trajectory algorithm for random walks on percolation systems at criticality in two and three dimensions,” *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 391, no. 4, pp. 925–929, 2012.

[28] Alexander, S. and Orbach, R., “Density of states on fractals : “ fractons ”,” *J. Physique Lett.*, vol. 43, no. 17, pp. 625–631, 1982.

Κεφάλαιο 8

Συμπεράσματα - Μελλοντικές

Ερευνητικές Προτάσεις

Συμπεράσματα

Στην παρούσα διατριβή στα πρώτα κεφάλαια, έγινε αριθμητική μοντελοποίηση θερμοηλεκτρικών γεννητριών που είναι ενσωματωμένες σε ένα σύνθετο εποξειδικό πολυστρωματικό υλικό προκειμένου να μελετηθούν τα θερμοηλεκτρικά φαινόμενα συλλογής θερμικής ενέργειας. Αναπτύχθηκε μια υπολογιστική διαδικασία μοντελοποίησης για θερμοηλεκτρικές γεννήτριες από ανθρακονήματα που είναι ενσωματωμένες σε στρώμα προσδίδοντας του TEG χαρακτηριστικά σε ένα σύνθετο εποξειδικό πολυστρωματικό υλικό οκτώ συνολικά (8) στρώσεων για αποδοτική μετατροπή της θερμικής σε ηλεκτρική ενέργεια. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης είναι σε συμφωνία με τις πειραματικές μετρήσεις τάσης εξόδου. Αφού μοντελοποιήθηκε επιτυχώς διενεργήθηκε πολυπαραμετρική μελέτη της συμπεριφοράς της συσκευής με μεταβλητές όπως διαφορές θερμοκρασίας, μήκος και διάμετρος θερμοστοιχείων και μεταξύ άλλων τη θερμική αγωγιμότητα της ρητίνης. Η συνέπεια της μεθόδου βοήθησε στον σχεδιασμό και τη βελτίωση των ηλε-

κτρικών χαρακτηριστικών των μονάδων TEG που κατασκευάστηκαν στο CSM LAB. Η έξοδος της προαναφερθείσας πολυπαραμετρικής μελέτης Πεπερασμένων Στοιχείων, συνοδευόμενη από πειραματικές μετρήσεις, χρησιμοποιήθηκε ως είσοδος για την εκπαίδευση νευρωνικού δικτύου προκειμένου να δημιουργηθεί μια εποπτική εικόνα για την συμπεριφορά της συσκευής σε συνάρτηση με τις παραμέτρους σχεδιασμού το οποίο μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως εργαλείο για τον σχεδιασμό συσκευής με επιθυμητή συμπεριφορά ή και στην κατασκευή βέλτιστων συσκευών TE.

Στην συνέχεια μοντελοποιήθηκε με επιτυχία ένα ιεραρχικά τροποποιημένο με ίνες πολυστρωτο (laminate) πολυμερικό συνθέτο υλικό με επικαλύψεις νανοσωλήνων άνθρακα μονού τοιχώματος το οποίο λειτουργεί ως αποδοτική θερμοηλεκτρική γεννήτρια, χρησιμοποιώντας, χαμηλού κόστους και εμποτισμένες με ρητίνη τυπωμένες θερμοηλεκτρικές n- και p- ημιαγώγιμες επικαλύψεις βασισμένες σε νανοσωλήνες άνθρακα μονού τοιχώματος (SWCNT).

Επίσης μοντελοποιήθηκε ένα σύνθετο πολυμερούς - μήτρας ίνας υάλου ως οργανική θερμοηλεκτρική γεννήτρια η οποία βασίζεται στις παραπάνω τυπωμένες θερμοηλεκτρικές n- και p- ημιαγώγιμες επικαλύψεις. Η συσκευή που αποτελείται από 232 ζεύγη p/n και παρήγαγε στην πράξη τάση ανοιχτού κυκλώματος μεγαλύτερη από 1.0V, $I_{SC}=850 \mu A$ που αντιστοιχεί στην αξιοσημείωτη ισχύ εξόδου 215 μW . Αυτή η μετρούμενη τιμή είναι από τις υψηλότερες που έχουν αναφερθεί για δομικά TEG με βάση τον άνθρακα που κατασκευάζονται μέσω εκτύπωσης.

Τέλος μια αρχιτεκτονική πολυλειτουργικού σύνθετου υλικού αφού υλοποιήθηκε στο εργαστήριο χρησιμοποιώντας θερμοηλεκτρικά μελάνια τύπου p και n στην συνέχεια προσομοιώθηκε. Τα μελάνια ενσωματώθηκαν στη σύνθετη δομή που εναποτέθηκε στα γυάλινα υφάσματα με τη μέθοδο drop casting, σχηματίζοντας μια ενιαία αγώγιμη διαδρομή. Η μέθοδος πεπερα-

σμένων στοιχείων αναπαράστησε επιτυχώς την πραγματική συσκευή.

Από την παραπάνω ανάλυση έγινε κατανοητό ότι οι αριθμητικές επιλύσεις είναι μονόδρομος για την εκτίμηση της συμπεριφοράς των θερμοηλεκτρικών συσκευών λόγω των πολύπλοκων γεωμετριών τους τα δε νευρωνικά δίκτυα αφενός αναπαραστούν επιτυχώς την συμπεριφορά σε σχέση με παραμέτρους σχεδιασμού και αφετέρου μπορούν να αποτελέσουν το εργαλείο βελτιστοποίησης.

Ένα από τα σημαντικά πορίσματα των αναλύσεων θερμοηλεκτρικών συσκευών με πεπερασμένα στοιχεία είναι ότι εκτός του συντελεστή Seebeck οι θερμικές και ηλεκτρικές ιδιότητες της ρητίνης στην οποία βρίσκονται τα θερμοζεύγη έχουν ένα δευτερεύων αλλά σημαντικό ρόλο στην απόδοση της συσκευής. Η παρατήρηση αυτή έγινε το έναυσμα για την μελέτη των θερμικών - ηλεκτρικών ιδιοτήτων σύνθετων υλικών.

Επειδή η μοντελοποίηση σύνθετων υλικών με αναλυτικές μεθόδους είναι σχεδόν αδύνατη εκτός ελαχίστων περιπτώσεων μονόδρομος είναι οι αριθμητικές μέθοδοι. Όμως εξαιτίας της τυχαιότητας δομής των υλικών και του πεπερασμένου χώρου που μπορεί να μελετηθεί θα πρέπει να μελετηθούν πολλά δείγματα και να εξαχθούν μέσες τιμές ιδιοτήτων.

Ένα μοντέλο που έχει μεγάλη επιτυχία στην μελέτη τυχαίων υλικών είναι η θεωρία διήθησης. Στην παρούσα εργασία αναπτύχθηκε εξ ολοκλήρου μια τροποποίηση της μεθόδου προκειμένου να μελετηθούν τόσο η δυαδική διήθηση πλέγματος όσο και η συνεχής διήθηση τόσο σε επίπεδο μικρο-κλίμακας όσο και μακρο-κλίμακας χωρίς να χρειαστούν περαιτέρω υπολογισμοί.

Συγκεκριμένα αναπτύχθηκε ένα θεωρητικό μοντέλο και δύο εργαλεία προσομοίωσης για τη μελέτη των φαινομένων διήθησης συνεχούς σε 2D καιώς 3D ενσωματώνοντας διαφορετικές γεωμετρίες (ελλείψεις - παραλληλόγραμμα) πλήρωσης και εύρη επιφανειακών κλασμάτων σε πολυφα-

σικά σύνθετα καθώς και την δυνατότητα μοντελοποίησης του φαινομένου σήραγγας. Το πλεονέκτημα των εργαλείων είναι ότι ο πηγαίος κώδικας δεν στηρίζεται σε καμιά εξωτερική βιβλιοθήκη πλὴν της STL της γλώσσας C++, αναπτύχθηκε σε περιβάλλον windows αλλά μπορεί να μεταγλωττιστεί και σε οποιαδήποτε unix-like λειτουργικό σύστημα, με μοναδικό περιορισμό ο μεταγλωτιστής να υποστηρίζει την προδιαγραφή C++17.

Το μοντέλο που αναπτύχθηκε και αναπαριστά το άπειρο μέσο έχει εγγενή ομοιότητα με τη διήθηση του πλέγματος. Επιπλέον, εστιάζει στην μικροκλίμακα και όχι σε ολόκληρο το μέσο, μετατρέποντας έτσι το πρόβλημα του 2D, 3D συνεχούς σε ισοδύναμο πρόβλημα διήθησης δικτυώματος 2D, 3D. Τα αποτελέσματα που παρουσιάστηκαν έδειξαν ότι η μεθοδολογία και η υλοποίηση που αναπτύχθηκε είναι ακριβής, με την ακρίβεια να εξαρτάται κυρίως από τα pixel ανά ελάχιστο μέγεθος (*ppms*) παράμετρος που ρυθμίζει το επίπεδο μεγέθυνσης. Ένας άλλος παράγοντας που σε κάποιο βαθμό επηρεάζει το αποτέλεσμα της μεθόδου είναι το μέγεθος RSE που υπαγορεύεται από το πλάτος (L) \times ύψος (L).

Το κύριο πλεονέκτημα της παρούσας μεθοδολογίας είναι η σχετική ευκολία στην εύρεση λύσεων για υλικά με μεγάλο αριθμό συστατικών με μόνη προϋπόθεση να μπορούν να αναπαρασταθούν με απλά γεωμετρικά σχήματα. Επιπλέον, η προτεινόμενη μεθοδολογία δύναται να χρησιμοποιηθεί σε συστήματα όπου εμφανίζεται το φαινόμενο σήραγγας tunnel effect, καθώς και την επίλυση του προβλήματος Swiss cheese. Η μέθοδος είναι υπολογιστικά προσιτή και απαιτεί μέτριους υπολογιστικούς πόρους.

Στην συνέχεια καθώς το ζητούμενο, από πρακτική σκοπιά, είναι ο υπολογισμός των ιδιοτήτων ενός υλικού η παραπάνω μεθοδολογία επεκτάθηκε προκειμένου να μπορεί να εκτιμήσει τις τιμές των ιδιοτήτων (θερμική - ηλεκτρική αγωγιμότητα) του υλικού τόσο στο επίπεδο της μικροδομής όσο και στη μακροσκοπική κλίμακα. Καθώς οι υπάρχουσες θεωρίες δεν κάνουν

διάκριση μεταξύ μικροδομής και μακροδομής με αποτέλεσμα οι υπολογισμοί που προκύπτουν από την μικροδομή να μην αντιστοιχούν σε υλικό μεγάλης κλίμακας. Για το λόγο αυτό αναπτύχθηκε μια θεωρία δύο σταδίων (μικροδομής και μακροδομής) η οποία βασίζεται τον νόμο του Ohm, στον κανόνα των μειγμάτων και στον υπολογισμό των αγώγιμων διαδρομών προκειμένου να υπολογιστούν οι ιδιότητες του υλικού χωρίς το μέσο να υποβάλλεται σε εξωτερικά πεδία. Για την έλεγχο της μεθόδου αρχικά επιλύθηκε το τυχαίο δυαδικό πρόβλημα προκειμένου να δοκιμαστεί η μέθοδος τόσο στο θεωρητικό υπόβαθρο όσο και στην αριθμητικής της υλοποίηση προκειμένου να εντοπιστούν τυχόν αποκλίσεις. Μετά την επιβεβαίωση της σχέσης δύναμης με προσομοιώσεις, επιλύθηκαν τρία συνεχόμενα μοντέλα σε επίπεδο μικροδομής και τα αποτελέσματα ανήχθησαν σε επίπεδο μακροδομής προκειμένου να υπάρξει δυνατότητα σύγκρισης με την συμπεριφορά πραγματικών υλικών.

Η παρούσα μεθοδολογία που αναπτύχθηκε είναι ακριβής και επεκτείνει την τρέχουσα βιβλιογραφία. Εξηγεί επίσης πολύ καθαρά το φυσικό μοντέλο της ηλεκτρικής (θερμικής) αγωγιμότητας σε τυχαίο μικροδομημένο υλικό, χωρίς την ανάγκη της μελέτης της σχέσης αιτίου αποτελέσματος όπως κάνουν οι τρέχουσες μέθοδοι. Οι υπολογιστικοί πόροι που απαιτούνται είναι μικρότεροι από τις παραδοσιακές γενικές μεθόδους για την επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων και τα αριθμητικά αποτελέσματα είναι πολύ κοντά στα θεωρητικά. Από αυτή την άποψη, η παρούσα μέθοδος μπορεί να λύσει μεγαλύτερα χωρικά προβλήματα και να συμπληρώσει της υπάρχουσες μεθόδους. Ο αριθμός των αγώγιμων διαδρομών καθώς και το μέσο μήκος τους αναλύθηκε και διαπιστώθηκε ότι και οι δύο ποσότητες υπακούουν στη σχέση κλιμάκωσης με συντελεστές περίπου 1.44 ± 0.01 και -0.25 ± 0.01 αντίστοιχα. Επίσης υπολογίστηκε η σχέση κλιμάκωσης του μέσου πλάτος ενός μονοπατιού να είναι περίπου ίση με -0.39 ± 0.01 .

Τα δύο εργαλεία προσομοίωσης, που αναφέρθηκαν επεκτάθηκαν προκειμένου να υπολογίζουν τις ηλεκτρικές - θερμικές ιδιότητες τυχαίων σύνθετων υλικών σε 2D και 3D ενσωματώνοντας διαφορετικές γεωμετρίες (ελλείψεις - παραλληλόγραμμα) πλήρωσης και εύρη επιφανειακών κλασμάτων καθώς και την δυνατότητα μοντελοποίησης του φαινομένου σήραγγας.

Περαιτέρω εργασία

Η θεωρία της διήθησης είναι ένας τομέας ο οποίος είναι σχετικά ώριμος δεδομένου ότι αναπτύσσεται για πάνω από 60 χρόνια, ένα πολύ μεγάλο πλήθος εργασιών και διατριβών έχει σαν θέμα την θεωρία διήθησης. Εν τούτοις με την παρούσα αναθεωρείται σημαντικά, τουλάχιστον όσο αφορά τον υπολογισμό των θερμικών και ηλεκτρικών ιδιοτήτων ενός σύνθετου υλικού, ο τρόπος υπολογισμού και γίνεται σαφές ότι οι μέσες τιμές που υπολογίζονται στην μικροδομή δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως αντιπροσωπευτικές του υλικού. Παρότι έγινε σημαντική εργασία, οι δυνατότητες της μεθόδου δεν έχουν εξαντληθεί δεδομένου του πολύ μεγάλου εύρους του πεδίου. Ενδεικτικά θα μπορούσαν να αναφερθούν ο υπολογισμός διαφόρων ιδιοτήτων ενός τυχαίου σύνθετου, πέρα από τις ηλεκτρικές και θερμικές, όπως π.χ. η διηλεκτρική σταθερά, η μαγνητική διαπερατότητα καθώς και ο συντελεστής διάχυσης όπου υφίστανται τέτοιες ιδιότητες σχετικά εύκολα διότι εντάσσονται στην ίδια κλάση προβλημάτων και ισχύει η φυσική της μεταφοράς. Επιπλέον ιδιότητες όπως οι ελαστικές ιδιότητες (μέτρο του Young) προϋποθέτουν την σύλληψη μια διαφορετικής φυσικής από αυτήν της αγωγής που ισχύει στις θερμικές, ηλεκτρικές ιδιότητες.

Σε υπολογιστικό επίπεδο θα μπορούσε ο κώδικας που προέκυψε από την παρούσα να βελτιωθεί ως προς την ταχύτητα με παραλληλισμό του

χρονοβόρου κώδικα.

ΒΙΟΓΡΑΦΙΚΟ ΣΗΜΕΙΩΜΑ

ΓΕΝΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ

ΟΝΟΜΑ: ΕΛΕΥΘΕΡΙΟΣ

ΕΠΩΝΥΜΟ: ΛΑΜΠΡΟΥ

ΠΑΤΡΩΝΥΜΟ: ΕΥΘΥΜΙΟΣ

ΤΟΠΟΣ ΓΕΝΝΗΣΗΣ: ΙΩΑΝΝΙΝΑ

ΤΟΠΟΣ ΚΑΤΟΙΚΙΑΣ: ΚΑΡΑΪΣΚΑΚΗ 14 ΣΤΑΥΡΑΚΙ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΕΤΟΣ ΓΕΝΝΗΣΗΣ: 1971

ΤΗΛΕΦΩΝΑ: ΟΙΚΙΑΣ:26510-42446

ΕΡΓΑΣΙΑΣ:26533-60113

e-mail:lef27064@otenet.gr, syzefxis@pogoni.gr

ΟΙΚΟΓΕΝΕΙΑΚΗ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗ: Εγγαμος με ένα τέκνο

ΣΠΟΥΔΕΣ

ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΕΣ

Πτυχίο Μηχανικού Ορυκτών Πόρων

Ίδρυμα αποφοίτησης :Πολυτεχνείο Κρήτης

Έτος κτήσης Πτυχίου: 1993

Βαθμός Πτυχίου 7.75

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΕΣ

Μεταπτυχιακό Δίπλωμα Ειδίκευσης του Πολυτεχνείου Κρήτης στο Τμήμα Μηχανικών Ορυκτών Πόρων. Έτος κτήσης Πτυχίου: 1995

Μεταπτυχιακή Εξειδίκευση στα Πληροφοριακά Συστήματα της Σχολής Θετικών επιστημών και τεχνολογίας του Ελληνικού Ανοικτού Πανεπιστημίου, Έτος κτήσης Πτυχίου: 2010, Βαθμός Διπλώματος 6.88

Υποψήφιος διδάκτωρ:

Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων: ΔΕΚ 2017-
Τίτλος «Ανάπτυξη μαθηματικών και υπολογιστικών μοντέλων για τη μελέτη συνθέτων και θερμοηλεκτρικών υλικών – δομών».

Ζμελής Επιτροπή:

Αναπληρωτής Καθηγητής Λεωνίδα Ν. Γεργίδης - Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων (ΤΜΕΥ), Καθηγητής Αλκιβιάδης Παϊπέτης - Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων (ΤΜΕΥ)
Καθηγητής, Αντώνιος Χαραλαμπίδης - Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο (ΣΕΜΦΕ).

ΚΑΤΑΡΤΗΣΗ

Πρόγραμμα Κατάρτισης και απόκτησης επαγγελματικής εμπειρίας Αποφοίτων ΑΕΙ και ΤΕΙ σε θέματα τοπικής ανάπτυξης και τοπικής Αυτοδιοίκησης συνολικής διάρκειας 2.264 ωρών με ημερομηνία ολοκλήρωσης 27/10/1999 που υλοποιήθηκε από την Ε.Ε.Τ.Α.Α. Α.Ε.

ΕΠΑΓΓΕΛΜΑΤΙΚΗ ΕΜΠΕΙΡΙΑ

Ως Μηχανικός στο Δήμο Καλπακίου και κατόπιν στον Δήμο Πωγωνίου δηλαδή από 2/3/2000 έως σήμερα με καθήκοντα: 1. Επίβλεψη έργων & μελετών από 2/3/2000 - 22/1/2016, 2. Υπεύθυνος μηχανοργάνωσης από 2/3/2000 - σήμερα, 3. Υπεύθυνος για θέματα του τμήματος Περιβάλλοντος

και Πολεοδομίας και του γραφείου Πολιτικής Προστασίας από 22/1/2016 - σήμερα .

ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ

Διεθνή & Εθνικά Συνέδρια με Κριτές

1. Exadaktylos, G., Agioutantis, Z. and Lambrou, E. (1994). Effect of the fracture process zone in directed crack propagation in borehole blasting, Proc. Eurock'94 ISRM International Conference, 29-31 August 1994, Balkema, Rotterdam, pp. 463-470.
2. Ε. Λάμπρου, Α. Ν. Γεργίδης, Α. Τζούνης, Γ. Καραλής, Α. Σ. Παϊπέτης (2019) Αριθμητική μοντελοποίηση θερμοηλεκτρικών συσκευών βασισμένες σε σύνθετα υλικά με ίνες άνθρακα για αποδοτική συγκομιδή ενέργειας 120 Πανελλήνιο Επιστημονικό Συνέδριο Χημικής Μηχανικής Αθήνα, 29-31 Μαΐου 2019.
3. Mytafides C., Tzounis L., Tsirka K., Karalis G., Koutsotolis L., Lambrou E., Gergidis L. N., Paipetis A. S., The Integration of a CNT-based Organic Thermoelectric Generator within a Carbon Fiber Reinforced Polymer Composite, 6th International Conference of Engineering Against Failure (ICEAF-VI) (2021).
4. Voudouris-Itskaras A., Karalis G., Koutsotolis L., Tsirka K., Lamprou E., Gergidis L. N., Paipetis A. S., Fiber reinforced polymer composites with self-powered sensing capabilities An experimental and simulation study, European Conference on Composite Materials (ECCM20), LausanneSwitzerland, July 2022.

Διεθνή Περιοδικά

1. George Karalis, Lazaros Tzounis, Eleftherios Lambrou, Leonidas N.Gergidis, Alkiviadis S. Paipetis (2019). A carbon fiber thermoelectric generator integrated as a lamina within an 8-ply laminate epoxy composite: Efficient thermal energy harvesting by advanced structural materials, *Applied Energy*.
2. G. Karalis, L. Tzounis, K. Tsirka, C. K. Mytafides, A. Voudouris Itskaras, M. Liebscher, E. Lambrou, L. N. Gergidis, N.-M. Barkoula, and A. S. Paipetis, "Advanced glass fiber polymer composite laminate operating as a thermoelectric generator: A structural device for micropower generation and potential largescale thermal energy harvesting," *ACS Applied Materials & Interfaces*, vol. 13, no. 20, pp. 24138–24153, 2021.
3. E. Lambrou and L. N. Gergidis, "A particle digitization-based computational method for continuum percolation," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 590, p. 126738, 2022.
4. C. K. Mytafides, L.Tzounis, K. Tsirka, G. Karalis, M. Liebscher, E. Lambrou, L. N. Gergidis and A. S. Paipetis, "A hierarchically modified fibre-reinforced polymer composite laminate with graphene nanotube coatings operating as an efficient thermoelectric generator" *Mater. Adv.*, 2024, DOI: 10.1039/D3MA01000G.
5. E. Lambrou and L. N. Gergidis, "A computational method for calculating the electrical and thermal properties of random composite" , *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Volume 642, 2024, 129760, ISSN 0378-4371, <https://doi.org/10.1016/j.physa.2024.129760>.

ΣΥΜΕΤΟΧΗ ΣΕ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΑ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ

1. Hierarchical management Control Christodoulou M. & Lambrou L. (1996b). Manufacturing algebra interface to neural networks. In Proc. 1st HIMAC WIS, A new math. approach to manufacturing eng. (Vallauri M. ed.), p.63-

81. CELID, Torino.

ΔΙΑΚΡΙΣΕΙΣ

Επιλαχούσα Πρόταση (βαθμολογία πάνω από 75%) στο Φοιτητικό Διαγωνισμό WeGov Awards 2010: Αναζήτηση κειμένου σε αρχεία εικόνων, Λάμπρου Ελευθέριος, Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο, Εξειδίκευση στα Πληροφοριακά συστήματα.

ΞΕΝΕΣ ΓΛΩΣΣΕΣ

Καλή Γνώση Αγγλικής

ΔΙΑΦΟΡΑ

Παρακολούθηση των εξής εκπαιδευτικών προγραμμάτων:

1. 02/02/2011 - 02/02/2011 ΕΝΗΜΕΡΩΣΗ ΚΑΙ ΚΑΤΑΡΤΙΣΗ ΕΡΓΑΖΟΜΕΝΩΝ ΣΤΗΝ ΑΥΤΟΔΙΟΙΚΗΣΗ Α ΚΑΙ Β ΒΑΘΜΟΥ ΓΙΑ ΤΗ ΝΕΑ ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΗ ΤΗΣ ΑΠΟΚΕΝΤΡΩΜΕΝΗΣ ΔΙΟΙΚΗΣΗΣ-ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΚΑΛΔΙΚΡΑΤΗΣ
2. 30/03/2011 - 01/04/2011 ΚΑΤΑΡΤΙΣΗ ΕΡΓΑΖΟΜΕΝΩΝ ΣΕ ΜΟΝΑΔΕΣ ΔΙΑΦΑΝΕΙΑΣ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗΣ ΔΙΑΚΥΒΕΡΝΗΣΗΣ
3. 18/06/2018 - 22/06/2018 ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΔΡΑΣΕΩΝ ΠΟΛΙΤΙΚΗΣ ΠΡΟΣΤΑΣΙΑΣ ΣΕ ΤΟΠΙΚΟ ΕΠΙΠΕΔΟ
4. 04/03/2020 - 06/03/2020 ΒΑΣΙΚΕΣ ΓΝΩΣΕΙΣ ΣΕ ΘΕΜΑΤΑ ΑΣΦΑΛΕΙΑΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΚΑΙ ΔΙΚΤΥΩΝ ΥΠΟΥΡΓΕΙΟΥ ΕΣΩΤΕΡΙΚΩΝ
5. 28/02/2023 - 02/03/2023 ΒΑΣΙΚΕΣ ΓΝΩΣΕΙΣ ΣΕ ΘΕΜΑΤΑ ΑΣΦΑΛΕΙΑΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΚΑΙ ΔΙΚΤΥΩΝ ΥΠΟΥΡΓΕΙΟΥ

ΕΣΩΤΕΡΙΚΩΝ

6. 18/10/2023 - 18/10/2023 ΠΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΕΠΑΓΓΕΛΜΑΤΙΚΗΣ ΕΠΑΡΚΕΙΑΣ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΤΗ ΚΙΝΔΥΝΩΝ (RISK MANAGER)(ΗΜΕΡΙΔΑ)

7. 07/02/2024 - 08/02/2024 MICROSOFT 365 FUNDAMENTALS (MS-900)

Συγγραφή των ανοικτών λογισμικών open source projects που συντηρούνται στην πλατφόρμα sourceforge:teli_dei Διαχείριση τελών ΔΕΗ για Ο.Τ.Α.
<https://sourceforge.net/projects/telidei/>.

Πρόγραμμα γέφυρα για παρουσίαση των οικονομικών δεδομένων του Δήμου Πωγωνίου (Έσοδα – Έξοδα) με ημερήσια ενημέρωση.

Παρουσίαση των στοιχείων : <http://www.pogoni.gr/reports/economics/> και ανανέωση των δεδομένων <https://sourceforge.net/projects/getdatafromserver/>.

ΠΡΟΣΘΕΤΕΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΕΣ

Άδεια ασκήσεως Μηχανικού Ορυκτών Πόρων. Χορηγήθηκε από το ΤΕΕ στις 13/06/1998.

Άδεια οδήγησης Β' κατηγορίας και Άδεια Οδήγησης Μοτοσυκλέτας χωρίς περιορισμό ισχύος ή κυβικών.