



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών
Τομέας Ρευστών
Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών
Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής &
Βελτιστοποίησης

**Ανάπτυξη μεθόδου σχεδιασμού δομής υλικού που συνδυάζει
εξελικτικούς αλγορίθμους με τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων.
Εφαρμογή στη βελτιστοποίηση βιο-εμπνευσμένων νανο-σύνθετων
ινών**

Εκτενής Περίληψη Διπλωματικής Εργασίας

Παναγιώτης Σιμάτος

Επιβλέπων: Κ. Χ. Γιαννάκογλου, Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, Οκτώβριος 2014



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών
Τομέας Ρευστών
Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών
Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής &

Ανάπτυξη μεθόδου σχεδιασμού δομής υλικού που συνδυάζει εξελικτικούς αλγορίθμους με τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων. Εφαρμογή στη βελτιστοποίηση βιο-εμπνευσμένων νανο-σύνθετων ινών

Παναγιώτης Σιμάτος

Επιβλέπων: Κ. Χ. Γιαννάκογλου, Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, Οκτώβριος 2014

Περίληψη

Εμπνευσμένοι από τις προηγμένες μηχανικές ιδιότητες του μεταξιού της αράχνης, σκοπός αυτής της διπλωματικής εργασίας είναι η βελτιστοποίηση της δομής ενός καινοτόμου, ελαφρύ, ανθεκτικού, βιο-εμπνευσμένου υλικού για χρήση στην αυτοκινητοβιομηχανία.

Ορισμένα dragline μετάξια του ιστού της αράχνης παρουσιάζουν εξαιρετικό συνδυασμό των μηχανικών ιδιοτήτων, όπως υψηλή αντοχή, ολκιμότητα και δυσθραυστότητα, που ξεπερνούν μερικά από τα καλύτερα βιομηχανικά υλικά. Η δομή του μεταξιού της αράχνης έχει διαπιστωθεί ως σύνθετο δύο διαφορετικών μερών, του δύσκαμπτου κρυσταλλικού και του αμόρφου το οποίο παρέχει την εκτασιμότητα της ίνας.

Η προσέγγιση αυτής της διπλωματικής εργασίας είναι η μοντελοποίηση των νέων υλικών χρησιμοποιώντας διακριτά δομικά στοιχεία για την περιγραφή των διαφορετικών φάσεων του υλικού. Αυτά τα δομικά στοιχεία συνεργάζονται ώστε να επιτευχθεί ένα συνολικό αποτέλεσμα που ξεπερνά τις ιδιότητες κάθε συστατικού χωριστά. Χρησιμοποιούνται Εξελικτικοί Αλγόριθμοι ως μέθοδοι βελτιστοποίησης σε συνδυασμό με πεπερασμένα στοιχεία ως μέθοδο αξιολόγησης. Στόχος είναι να υποδειχθεί μία μέθοδος σχεδιασμού, όπου ο εσωτερικός σχεδιασμός του υλικού βελτιστοποιείται αυτόματα για δεδομένα χαρακτηριστικά (υψηλή δυσκαμψία, υψηλή δυσθραυστότητα και ελάχιστο κόστος).

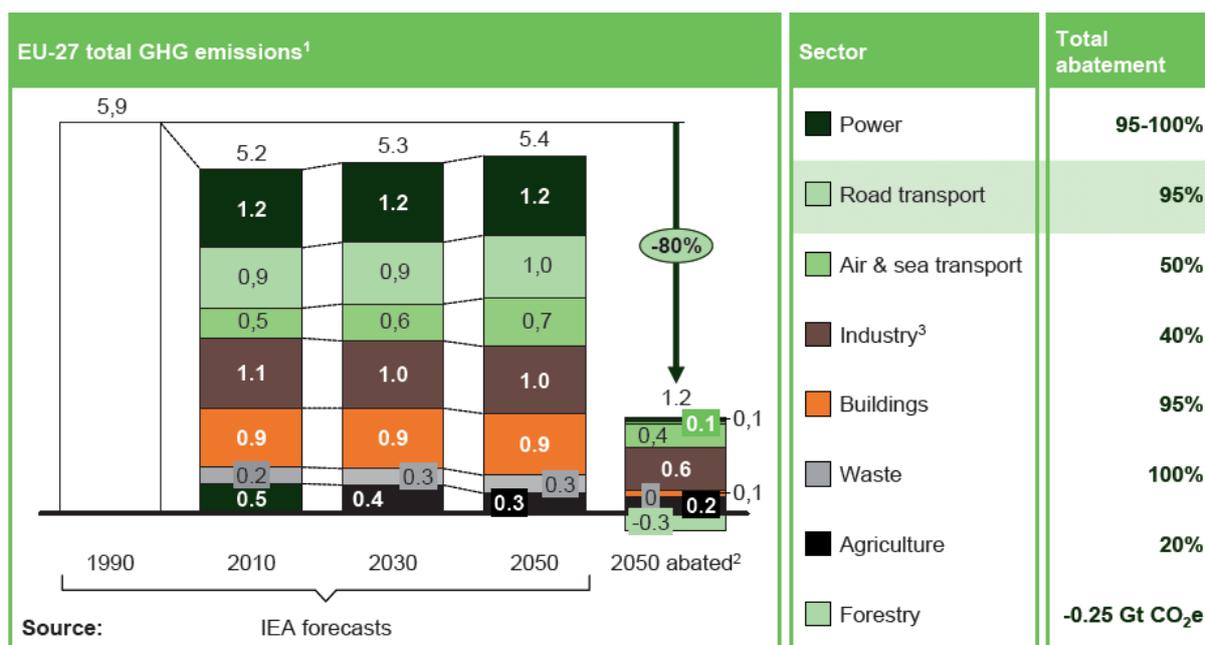
Η εργασία αυτή εκπονήθηκε στις εγκαταστάσεις της TOYOTA MOTOR EUROPE, στις Βρυξέλλες, κατά την εξάμηνη εκεί παραμονή μου, υπό την εκεί καθοδήγηση του Δρ. Κ. Γκαγκά, Senior Engineer, Dept. R&D Advanced Technology Division 2.

Πίνακας Περιεχομένων

ΠΕΡΙΛΗΨΗ	3
ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ	5
ΚΕΦΆΛΑΙΟ 1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ	6
ΚΕΦΆΛΑΙΟ 2. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΚΗ ΕΠΙΣΚΟΠΗΣΗ	10
2.1. ΥΛΙΚΑ	10
2.2. ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ	16
2.3. ΕΞΕΛΙΚΤΙΚΟΙ ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ	16
ΚΕΦΆΛΑΙΟ 3. ΜΕΘΟΔΟΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΤΟΥ ΥΛΙΚΟΥ	19
3.1. ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΟΥ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟΥ ΠΕΙΡΑΜΑΤΟΣ	19
3.2. ΤΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ ΤΗΣ ΙΝΑΣ	19
3.3. ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΩΝ ΣΥΝΙΣΤΩΣΩΝ ΤΗΣ ΙΝΑΣ	20
3.4. ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΠΛΕΓΜΑ	24
3.5. ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ	24
3.6. ΕΞΑΓΩΓΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ	25
3.7. ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ	25
ΚΕΦΆΛΑΙΟ 4. ΡΥΘΜΙΣΗ ΤΗΣ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑΣ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ	26
4.1. Η ΔΟΜΗ ΤΗΣ ΙΝΑΣ ΚΑΙ ΟΙ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΗΣ	26
4.2. ΑΝΕΞΑΡΤΗΣΙΑ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ	33
4.3. ΠΑΡΑΜΕΤΡΟΙ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ	36
ΚΕΦΆΛΑΙΟ 5. ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΤΗΣ ΙΝΑΣ	40
5.1. ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΤΗΣ ΤΟΠΟΛΟΓΙΑΣ ΤΩΝ ΚΡΥΣΤΑΛΛΩΝ	40
5.2. ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΤΩΝ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ	43
5.3. ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΤΟΥ ΚΟΣΤΟΥΣ ΥΛΙΚΩΝ	45
5.4. ΓΕΝΙΚΕΣ ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΕΙΣ ΣΧΕΤΙΚΑ ΜΕ ΤΙΣ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΕΙΣ ΠΟΥ ΕΚΤΕΛΕΣΤΗΚΑΝ	48
ΚΕΦΆΛΑΙΟ 6. ΤΡΙΔΙΑΣΤΑΤΟ (3Δ) ΜΟΝΤΕΛΟ	50
6.1. ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑ ΤΟΥ 3Δ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ	50
6.2. ΑΝΕΞΑΡΤΗΣΙΑ ΛΥΣΗΣ ΑΠΟ ΤΗΝ ΠΟΙΟΤΗΤΑ ΠΛΕΓΜΑΤΟΣ	51
6.3. ΟΙΚΕΙΟΣ ΠΛΕΓΜΑΤΟΠΟΙΗΤΗΣ	53
6.4. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΑ ΒΗΜΑΤΑ	55
ΚΕΦΆΛΑΙΟ 7. ΓΕΝΙΚΑ ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	56
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	58

Κεφάλαιο 1. Εισαγωγή

Το θέμα της υπερθέρμανσης του πλανήτη και η σχέση της με ανθρωπογενείς εκπομπές είναι ευρέως γνωστή. Το 2009, η Ευρωπαϊκή Ένωση και οι ηγέτες της G8 αποφάσισαν ότι οι εκπομπές CO₂ πρέπει να μειωθούν κατά 80% μέχρι το 2050 προκειμένου να σταθεροποιηθεί η συγκέντρωση των αερίων του θερμοκηπίου (GHG) στην ατμόσφαιρα στο επίπεδο των 450 ppm ισοδύναμου CO₂ και να διατηρηθεί η παγκόσμια αύξηση της θερμοκρασίας κάτω από 2°C. Οι μεταφορές ευθύνονται για το 1/5 της παγκόσμιας χρήσης της ενέργειας και το ¼ της ενέργειας που σχετίζονται με τις εκπομπές CO₂ (1). Για να επιτευχθούν οι αναγκαίες μειώσεις των αερίων του θερμοκηπίου μέχρι το 2050, οι μεταφορές διαδραματίζουν σημαντικό ρόλο. Το πλήθος αυτοκινήτων σε όλον τον κόσμο αναμένεται να τριπλασιαστεί σε άνω των δύο εκατομμυρίων μέχρι το 2050 και, χωρίς ισχυρή δράση σε παγκόσμιο επίπεδο, θα προκύψει και η αντίστοιχη αύξηση της χρήσης ενέργειας και των εκπομπών CO₂. (1) Το Σχήμα 1 παρουσιάζει την εκτίμηση για τις εκπομπές των αερίων του θερμοκηπίου στην Ευρώπη. (2).



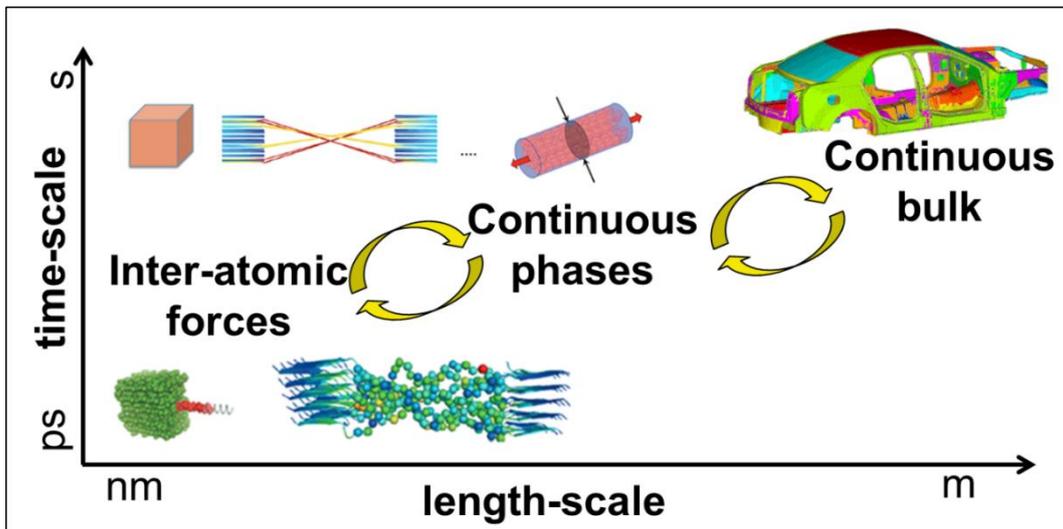
Σχήμα 1: EU Πρόγνωση συνολικών εκπομπών GHG για το 2050 και σύγκριση με τον στόχο.

Η μείωση του βάρους του αυτοκινήτου είναι ένας σημαντικός πυλώνας για την ελαχιστοποίηση των εκπομπών και της κατανάλωσης ενέργειας, καθώς 1% μείωση στο βάρος αντιστοιχεί σε ~0.65% βελτίωση στην κατανάλωση καυσίμου. (3). Ωστόσο, η τρέχουσα έρευνα στα υλικά βρίσκεται σε συμβιβασμό μεταξύ απόδοσης και κόστους. Συνεπώς, θα ήταν πολύ ωφέλιμη η νέα μεθοδολογία σχεδιασμού η οποία θα μπορούσε να ξεπεράσει αυτόν τον συμβιβασμό και να προσφέρει νέα φτηνά και ελαφρά υλικά για καθημερινή χρήση στα αυτοκίνητα.

Επί του παρόντος, ο χάλυβας είναι το κυρίαρχο υλικό το οποίο χρησιμοποιείται στη βιομηχανία. Η τεχνολογία υλικών αναπτύσσεται σταθερά τα τελευταία χρόνια. Έχουν αναπτυχθεί νέα σύνθετα υλικά τα οποία συνδυάζουν την αντοχή με πολύ μικρότερο βάρος από αυτό του χάλυβα. Τα σύνθετα αποτελούνται από ένα μίγμα διαφόρων υλικών τα οποία συνήθως περιλαμβάνουν ισχυρά αλλά ελαφρά υλικά όπως το τιτάνιο, το αλουμίνιο, ο υαλοβάμβακας και τα ανθρακονήματα. Το κόστος παραγωγής αυτών των νέων υλικών είναι γενικά σημαντικότερο σε σχέση με τα κράματα μετάλλων και πλαστικών. Ωστόσο, τα σύνθετα έχουν το πλεονέκτημα ότι συνδυάζουν χαμηλό βάρος με υψηλή αντοχή. Η χρήση τους εξακολουθεί να στοχεύει κυρίως στην παραγωγή των αεροσκαφών ή ορισμένων τμημάτων αυτοκινήτων πολυτελείας. (4)

Αναζητώντας έμπνευση στη φύση, παρατηρήθηκαν οι εντυπωσιακές ιδιότητες των διαφόρων βιοϋλικών, όπως το μετάξι της αράχνης. Το μετάξι της αράχνης μπορεί να απορροφήσει 30 φορές μεγαλύτερη ενέργεια πριν τη θραύση και είναι 6 φορές ελαφρύτερο σε σχέση με τον χάλυβα. Προκειμένου να εξηγηθεί πως αυτές οι ιδιότητες λαμβάνονται από τις πρωτεΐνες, έχουν αναπτυχθεί αναλύσεις ατομικής κλίμακας, χρησιμοποιώντας εργαλεία προσομοίωσης σε νανο-κλίμακα, όπως Molecular Dynamics (MD). Πειράματα και προσομοιώσεις με MD έχουν ανακαλύψει την πολύπλοκη, ιεραρχική, νανο-σύνθετη δομή των φυσικών υλικών.

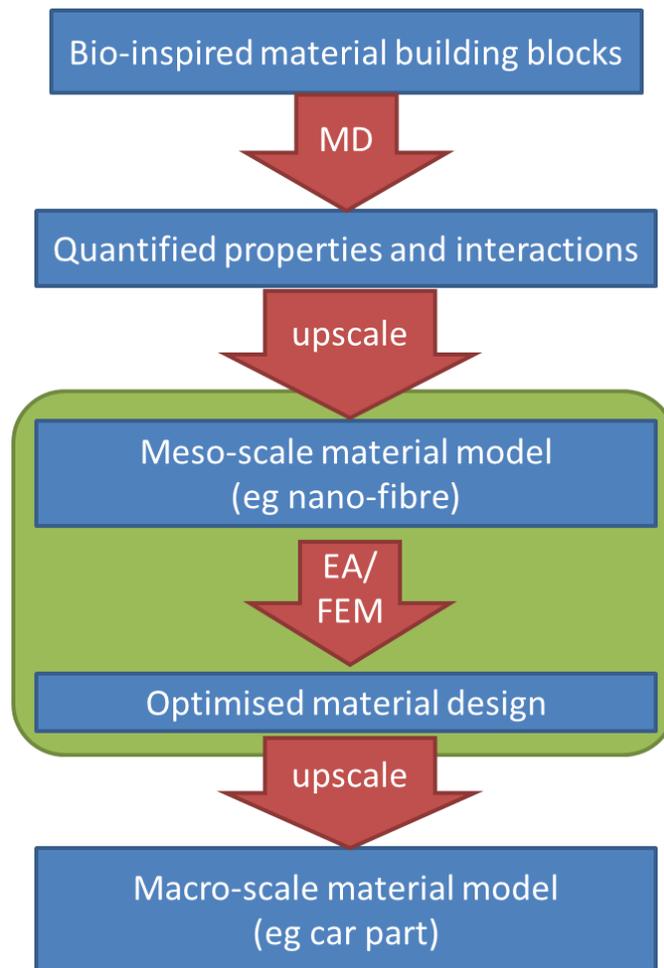
Προκειμένου να εφαρμοστούν οι πολύπλοκοι μηχανισμοί της φύσης σε εφαρμογές αυτοκινήτων, ο σχεδιασμός σε νανο-κλίμακα πρέπει να μεταφερθεί σε μη-βιολογικά υλικά, όπως σύνθετα πολυμερή. Για τον σκοπό αυτό, είναι απαραίτητη μία μεθοδολογία η οποία συνδυάζει τις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής (ΜΔ - MD) και πεπερασμένων στοιχείων (FEM). Οι προσομοιώσεις ΜΔ παρέχουν ακριβή αναπαράσταση των ενδο-ατομικών δυνάμεων σε νανο-κλίμακα και επιτρέπει την εφαρμογή των φυσικοχημικών τους νόμων που ελέγχουν την συμπεριφορά του υλικού. Τα αποτελέσματα αυτών των προσομοιώσεων μπορούν, στη συνέχεια, να εφαρμοστούν σε μεγαλύτερη κλίμακα, σε μοντέλα πεπερασμένων στοιχείων κατά το σχεδιασμό πραγματικών εξαρτημάτων αυτοκινήτων. Μία τέτοια διεργασία παρουσιάζεται σχηματικά στο Σχήμα 2.



Σχήμα 2: Προσομοίωση πολλαπλών μεγεθών.

Οι προσομοιώσεις που βασίζονται στη ΜΔ χρησιμοποιούν χιλιάδες διακριτά άτομα για την υλική αναπαράσταση. Ως αποτέλεσμα, παρέχουν ακριβή υπολογισμό των μοριακών δυνάμεων, αλλά είναι συνήθως πολύ ακριβές σε υπολογιστικό κόστος. Από την άλλη πλευρά, η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων αντιπροσωπεύει το υλικό ως συνεχές με δεδομένες ιδιότητες. Μία τέτοια αναπαράσταση επιτρέπει την προσομοίωση σε μεγαλύτερες κλίμακες μήκους και μικρότερο υπολογιστικό κόστος, γεγονός που εξηγεί την ευρεία χρήση τους σε μηχανικά προβλήματα.

Η πλήρης μεθοδολογία σχεδιασμού παρουσιάζεται σχηματικά στο Σχήμα 3. Η παρούσα εργασία επικεντρώνεται στην επισημασμένη περιοχή που ασχολείται με τον σχεδιασμό των νανο-συνθέτων ινών σε μέση κλίμακα. Χρησιμοποιώντας Εξελικτικούς Αλγόριθμους ως εργαλείο αξιολόγησης, βελτιστοποιείται αυτόματα η εσωτερική διαρρύθμιση του υλικού ως προς τις επιθυμητές ιδιότητες.



Σχήμα 3: Μεθοδολογία σχεδιασμού ενός υλικού.

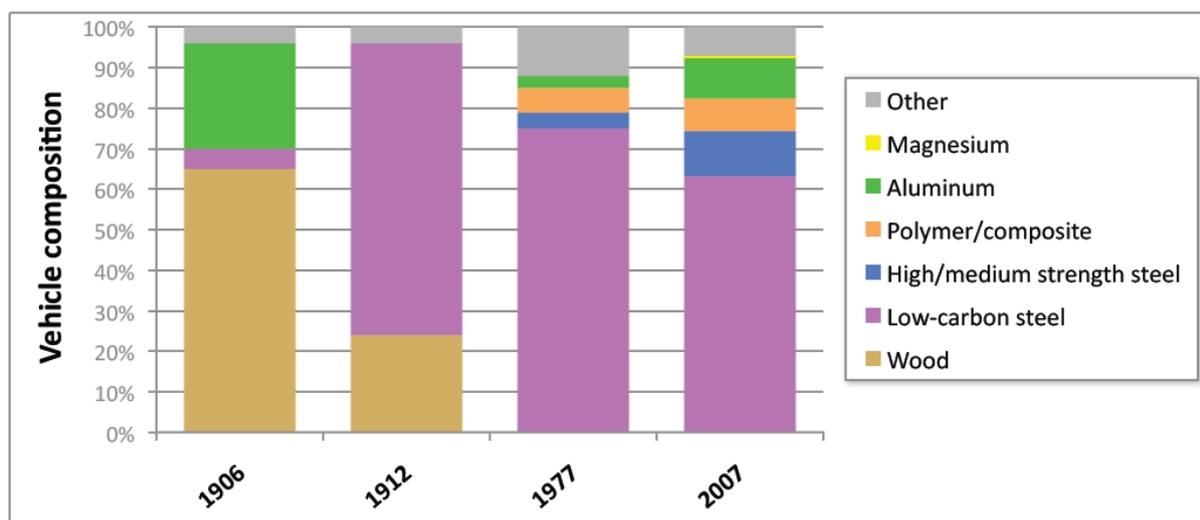
Η διπλωματική εργασία δομείται ως εξής. Στο Κεφάλαιο 2, περιέχεται μία σύντομη επισκόπηση των υλικών μηχανικής και μελετώνται ορισμένα παραδείγματα βιοϋλικών και μηχανικής. Τέλος, παρέχεται μία σύντομη επισκόπηση των αριθμητικών μεθόδων που χρησιμοποιούνται σε αυτήν την εργασία. Στο Κεφάλαιο 3, παρουσιάζεται ο τρόπος σχεδιασμού του υλικού, με βάση το 2D μοντέλο της ίνας. Στο Κεφάλαιο 4, αξιολογείται το μοντέλο της ίνας και ρυθμίζονται ανάλογα οι αριθμητικές μέθοδοι. Στο Κεφάλαιο 5 πραγματοποιούνται αρκετές μελέτες βελτιστοποίησης για την παραγωγή και τον σχεδιασμό των νανο-συνθέτων υλικών. Στο Κεφάλαιο 6, παρουσιάζεται ένα μοντέλο 3D ίνας και συζητούνται οι προκλήσεις της επέκτασης του σχεδιασμού στις τρεις διαστάσεις. Τέλος, στο Κεφάλαιο 7, συνοψίζεται η τρέχουσα εργασία και παρέχονται ορισμένες προτάσεις για τα επόμενα βήματα.

Κεφάλαιο 2. Βιβλιογραφική επισκόπηση

Προκειμένου να επιτευχθεί ο σχεδιασμός των νέων υλικών, είναι σημαντική η κατανόηση των μηχανισμών της φύσης και των αριθμητικών μεθόδων που εμπλέκονται. Για τον σκοπό αυτό, σε αυτό το κεφάλαιο, συνοψίζονται οι βασικές αρχές της μηχανικής των υλικών μαζί με μερικά παραδείγματα υλικών που μπορούν να αποτελέσουν πηγή έμπνευσης. Επιπλέον, παρουσιάζεται σύντομη εισαγωγή στη μοντελοποίηση με πεπερασμένα στοιχεία και θεωρία Εξελικτικών Αλγορίθμων.

2.1. Υλικά

Το Σχήμα 4 παρουσιάζει την ιστορική εξέλιξη των χρησιμοποιούμενων υλικών για τα αυτοκίνητα. Είναι προφανές ότι το κύριο υλικό που χρησιμοποιείται στην κατασκευή του οχήματος ήταν και παραμένει ο χάλυβας, ο οποίος προτιμάται για την υψηλή δύναμη και αντοχή του σε συνδυασμό με το χαμηλό κόστος. Με την εξέλιξη των υλικών και τη δέσμευση των αυτοκινητοβιομηχανιών για την αύξηση της απόδοσης των οχημάτων, ελαφρύτερα και ανθεκτικότερα υλικά, όπως κράμα υψηλής αντοχής, αλουμίνιο, πολυμερή και σύνθετα υλικά (5) έχουν αντικαταστήσει σταδιακά ένα μέρος από τον χάλυβα χαμηλής περιεκτικότητας σε άνθρακα. Ωστόσο, ο χάλυβας παραμένει το κυρίαρχο υλικό που χρησιμοποιείται στα αυτοκίνητα.



Σχήμα 4: Ιστορική μεταβολή στη σύνθεση στων οχημάτων κατά μάζα. (5)

2.1.1. Οι ιδιότητες των υλικών

Για την αυτοκινητοβιομηχανία, οι πιο σημαντικοί παράγοντες που αφορούν τα υλικά είναι πάνω από όλα η ασφάλεια και η αντοχή στις συγκρούσεις και, στη συνέχεια, το βάρος και το κόστος. Έτσι, για τη σύγκριση διαφορετικών υλικών, είναι σημαντικό να μελετήσουμε τις ιδιότητές τους.

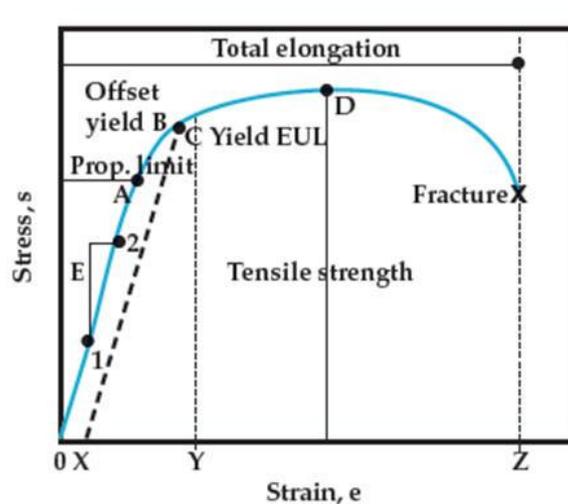
Σε αυτό το σημείο, γίνεται μια σύντομη ανάλυση των πιο σημαντικών, σχετικών με αυτήν την εργασία, ιδιοτήτων των υλικών και, επίσης, γίνεται μια σύντομη επισκόπηση μερικών

ενδιαφερόντων υλικών. Σε αυτήν την περίληψη, περιγράφονται μόνο οι ιδιότητες που θα χρησιμοποιούν ως στόχοι της βελτιστοποίησης.

2.1.1.1. Καμπύλη τάσεων παραμορφώσεων (stress-strain curve)

Υποθέτοντας ότι ένα δείγμα τοποθετείται σε μηχανή δοκιμής εφελκυσμού-συμπίεσης, καθώς το αξονικό φορτίο αυξάνεται βηματικά, μετράται το συνολικό μήκος (L) σε κάθε αύξηση του φορτίου και αυτό συνεχίζεται μέχρις ότου να σπάσει το δείγμα. Γνωρίζοντας το αρχικό εμβαδόν διατομής (A_0) και το μήκος του δείγματος (l_0), μπορεί να υπολογιστεί η τάση (σ) και η παραμόρφωση (ϵ). Η γραφική παράσταση των ποσοτήτων αυτών με την τάση (σ) κατά μήκος του άξονα y και τη παραμόρφωση (ϵ) κατά μήκος του άξονα x καλείται διάγραμμα τάσεων-παραμορφώσεων. Ένα τέτοιο τυπικό διάγραμμα για ένα δείγμα μετάλλου παρουσιάζεται στο Σχήμα 5. Το διάγραμμα τάσεων-παραμορφώσεων μπορεί να διαφέρει σε μορφή για διαφορετικά υλικά.

Η καμπύλη τάσεων-παραμορφώσεων ενός υλικού είναι μια ανεκτίμητη βοήθεια για την περιγραφή της μηχανικής συμπεριφοράς του. Η καμπύλη τάσεων-παραμορφώσεων θα χρησιμοποιηθεί εκτενώς, ώστε να υπολογιστούν οι επιθυμητές ιδιότητες των δοκιμών.



Σχήμα 5: Καμπύλη τάσεων-παραμορφώσεων. (6)

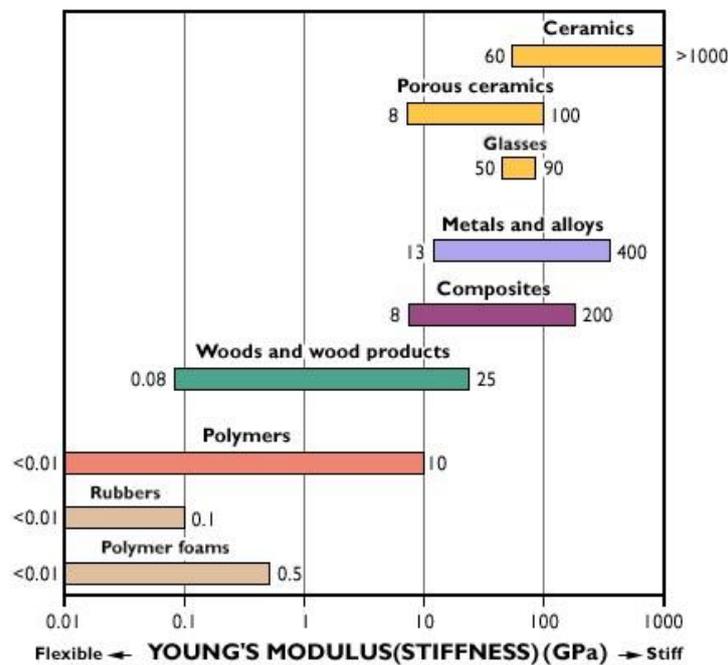
2.1.1.2. Δυσκαμψία (Stiffness)

Η δυσκαμψία υποδηλώνει την ακαμψία ενός αντικειμένου, δηλαδή τον βαθμό στον οποίο ανθίσταται στην παραμόρφωση κατά την εφαρμογή δύναμης. Το μέτρο ελαστικότητας Young μετρά την αντίσταση ενός υλικού σε ελαστική παραμόρφωση υπό αξονικό φορτίο. Τυπικές τιμές του μέτρου ελαστικότητας Young για αρκετές οικογένειες υλικού φαίνεται στο Σχήμα 6.

$$E \equiv \frac{\text{τάση εφελκυσμού}}{\text{παραμόρφωση}} = \frac{\sigma}{\varepsilon} \quad (2-1)$$

Ένα σκληρό υλικό έχει υψηλό μέτρο ελαστικότητας Young και δεν αλλάζει το σχήμα του σημαντικά κάτω από ελαστικά φορτία (π.χ. διαμάντια). Ένα εύκαμπτο υλικό έχει χαμηλότερο μέτρο ελαστικότητας Young και αλλάζει σημαντικά το σχήμα του (π.χ. λάστιχα).

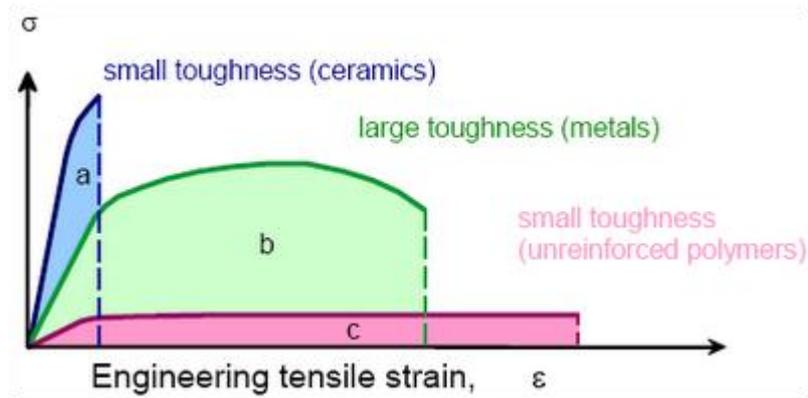
Σε εφαρμογές μεταφορών, η υψηλή ακαμψία σε συνδυασμό με το χαμηλό βάρος είναι σημαντική και για αυτό, είναι επιθυμητά υλικά με μεγάλη ειδική δυσκαμψία. Σε αυτήν την εργασία, η μέγιστη δυσκαμψία θα είναι ένας από τους στόχους σχεδιασμού.



Σχήμα 6: Διάγραμμα δυσκαμψίας για διάφορες οικογένειες υλικών. (7)

2.1.1.3. Δυσθραυστότητα (Toughness)

Δυσθραυστότητα είναι η ικανότητα ενός υλικού να απορροφά ενέργεια και να παραμορφώνεται πλαστικά χωρίς θραύση. Αντιστοιχεί στο ποσό της ενέργειας ανά όγκο που ένα υλικό μπορεί να απορροφήσει πριν τη θραύση.

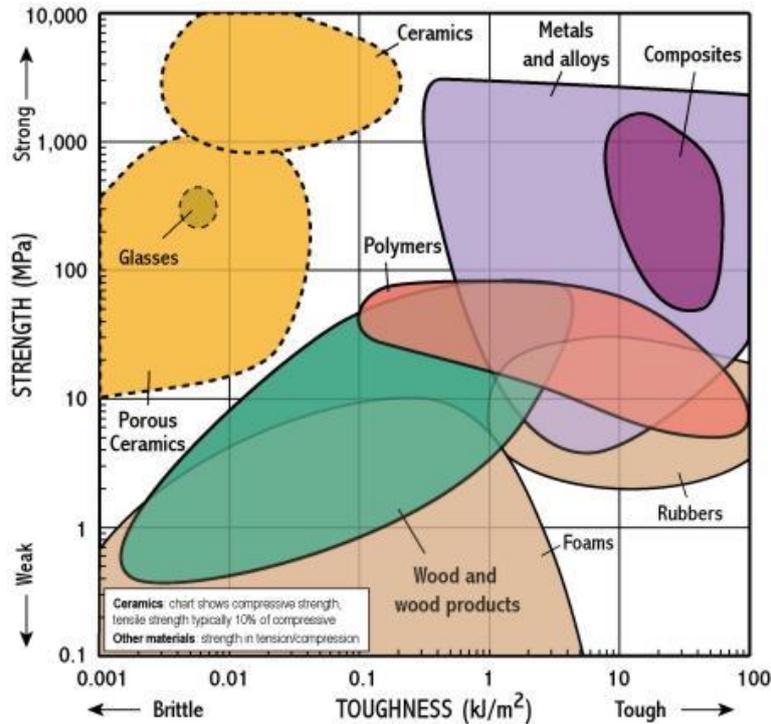


Σχήμα 7: Η καμπύλη τάσεων-παραμορφώσεων για τρία διαφορετικά υλικά. Το εμβαδό κάτω από τις καμπύλες αντιστοιχεί στην δυσθραυστότητα. (7)

$$\Delta\text{υσθραυστότητα} = \frac{\text{Ενέργεια}}{\text{Όγκος}} = \int_0^{\epsilon_f} \sigma \, d\epsilon \quad (2-2)$$

Όπως φαίνεται στο Σχήμα 7, η υψηλή δυσθραυστότητα απαιτεί συνδυασμό αντοχής και ολκιμότητας. Για παράδειγμα, εύθραυστα υλικά (όπως κεραμικά) τα οποία έχουν υψηλή δυσκαμψία, αλλά περιορισμένη ολκιμότητα δεν έχουν μεγάλη δυσθραυστότητα. Από την άλλη πλευρά, πολύ όλκιμα υλικά, με χαμηλή αντοχή (όπως πολυμερή) επίσης δεν έχουν υψηλή δυσθραυστότητα. Ως εκ τούτου, υψηλή δυσθραυστότητα και υψηλή δυσκαμψία είναι δύο αντικρουόμενοι στόχοι.

Η υψηλή δυσθραυστότητα είναι ιδιαίτερα σημαντική για τα εξαρτήματα που ενδέχεται να συμμετάσχουν σε συγκρούσεις (αυτοκίνητα, ποδήλατα), ή για κατασκευαστικά στοιχεία, όπου η θραύση μπορεί να είναι καταστροφική (δοχεία πίεσης, αεροσκάφη). Εδώ, η μέγιστη δυσθραυστότητα θα είναι επίσης ένας από τους στόχους σχεδιασμού

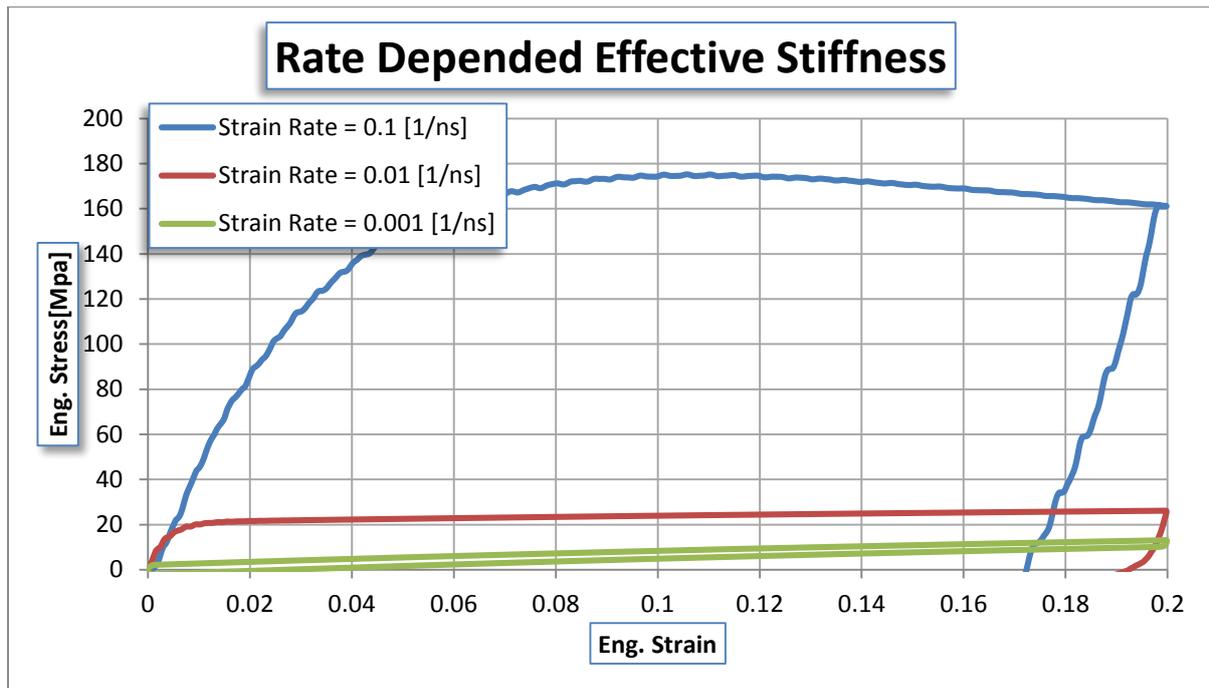


Σχήμα 8: Διάγραμμα δύναμης-δυσθραυστότητας για διαφορετικούς τύπους υλικών. (7)

2.1.1.4. Ξωδοελαστικότητα (*viscoelasticity*)

Ιξωδοελαστικότητα είναι η ιδιοκτησία των υλικών που παρουσιάζουν τόσο ιξώδη, όσο και ελαστική συμπεριφορά, όταν υποβάλλονται σε παραμόρφωση. Τα συνθετικά πολυμερή, το ξύλο και ο ανθρώπινος ιστός, καθώς και τα μέταλλα σε υψηλή θερμοκρασία εμφανίζουν σημαντικές ιξωδοελαστικές επιδράσεις. (8)

Μερικές από τις ιδιότητες ενός ιξωδοελαστικού υλικού είναι ότι η δυσκαμψία εξαρτάται από τον ρυθμό παραμόρφωσης, (Σχήμα 9). Υψηλότερος ρυθμός παραμόρφωσης οδηγεί σε υψηλότερες τάσεις. Επίσης, εάν εφαρμοστεί κυκλικό φορτίο, εμφανίζεται υστέρηση στην καμπύλη τάσεων-παραμορφώσεων, οδηγώντας σε διάχυση της μηχανικής ενέργειας.



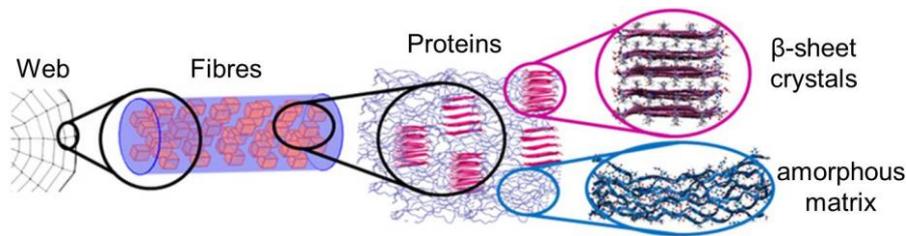
Σχήμα 9: Οι καμπύλες τάσης-παραμόρφωσης ενός ιξωδοελαστικού υλικού για διαφορετικές σταθερές ρυθμού παραμόρφωσης. Οι υψηλότερες τάσεις αντιστοιχούν σε υψηλότερο ρυθμό παραμόρφωσης. Η περιοχή στο εσωτερικό του βρόχου υστέρησης είναι η ενέργεια που καταναλώνεται λόγω εσωτερικών τριβών

2.1.2. Μετάξι της αράχνης

Το μετάξι της αράχνης είναι ένα βιοϋλικό με αξιοσημείωτες μηχανικές ιδιότητες. Η αράχνη *araneus diadematus* έχει έως και επτά διαφορετικά ζεύγη αδένων, όπου το καθένα παράγει μετάξι για συγκεκριμένο σκοπό και με μοναδικές μηχανικές ιδιότητες. Το ισχυρότερο μεταξύ αυτών, το dragline μετάξι, είναι ένα από τα πιο σκληρά υλικά που είναι γνωστά στον άνθρωπο. Το dragline μετάξι χρησιμοποιείται για το πλαίσιο του ιστού καθώς επίσης και τις ακτίνες. Έχει ημι-κρυσταλλική δομή που αποτελείται από μία κρυσταλλική περιοχή τμημάτων πολυαλανίνης, τα οποία σχηματίζουν άκαμπτα β-sheet νανο-κρυστάλλους που περιβάλλονται από την άμορφη, πλούσια σε γλυκίνη περιοχή, οι οποία παρέχει την εκτασιμότητα της ίνας. Αυτή η δομή παρουσιάζεται σχηματικά στο Σχήμα 10.

Το μετάξι της αράχνης είναι ένα βιοϋλικό με ασυνήθιστο συνδυασμό χαμηλής πυκνότητας, υψηλής δυσκαμψίας, δυσθραυστότητας και εκτατότητας. Τυπικές τιμές των μηχανικών ιδιοτήτων της είναι:

- Πυκνότητα = 1.3 g/cm^3 (ένα έκτο του χάλυβα)
- Εκτασιμότητα = 0.27
- Μέτρο ελαστικότητας Young - $E = 10 \text{ GPa}$ (παρόμοιο με σχετικά μαλακά μέταλλα και κράματα μετάλλων)
- Όριο διαρροής = 1 GPa (συγκρίσιμο με χάλυβα υψηλής αντοχής)
- Δυσθραυστότητα = 160 MJ/m^3 (τριπλάσιο του kevlar)



Σχήμα 10: Ιεραρχική δομή της ίνας του μεταξιού της αράχνης.

2.2. Μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων

Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων είναι μια αριθμητική τεχνική που δίνει λύσεις σε προβλήματα που προκύπτουν στο πεδίο της φυσικής και της μηχανικής με αριθμητική επίλυση συστημάτων διαφορικών εξισώσεων. Η μέθοδος χρησιμοποιείται για την επίλυση ενός ευρέος φάσματος προβλημάτων και επιτρέπει στο φυσικό πεδίο να μοντελοποιηθεί άμεσα με τη χρήση πλεγμάτων, τα οποία βασίζονται συνήθως σε τριγωνικά ή τετραπλευρικά στις δύο διαστάσεις και σε τετράεδρα ή εξάεδρα στις τρεις διαστάσεις. Σε κάθε πεπερασμένο στοιχείο, οι άγνωστες μεταβλητές (π.χ., θερμοκρασία, ταχύτητα, κλπ) προσεγγίζονται με τη χρήση συναρτήσεων βάσης. Αυτές οι συναρτήσεις μπορεί να είναι γραμμικές ή ανώτερης τάξης πολυωνυμικές εκφράσεις.

Η ποσοτική εκτίμηση του βαθμού της απλούστευσης και του σφάλματος διακριτοποίησης του μοντέλου πεπερασμένων στοιχείων χρησιμοποιώντας δοκιμές σύγκλισης, μελέτες ευαισθησίας και αξιοπιστίας, αποτελεί απαραίτητη προϋπόθεση προκειμένου να εξασφαλιστεί η αξιοπιστία του μοντέλου. (9)

2.3. Εξελικτικοί Αλγόριθμοι

Οι Εξελικτικοί Αλγόριθμοι (EA) είναι στοχαστικές μέθοδοι βελτιστοποίησης που βασίζονται στις αρχές που απορρέουν από τη φυσική εξέλιξη, όπως η αναπαραγωγή και η μετάλλαξη. Σε μία τέτοια μέθοδο, ένας πληθυσμός ατόμων χρησιμοποιείται για να αναπαραστήσει τις υποψήφιες λύσεις σε ένα δεδομένο χώρο αναζήτησης. Η εξέλιξη του πληθυσμού λαμβάνει χώρα μετά την επανειλημμένη εφαρμογή των εξελικτικών τελεστών με στόχο την οδήγηση ενός πληθυσμού υποψήφιων λύσεων προς καλύτερες περιοχές του χώρου αναζήτησης, (10).

Μερικά χαρακτηριστικά των EA είναι:

- Η εξέλιξη του πληθυσμού καθορίζεται από τις τιμές ενός ή περισσότερων αντικειμενικών συναρτήσεων.
- Η δυναμική διαδοχή των πληθυσμών γίνεται με τη δημιουργία και τη διαγραφή των ατόμων με βάση την τιμή της αντικειμενικής τους αξίας.
- Κατά τη διάρκεια της εξέλιξης, χαρακτηριστικά του πληθυσμού των γονέων κληροδοτούνται στους απογόνους ενώ νέα χαρακτηριστικά μπορούν να εμφανιστούν στοχαστικά.

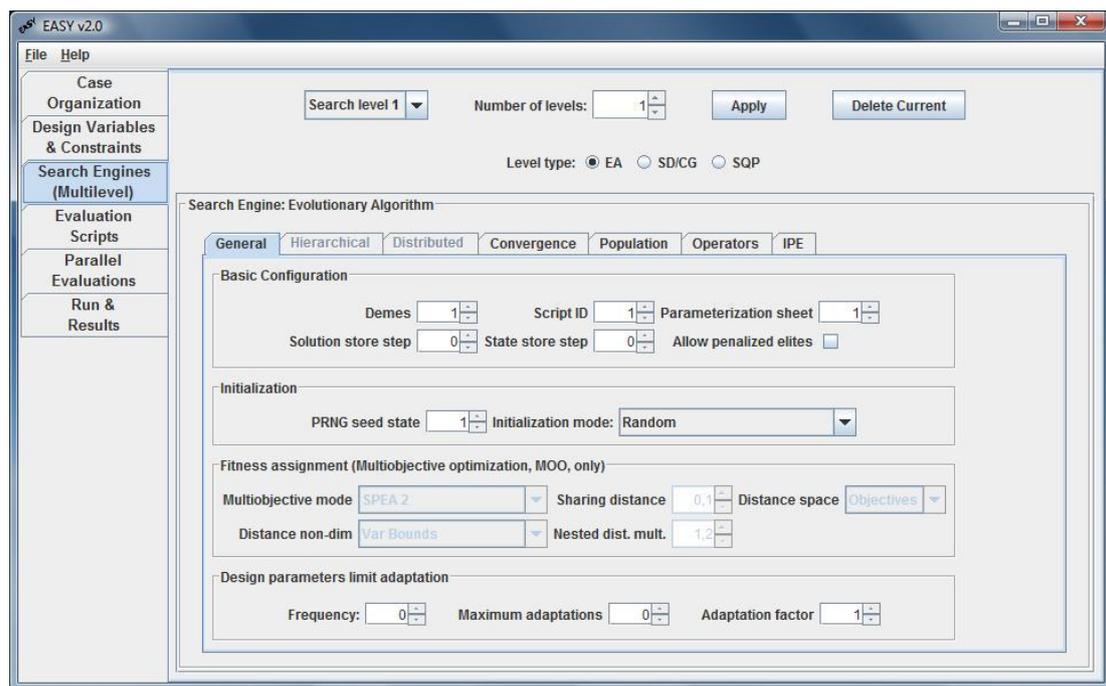
Ένα βασικό μειονέκτημα των EA είναι ο μεγάλος αριθμός των αξιολογήσεων που συνήθως απαιτούνται για τον προσδιορισμό της βέλτιστης λύσης. Αυτό είναι ιδιαίτερα ενοχλητικό

όταν η αξιολόγηση είναι χρονοβόρα, όπως στην περίπτωση των πεπερασμένων στοιχείων της παρούσης μελέτης.

Οι ΕΑ ξεκινούν δημιουργώντας τυχαία έναν αριθμό ατόμων (πληθυσμός εκκίνησης). Μέσω του λογισμικού αξιολόγησης, καθένα από τα αρχικά άτομα συνδέεται με τη δική του αντικειμενική τιμή κόστους. Όσο δεν πληρούνται τα κριτήρια βελτιστοποίησης, δημιουργούνται διαρκώς νέες γενιές. Τα άτομα επιλέγονται ανάλογα με την καταλληλότητά τους, για την παραγωγή απογόνων μέσω διασταύρωσης και μετάλλαξης. Στη συνέχεια υπολογίζεται η τιμή κόστους των απογόνων. Οι καλύτεροι απόγονοι επιλέγονται ως νέοι γονείς, παράγοντας μια νέα γενιά, και αυτό συνεχίζει μέχρι να ικανοποιηθούν τα κριτήρια βελτιστοποίησης. (11)

2.3.1. EASY

Ο EASY, Evolutionary Algorithms SYstem (11), είναι ένα λογισμικό που αναπτύχθηκε από τη Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής & Βελτιστοποίησης (12) του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου (ΕΜΠ). Το λογισμικό EASY είναι ένα λογισμικό γενικής χρήσεως, για την αναζήτηση των βέλτιστων λύσεων σε προβλήματα ενός ή περισσότερων στόχων.



Σχήμα 11: Panel από το γραφικό περιβάλλον του EASY. (11)

Το λογισμικό EASY προσφέρει μία πληθώρα επιλογών όπως η χρήση μεταπροτύπων (λ.χ. τεχνητά νευρωνικά δίκτυα ή άλλες μέθοδοι παρεμβολής) συνδεδεμένα με την εξέλιξη (online training), όπου τα μεταπρότυπα εκπαιδεύονται κατά την διάρκεια της διαδικασίας βελτιστοποίησης (13), (14), (15). Η διαδικασία συντομεύεται με προσεγγιστική προ-αξιολόγηση (ΠΠΑ – ΙΡΕ), όπου οι (λίγες) καλύτερες λύσεις (απόγονοι) κάθε γενιάς υπολογίζονται με τη χρήση των μεταπροτύπων, στη συνέχεια κατατάσσονται σε φθίνουσα σειρά καταλληλότητας και οι καλύτερες λύσεις επαναξιολογούνται με το ακριβές λογισμικό.

Επίσης προσφέρει Ιεραχικούς ΕΑ, ή αλγόριθμους πολυεπίπεδης αξιολόγησης, όπου στο υψηλότερο επίπεδο χρησιμοποιείται το καλύτερης ακρίβειας λογισμικό αξιολόγησης, αλλά και ακριβότερο σε κόστος CPU, ενώ στα χαμηλότερα επίπεδα χρησιμοποιείται λογισμικό αξιολόγησης μικρότερης ακρίβειας αλλά και χαμηλότερου κόστους CPU ώστε να αναζητήσει οικονομικότερα τις πιθανές υποσχόμενες λύσεις και να τροφοδοτήσει με αυτές τα υψηλότερα επίπεδα, (16), (17). Επίσης, προσφέρει τη χρήση ασύγχρονων ΕΑ, όπου ελέγχοντας αλληλοκαλυπτόμενους δήμους, κάνουν βέλτιστη χρήση πολυεπεξεργαστικών συστημάτων, ώστε να παραμένουν όλες οι CPU πλήρως απασχολημένες καθόλη τη διάρκεια της βελτιστοποίησης, (18), (19).

Αυτή η διπλωματική εργασία θα κάνει βελτιστοποίηση με χρήση Εξελικτικών Αλγόριθμων και συγκεκριμένα με το λογισμικό EASY.

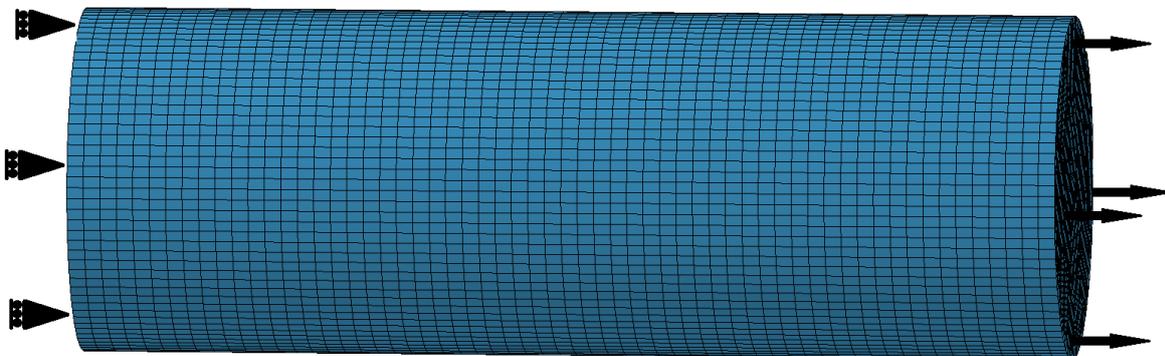
Κεφάλαιο 3. Μέθοδος σχεδιασμού του υλικού

Αναπτύχθηκε μέθοδος προκειμένου να επιτευχθεί ο σχεδιασμός ενός νέου υλικού, ελέγχοντας τη νάνο-δομή του. Όπως επισημάνθηκε στις προηγούμενες παραγράφους, επιλέχθηκε η δομή του ιστού της αράχνης ως αφετηρία για τον σχεδιασμό. Εκτιμήθηκαν οι μηχανικές ιδιότητες του υλικού με τη χρήση πεπερασμένων στοιχείων ενώ η διαδικασία σχεδιασμού έγινε με τη χρήση ΕΑ. Σε αυτό το κεφάλαιο περιγράφεται η μέθοδος σχεδιασμού.

3.1. Περιγραφή του υπολογιστικού πειράματος

Όπως επισημάνθηκε στην Ενότητα 2.1, ως συναρτήσεις καταλληλότητας επιλέχθηκαν η μεγιστοποίηση της δυσκαμψίας και η μεγιστοποίηση της δυσθραυστότητας. Προκειμένου να γίνει ο υπολογισμός τους, δοκιμάστηκε η ίνα σε δοκιμή σε εφελκυσμό. Κατά τη δοκιμή σε εφελκυσμό το δοκίμιο υφίσταται φόρτιση σε μονοαξονικό προοδευτικά αυξανόμενο φορτίο, μέχρι την τελική του θραύση. Μέσω της δοκιμής του εφελκυσμού, μπορεί να προσδιοριστεί η καμπύλη τάσεων-παραμορφώσεων και, στη συνέχεια, να υπολογιστούν η δυσκαμψία και η δυσθραυστότητά της, (20).

Οι συνοριακές συνθήκες που εφαρμόστηκαν για τη δοκιμή του εφελκυσμού παρουσιάζονται στο Σχήμα 12. Η προσομοίωση της δοκιμής τους εφελκυσμού διεξήχθη με τη χρήση του εμπορικού προγράμματος LS-DYNA (version Is971s R5.1.1), το οποίο διαθέτει και χρησιμοποιεί η TOYOTA.



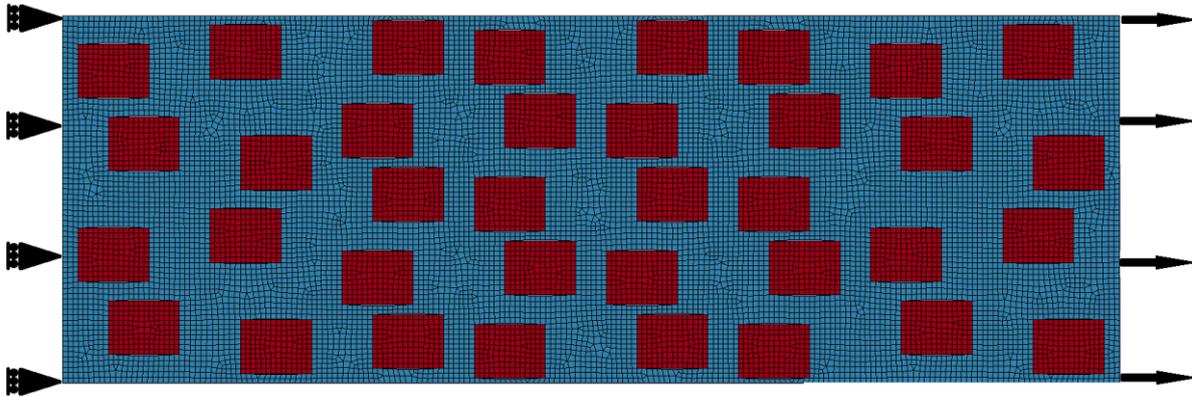
Σχήμα 12: Το μοντέλο της ίνας κατά την δοκιμή σε εφελκυσμό.

3.2. Το μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων της ίνας

Για την μελέτη της μηχανικής συμπεριφοράς της ίνας της αράχνης, δημιουργήθηκε ένα 2D μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων. Το μοντέλο αυτό βασίστηκε στη νανοδομή του dragline μεταξιού της αράχνης και συγκεκριμένα στα δύο βασικά συστατικά: το κρυσταλλικό και το άμορφο. Η επιλογή των γεωμετρικών χαρακτηριστικών της ίνας έγινε με βάση προηγούμενη πειραματική και υπολογιστική εργασία, (21), (22). Το μήκος της ίνας ήταν 40 nm και η διάμετρος 14 nm. Κάθε κρύσταλλος είχε σχήμα ορθογωνίου παραλληλογράμμου διαστάσεων $2.691 \times 2.048 \text{ nm}^2$.

Η διάταξη των κρυστάλλων μέσα στο άμορφο δεν είναι γνωστή. Ως εκ τούτου θεωρήθηκε η τυχαία διάταξη ως αντιπροσωπευτική διάταξη της ίνας.

Το Σχήμα 13 δείχνει ένα 2D μοντέλο, το οποίο δημιουργήθηκε με τη χρήση του LS-PrePost. Το μοντέλο αυτό είναι 25% κρυσταλλικό και η διάταξη των κρυστάλλων είναι ψευδο-τυχαία.



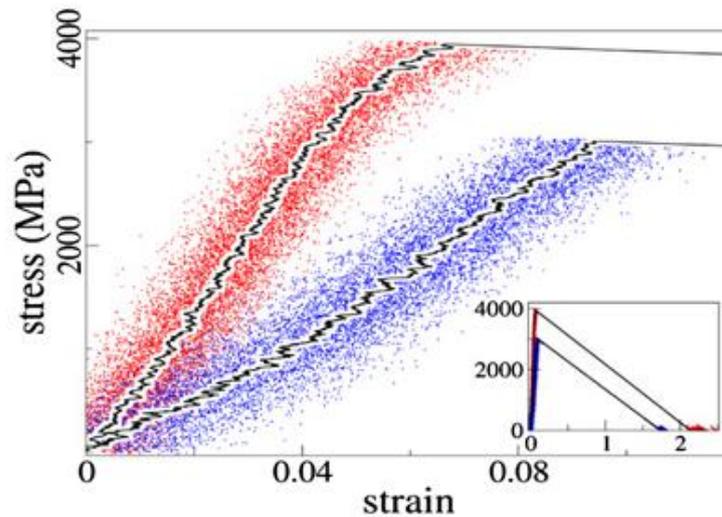
Σχήμα 13: Το 2D μοντέλο του ιστού της αράχνης με τις συνοριακές συνθήκες.

3.3. Ιδιότητες των συνιστωσών της ίνας

Ο dragline ιστός της αράχνης αποτελείται από δύο μέρη, το κρυσταλλικό, το οποίο συμπεριφέρεται ως ελαστοπλαστικό υλικό και το άμορφο, το οποίο συμπεριφέρεται ως ιξωδοελαστικό. Οι μηχανικές ιδιότητες εκάστου ελήφθησαν από προηγούμενη εργασία, (22).

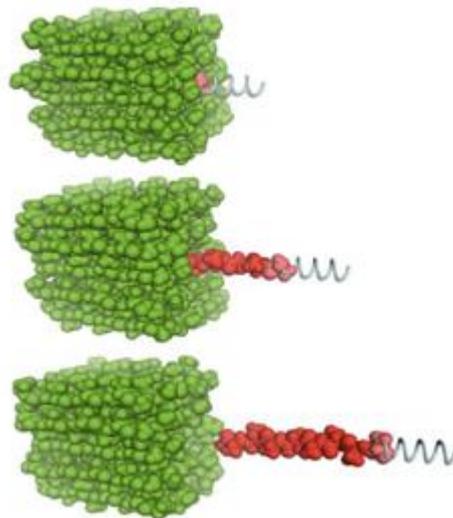
3.3.1. Κρυσταλλική φάση

Η κρυσταλλική φάση του ιστού της αράχνης συμπεριφέρεται ως ελαστοπλαστικό υλικό, το οποίο υφίσταται μη-αναστρέψιμη παραμόρφωση όταν του ασκούνται δυνάμεις. Το υλικό μοντελοποιήθηκε με το μοντέλο του LS-DYNA MAT_003_PLASTIC_KINEMATIC. Το Σχήμα 14 παρουσιάζει την καμπύλη τάσεων παραμορφώσεων δύο διαφορετικών συνθέσεων της κρυσταλλικής φάσης, από προσομοιώσεις MD. Οι μηχανικές ιδιότητες του υλικού είναι πυκνότητα $\rho = 1200 \left[\frac{kg}{m^3} \right]$, μέτρο ελαστικότητας young $E = 71[GPa]$, $\nu = 0.33$ και αντοχή $UTS = 3.95[GPa]$, (21).



Σχήμα 14 Η καμπύλη τάσεων παραμορφώσεων δύο διαφορετικών συνθέσεων της κρυσταλλικής φάσης από MD προσομοιώσεις. Με μαύρη γραμμή φαίνονται ο μέσος όρος.

Όπως φαίνεται στο Σχήμα 14, μετά το σημείο διαρροής, οι τάσεις ελαττώνονται απότομα. Το Σχήμα 15 δείχνει το ότι μετά το σημείο διαρροής, η εσωτερική δομή του κρυστάλλου καταρρέει. Ως εκ τούτου, επιλέχθηκε το όριο διαρροής ως το κριτήριο αστοχίας.



Σχήμα 15 Στιγμιότυπα από προσομοίωση MD. Το κρυσταλλικό μέρος είναι με πράσινο και μέρος αυτού υπόκειται σε δυνάμεις. Η εφελκυστική δύναμη απεικονίζεται ως ελατήριο.

3.3.2. Η ιξωδοελαστική άμορφη φάση

Η άμορφη φάση είναι η δεύτερη συνιστώσα του μοντέλου. Χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο ιξωδοελαστικού υλικού MAT_006_VISCOELASTIC για τη μοντελοποίηση της άμορφης φάσης στο LS-DYNA. (23)

Σε αυτό το μοντέλο, θεωρείται γραμμική ιξωδοελαστικότητα για τον τανυστή τάσεων (24):

$$s_{ij} = 2 * \int_0^t \varphi(t - \tau) \frac{\partial \varepsilon'_{ij}(\tau)}{\partial \tau} d\tau \quad (3-1)$$

όπου:

$$\varphi(t) = G_{\infty} + (G_0 - G_{\infty}) \exp(-\beta t) \quad (3-2)$$

είναι το μέτρο διάτμησης. G_0 είναι το βραχυπρόθεσμο μέτρο διάτμησης (short-term shear modulus) and G_{∞} είναι το μακροπρόθεσμο μέτρο διάτμησης (the long-term shear modulus). Είναι $G_0 = 1.66 [GPa]$. Η σταθερά απόσβεσης είναι $\beta = \frac{G_0}{\eta}$, όπου η είναι το ιξώδες του υλικού με τιμή $\eta = 10^4 \left[\frac{Ns}{m^2} \right]$. (21)

Για την άμορφη φάση, ως κριτήριο αστοχίας θεωρήθηκε συγκεκριμένη τιμή της παραμόρφωση της. Από προηγούμενες προσομοιώσεις το κριτήριο τέθηκε ίσο με 70% παραμόρφωση, (25).

3.3.2.1. Αναλυτική λύση της διαφορικής εξίσωσης που περιγράφει το ιξωδοελαστικό υλικό

Προκειμένου να γίνει καλύτερη κατανόηση των σταθερών που περιγράφουν τη συμπεριφορά του ιξωδοελαστικού υλικού υπό εφελκυσμό. Η διαφορική εξίσωση (3-1) μελετήθηκε αναλυτικά, προκειμένου να κατανοηθούν καλύτερα οι σταθερές που περιγράφουν τη συμπεριφορά του ιξωδοελαστικού υλικού υπό την δοκιμή του εφελκυσμού. Γίνεται η μονοδιάστατη θεώρηση και ως αποτέλεσμα όλες οι παραμορφώσεις είναι μηδέν, εκτός από την ε_{11} , και όλες οι τάσεις είναι μηδέν, εκτός από την σ_{11} .

Το αποτέλεσμα της επίλυσης είναι:

$$s_{11}(\varepsilon) = C_1 \varepsilon + C_2 (1 - e^{-C_3 \varepsilon}) \quad (3-3)$$

όπου:

$$C_1 = 2 G_{\infty}$$

$$C_2 = 2 \frac{u (G_0 - G_{\infty})}{\beta l_0}$$

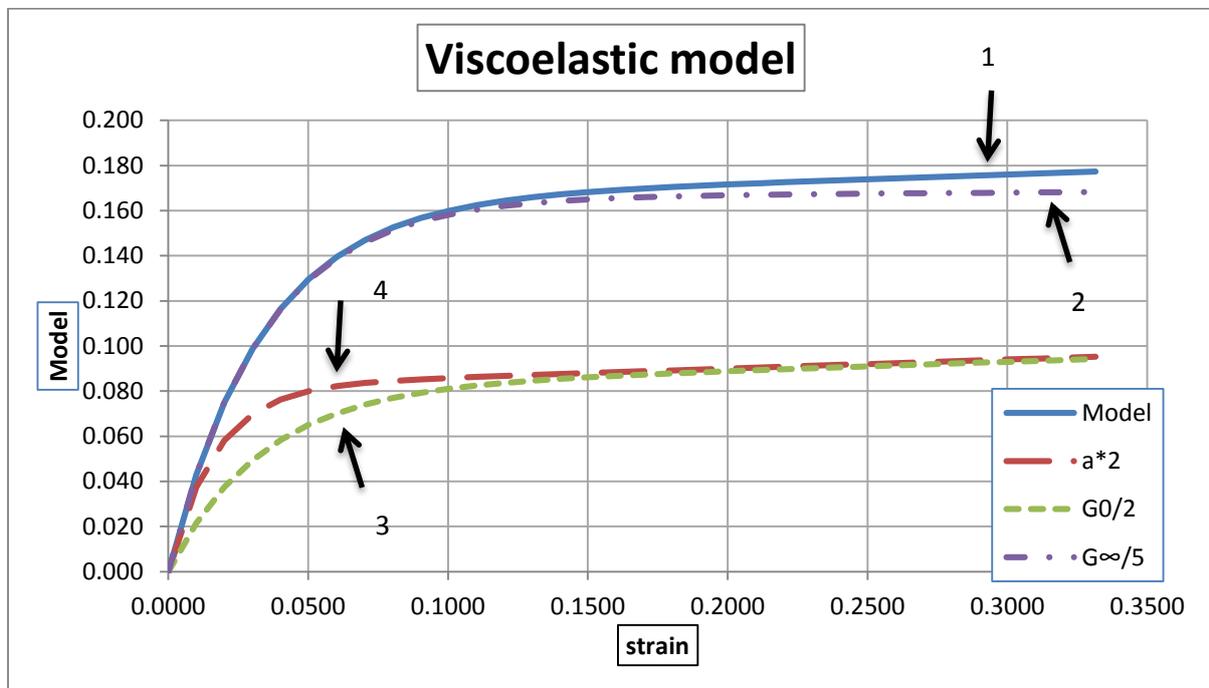
$$C_3 = \frac{3 \beta l_0}{2 u}$$

Η τελική εξίσωση είναι συνάρτηση της μετατόπισης και αποτελείται από τρεις συντελεστές. Οι σταθερές εξαρτώνται από τις εξής μεταβλητές

- l_0 , το αρχικό μήκος του δοκιμίου,

- G_0 , το βραχυπρόθεσμο μέτρο διάτμησης,
- G_∞ , το μακροπρόθεσμο μέτρο διάτμησης,
- β , την σταθερά απόσβεσης,
- u , την ταχύτητα εφελκυσμού.

Η εξίσωση (3-3) περιγράφει πως οι ιξωδοελαστικές ιδιότητες επηρεάζουν τη συμπεριφορά του υλικού. Το Σχήμα 16 απεικονίζει την επιρροή αυτή. Η εξίσωση (3-3) αποτελείται από 2 όρους, τον γραμμικό με τον συντελεστή C_1 και τον εκθετικό με τους συντελεστές C_2 και C_3 . Ο γραμμικός όρος επηρεάζει τη μακροπρόθεσμη συμπεριφορά του υλικού (καμπύλη 2), ενώ ο εκθετικός τη βραχυπρόθεσμη. Συγκεκριμένα, ο συντελεστής C_2 επηρεάζει τη βραχυπρόθεσμη συμπεριφορά με κυριαρχούσα μεταβλητή το G_0 το οποίο επηρεάζει τη βραχυπρόθεσμη συμπεριφορά του υλικού (καμπύλη 3) και το β το οποίο επηρεάζει την ταχύτητα μετάβασης από τη βραχυπρόθεσμη στη μακροπρόθεσμη.



Σχήμα 16: Απεικόνιση της εξίσωσης (3-3).

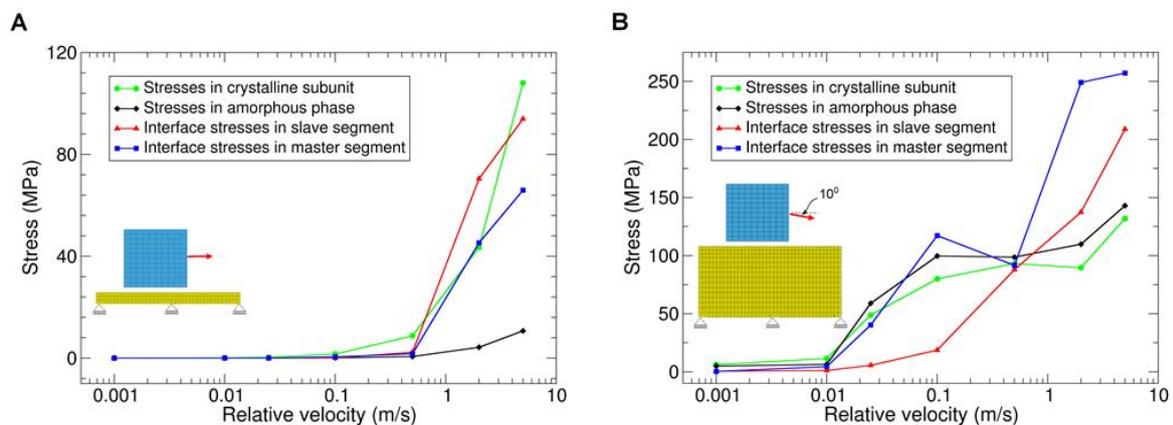
Το μοντέλο της ίνας μπορεί να αποτύχει λόγω δύο κριτηρίων: είτε όταν ο κρύσταλλος φτάσει στο όριο διαρροής είτε όταν το άμορφο υποστεί συγκεκριμένη παραμόρφωση. Αυξάνοντας την ταχύτητα εφελκυσμού, οι κρύσταλλοι έχουν την ίδια μηχανική συμπεριφορά (ανεξάρτητα του ρυθμού παραμόρφωσης) και, άρα, θα φτάσουν στο όριο διαρροής ταχύτερα. Με αυτόν τον τρόπο, μπορεί να μειωθεί ο συνολικός χρόνος της επίλυσης χωρίς να επηρεαστεί η μηχανική απόκριση του δοκιμίου. Ωστόσο, το ιξωδοελαστικό άμορφο εξαρτάται από τον ρυθμό παραμόρφωσης (2.1.1.4). Επανεξετάζοντας την εξίσωση (3-3), παρατηρείται ότι η ταχύτητα παραμόρφωσης (u) εμφανίζεται μαζί με τη σταθερά απόσβεσης. Ως εκ τούτου, ορίζεται ο λόγος $\beta_2 = \frac{\beta}{u}$ και γίνεται η υπόθεση ότι αν ο λόγος β_2 παραμένει σταθερός, η μηχανική συμπεριφορά του

υλικού θα παραμείνει ίδια. Έγιναν διάφορες δοκιμαστικές προσομοιώσεις με το LS-DYNA και επαληθεύτηκε η παραπάνω υπόθεση και για το 2D και για το 3D μοντέλο.

3.3.3. Επαφή μεταξύ της κρυσταλλικής και της άμορφης φάσης

Οι κρύσταλλοι και η άμορφη φάση είναι πλήρως συνδεδεμένα κατά τη διεύθυνση της ίνας. Αντιθέτως, κατά την κάθετη διεύθυνση, δεν υπάρχει άμεση σύνδεση μεταξύ τους. Οι κρύσταλλοι έχουν τη δυνατότητα, υπό την επίδραση δύναμης, να ολισθαίνουν και, συνεπώς, να ανακατανέμονται μέσα στο άμορφο.

Από προηγούμενη εργασία (26), έχει υπολογιστεί η δύναμη τριβής μεταξύ των δύο συνιστωσών (Σχήμα 17) με τη χρήση MD και FEM προσομοιώσεων. Το Σχήμα 17 δείχνει ότι για χαμηλές σχετικές ταχύτητες (<1 m/s), οι τάσεις μεταξύ των συνιστωσών είναι αμελητέες.



Σχήμα 17: Οι τάσεις μεταξύ της κρυσταλλικής και της άμορφης συνιστώσας, (26).

Κατά τη δημιουργία του μοντέλου, παρατηρήθηκε από τις προσομοιώσεις ότι η σχετική ταχύτητα μεταξύ του άμορφου και των κρυστάλλων ήταν πολύ χαμηλή, ενώ η κατεύθυνση της σχετικής τους κίνησης ήταν αυτή της ίνας. Ως αποτέλεσμα αποφασίστηκε να αγνοηθεί η τριβή μεταξύ των επιφανειών διεπαφής και, αντί αυτού, θεωρήθηκε ένα μικρό κενό μεταξύ τους.

3.4. Υπολογιστικό Πλέγμα

Για την επίλυση του μοντέλου της ίνας με πεπερασμένα στοιχεία, το χωρίο διακριτοποιήθηκε σε ένα 2D πλέγμα. Σημαντική προϋπόθεση, για την αυτόματη μέθοδο σχεδιασμού, ήταν η αυτόματη κατασκευή του πλέγματος χωρίς την αλληλεπίδραση του χρήστη. Έτσι, δημιουργήθηκε ένα macro το οποίο έφτιαχνε αυτόματα το πλέγμα με τη χρήση του προγράμματος LS-PrePost.

3.5. Προσομοίωση

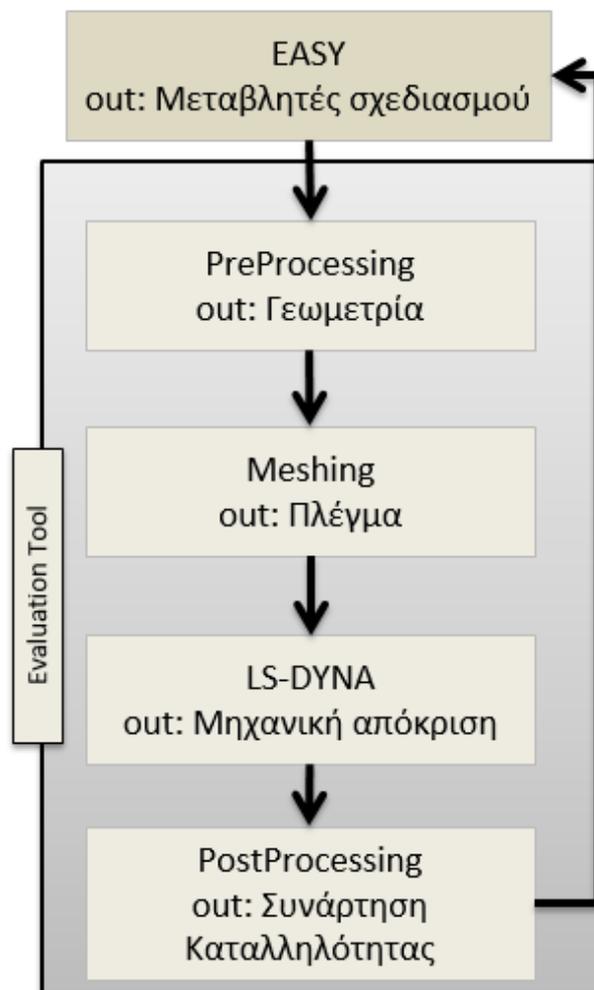
Χρησιμοποιήθηκε το εμπορικό πρόγραμμα πεπερασμένων στοιχείων LS-DYNA (version ls971s R5.1.1) για την επίλυση του μοντέλου.

3.6. Εξαγωγή Αποτελεσμάτων

Το LS-DYNA έχει ως έξοδο αρκετά αρχεία ASCII. Χρησιμοποιώντας το αρχείο SPCFORC υπολογίζεται η καμπύλη τάσεων παραμορφώσεων. Το αρχείο αυτό περιέχει τη δύναμη ανάδρασης στους κόμβους της συνοριακής συνθήκης με πάκτωση. Στη συνέχεια, από την καμπύλη τάσεων παραμορφώσεων υπολογίζεται η δυσκαμψία και η δυσθραυστότητα.

3.7. Διαδικασία βελτιστοποίησης

Το λογισμικό αξιολόγησης περιγράφηκε πλήρως στις προηγούμενες παραγράφους. Προκειμένου να ολοκληρωθεί η διαδικασία αυτόματου σχεδιασμού, το λογισμικό αξιολόγησης συνδυάστηκε με το λογισμικό βελτιστοποίησης (EASY). Για το λογισμικό EASY, το λογισμικό αξιολόγησης θεωρείται ως «μαύρο κουτί». Το λογισμικό EASY παρέχει τις μεταβλητές σχεδιασμού στο λογισμικό αξιολόγησης, αυτό αξιολογεί την υποψήφια λύση και επεστρέφε τις τιμές των συναρτήσεων καταλληλότητας. Η όλη διαδικασία φαίνεται στο Σχήμα 18.



Σχήμα 18: Διάγραμμα ροής του αλγόριθμου βελτιστοποίησης.

Κεφάλαιο 4. Ρύθμιση της διαδικασίας βελτιστοποίησης

Η μεθοδολογία που αναπτύχθηκε για τον αυτόματο σχεδιασμό των νανο-συνθέτων ινών παρουσιάστηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Προκειμένου να γίνει η αναζήτηση με αποτελεσματικό τρόπο, πρέπει να ρυθμιστεί κατάλληλα η κάθε συνιστώσα της μεθόδου. Στις επόμενες ενότητες θα παρουσιαστούν οι ρυθμίσεις της κάθε συνιστώσας του σχεδιασμού.

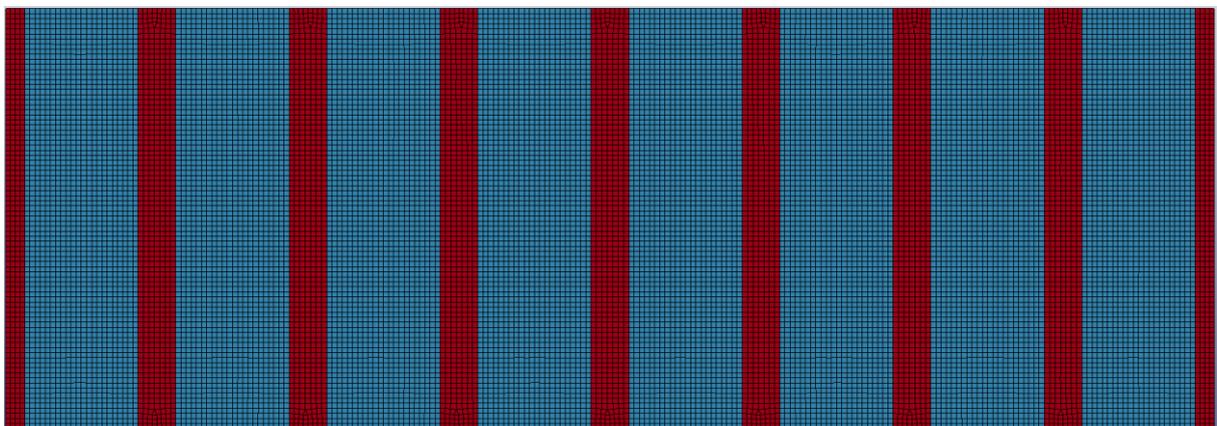
4.1. Η δομή της ίνας και οι ιδιότητες της

Το μοντέλο της ίνας της αράχνης το οποίο περιεγράφηκε στο κεφάλαιο 3, θα χρησιμοποιηθεί για τη μελέτη των ιδιοτήτων της. Ενώ το μέγεθος των κρυστάλλων έχει κατά προσέγγιση προσδιοριστεί (27), η ακριβής διάταξη τους παραμένει άγνωστη, με την κοινή παραδοχή της τυχαίας διάταξης. Για να διερευνηθεί η επίδραση της νανοδομής της ίνας, πραγματοποιήθηκε μία πλήρης φασματική μελέτη της κρυσταλλικότητας και διατάξεων της. Προκειμένου να ληφθούν κάποια σημεία αναφοράς για τις δυνατότητες της ίνας, έγινε σύγκριση της τυχαίας διάταξης με δύο ακραίες διατάξεις, τη διάταξη σε σειρά και την παράλληλη διάταξη. Τέλος, το μοντέλο επαληθεύτηκε βάσει προηγούμενης εργασίας (28).

4.1.1. Διάταξη σε σειρά

Στη διάταξη σε σειρά, η κρυσταλλική και η άμορφη φάση διατάσσονται εναλλάξ, παράλληλα στη διεύθυνση της ίνας. Σε αυτήν τη διάταξη, η μαλακότερη άμορφη φάση αναμένεται να είναι η κυριαρχούσα.

Η διακριτοί κρύσταλλοι, σε συνδυασμό με τις μεγάλες αξονικές παραμορφώσεις, επηρέασαν σημαντικά την συμπεριφορά της ίνας. Προκειμένου να επιτευχθεί η ανεξαρτησία της μηχανική συμπεριφοράς, σε σχέση με τον αριθμό των κρυστάλλων, διαδοχικές διαιρέσεις της κρυσταλλικής φάσης διεξήχθησαν μέχρις ότου οι προκύπτουσες τιμές της δυσθραυστότητας και της ακαμψίας δεν παρουσίασαν καμία σημαντική αλλαγή.



Σχήμα 19: Μοντέλο του LS-DYNA για την διάταξη σε σειρά με 25% κρυσταλλικότητα. Με κόκκινο είναι η κρυσταλλική φάση και με μπλέ η άμορφη. Η ίνα έχει οριζόντια διεύθυνση.

Αυτή η διάταξη είναι ισοδύναμη με ελατήρια στη σειρά. Η συνολική παραμόρφωση είναι το άθροισμα της κάθε συνιστώσας

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 \quad (4-1)$$

και η συνολική δυσκαμψία υπολογίζεται ως:

$$\frac{1}{E} = \frac{A_1}{E_1} + \frac{A_2}{E_2} \quad (4-2)$$

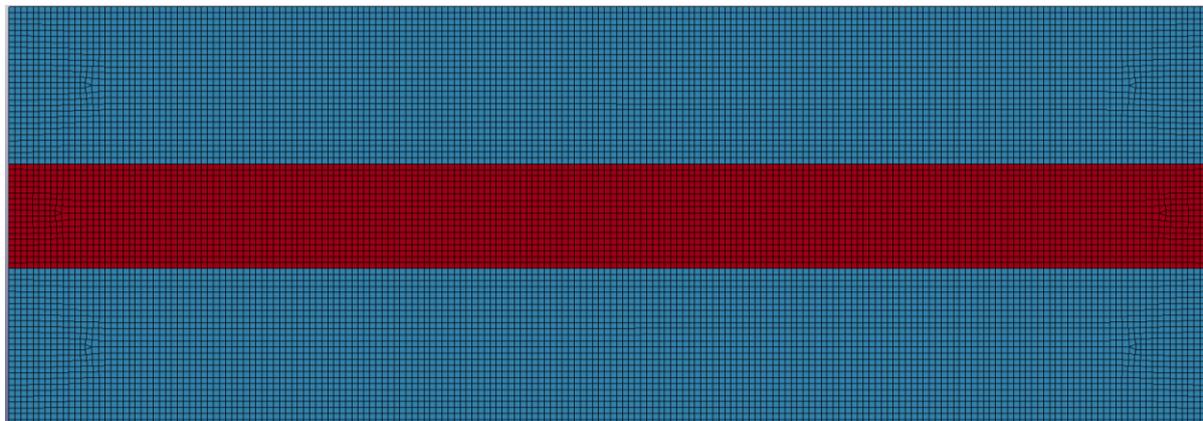
όπου:

E_1, E_2 : η δυσκαμψία της κάθε συνιστώσας

A_1, A_2 : το ποσοστό του εμβαδού που καταλαμβάνει η κάθε συνιστώσα.

4.1.2. Παράλληλη διάταξη

Στην παράλληλη διάταξη, οι συνιστώσες διετάχθησαν παράλληλα στη διεύθυνση της ίνας. Η κρυσταλλική φάση βρίσκεται στον πυρήνα της ίνας. Σε αυτήν τη διάταξη, αναμένεται η κρυσταλλική φάση να είναι η κυριαρχούσα.



Σχήμα 20: Μοντέλο του LS-DYNA για την παράλληλη διάταξη με 25% κρυσταλλικότητα. Με κόκκινο είναι η κρυσταλλική φάση και με μπλέ η άμορφη. Η ίνα έχει οριζόντια διεύθυνση.

Αυτή η διάταξη είναι ισοδύναμη με παράλληλα ελατήρια. Η παραμόρφωση της κάθε συνιστώσας είναι ίση με τη συνολική παραμόρφωση

$$\varepsilon = \varepsilon_1 = \varepsilon_2 \quad (4-3)$$

Η συνολική τάση είναι ίση με το άθροισμα των επιμέρων παραμορφώσεων

$$\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 \quad (4-4)$$

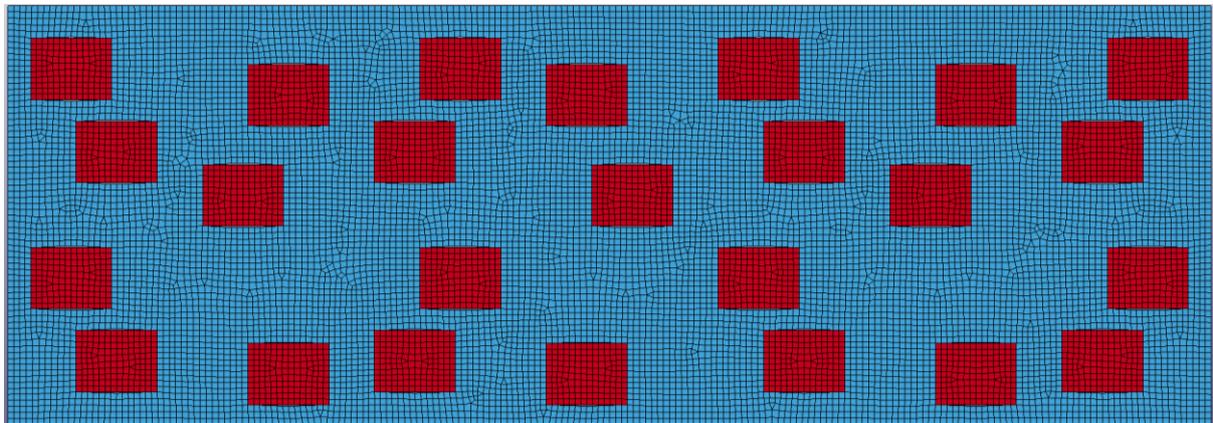
και η συνολική δυσκαμψία υπολογίζεται:

$$E = A_1 * E_1 + A_2 * E_2 \quad (4-5)$$

4.1.3. Τυχαία διάταξη

Προκειμένου να ρυθμιστεί και να επαληθευτεί το μοντέλο της ίνας του ιστού της αράχνης, πραγματοποιήθηκαν διάφορες προσομοιώσεις με διάφορα ποσοστά κρυσταλλικότητας από 5% ως 70%. Οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν με ψευδο-τυχαία διάταξη της ίνας. Το Σχήμα 21 δείχνει ένα παράδειγμα ψευδο-τυχαίας διάταξης με 25% κρυσταλλικότητα.

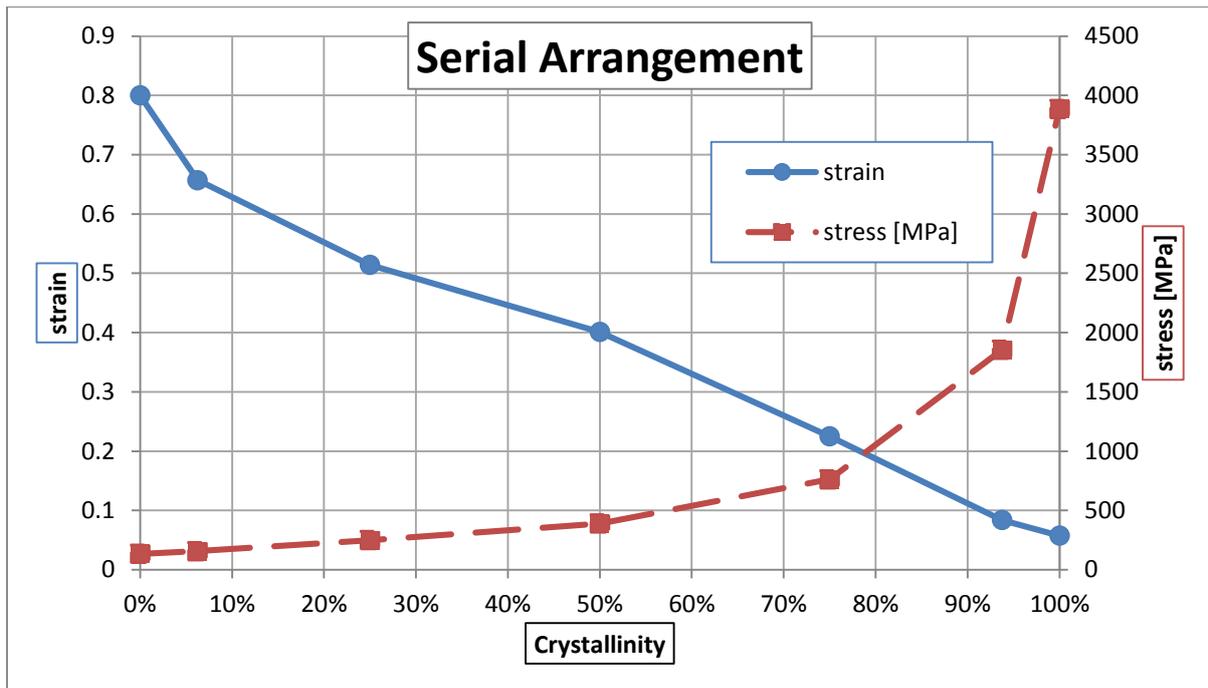
Η μέγιστη κρυσταλλικότητα η οποία εκτιμήθηκε ήταν 70% λόγω γεωμετρικών περιορισμών. Το μέγεθος της ίνας και των κρυστάλλων ήταν καθορισμένα. Ως αποτέλεσμα, αν η κρυσταλλικότητα αυξάνονταν πάνω από 70%, η δυνατές θέσεις των κρυστάλλων ήταν υπερβολικά περιορισμένες. Αυτό είχε ως αποτέλεσμα, οι προκύπτουσες διατάξεις να είναι δομημένες και τα αποτελέσματα της δυσκαμψίας και της δυσθραυστότητας να μοιάζουν με τη διάταξη σε σειρά. Κατά συνέπεια, οι περιπτώσεις που είχαν παραπάνω από 70% κρυσταλλικότητα θεωρήθηκαν ως μη τυχαίες και δεν εξετάστηκαν.



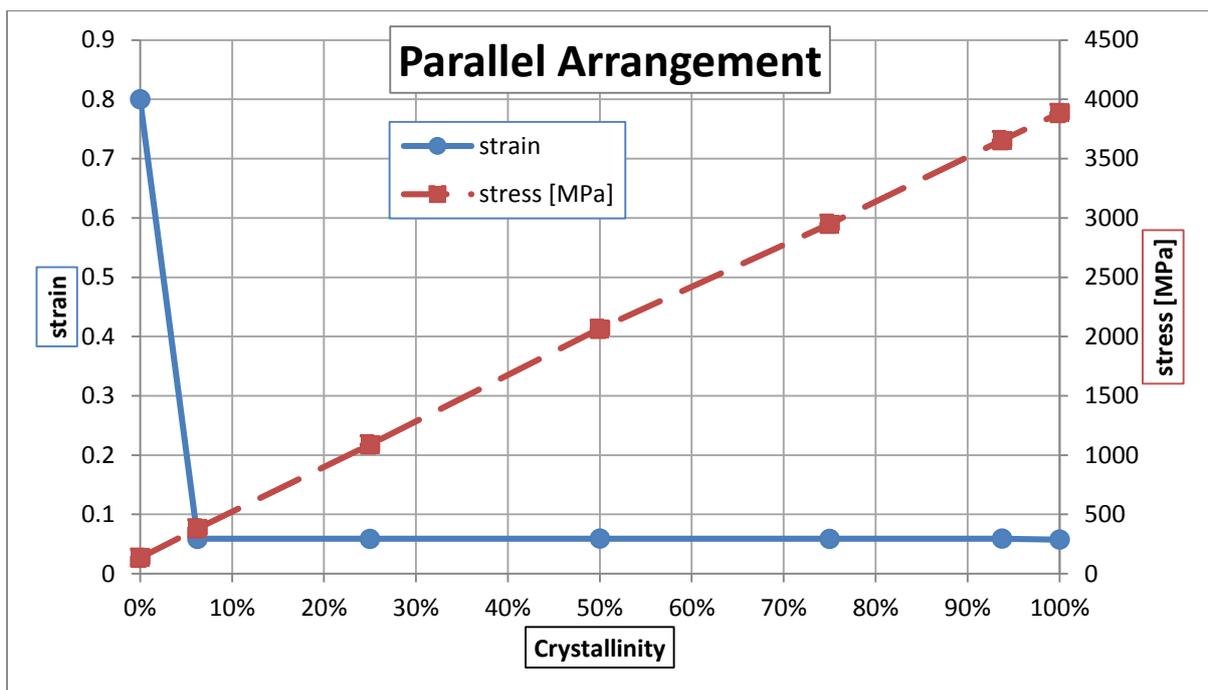
Σχήμα 21: Μοντέλο του LS-DYNA για την παράλληλη διάταξη με 25% κρυσταλλικότητα.

4.1.4. Μηχανικές ιδιότητες

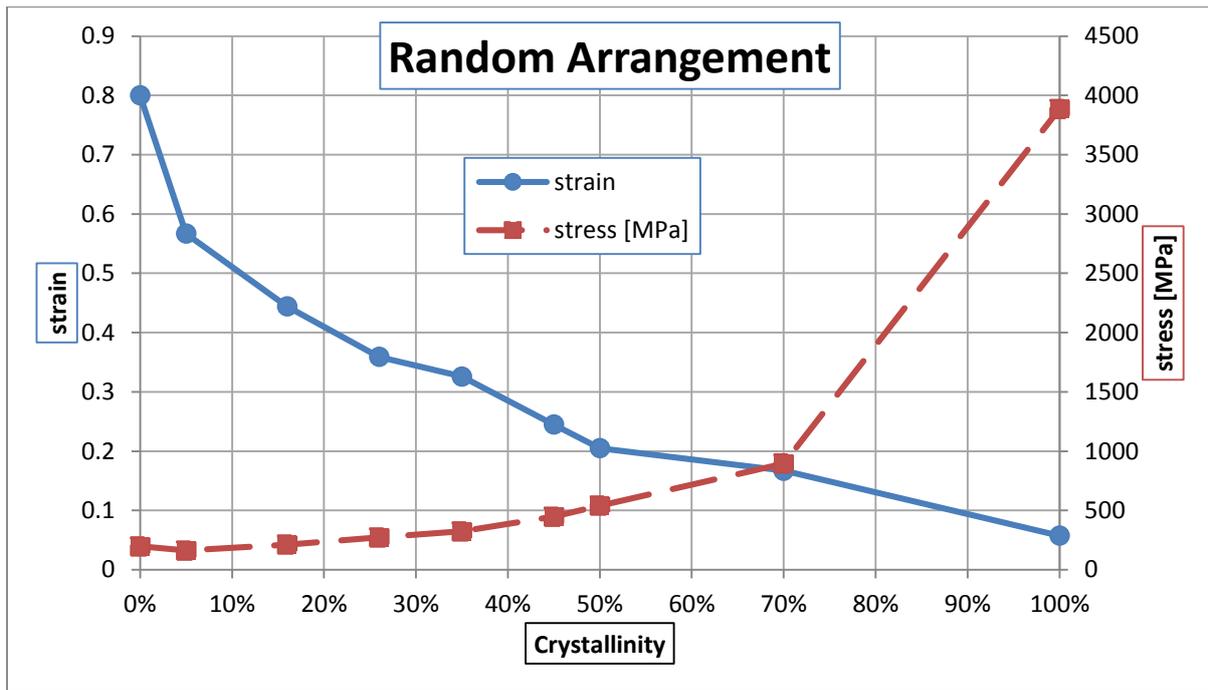
Προκειμένου να επαληθευτεί το 2D μοντέλο, χρησιμοποιήθηκαν οι διατάξεις που περιγράφηκαν προηγουμένως. Η τάση θραύσης και η παραμόρφωση θραύσης απεικονίζονται στα παρακάτω διαγράμματα σε σχέση με την κρυσταλλικότητα της ίνας.



Σχήμα 22: Διάταξη σε σειρά από 0% κρυσταλλικότητα (καθαρά άμορφο) ως 100% κρυσταλλικότητα (καθαρά κρύσταλλος).

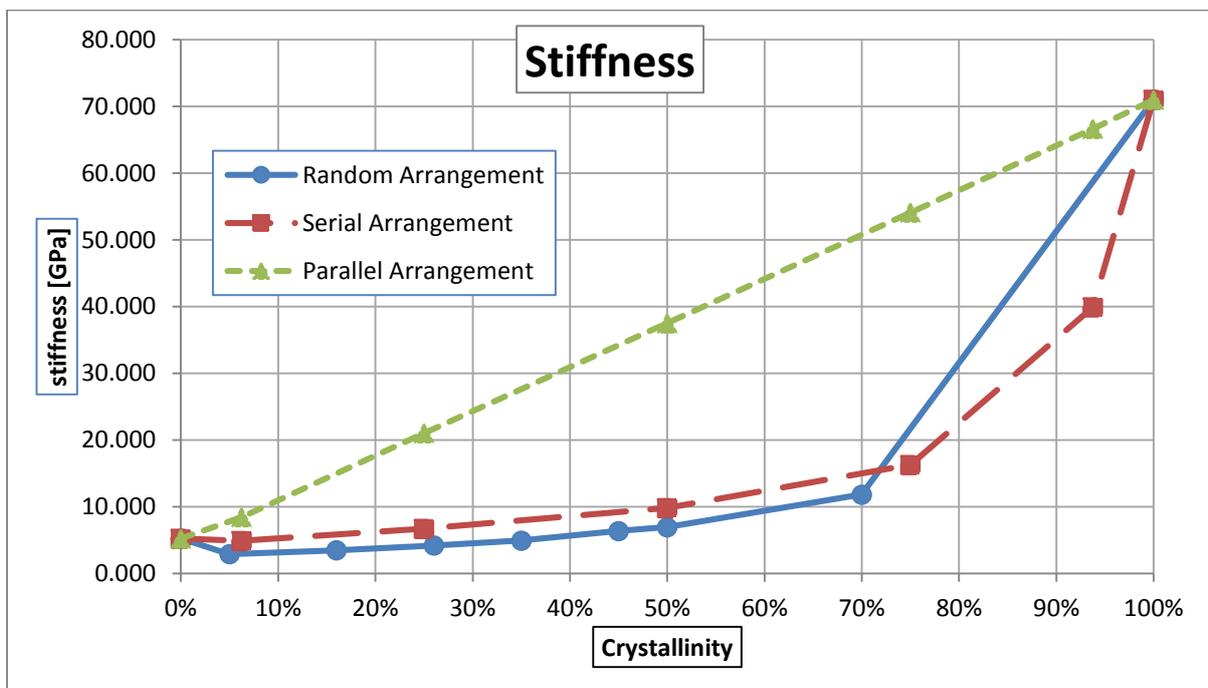


Σχήμα 23: Παράλληλη διάταξη από 0% κρυσταλλικότητα (καθαρά άμορφο) ως 100% κρυσταλλικότητα (καθαρά κρύσταλλος).



Σχήμα 24 Τυχαία διάταξη από 0% κρυσταλλικότητα (καθαρά άμορφο) ως 100% κρυσταλλικότητα (καθαρά κρύσταλλος).

Τα σχήματα 22, 23 και 24 παρουσιάζουν την τάση θραύσης και την παραμόρφωση τάσης έως 70% κρυσταλλικότητα. Με την αύξηση της κρυσταλλικότητας, η τάση θραύσης αυξάνεται ενώ η παραμόρφωση θραύσης μειώνεται. Συγκεκριμένα, στην παράλληλη διάταξη, η παραμόρφωση θραύσης ($\epsilon_f = 5.87\%$) είναι ίση με την παραμόρφωση θραύσης του κρυστάλλου. Αυτό δικαιολογείται με την εξίσωση (4-3), όπου η παραμόρφωση της κάθε συνιστώσας είναι ίση με τη συνολική παραμόρφωση.



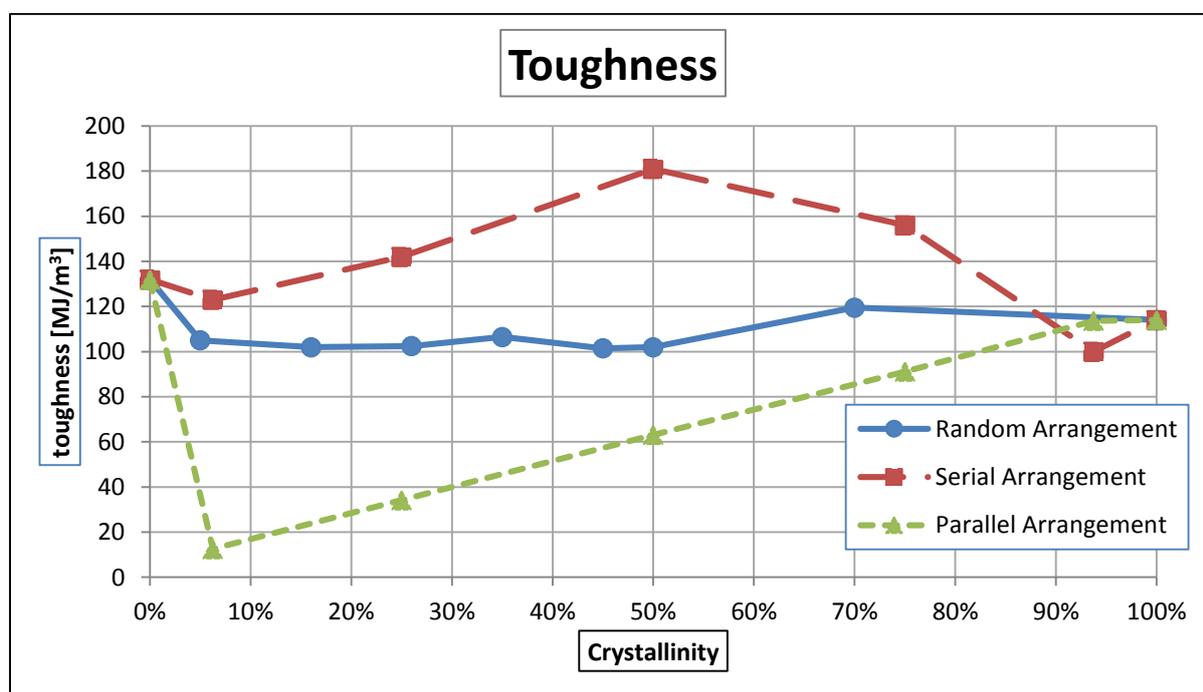
Σχήμα 25: Η δυσκαμψία της ίνας για τις τρεις διατάξεις σε σχέση με την κρυσταλλικότητα.

Το Σχήμα 25 παρουσιάζει τη δυσκαμψία σε σχέση με την κρυσταλλικότητα της ίνας για την τυχαία, παράλληλη και σε σειρά διάταξη. Η διάταξη σε σειρά είχε τις μικρότερες τιμές δυσκαμψίας ενώ η παράλληλη διάταξη τις μεγαλύτερες. Η τυχαία διάταξη είχε τιμές ανάμεσα στις δύο ακραίες τιμές.

Στον Πίνακα 1 παρουσιάζονται η σύγκριση της δυσκαμψίας της διάταξης σε σειρά και της παράλληλης διάταξης όπως αυτή υπολογίστηκε από τη λύση του LS-DYNA και από το ισοδύναμο μοντέλο με ελατήρια. Τα αποτελέσματα επαληθεύουν ότι οι δύο διατάξεις ακολουθούν το ισοδύναμο μοντέλο με ελατήρια.

Πίνακας 1: Σύγκριση της δυσκαμψίας της διάταξης σε σειρά και της παράλληλης διάταξης όπως υπολογίστηκαν από τη λύση του LS-DYNA και το ισοδύναμο μοντέλο με ελατήρια.

Κρυσταλλικότητα	Δυσκαμψία [GPa]			
	Διάταξη σε σειρά		Παράλληλη διάταξη	
	LS-DYNA	Ελατήρια σε σειρά	LS-DYNA	Παράλληλα ελατήρια
6.25%	4.88	5.54	8.44	9.33
25.00%	6.68	6.79	21.02	21.66
50.00%	9.80	9.72	37.52	38.11
75.00%	16.26	17.09	54.09	54.55
93.75%	39.87	39.67	66.63	66.89



Σχήμα 26: Η δυσθραυστότητα της ίνας σε σχέση με την κρυσταλλικότητα για τις τρεις διατάξεις.

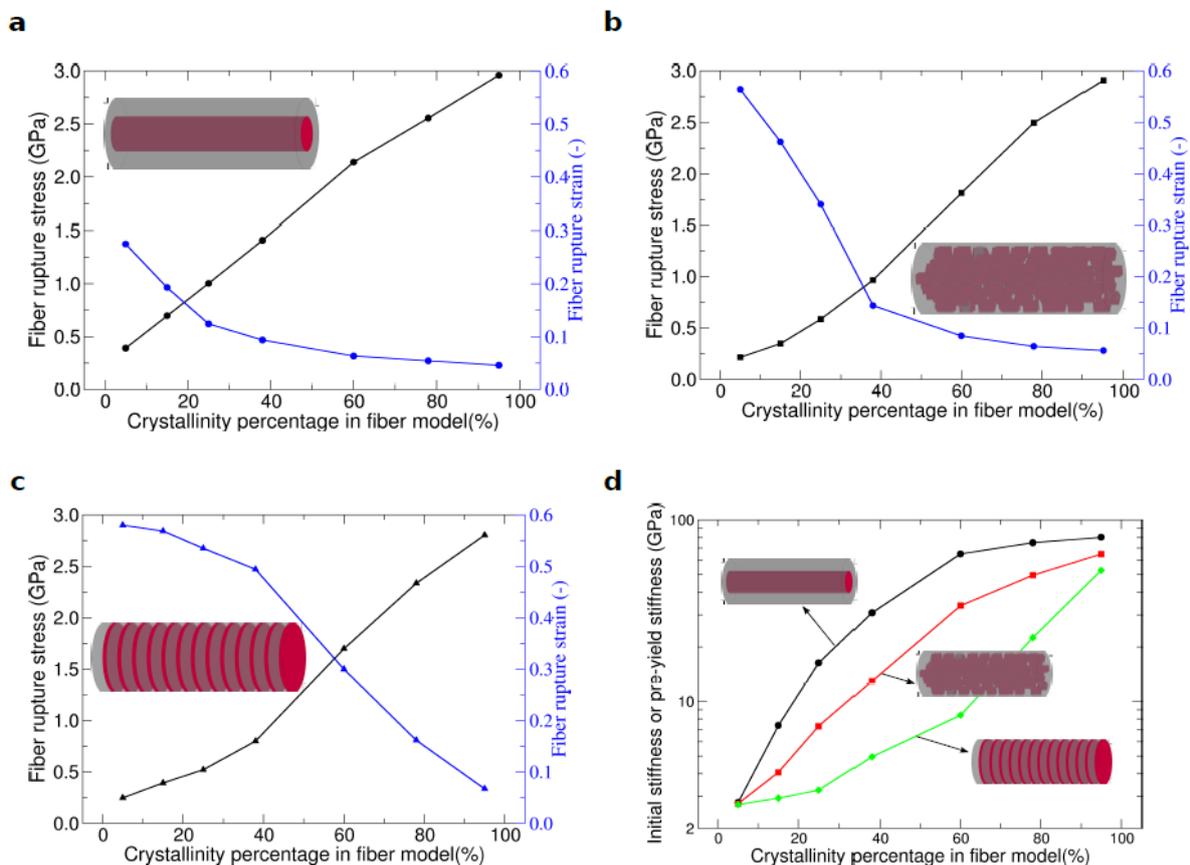
Το Σχήμα 26 παρουσιάζει τη δυσθραυστότητα της ίνας για τις τρεις διαφορετικές διατάξεις. Η διάταξη σε σειρά παρουσίασε τις καλύτερες επιδόσεις με μέγιστη τιμή δυσθραυστότητας για περίπου 50% κρυσταλλικότητα. Αντιθέτως, η παράλληλη διάταξη παρουσίασε πολύ

χαμηλές τιμές, αλλά αυτό οφείλεται στο χαμηλό όριο παραμόρφωσης θραύσης του κρυστάλλου.

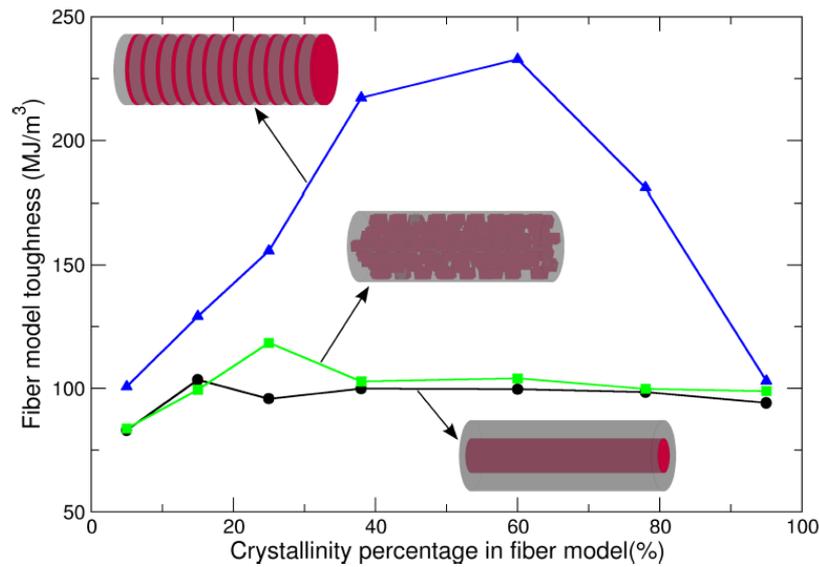
4.1.5. Επαλήθευση

Το μεγαλύτερο μέρος των μηχανικών ιδιοτήτων οι οποίες ελήφθησαν από τις προσομοιώσεις με πεπερασμένα στοιχεία παρουσιάζουν παρόμοια αποτελέσματα σύμφωνα με προηγούμενες εργασίες (21) (22) (28). Για περαιτέρω επαλήθευση, η τάση θραύσης, η παραμόρφωση θραύσης, η δυσθραυστότητα και η δυσκαμψία για τις τρεις διατάξεις από προηγούμενη εργασία (28) παρουσιάζονται στα Σχήματα 27 και 28.

Συγκρίνοντας τα σχήματα, οι μηχανικές ιδιότητες της διάταξης σε σειρά και της τυχαίας διάταξης παρουσιάζουν παρόμοια αποτελέσματα ενώ η παράλληλη διάταξη εμφανίζει σημαντικές διαφορές κυρίως στην παραμόρφωση θραύσης. Οι διαφορές οφείλονται κυρίως στο διαφορετικό τρόπο με τον οποίο τέθηκαν τα κριτήρια θραύσης.



Σχήμα 27: Η διακύμανση των μηχανικών ιδιοτήτων για τις τρεις διαφορετικές διατάξεις της κρυσταλλικής φάσης. Η διακύμανση της τάσης θραύσης και παραμόρφωση θραύσης σε σχέση με την κρυσταλλικότητα της ίνας για το 3D μοντέλο με (a) παράλληλη διάταξη, (b) τυχαία διάταξη και (c) διάταξη σε σειρά. (d) Διακύμανση της δυσκαμψίας για τις τρεις διατάξεις, (28).

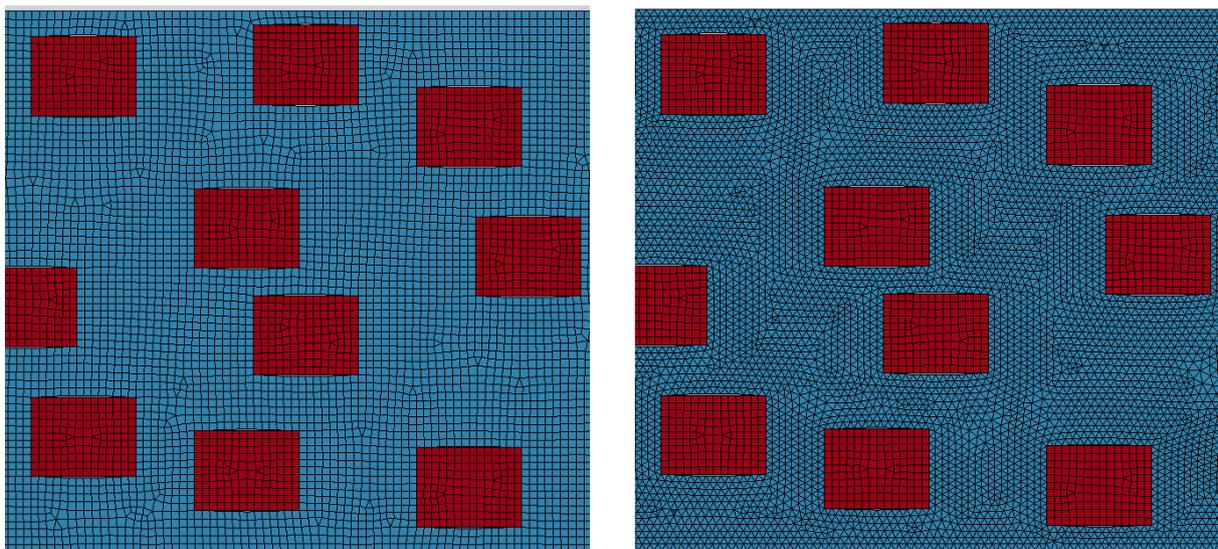


Σχήμα 28: Διακύμανση της δυσθραυστότητας σε σχέση με την κρυσταλλικότητα. (28)

Με την επιβεβαίωση των αποτελεσμάτων του 2Δ μοντέλου κατά τις προηγούμενες πειραματικές μετρήσεις και 3Δ προσομοιώσεις, συμπεραίνεται ότι το 2Δ μοντέλο μπορεί να προλέξει τη συμπεριφορά του μεταξιού της αράχνης με αρκετή ακρίβεια.

4.2. Ανεξαρτησία πλέγματος

Κατά την επίλυση των πεπερασμένων στοιχείων, το πλέγμα παίζει κρίσιμο ρόλο. Γενικά, μεγαλύτερη διακριτοποίηση του πλέγματος αποδίδει καλύτερη προσέγγιση και πιο ακριβή αποτελέσματα. Προκειμένου να ελεγχθεί η ανεξαρτησία του πλέγματος, έγιναν τρεξίματα του μοντέλου με τριγωνικά και τετραπλευρικά στοιχεία (Σχήμα 29) με διαφορετικές πυκνώσεις.



Σχήμα 29: Μέρος των δύο διαφορετικών τύπων πλεγμάτων όπως αυτά κατασκευάστηκαν από το LS-PrePost. Και τα δύο πλέγματα έχουν μέγεθος στοιχείου 0.2 nm.

Ο Πίνακας 2 δείχνει τα αποτελέσματα με τα τετραπλευρικά στοιχεία ενώ ο Πίνακας 3 με τα τριγωνικά. Η μηχανική απόκριση του δοκιμίου συνέκλινε για το πλέγμα με τετραπλευρικά στοιχεία μεγέθους 0.2 nm, ενώ το πλέγμα με τριγωνικά στοιχεία δεν συνέκλινε.

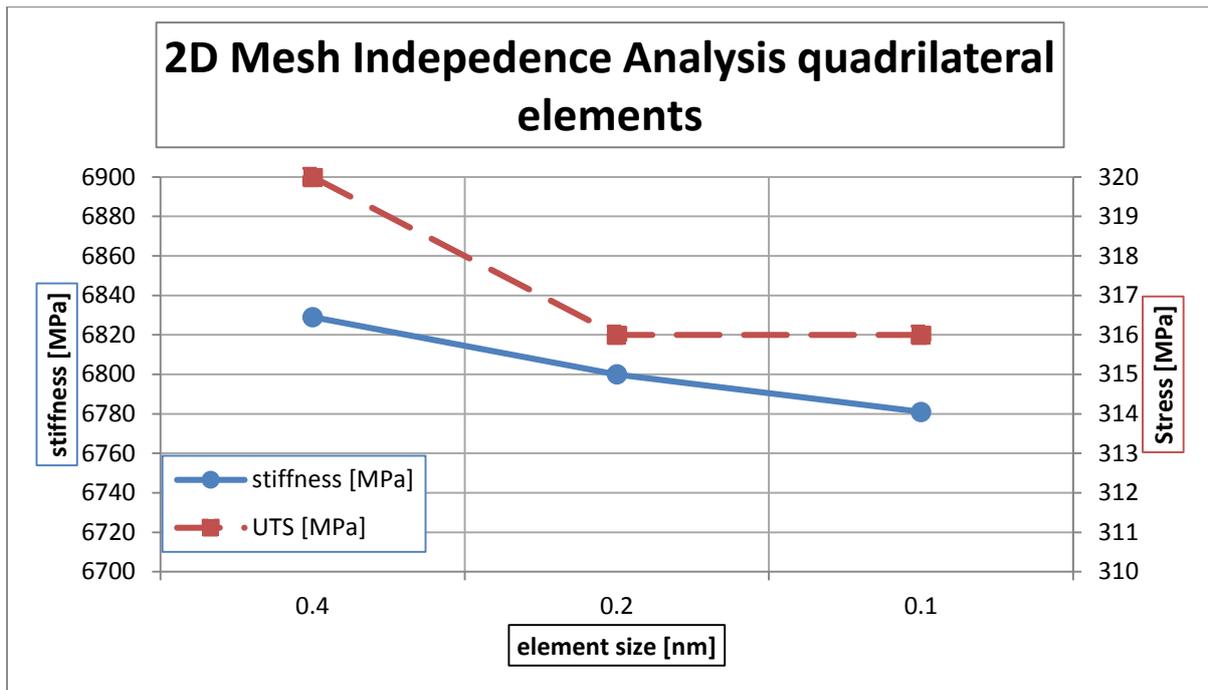
Πίνακας 2: Ανεξαρτησία πλέγματος. Ανάλυση ως προς το μέγεθος των στοιχείων για πλέγμα με τετραπλευρικά στοιχεία. Η επίλυση έγινε με ταχύτητα εφελκυσμού 0.6 m/s και η επίλυση έγινε σε 8 CPU.

Τετραπλευρικά στοιχεία			
Μέγεθος στοιχείου [nm]	0.1	0.2	0.4
Συνολικός αριθμός στοιχείων	55 737	14 432	3 996
Χρόνος CPU (8 CPUs)	3h 26m 27s	0h 14m 46s	0h 1m 14s
Δυσκαμψία [MPa]	6781	6800	6826
UTS [MPa]	316	316	320
Τάση θραύσης [Mpa]	286	286	291

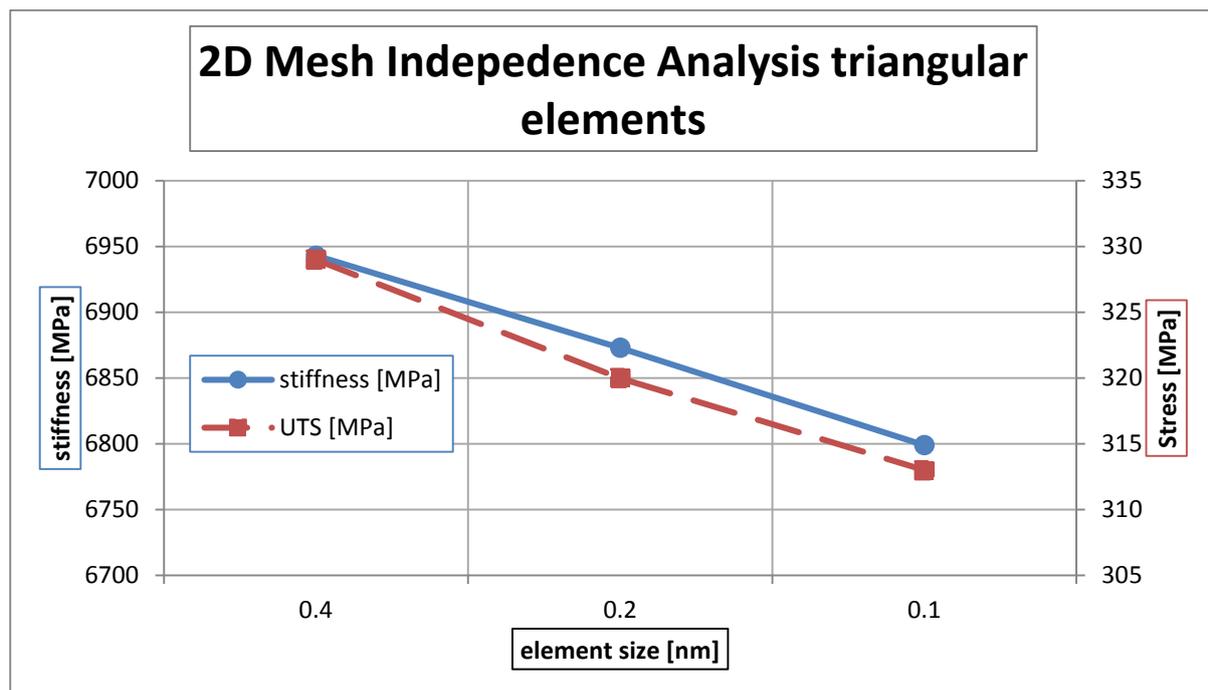
Πίνακας 3: Ανεξαρτησία πλέγματος. Ανάλυση ως προς το μέγεθος των στοιχείων για πλέγμα με τριγωνικά στοιχεία. Η επίλυση έγινε με ταχύτητα εφελκυσμού 0.6 m/s και η επίλυση έγινε σε 8 CPU.

Τριγωνικά στοιχεία			
Μέγεθος στοιχείου [nm]	0.1	0.2	0.4
Συνολικός αριθμός στοιχείων	115 486	28 946	7 573
Χρόνος CPU (8 CPUs)	12h 50m 10s	1h 39m 26s	0h 7m 22s
Δυσκαμψία [MPa]	6799	6873	6943
UTS [MPa]	313	320	329
Τάση θραύσης [Mpa]	282	286	300

Σε αυτή την εργασία χρησιμοποιήθηκε το πλέγμα με τετραπλευρικά στοιχεία μεγέθους 0.2 nm. Όπως επισημάνθηκε προηγουμένως (Εδάφια 3.3.2.1 και 3.6) η ταχύτητα εφελκυσμού τέθηκε στα 6 m/s.



Σχήμα 30: Ανεξαρτησία πλέγματος για τετράπλευρικά στοιχεία.



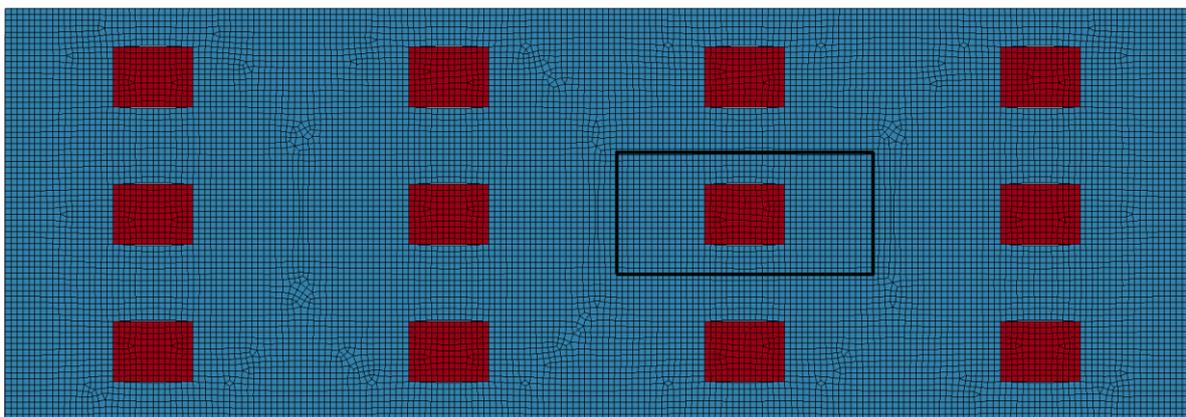
Σχήμα 31: Ανεξαρτησία πλέγματος για τριγωνικά στοιχεία.

4.3. Παράμετροι βελτιστοποίησης

Όπως επισημάνθηκε στο Κεφάλαιο 3 η διαδικασία σχεδιασμού προϋποθέτει τη σύζευξη των πεπερασμένων στοιχείων με τον ΕΑ. Μετά τη ρύθμιση και επαλήθευση του μοντέλου των πεπερασμένων στοιχείων, παρουσιάζεται η ρύθμιση του λογισμικού της βελτιστοποίησης EASY.

Όπως παρουσιάστηκε στην ενότητα 2.3.1, το λογισμικό EASY επιτρέπει πληθώρα ρυθμίσεων. Σε αυτήν την ενότητα, μελετήθηκε η επίδραση αυτών των ρυθμίσεων στα αποτελέσματα.

Επιλέχθηκε μια γεωμετρία της ίνας με 12% κρυσταλλικότητα ως βάση των δοκιμών. Οι κρύσταλλοι τοποθετήθηκαν σε διατεταγμένη διάταξη που αποτελείται από 4 στήλες και 3 σειρές. Κάθε κρύσταλλος είχε τη δυνατότητα κίνησης γύρω από την κεντραρισμένη θέση αναφοράς του για μέχρι και 40% του διαθέσιμου χώρου ανάμεσα στους γείτονές του, και στις δύο κατευθύνσεις (x και y). Ως μεταβλητές σχεδιασμού ορίστηκαν η μετατόπιση του κάθε κρυστάλλου κατά μήκος της x και y κατεύθυνσης, οδηγώντας έτσι σε ένα σύνολο 28 μεταβλητών σχεδιασμού. Η βελτιστοποίηση είχε δύο στόχους, τη μεγιστοποίηση της δυσθραυστότητας και τη μεγιστοποίηση της ακαμψίας.



Σχήμα 32: Η αρχική γεωμετρία των κρυστάλλων για τις παραμετρικές μελέτες. Σημειώνεται με μαύρο ορθογώνιο η περιοχή στην οποία ορίστηκε η μετατόπιση του κρυστάλλου.

4.3.1. Αρχική ρύθμιση

Για την αρχική ρύθμιση, ορίστηκε ο αριθμός των γονέων $\mu = 12$ και ο αριθμός των απογόνων $\lambda = 36$. Η κωδικοποίηση των μεταβλητών ορίστηκε ως "Binary-Gray". Ως τελεστής διασταύρωσης ορίστηκε two-points per variable, με πιθανότητα 0.95. Στη συνέχεια, κάθε απόγονος υφίσταται μετάλλαξη με πιθανότητα 0.2%. Η προσεγγιστική προ-αξιολόγηση δεν χρησιμοποιήθηκε. Σε αυτή την παραμετρική ανάλυση σχετικά με τον EASY, τροποποιήθηκε μία παράμετρος σε κάθε δοκιμή και αξιολογήθηκε ο αντίκτυπός της στο μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων.

4.3.2. EA υποβοηθούμενοι με Μεταπρότυπα (MAEA) με Προσεγγιστική Προ-Αξιολόγηση (ΠΠΑ)

Η πρώτη αλλαγή ήταν η χρήση ενός (12, 36) Meta-Assisted Evolutionary Algorithm (MAEA) (δηλαδή MAEA με γονείς και απογόνους ίσους με 12 και 36 αντίστοιχα), με on-line εκπαιδευόμενα RBF νευρωνικά δίκτυα για την Προσεγγιστική Προ-Αξιολόγηση (ΙΡΕ) των μελών του πληθυσμού. Ο ελάχιστος αριθμός των ακριβών αξιολογήσεων που πρέπει να εκτελεστούν πριν από την έναρξη χρήσης των μεταπρωτύπων ορίστηκε σε 72 καταχωρήσεις στη βάση δεδομένων (DB). Η DB αποθηκεύει όλες τις λύσεις που αξιολογούνται και χρησιμοποιείται για την εκπαίδευση των μεταπρωτύπων. Κάθε επόμενη γενεά εκτελούσε συνήθως, 5-6 ακριβείς αξιολογήσεις.

4.3.3. MAEA: Συνολικός αριθμός αξιολογήσεων πριν την έναρξη ΠΠΑ

Στην προηγούμενη ενότητα, οι ακριβείς αρχικές αξιολογήσεις, πριν την έναρξη των μεταπρωτύπων, είχαν οριστεί σε 72. Προκειμένου να διευκρινιστεί η επίδραση των αρχικών αξιολογήσεων στα μεταπρότυπα, για τον ίδιο (12, 36) MAEA, η έναρξη της ΠΠΑ ενεργοποιήθηκε μετά από 36 ακριβείς αξιολογήσεις στη DB, αντί 72 που μελετήθηκε προηγουμένως. Κάθε επόμενη γενεά εκτελούσε συνήθως 5-6 ακριβείς αξιολογήσεις.

4.3.4. MAEA: Ανάλυση Κύριων Συνιστωσών για τις Σημαντικές Συνιστώσες

Η Ανάλυση Κύριων Συνιστωσών (PCA) είναι μια στατιστική διαδικασία, η οποία σκοπεύει να μειώσει τη συσχέτιση των μεταβλητών σε ένα μικρότερο σύνολο σημαντικών ανεξάρτητων μεταβλητών. Σε αυτήν την ενότητα δοκιμάστηκε η επίδραση της PCA (ανάλυσης σε κύριες συνιστώσες). Δοκιμάστηκε ένας (12, 36) MAEA.

4.3.5. Κατανεμημένοι EA (DEA)

Οι κατανεμημένοι EA (DEA) διαιρούν το σύνολο του πληθυσμού σε μικρότερους, που ονομάζονται δήμοι, οι οποίοι εξελίσσονται σε ημι-απομόνωση ανταλλάσσοντας τακτικά τα πιο υποσχόμενη μέλη τους. Εξετάστηκε ένας (12, 36) MAEA και ένας (12, 18) DMAEA. Ο πληθυσμός των απογόνων κατανεμήθηκε εξίσου μεταξύ των δύο δήμων.

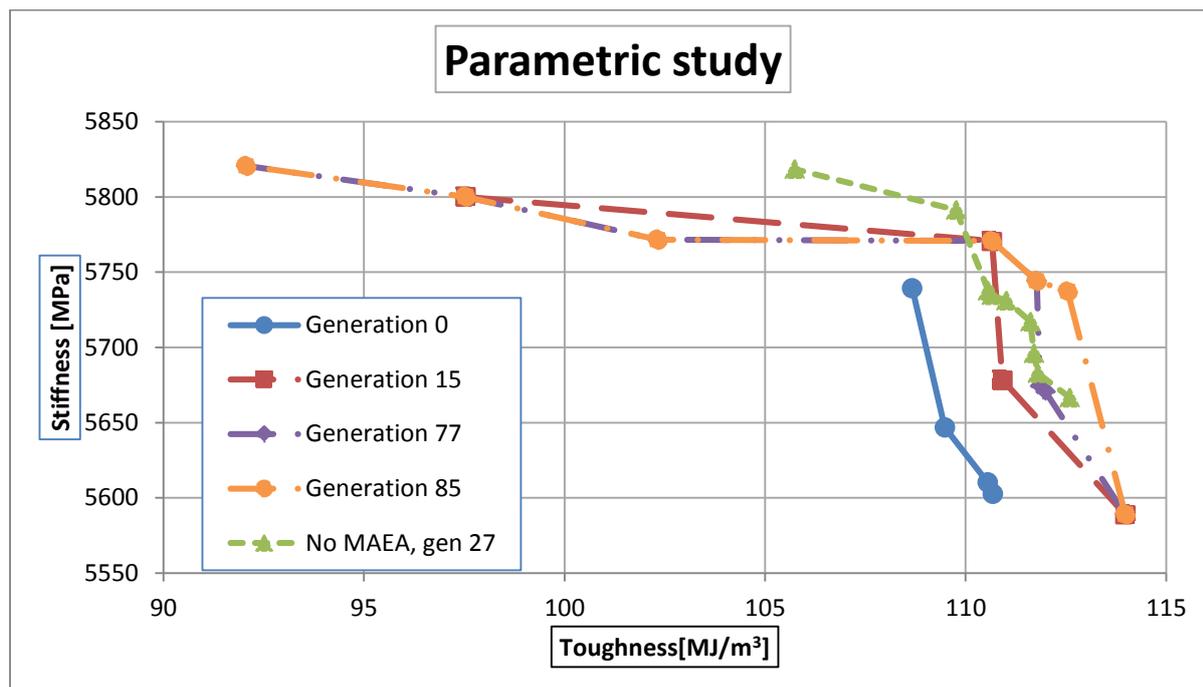
4.3.6. Συμπεράσματα

Ύστερα από αρκετές δοκιμές, υιοθετήθηκαν οι ρυθμίσεις που φαίνονται στον Πίνακα 4, αυτές χρησιμοποιήθηκαν σε όλη την εργασία.

Πίνακας 4: Οι τελικές ρυθμίσεις του EASY που χρησιμοποιήθηκαν σε αυτήν την εργασία.

	Final settings
parents (μ)	12
offspring (λ) per deme	18
Demes	2
ratio (μ/λ)	1/3
μ forming λ	2
Coding	binary-Grey
Crossover operator	Two-points per variable (95%)
Tournament Size	2 (90%)

Η παραμετρική ανάλυση πραγματοποιήθηκε σε ένα πολύ περιορισμένο χρονικό όριο των 16 ωρών ανά τρέξιμο. Προκειμένου να επαληθευτούν τα αποτελέσματα αυτής της βελτιστοποίησης (με τις τελικές ρυθμίσεις, υπό τον χρονικό περιορισμό των 16 ωρών), συγκρίθηκαν με μία τυπική βελτιστοποίηση, ύστερα από συνολικά 1147 ακριβείς αξιολογήσεις, οι οποίες κράτησαν περίπου 4 μέρες.



Σχήμα 33: Τα μέτωπα κυριαρχούντων λύσεων με τις τελικές ρυθμίσεις του EASY.

Το Σχήμα 33 παρουσιάζει το μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων ύστερα από 188 αξιολογήσεις, σύμφωνα με τον αρχικό χρονικό περιορισμό. Παρουσιάζεται επίσης η πρόοδος του μετώπου ύστερα από 1000 αξιολογήσεις, όπως και στις 1147 αξιολογήσεις. Επιπλέον, παρουσιάζεται το μέτωπο με τις αρχικές ρυθμίσεις (4.3.1) ύστερα στις 972 αξιολογήσεις.

Συγκρίνοντας το μέτωπο κυριαρχούντων λύσεων στις 188 αξιολογήσεις με αυτό στις 1147 αξιολογήσεις, το μέτωπο στις 188 αξιολογήσεις παρουσιάζει αρκετά καλά χαρακτηριστικά. Επομένως, η ρύθμιση των παραμέτρων σε αυτό το περιορισμένο χρονικό όριο μπορεί να θεωρηθεί καλή. Για λόγους σύγκρισης, τα αποτελέσματα της αρχικής ρύθμισης περιλαμβάνονται στο Σχήμα 33.

Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα EA στις 927 αξιολογήσεις των αρχικών ρυθμίσεων με αυτά στις 1000 αξιολογήσεις με MAEA, τα αποτελέσματα μπορούν να θεωρηθούν ισάξια. Είναι

προφανές ότι με προσεκτική ρύθμιση των παραμέτρων του EASY μπορεί να επιτευχθούν καλύτερα αποτελέσματα με μικρότερο υπολογιστικό κόστος.

Κεφάλαιο 5. Βελτιστοποίηση της ίνας

Αξιοποιώντας τις ίνες του μεταξιού της αράχνης ως πρωτότυπο, διεξήχθησαν διάφορα πειράματα βελτιστοποίησης για τη βελτίωση των μηχανικών ιδιοτήτων τους. Επιλέχθηκαν ως στόχοι βελτιστοποίησης η δυσθραυστότητα και η δυσκαμψία (2.1.1), καθώς και οι δύο είναι ιδιαίτερα σημαντικοί για εφαρμογές της μηχανικής. Επιπλέον, εξετάστηκε η επίδραση των ιδιοτήτων των υλικών στις ιδιότητες των ινών. Σε πραγματικές εφαρμογές, το κόστος των υλικών μπορεί να είναι εξίσου σημαντικό. Ως εκ τούτου, έγιναν κάποιες πρόσθετες βελτιστοποιήσεις εικονικών υλικών, όπου υπήρχε ένας συμβιβασμός μεταξύ των ιδιοτήτων του υλικού και του κόστους. Τα προβλήματα της βελτιστοποίησης θα παρουσιαστούν στις παρακάτω ενότητες.

5.1. Βελτιστοποίηση της τοπολογίας των κρυστάλλων

Σε αυτή την ενότητα, μελετήθηκε με τη βοήθεια των ΕΑ η επίδραση της νανο-αρχιτεκτονικής της ίνας στις μηχανικές ιδιότητες. Ο σκοπός της παρούσας μελέτης ήταν να αναπτυχθούν κανόνες σχεδιασμού που μπορούν να εφαρμοστούν στο πλαίσιο της διαδικασίας παραγωγής νέων βιομηχανικών υλικών. Ως εκ τούτου, στόχος ήταν οι σχετικές τάσεις και όχι οι απόλυτες τιμές των επιδόσεων των ινών του μεταξιού της αράχνης.

Μια άμεση προσέγγιση της βελτιστοποίησης της τοπολογίας του κρυστάλλου θα μπορούσε να επιχειρηθεί επιτρέποντας την ελεύθερη κυκλοφορία του κάθε κρυστάλλου μέσα στην άμορφη φάση. Σε μια τέτοια περίπτωση η διασφάλιση ότι οι προκύπτουσες περιπτώσεις θα ήταν με μη-επικαλυπτόμενους κρυστάλλους, ήταν μια μεγάλη πρόκληση. Ως εκ τούτου, προτάθηκαν αρκετοί κανόνες για την τοποθέτηση των κρυστάλλων που θα εξασφαλίζουν μεγάλη ελευθερία σχεδιασμού, αποφεύγοντας οποιαδήποτε επικάλυψη. Ως αποτέλεσμα, πολλές από τις περιπτώσεις που θα παρουσιαστούν είχαν ένα σχετικά μικρό αριθμό μεταβλητών σχεδιασμού. Μέσα από τα αποτελέσματα αυτών των περιπτώσεων που παρουσιάζονται στην ακόλουθη ενότητα, στόχος ήταν η επίτευξη κάποιων σταθερών τάσεων που μπορούν, στη συνέχεια, να χρησιμοποιηθούν στο μέλλον ως κανόνες σχεδιασμού των νανο-συνθέτων υλικών.

Οι ιδιότητες των κρυσταλλικών και άμορφων φάσεων προήλθαν απευθείας από το πραγματικό μετάξι της αράχνης, όπως παρουσιάστηκαν στην Ενότητα 3.3. Στην περίληψη αυτή, θα παρουσιαστεί μόνο η τελική περίπτωση η οποία παρουσίασε και το καλύτερο μέτωπο μη-κυριαρχουμένων λύσεων.

5.1.1. Τελική περίπτωση

Αυτή η περίπτωση συνδυάζει τα αποτελέσματα των προηγούμενων περιπτώσεων. Σε αυτήν την περίπτωση, αρχικά οι κρύσταλλοι τοποθετούνται σε ένα δομημένο πλέγμα, όπου για δεδομένη κρυσταλλικότητα, ελέγχεται ο αριθμός των γραμμών και των στηλών. Στη συνέχεια, εφαρμόζοντας κάποιους ψευδο-τυχαίους κανόνες, προκύπτει μία ψευδο-τυχαία μετατόπιση εκάστοτε κρυστάλλου κατά τη x -διεύθυνση και τη y -διεύθυνση.

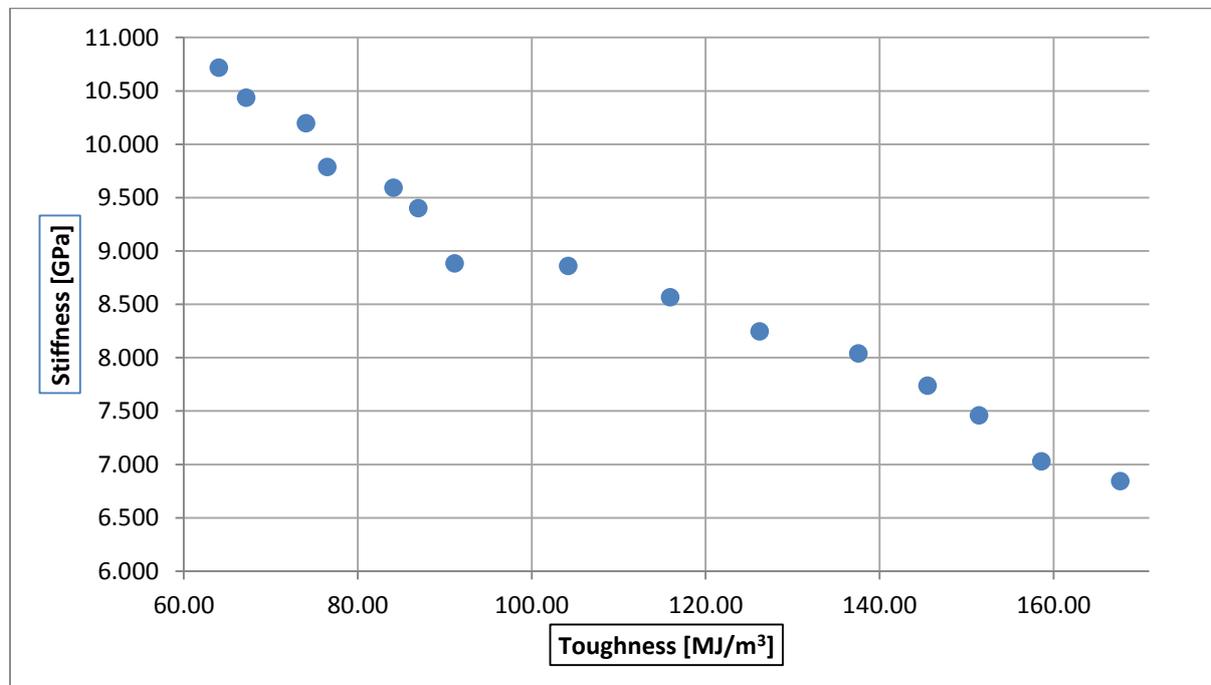
Τέλος, για ένα δεδομένο αριθμό στηλών και γραμμών καθορίστηκε ο αριθμός των κρυστάλλων. Επακολούθως, για δεδομένη κρυσταλλικότητα ορίζεται επίσης μονοσήμαντα το εμβαδό του κάθε κρυστάλλου. Επομένως, ο λόγος (λ) των δύο διαστάσεων του κρυστάλλου (μήκος/ύψος) ήταν μία, επαρκής, μεταβλητή σχεδιασμού, για τον ορισμό των διαστάσεων του κρυστάλλου, όπως φαίνεται στην ακόλουθη εξίσωση

$$\Upsilon\psi\omicron\varsigma \kappa\rho\upsilon\varsigma\tau\acute{\alpha}\lambda\lambda\omicron\upsilon = \sqrt{\frac{\text{Κρυσταλλικότητα} * \text{Εμβαδό Ύνας}}{\lambda\omicron\gamma\omicron\varsigma \text{ διαστάσεων} * \text{Αρ. Στηλών} * \text{Αρ. Γραμμών}}} \quad (5-1)$$

Συνοψίζοντας οι μεταβλητές σχεδιασμού είναι ο αριθμός των στηλών, ο αριθμός των γραμμών, η ψευδο-τυχαία μετατόπιση στη x-διεύθυνση, η ψευδο-τυχαία μετατόπιση στην y-διεύθυνση και ο λόγος των διαστάσεων του κρυστάλλου. Ο αριθμός των γραμμών και ο αριθμός των στηλών ήταν ακέραιοι αριθμοί, επομένως επιλέχθηκαν κατάλληλα όρια και κατάλληλος αριθμός bits της δυαδικής αρίθμησης έτσι ώστε οι πιθανές λύσεις να αποτελούνται από αποκλειστικά από ακέραιους αριθμούς εντός των ορίων. Ο αριθμός των στηλών είχε ως όρια από 5 ως 20 με διακριτοποίηση 4 bit, ενώ ο αριθμός των γραμμών είχε όρια από 3 ως 10 με διακριτοποίηση 3 bit. Οι ψευδο-τυχαίες μετατοπίσεις είχαν όρια $\pm 40\%$ και ο λόγος (λ) διαστάσεων του κρυστάλλου είχε όρια από 1/3 ως 3.

Αυτή η βελτιστοποίηση είχε ως στόχο τη μεγιστοποίηση της δυσκαμψίας και την μεγιστοποίηση της δυσθραυστότητας.

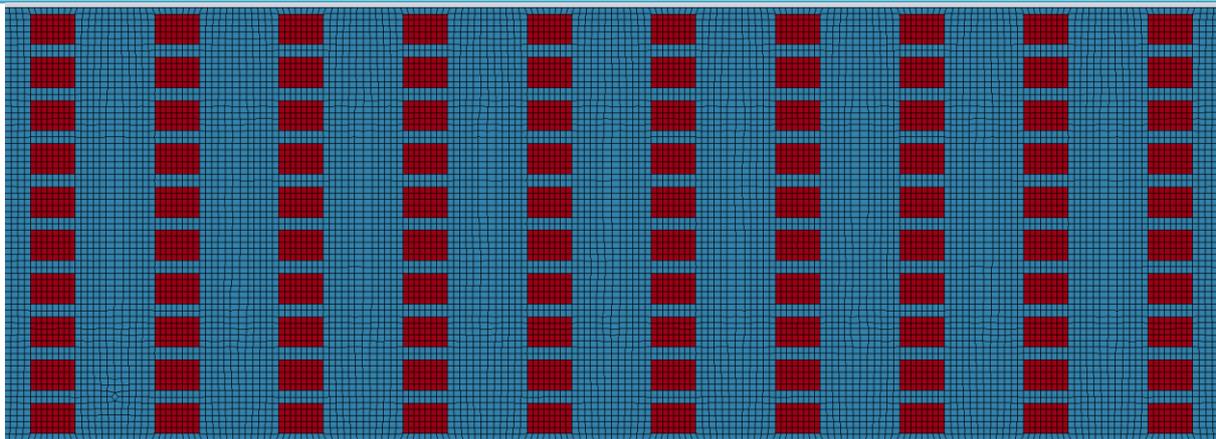
Για 25% κρυσταλλικότητα, τα αποτελέσματα φαίνονται στο ακόλουθο Σχήμα 34 και στον Πίνακα 5.



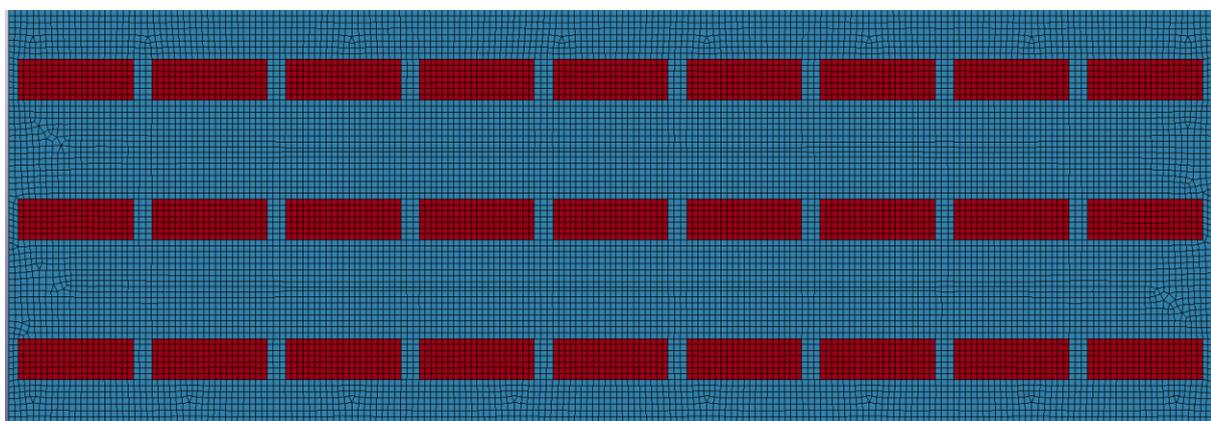
Σχήμα 34: Το μέτωπο μη-κυριαρχουμένων λύσεων.

Πίνακας 5: Τα αποτελέσματα των μεταβλητών σχεδιασμού. Τα αποτελέσματα της αντικειμενικής συνάρτησης φαίνονται στο Σχήμα 34. Ο πίνακας είναι ταξινομημένος σε φθίνουσα τάξη κατά δυσθραυστότητα και κατά αύξουσα κατά δυσκαμψία.

# Columns	# Rows	ratio (λ)	Crystal length	Crystal Height	X mov	Y mov
10	10	1.4497	1.425	0.983	0	0
10	9	1.6219	1.588	0.979	0	0
8	9	3.0	2.415	0.805	0	0
12	10	2.8	1.816	0.642	0	0
12	9	3.0	1.972	0.657	0	0
9	6	3	2.749	0.943	0	0
9	5	3	3.055	1.018	0	0
10	5	3	2.898	0.966	0	0
9	4	3	3.366	1.155	0	0
10	4	3	3.146	1.113	0	0
10	4	3	3.194	1.096	0	0
8	3	3	4.061	1.436	0	0
8	3	3.0	4.183	1.394	0	0
9	3	2.7	3.770	1.375	0	0
9	3	2.8	3.829	1.354	0.08	0



Σχήμα 35: Λύση μέγιστης δυσθραυστότητας.



Σχήμα 36: : Λύση μέγιστης δυσκαμψίας.

Το μέγεθος των κρυστάλλων είχε σημαντική επίδραση στα αποτελέσματα. Οι κρύσταλλοι με εγκάρσιο προσανατολισμό (λόγο διαστάσεων $\lambda < 1$) οδήγησαν σε αυξημένη δυσθραυστότητα, ενώ κρύσταλλοι με αξονικό προσανατολισμό (λόγο διαστάσεων $\lambda > 1$) σε αυξημένη δυσκαμψία.

Ο αριθμός των στηλών κυμαίνονταν από 5 έως 20, αλλά ο πίνακας των επίλεκτων αποτελούνταν μόνο από τιμές που κυμαίνονται από 8 έως 12 Σε αντίθεση με τον αριθμό των σειρών, όπου ο αριθμός κυμαίνονταν από 3 έως 10, ο πίνακας των επίλεκτων που περιελάμβανε όλες τις τιμές, αλλά με τις χαμηλές τιμές για μέγιστη δυσκαμψία και με τις υψηλές τιμές για μέγιστη δυσθραυστότητα.

Θεωρώντας ότι ο αριθμός των στηλών ήταν πρακτικά σταθερός, αυτή η αλλαγή στον αριθμό των σειρών είναι άμεσα συνδεδεμένη με την αλλαγή της αναλογίας των διαστάσεων κρυστάλλων και τον ευρύ προσανατολισμό αυτών σε σειρά για μεγιστοποίηση της δυσθραυστότητας, είτε σε παράλληλο προσανατολισμό για μεγιστοποίηση της δυσκαμψίας.

5.2. Βελτιστοποίηση των ιδιοτήτων των υλικών

Στην προηγούμενη ενότητα, μελετήθηκε ο αντίκτυπος της νανο-αρχιτεκτονικής της ίνας στις μηχανικές ιδιότητες της, με τη βοήθεια των ΕΑ. Οι ιδιότητες της κρυσταλλικής και άμορφης φάσης προήλθαν απευθείας από το πραγματικό μετάξι της αράχνης. Ωστόσο, όπως συζητήθηκε στο Κεφάλαιο 2, το βιομηχανικό υλικό πρέπει να βασίζεται σε υλικά, όπως πολυμερή ή νανοσωλήνες άνθρακα αντί για πρωτεΐνες. Για τον σκοπό αυτό, στην παρούσα ενότητα, εξετάστηκε η συμπεριφορά του δοκιμίου, κατά τη μεταβολή των μηχανικών ιδιοτήτων των συστατικών του.

Για την αρχικοποίηση της ίνας, χρησιμοποιήθηκαν οι μηχανικές ιδιότητες του μοντέλου που περιγράφηκε προηγουμένως. Επιπλέον, η διάταξη των κρυστάλλων που επιλέχθηκε για την ίνα ήταν μία από τις επίλεκτες (elite) που περιεγράφηκαν στην Ενότητα 5.1. Οι ιδιότητες της ίνας συνοψίζονται στον Πίνακα 6.

Πίνακας 6: Η αρχικοποίηση των ιδιοτήτων της ίνας.

Number of Columns	8
Number of Rows	9
Crystal Length [nm]	2.415
Crystal height [nm]	0.805
Crystal yield stress [GPa]	3.95
Crystal Young Modulus [GPa]	71
Viscoelastic short-term shear modulus [GPa]	1.66
Viscoelastic long-term shear modulus [GPa]	0.02
Viscoelastic decay constant / pulling velocity speed [1/nm]	0.5

5.2.1. Μηχανικές ιδιότητες του κρυστάλλου

Σε αυτήν την περίπτωση, αναλύθηκαν οι μηχανικές ιδιότητες της κρυσταλλικής φάσης ενώ οι μηχανικές ιδιότητες της άμορφης φάσης διατηρήθηκαν σταθερές.

Τα κριτήρια αποτυχίας του μοντέλου ήταν δύο: το όριο διαρροής των κρυστάλλων και η παραμόρφωση θραύσης της άμορφης φάσης. Είναι σημαντικό να σημειωθεί ότι σε όλους τους υπολογισμούς που εκτελέστηκαν μέχρι αυτό το σημείο, η παραμόρφωση της άμορφης φάσης ήταν το κριτήριο που ενεργοποιήθηκε, ενώ η τάση των κρυστάλλων δεν ήταν αρκετά υψηλή ώστε να οδηγήσει σε αποτυχία αυτών. Το όριο διαρροής του κρυστάλλου δεν επηρέασε σημαντικά τα αποτελέσματα όσο ήταν πάνω από μια οριακή τιμή. Αυτή η οριακή τιμή εξαρτάται από τις ιδιότητες της άμορφης φάσης. Η δυσθραυστότητα ήταν, ουσιαστικά, σταθερή. Η διαφορά μεταξύ της ελάχιστης και της μέγιστης τιμής ήταν <3% σε σύγκριση με την αύξηση της δυσκαμψίας του κρυστάλλου. Η δυσκαμψία της ίνας, από την άλλη πλευρά, παρουσίασε αύξηση περίπου 1,4 GPa (~ 20%). Ως εκ τούτου, για τις δεδομένες ιδιότητες της άμορφης φάσης, ήταν αποδοτική η αύξηση του μέτρου ελαστικότητας του Young του κρυστάλλου, έως μια τιμή περίπου 200 GPa. Περαιτέρω αύξηση δεν έφερε σημαντική επίδραση στις ιδιότητες των ινών.

5.2.2. Μηχανικές ιδιότητες της άμορφης φάσης

Η ενότητα αυτή επιδιώκει να προσδιοριστεί η συσχέτιση μεταξύ των ιδιοτήτων του ιξωδοελαστικού υλικού της άμορφης φάσης και της μηχανικής συμπεριφοράς της ίνας, διατηρώντας παράλληλα τις ιδιότητες των κρυστάλλων όπως καθορίστηκαν στον Πίνακα 6. Η συμπεριφορά του ιξωδοελαστικού υλικού περιεγράφηκε λεπτομερώς στην ενότητα 3.3 του αγγλικού κειμένου. Η ταχύτητα εφελκυσμού διατηρήθηκε σταθερή και ίση με 6 [nm/ns]. Ως συναρτήσεις καταλληλότητας ορίστηκαν η δυσθραυστότητα και η δυσκαμψία.

Η σταθερά απόσβεσης (β) είχε μια αντίθετη επίδραση στη δυσθραυστότητα και στη δυσκαμψία. Καθώς η σταθερά αυξάνεται, αυξάνεται η δυσθραυστότητα, ενώ μειώνεται η δυσκαμψία. Όπως αναφέρθηκε στις ενότητες 2.1.1.8 και 3.3.2.1 του Αγγλικού κειμένου, αυτή η συμπεριφορά μπορεί να εξηγηθεί ως ότι υψηλότερη τιμή της σταθεράς απόσβεσης ισοδυναμεί με χαμηλότερη ταχύτητα εφελκυσμού και, άρα, ρυθμού παραμόρφωσης και επομένως αποδίδει μειωμένη δυσκαμψία.

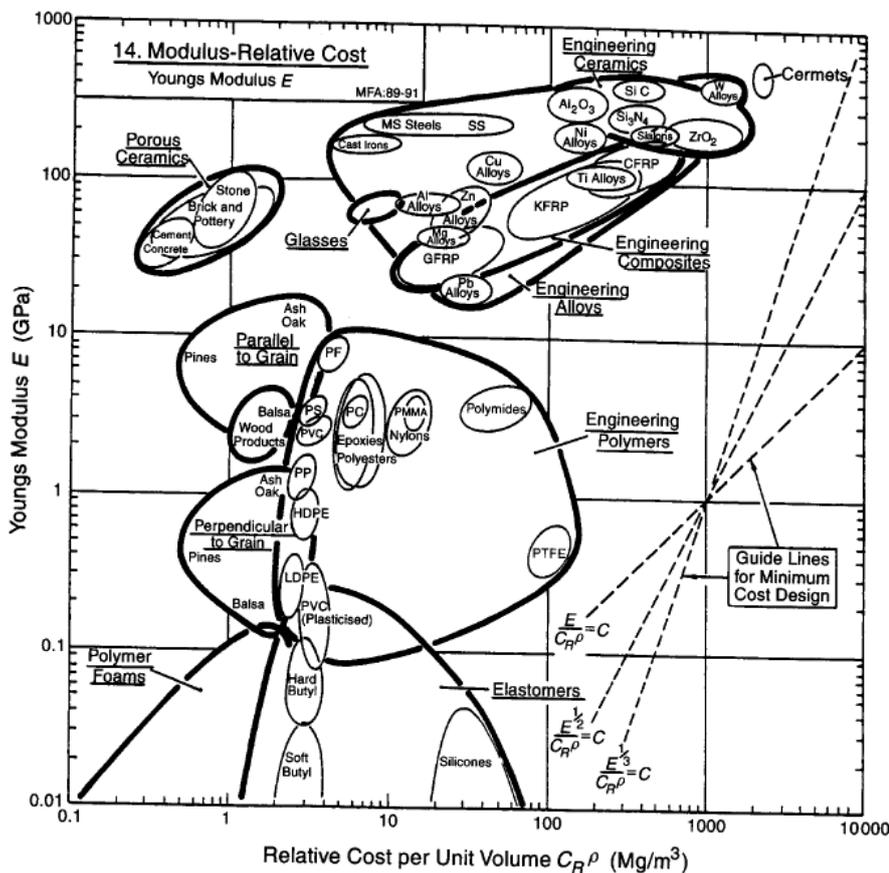
Καθώς το βραχυπρόθεσμο και το μακροπρόθεσμο μέτρο διάτμησης αυξάνεται, αυξάνονται η δυσθραυστότητα και η δυσκαμψία, με τη δυσθραυστότητα να αυξάνεται μέχρι ένα ορισμένο όριο. Αυτό συνέβη επειδή καθώς αυξάνεται η δυσκαμψία, όλες οι εσωτερικές τάσεις αυξάνονται. Ως αποτέλεσμα, ύστερα από μια ορισμένη τιμή, οι κρύσταλλοι φτάνουν στο όριο διαρροής τους, το οποίο στη συνέχεια ελέγχει την αστοχία του υλικού, με αρνητικές επιπτώσεις για τη δυσθραυστότητα των ινών.

Ως εκ τούτου, τα αποτελέσματα έδειξαν ότι η αύξηση του βραχυπρόθεσμου μέτρου διάτμησης έναντι του μακροπρόθεσμου μέτρου διάτμησης, αν αυτό είναι δυνατόν, ήταν αποτελεσματικότερη για τη βελτίωση των συνολικών ιδιοτήτων της ίνας.

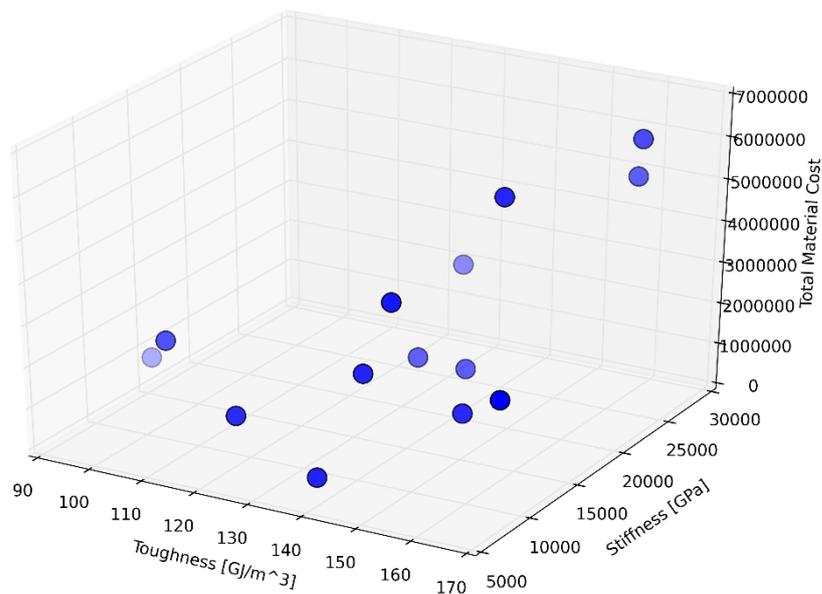
5.3. Βελτιστοποίηση του κόστους υλικών

Στην ενότητα 5.2 μελετήθηκε η επίδραση της χρήσης εξιδανικευμένων υλικών στη νανο-σύνθετη ίνα. Αποδείχθηκε ότι η βελτίωση των ιδιοτήτων των συνιστωσών οδήγησε σε βελτίωση των ιδιοτήτων της ίνας, εφόσον υπήρχε ισορροπία μεταξύ της κρυσταλλικής και της άμορφης φάσης. Ωστόσο, εκτός από τις μηχανικές ιδιότητες, ένας σημαντικός παράγοντας του σχεδιασμού είναι το κόστος των υλικών. Σε αυτήν την ενότητα, ορίζεται ένα λειτουργικό κόστος για τα υλικά με στόχο, τη μεγιστοποίηση της δυσθραυστότητας και της δυσκαμψίας της ίνας, με το ελάχιστο κόστος υλικών.

Ορίστηκε ένα σχετικό κόστος για τα υλικά χρησιμοποιώντας τα διαγράμματα του Asby (Σχήμα 37, Σχήμα 38). Ως υποκατάστατο για την άμορφη φάση των ινών του μεταξιού, θεωρήθηκε η κατηγορία των πολυμερών, ενώ ως υποκατάστατο για την κρυσταλλική φάση, θεωρήθηκε η κρυσταλλική φάση των πολυμερών μαζί με τα κράματα των μετάλλων, τα σύνθετα υλικά και τα κεραμικά.



Σχήμα 37 Το διάγραμμα του Asby για το σχετικό κόστος των υλικών ως προς τη μονάδα του όγκου σε σχέση με το μέτρο ελαστικότητας Young. (29)



Σχήμα 39: Το μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων.

Πίνακας 7: Η μεταβλητές σχεδιασμού του μετώπου μη-κυριαρχούμενων λύσεων (Σχήμα 39). Οι τιμές είναι καταταγμένες σε αύξουσα σειρά βάσει του συνολικού κόστους υλικών.

Elite No	Total material Cost	Number of Columns	Number of Rows	Crystal Young Modulus [GPa]	Crystal Yield Stress [MPa]
1	4.51E+04	5	5	130.00	1924.02
2	2.17E+05	10	6	53.55	4658.33
3	1.51E+05	10	6	84.52	3095.87
4	1.75E+05	11	6	87.42	3261.88
5	1.10E+05	12	3	166.77	3496.25
6	1.44E+05	7	4	594.52	2597.83
7	2.28E+05	9	5	603.23	2197.45
8	1.92E+05	11	5	364.19	3173.99
9	2.40E+05	10	3	987.42	2158.39
10	3.66E+05	10	5	889.68	2539.24
11	3.14E+05	12	5	595.48	3154.46
12	5.37E+05	11	6	969.03	3447.42
13	5.19E+05	12	6	842.26	3603.67
14	6.05E+05	12	6	953.55	3535.31
15	7.94E+04	12	6	982.58	4111.47

Το Σχήμα 39 παρουσιάζει το μέτωπο μη-κυριαρχούμενων λύσεων για τη βελτιστοποίηση συνολικού κόστους υλικών. Απεικονίζονται η δυσθραυστότητα, η δυσκαμψία και το συνολικό κόστος υλικών. Ο Πίνακας 7 παρουσιάζει τις μεταβλητές σχεδιασμού για τις απεικονιζόμενες τιμές. Διαπιστώνεται επίσης ότι μπορεί να επιτευχθεί η ίδια μηχανική

απόδοση της ίνας με 55% λιγότερο συνολικό κόστος υλικών για την αρχική διάταξη με 5 γραμμές και 5 στήλες.

5.4. Γενικές παρατηρήσεις σχετικά με τις βελτιστοποιήσεις που εκτελέστηκαν

Η εργασία αυτή επικεντρώθηκε σε ένα ελεγχόμενο σχεδιασμό των δύο διαστάσεων του μοντέλου της ίνας, προκειμένου να διαπιστωθεί η επίδραση της νανο-δομής στις μηχανικές ιδιότητες του υλικού. Μέσα από αυτή τη μελέτη, εξήχθησαν πολλά ενδιαφέροντα συμπεράσματα.

Η πρώτη μελέτη του σχεδιασμού επικεντρώθηκε στην τοπολογία των κρυστάλλων (Ενότητα 5.1). Η μελέτη αυτή προσπάθησε να βρει τη συσχέτιση μεταξύ των κρυστάλλων και μηχανικές ιδιότητες των ινών. Τροποποιώντας τη γεωμετρία, τις διαστάσεις και τη διάταξη των κρυστάλλων μέσα στην άμορφη φάση επιτεύχθηκε σημαντική βελτίωση των στόχων σχεδιασμού, διατηρώντας παράλληλα τις ιδιότητες των συνιστωσών αμετάβλητες.

Για δεδομένη κρυσταλλικότητα, μικρότεροι κρύσταλλοι βελτίωσαν τόσο τη δυσθραυστότητα όσο τη δυσκαμψία. Επιπλέον, μια δομημένη διάταξη των κρυστάλλων, σε «πλέγμα», είχε γενικά καλύτερο αποτέλεσμα. Είναι σημαντικό να ληφθεί υπόψη ότι τέλεια τοποθετημένοι κρύσταλλοι, θα αυξήσουν πιθανώς το συνολικό κόστος και τη δυσκολία της πραγματικής παραγωγής υλικού.

Επιτεύχθηκαν υψηλές τιμές δυσθραυστότητας όταν η διάταξη των κρυστάλλων θύμιζε τη διάταξη σε σειρά (μεγάλος λόγος στηλών/σειρές). Από την άλλη πλευρά, μια διάταξη που θυμίζει την παράλληλη διάταξη (χαμηλός λόγος στηλών/σειρές) οδήγησε σε υψηλές τιμές δυσκαμψίας. Οι ίδιες διαπιστώσεις ισχύουν επίσης για το λόγο ύψους/μήκους των διαστάσεων του κρυστάλλου.

Σημειωτέον ότι μια εντελώς τυχαία διάταξη δεν αποδίδει πολύ υψηλές τιμές δυσθραυστότητας ή δυσκαμψίας. Είναι ενδιαφέρον να επισημανθεί ωστόσο, ότι σε μια τέτοια περίπτωση, οι μηχανικές ιδιότητες ήταν σχετικά ανεξάρτητες από τον βαθμό κρυσταλλικότητας.

Ο δεύτερος σχεδιασμός βασίστηκε στις ιδιότητες των υλικών. Οι ιδιότητες των συνιστωσών εξετάστηκαν ξεχωριστά χρησιμοποιώντας μία συγκεκριμένη διάταξη κρυστάλλων. Η τάση διαρροής του κρυστάλλου δεν είχε καμία επίδραση στα αποτελέσματα, εφόσον ήταν πάνω από μία τιμή, έτσι ώστε η αποτυχία της ίνας θα συμβεί λόγω της άμορφης φάσης. Αύξηση του μέτρου ελαστικότητας Young αύξησε επίσης τη δυσκαμψία της ίνας, αλλά ήταν αποτελεσματικό μέχρι μια ορισμένη τιμή, διότι πέραν αυτής περιοριζόταν από την άμορφη φάση. Σε γενικές γραμμές, οι μηχανικές ιδιότητες του κρυστάλλου είχαν σημαντική επίδραση στη δυσθραυστότητα της ίνας.

Οι ιδιότητες της άμορφης φάσης είχαν άμεση επίδραση στη δυσθραυστότητα και τη δυσκαμψία. Αύξηση του βραχυπρόθεσμου και μακροπρόθεσμου μέτρου διάτμησης

οδήγησε σε αύξηση τόσο της δυσκαμψίας όσο και της δυσθραυστότητας. Η αύξηση των συντελεστών διάτμησης ακολουθήθηκε από αύξηση της δυσθραυστότητας των ινών μέχρι του σημείου όπου οι κρύσταλλοι θα φθάσουν το όριο διαρροής τους και, συνεπώς, να γίνουν η αιτία για την αποτυχία των ινών. Πέραν αυτού του σημείου, οποιαδήποτε περαιτέρω αύξηση του ιξωδοελαστικού μέτρου διάτμησης θα εξακολουθούσε να οδηγεί σε αύξηση της δυσκαμψία των ινών, σε συνδυασμό με μείωση της δυσθραυστότητας. Συγκρίνοντας τους δύο συντελεστές διάτμησης, η αύξηση του βραχυπρόθεσμου μέτρου διάτμησης ήταν προτιμότερη από του μακροπρόθεσμου. Υψηλότερη τιμή της σταθεράς απόσβεσης, αυξάνει τη δυσθραυστότητα, μειώνοντας παράλληλα τη δυσκαμψία.

Τέλος, ορίστηκε μία συνάρτηση συνολικού κόστους υλικών με σκοπό την ελαχιστοποίηση αυτής και παράλληλα τη μεγιστοποίηση της δυσθραυστότητας και τη μεγιστοποίηση της δυσκαμψίας. Το συνολικό κόστος υλικών εξαρτάται από την κρυσταλλικότητα και τις μηχανικές ιδιότητες του κρυστάλλου. Τα αποτελέσματα αυτής της βελτιστοποίησης έδειξαν μια γραμμική συσχέτιση μεταξύ της δυσκαμψίας των ινών και το συνολικό κόστος υλικών. Ωστόσο, επιτεύχθηκαν υψηλές τιμές δυσθραυστότητας ακόμη και σε χαμηλό συνολικό κόστος υλικών. Αυτή η τάση οφείλεται στο γεγονός ότι οι κρύσταλλοι, οι οποίες είχαν σημαντικά υψηλότερο συνολικό κόστος υλικών σε σύγκριση με την άμορφη φάση, δεν είχαν σημαντική επίδραση στη δυσθραυστότητα.

Κεφάλαιο 6. Τριδιάστατο (3Δ) μοντέλο

Η εργασία αυτή ως τώρα χρησιμοποίησε ένα 2Δ μοντέλο για λόγους ευκολίας και υπολογιστικού κόστους, το οποίο έχει ιδιαίτερη σημασία κατά τη βελτιστοποίηση. Ωστόσο, η 3Δ γεωμετρία είναι απαραίτητη για τη μοντελοποίηση της πραγματικής ίνας. Αυτό το Κεφάλαιο προετοιμάζει ένα 3Δ μοντέλο της ίνας.

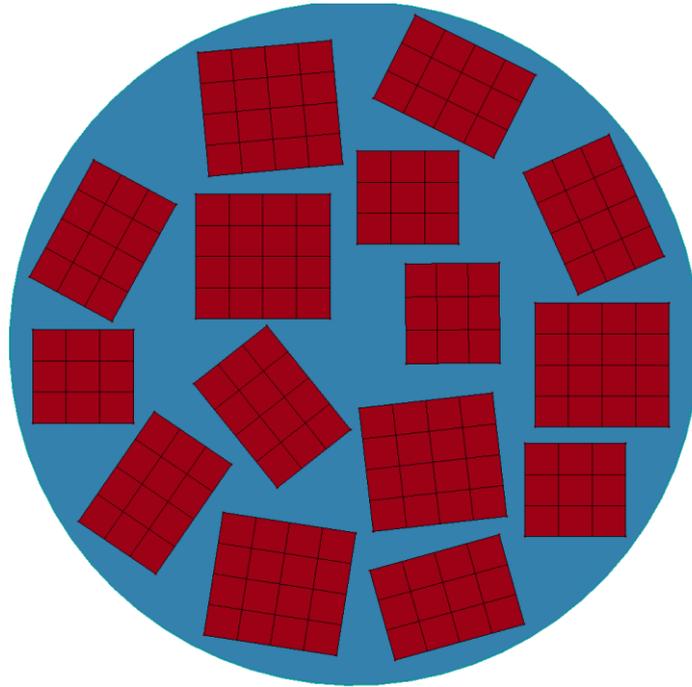
Όταν η γεωμετρία της ίνας είναι ένας κύλινδρος, επιτρέπεται μεγαλύτερη ευελιξία στην τυχαία τοποθέτηση των κρυστάλλων. Ωστόσο, κατά τη διάρκεια της κατασκευής του 3Δ μοντέλου, κατέστη προφανές ότι η δημιουργία του μίας εντελώς τυχαία διάταξης κρυστάλλων είναι εξαιρετικά δύσκολη λόγω των δυνατοτήτων του εμπορικού λογισμικού που χρησιμοποιείται. Στις επόμενες ενότητες, θα παρουσιαστούν τα πρώτα βήματα για την αντιμετώπιση αυτού του προβλήματος.

6.1. Δημιουργία του 3Δ πλέγματος

Ένα 3Δ πλέγμα πεπερασμένων στοιχείων αποτελείται συνήθως από τετράεδρα, εξάεδρα ή και πεντάεδρα. Αυτή η πρώτη προσέγγιση επιχείρησε να δημιουργήσει το πλέγμα χρησιμοποιώντας κυρίως εξάεδρα στοιχεία.

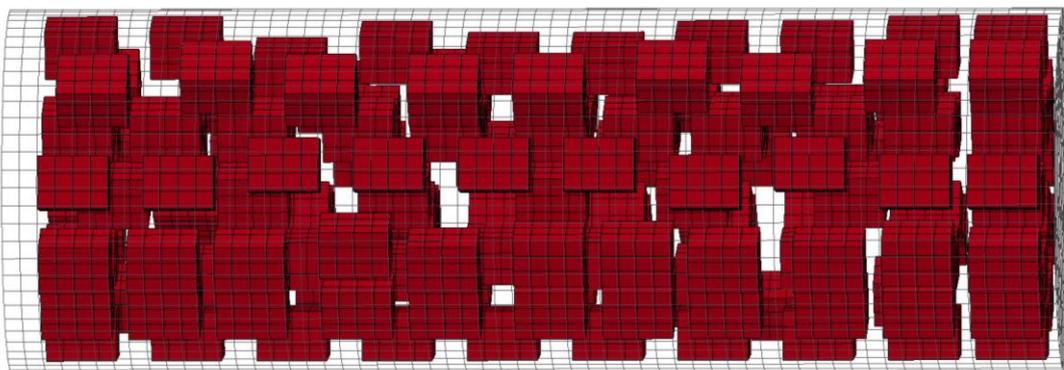
Οι γεωμετρικές παράμετροι του μοντέλου της ίνας βασίζονται σε προηγούμενα πειράματα και υπολογισμούς, (21), (22). Ως αποτέλεσμα, το μήκος της ίνας τέθηκε ίσο με 40 nm και 14 nm διάμετρο. Κάθε κρύσταλλος περιεγράφηκε ως κύβος διαστάσεων $2.691 \times 2.048 \times 1.908 \text{ nm}^3$.

Αρχικά, δημιουργήθηκε το πλέγμα σε μία 2Δ διατομή της ίνας. Στην διατομή αυτή τοποθετήθηκαν διάφορα τετράγωνα με σκοπό να δημιουργήσουν στήλες στις οποίες θα τοποθετηθούν μέσα η κρύσταλλοι με κάποιο σχετικό βαθμό ελευθερίας. Στο Σχήμα 40 φαίνεται μία γεωμετρία που δημιουργήθηκε όπου το κάθε στοιχείο είχε μέγεθος $0.683 \times 0.636 \text{ nm}^2$, επομένως ένας κρύσταλλος καταλαμβάνει 3×3 στοιχεία ακριβώς.



Σχήμα 40: Η αρχική γεωμετρία η οποία χρησιμοποιήθηκε για την δημιουργία της 3D ίνας.

Το τελικό μοντέλο φαίνεται στο Σχήμα 41. Η ίνα αποτελείται από 15 στήλες από 8 με 11 κρυστάλλους σε κάθε στήλη.



Σχήμα 41: 3D πλέγμα με τυχαία διάταξη κρυστάλλων.

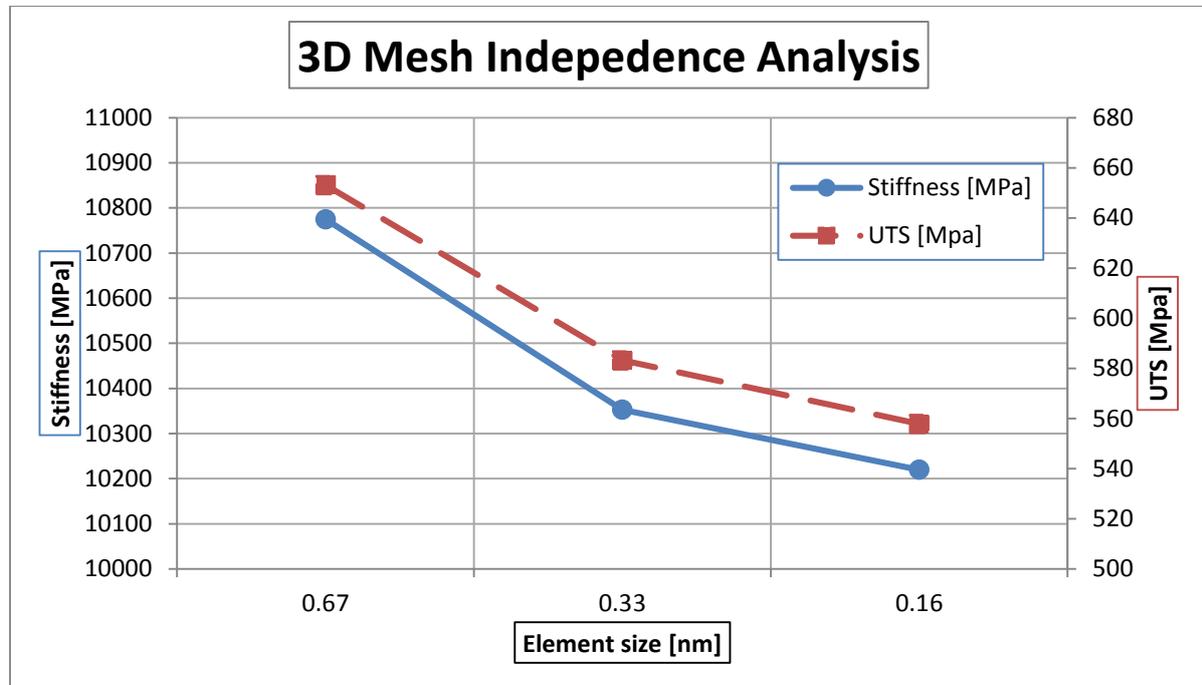
Είναι προφανές ότι η προσέγγιση αυτή χρειάζεται αρκετή παρέμβαση από τον χρήστη και θέτει μείζονες περιορισμούς όσον αφορά την αυθαίρετη τοποθέτηση των κρυστάλλων.

6.2. Ανεξαρτησία λύσης από την ποιότητα πλέγματος

Χρησιμοποιώντας τη διαδικασία που περιγράφηκε, εξετάστηκε η ανεξαρτησία της λύσεως που δίνει ο κώδικας που λύνει το φυσικό πρόβλημα ως προς το πλέγμα που προέκυψε, αλλάζοντας διάφορες παραμέτρους και βλέποντας πόσο αλλάζει η λύση. Το πλέγμα εξετάστηκε μόνο ως προς το μέγεθος των στοιχείων. Στον Πίνακα 8 φαίνονται τα συγκριτικά αποτελέσματα.

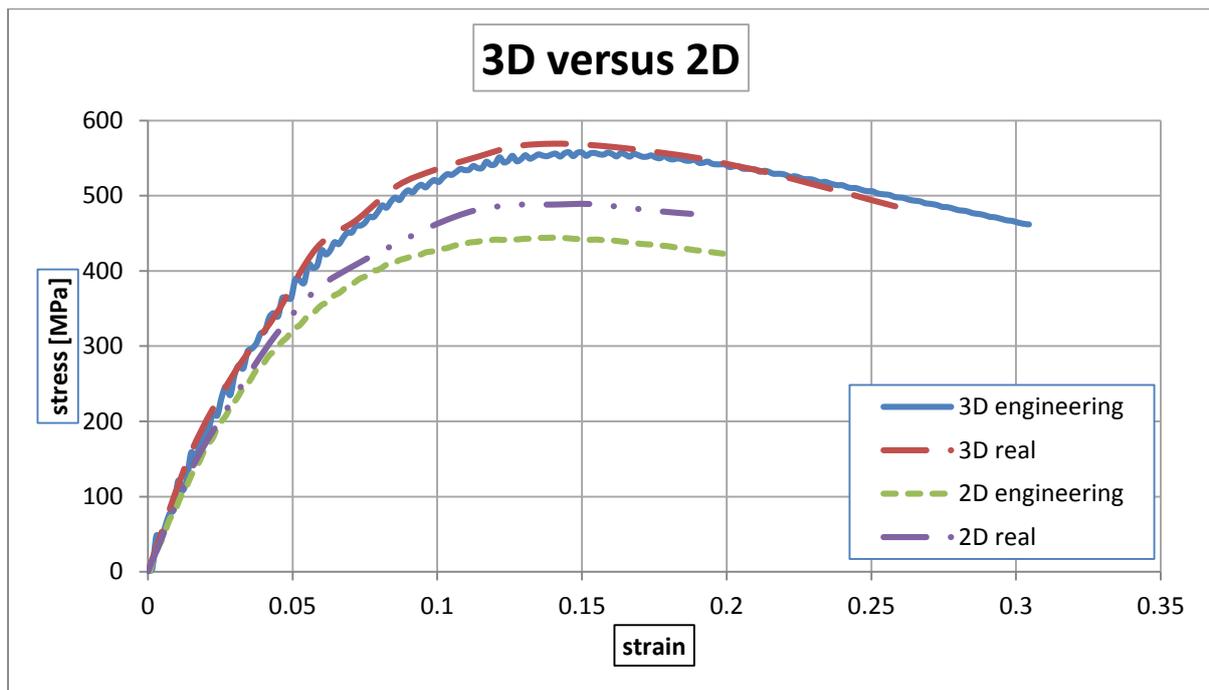
Πίνακας 8: Ανεξαρτησία πλέγματος για τρία διαφορετικά μεγέθη στοιχείων.

Element size	0.67	0.33	0.16
Number of Elements	23 640	166 680	1 360 320
Total CPU time	1h 19m	10h 19m	143h 43m
Stiffness [MPa]	10 775	10 353	10 220



Σχήμα 42: Ανεξαρτησία πλέγματος για το 3D μοντέλο.

Στο Σχήμα 42 φαίνονται η δυσκαμψία και η τάση διαρροής όπως υπολογίστηκαν για τρία διαφορετικά μεγέθη στοιχείων. Λαμβάνοντας υπόψη ότι το μοντέλο θα χρησιμοποιηθεί στο μέλλον σε έναν βρόχο βελτιστοποίησης, το πλέγμα με μέγεθος στοιχείων 0.16nm ήταν εξαιρετικά ακριβό ως προς το κόστος CPU. Προτείνεται, λοιπόν, να υιοθετηθεί το πλέγμα των 0.33 nm. Ωστόσο, τα λιγότερο πυκνά πλέγματα μπορούν να δώσουν ακριβή αποτελέσματα και τα πυκνότερα πλέγματα να χρησιμοποιηθούν εκεί που χρειάζεται μεγαλύτερη ακρίβεια.

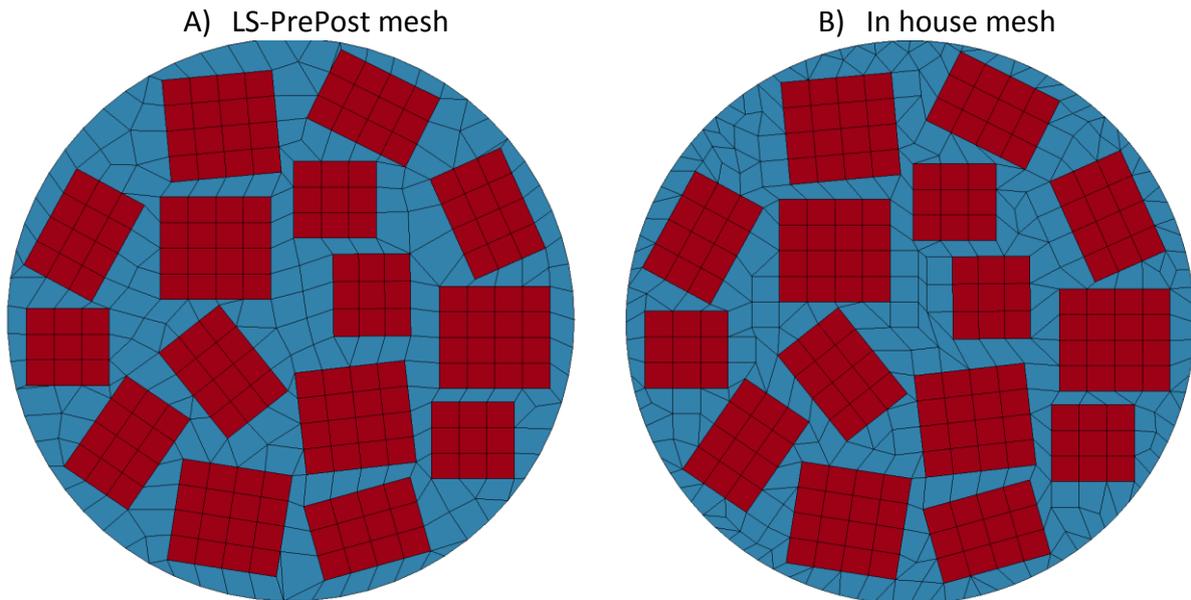


Σχήμα 43: Το διάγραμμα τάσεων παραμορφώσεων του 2D και του 3D μοντέλου με 25% κρυσταλλικότητα.

Το Σχήμα 43 συγκρίνει το διάγραμμα τάσεων παραμορφώσεων του 2D και του 3D μοντέλου με 25% κρυσταλλικότητα. Ο διαφορετικός αριθμός των κρυστάλλων, η διάταξή τους και η μία επιπλέον διάσταση καθιστούν τα δύο αυτά μοντέλα διαφορετικά. Λαμβάνοντας υπόψη τα ανωτέρω, οι αποκλίσεις μεταξύ των δύο καμπυλών θεωρήθηκαν εύλογες

6.3. Οικείος πλεγματοποιητής

Όπως περιγράφηκε στην ενότητα 6.1, το εμπορικό λογισμικό που χρησιμοποιήθηκε, παρουσίασε διάφορους περιορισμούς. Προκειμένου να αυτοματοποιηθεί η διαδικασία πλεγματοποίησης, δημιουργήθηκε ένα οικείο λογισμικό πλεγματοποίησης. Το λογισμικό αυτό δημιουργήθηκε στο Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών στη Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής & Βελτιστοποίησης από τον Υ.Δ. Χ. Καπέλλο. Ως πρώτο βήμα, δημιουργήθηκε ένα 2D πλέγμα με τη διαδικασία που περιγράφηκε στην ενότητα 6.1. Ο οικείος πλεγματοποιητής δημιουργεί αυτό το 2D, μη-δομημένο πλέγμα, με τριγωνικά στοιχεία, με τη μέθοδο του προελαύνοντος μετώπου. Στη συνέχεια, ο αλγόριθμος πραγματοποιεί "έξυπνες" συνενώσεις γειτονικών τριγώνων, δημιουργώντας τετράπλευρα. Όπως είναι φυσικό στο τέλος μένουν και μερικά τρίγωνα.



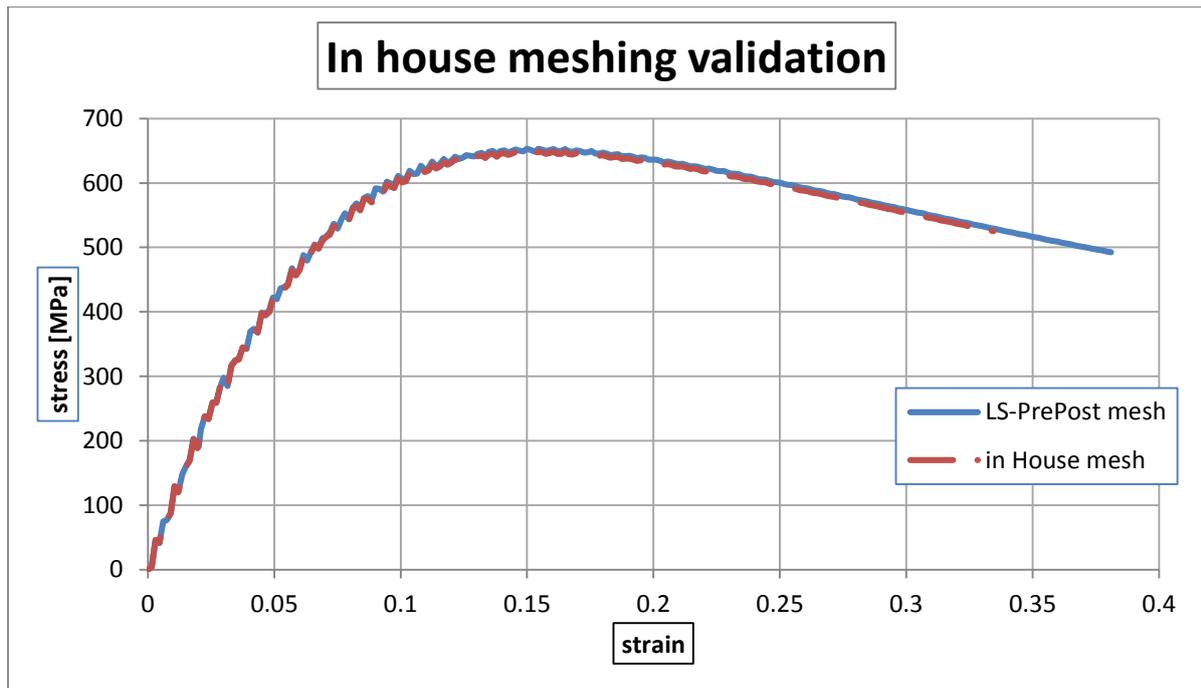
Σχήμα 44: Σύγκριση των πλεγμάτων των δύο διατομών, όπως κατασκευάστηκαν από τα δύο λογισμικά.

Η σύγκριση μεταξύ των δύο διαφορετικών 2Δ πλεγμάτων που δημιουργήσαν τα δύο 3Δ μοντέλα, φαίνεται στο Σχήμα 44.

Πίνακας 9: Σύγκριση μεταξύ των δύο 3Δ μοντέλων.

	LS-PrePost	In House
Στοιχεία	23 640	28 680
Παραμόρφωση θραύσης	38.1%	33.5%
Χρόνος CPU	3h 1m	1h 28m
Χρόνος CPU για 33.5% παραμόρφωση	2h 39m	1h 28m
Δυσκαμψία [MPa]	10 775	10 775

Η καμπύλη τάσεων παραμορφώσεων για τα δύο μοντέλα δεν παρουσίασε σημαντική διαφορά. Ο τερματισμός της προσομοίωσης έγινε λόγω αποτυχίας των στοιχείων. Το πλέγμα από το LS-PrePost απέτυχε σε 5% μεγαλύτερη παραμόρφωση, αλλά ήταν 37% πιο αργή η επίλυση του, για την ίδια τιμή παραμόρφωσης, Πίνακας 9.



Σχήμα 45: Διάγραμμα τάσεων-παραμορφώσεων για τα δύο 3D μοντέλα.

6.4. Συμπεράσματα και μελλοντικά βήματα

Ο οικείος πλεγματοποιητής παρήγαγε πλέγματα που έδωσαν καλά αποτελέσματα. Η ποιότητα του πλέγματος ήταν ήδη συγκρίσιμη με αυτή του LS-PrePost. Μελλοντικά, ο κώδικας θα μπορούσε να αυξήσει ακόμα περισσότερο την ποιότητα του πλέγματος και να επιτρέψει την αυθαίρετη τοποθέτηση των κρυστάλλων μέσα στην ίνα.

Κεφάλαιο 7. Γενικά συμπεράσματα

Εμπνευσμένοι από βιοϋλικά, σε αυτή την έρευνα αναπτύχθηκε μία μέθοδος για το σχεδιασμό ενός βιομηχανικού υλικού το οποίο μιμείται τη φύση. Ο σκοπός ήταν να σχεδιαστεί ένα φτηνό, ελαφρύ και δυνατό υλικό. Ο σχεδιασμός αξιολογήθηκε με προσομοιώσεις πεπερασμένων στοιχείων. Το υλικό βασίστηκε στο μετάξι της αράχνης, το οποίο χαρακτηρίζεται από δύο συνιστώσες: ένα σκληρό και τυπικά ψαθυρό τμήμα και ένα μαλακό με υψηλή επεκτασιμότητα, ιξωδοελαστική συμπεριφορά και την ικανότητα να διαχέει την ενέργεια. Με βάση τα ευρήματα από προηγούμενες εργασίες, αναπτύχθηκε ένα 2D μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες του ιστού της αράχνης. Στη συνέχεια, έγινε σύζευξη του μοντέλου αυτού με ένα λογισμικό EA και χρησιμοποιήθηκαν προκειμένου να μελετηθούν οι σχεδιαστικές δυνατότητες.

Οι βελτιστοποιήσεις του 2D μοντέλου υπέδειξαν ότι η εντελώς τυχαία διάταξη των κρυστάλλων δεν επέφερε πολύ υψηλές τιμές στη δυσκαμψία και στη δυσθραυστότητα. Αντιθέτως, όταν οι κρύσταλλοι τοποθετήθηκαν σε πλήρως διατεταγμένη διάταξη, παρατηρήθηκε σημαντική βελτίωση της δυσκαμψίας και της δυσθραυστότητας. Επιπροσθέτως, όταν η διάταξη έτεινε προς την διάταξη σε σειρά, παρατηρήθηκε αύξηση της δυσθραυστότητας, ενώ όταν η διάταξη έτεινε προς την παράλληλη διάταξη, παρατηρήθηκε αύξηση της δυσκαμψίας. Παρομοίως, η αναλογία των διαστάσεων του κρυστάλλου έδειξε την ίδια τάση. Αυτή η συμπεριφορά ήταν σύμφωνη με τις θεωρητικές τιμές των θεωρητικών δομών: της παράλληλης διάταξης και της διάταξης σε σειρά.

Η ανάλυση υλικών και συνολικού κόστους υλικών υπέδειξε την σημασία των ιδιοτήτων του υλικού. Οι μηχανικές ιδιότητες της άμορφης φάσης πρέπει να είναι σε συμφωνία με τις μηχανικές ιδιότητες της κρυσταλλικής φάσης για τον πιο οικονομικά αποτελεσματικό σχεδιασμό. Γενικά, η άμορφη φάση είχε σημαντική επιρροή τόσο στην δυσκαμψία, όσο και στην δυσθραυστότητα, ενώ οι ιδιότητες της κρυσταλλικής επηρέασαν κυρίως την δυσκαμψία της ίνας.

Το 2D μοντέλο προσέφερε μεγάλη βοήθεια για την διερευνητική ανάλυση του σχεδιασμού. Η αυτόματη μεθοδολογία η οποία βασίστηκε στο συνδυασμό των πεπερασμένων στοιχείων με τους EA εφαρμόστηκε με επιτυχία σε μία πληθώρα περιπτώσεων. Ωστόσο, οι 3D γεωμετρίες ήταν απαραίτητες για τις πραγματικές εφαρμογές της μηχανικής. Επομένως, ένα μοντέλο 3D γεωμετρίας της ίνας προετοιμάστηκε. Μία πληθώρα προκλήσεων παρουσιάστηκαν από την ανάγκη των EA για την αυτόματη δημιουργία του μοντέλου. Προκειμένου να ξεπεραστούν οι περιορισμοί, δημιουργήθηκε ένας οικείος αλγόριθμος δημιουργίας του πλέγματος.

Ως μελλοντικά βήματα, είναι απαραίτητη η περαιτέρω ανάπτυξη του οικείου αλγόριθμου ώστε να επιτρέπει την αυθαίρετη τοποθέτηση των κρυστάλλων μέσα στην ίνα, ώστε να διερευνηθούν πλήρως οι δυνατότητες της δομής της ίνας.

Η έρευνα αυτή εξέτασε τις ενδεχόμενες τιμές που μπορούν να λάβουν οι μηχανικές ιδιότητες των συνιστωσών της ίνας. Τα αποτελέσματα αυτά προσέφεραν πρακτικές πληροφορίες, ωστόσο για την ανάπτυξη ενός βιομηχανικού υλικού, είναι απαραίτητη η περαιτέρω έρευνα της ίνας χρησιμοποιώντας τις μηχανικές ιδιότητες των πραγματικών υλικών, όπως επίσης και μία πιο ακριβής περιγραφή της αλληλεπίδρασης τους. Επιπλέον, είναι θεμελιώδους σημασίας να ληφθεί υπόψη το πραγματικό κόστος των υλικών αλλά και η δυσκολία της κατασκευής.

Βιβλιογραφία

1. International Energy Agency. *Transport, Energy and CO2: Moving towards Sustainability*. s.l. : OECD Publishing, 2009.
2. EIA (US Department of Energy, Energy Information Administration). *International Energy Outlook 2010*. 2010. DOE/EIA-0484(2010).
3. A. Casadei, R. Broda. *Impact of Vehicle Weight Reduction on Fuel Economy for Various Vehicle Architectures*. Ricardo. 2008. RD.07/71602.2.
4. S. Ashley. *Lightweight carbon-fibre and SMC body panels under development*. <http://www.sae.org/mags/aei/mater/12288>.
5. N. Lutsey. *Review of technical literature and trends related to automobile mass-reduction technology*. California : s.n., 2010.
6. *Determining Tensile Test Offset Yield Strengths using Extensometer*. ADMET <http://admet.com/blogposts/determining-tensile-test-offset-yield-strengths-using-extensometer/>.
7. *Material selection and processing*. University of Cambridge, Department of engineering. <http://www-materials.eng.cam.ac.uk/mpsite/properties/default.html>.
8. R.S. Lakes. *Viscoelastic Solids (Mechanical and Aerospace Engineering Series)*. 1998.
9. D.W. Pepper, J.C. Heinrich. *The Finite Element Method: Basic Concepts and Applications*. s.l. : Taylor & Francis. ISBN 1-59169-027-7.
10. K.C. Giannakoglou. *Optimization Methods in Aerodynamics. Notes*, National Technical University of Athens, 2005, (in Greek).
11. *EASY: the Evolutionary Algorithms SYstem*. <http://velos0.ltt.mech.ntua.gr/EASY/>.
12. K.C. Giannakoglou. <http://velos0.ltt.mech.ntua.gr/research/index.html>.
13. K.C. Giannakoglou. *Design of optimal aerodynamic shapes using stochastic optimization methods and computational intelligence*. Progress in Aerospace Sciences, 2002, Vol. 38, pp. 43-76.
14. M.K. Karakasis, A.P. Giotis, K.C. Giannakoglou. *Inexact information aided, low-cost, distributed genetic algorithms for aerodynamic shape optimization.*: International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2003, Vols.10-11, pp. 1149-1166.
15. M. Karakasis, K.C. Giannakoglou. *On the Use of Metamodel-Assisted Multi-Objective Evolutionary Algorithms.*: Engineering Optimization, 2006, Vol. 38, pp. 941-957.

16. I.C. Kampolis, K.C. Giannakoglou. *Distributed Evolutionary Algorithms with Hierarchical Evaluation*. : Engineering Optimization, 2009, Vol. 41, pp. 1037-1049.
17. I.C. Kampolis, K.C. Giannakoglou. *A multilevel approach to single- and multiobjective aerodynamic optimizations*.: Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2008, Vol. 197, pp. 33-40.
18. V.G. Asouti, I.C. Kampolis, K.C. Giannakoglou. *A Grid-Enabled Asynchronous Metamodel-Assisted Evolutionary Algorithm for Aerodynamic Optimization*. Genetic Programming and Evolvable Machines: Parallel and Distributed Evolutionary Algorithms, Part One, 2009, Vol. 10, pp. 373-389.
19. V.G. Asouti, K.C. Giannakoglou. *Aerodynamic optimization using a parallel asynchronous evolutionary algorithm controlled by strongly interacting demes*.: Engineering Optimization, 2009, Vol. 41, pp. 241-257.
20. J.R. Davis. *Tensile Testing*. ASM international, 204. 0-87170-806-X.
21. *Rate-Dependent Behaviour of the Amorphous Phase of Spider Dragline Silk*. June 2014 . Patil SP, Markert B, Gräter F. 11, s.l. : Biophysical Journal, June 2014, Τόμ. 106, σσ. 2511-2518.
22. S.P. Patil, B. Markert, F. Gräter. *Refining a Bottom-up Computational Approach for Spider Silk Fibre Mechanics*.: Proceedings of the 3rd GAMM Seminar on Continuum Biomechanics, 2012/11. Vols. II-21, pp. 75–87.
23. J.O. Hallquist. *LS-DYNA Theoretical Manual*. May 1998.
24. L.R. Herrmann, F.E. Peterson. *A numerical procedure for viscoelastic stress analysis*.: CPIA Publication, 1968. Seventh meeting of ICRPG Mechanical Behaviour Working Group. Vol. 177, pp. 60-69.
25. M. Cetinkaya, S. Xiao, B. Markert, W. Stacklies, F. Gräter. *Silk Fiber Mechanics from Multiscale Force Distribution Analysis*.: Biophysical Journal, 2 Mar 2011, Vol. 100, pp. 1298–1305.
26. S.P. Patil, S. Xiao, K. Gkagkas, B. Markert, F. Gräter. *Viscous Friction between Crystalline and Amorphous Phase of Dragline Silk*: PLoS ONE, 13 Aug 2014, Vol. 9.
27. S. Xiao, W. Stacklies, M. Cetinkaya, B. Markert, F. Gräter. *Mechanical Response of Silk Crystalline Units from Force-Distribution Analysis*.: Biophysics Journal, 20 May 2009, Vol. 96, pp. 3997–4005.
28. S.P. Patil, B. Markert, F. Gräter. *Revealed Dragline Silk Fiber Mechanics with Visco-elastoplastic Material Model*.: Heidelberg Institute for Theoretical Studies.



**NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS
SCHOOL OF MECHANICAL ENGINEERING
LAB. OF THERMAL TURBOMACHINES
PARALLEL CFD & OPTIMISATION UNIT**

Development of material structure design method combining evolutionary algorithms and finite elements. Application for the optimisation of bio-inspired nano-composite fibres.

Diploma thesis

Panagiotis Simatos

Supervisor: Kyriakos C. Giannakoglou, Professor NTUA

Athens, October 2014

Acknowledgements

As it is common tradition, the opening of my Diploma Thesis is an acknowledgement. However, not only the first page but the whole paper is a very sincere expression of gratitude to all the people who have shared their knowledge, experiences and feelings with me over the last years. I would like to thank Prof. K. C. Giannakoglou for being an inspiration throughout my Academic year and his personal guidance and assistance.

A big part of this diploma thesis, was realized in “TOYOTA Motor Europe”, department of “Advanced Technology 2”. Here specifically, I would like to take the opportunity to wholeheartedly thank Dr. K. Gkagkas for all his support, guidance and invaluable assistance. With fortitude and tenacity he urged and consorted me throughout my endeavor.

Furthermore, I would like to express my deepest appreciation to all my colleagues, I. Sakata, J. Ambeck, G. Othmezouri, P. Sauer, N. Vignard, Y. Morita, M. De Weser for giving me the chance to work amongst them in such a wonderful and friendly environment.

In addition, I would like to thank V. Asouti, X. Trompoukis, C. Kapelos and all the members of the PARALLEL CFD & OPTIMIZATION UNIT of the School of Mechanical Engineering of National Technical University for their continuocous assistance.

Last but not the least important, I owe more than thanks to my family, my friends and my teachers for the encouragement and the knowledge they have generously offered me.



**NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS
SCHOOL OF MECHANICAL ENGINEERING
LAB. OF THERMAL TURBOMACHINES
PARALLEL CFD & OPTIMISATION UNIT**

Development of material structure design method combining Evolutionary Algorithms and Finite Elements. Application for optimisation of bio-inspired nano-composite fibres.

Panagiotis Simatos

Supervisor: Kyriakos C. Giannakoglou, Professor NTUA

Athens, October 2014

Abstract

Inspired by the advanced mechanical properties of spider silk, the purpose of this diploma thesis is the optimisation of the structure of a novel, light weight, strong, bio-inspired material for automotive use.

Certain spider dragline silks have an extraordinary combination of mechanical properties such as high strength, ductility and toughness, which outperform some of the best man-made materials in term of their mechanical properties. The structure of spider silk has been found to be a composite of two different phases, the stiff crystal and the amorphous phase which provides the extensibility of the fibre.

The approach of this diploma thesis is to model the new materials using discrete building blocks that describe the different phases of the material. These building blocks co-operate in order to achieve a global result which surpasses the properties of each separate component. Using Evolutionary Algorithms as the optimisation method combined with an FEM tool as the evaluation method, the target is to demonstrate a design method where the internal layout of a material is automatically optimised for given target properties (high stiffness, high toughness, minimum material cost). Additionally, based on the optimisation findings, the direction for designing an ultimate virtual material may be defined, with ideal sub-component behaviour and interaction.

Acronyms

- MD Molecular Dynamics
- FEM Finite Element Method
- EASY Evolutionary Algorithms System
- IPE Inexact Pre-Evaluations
- IF Important Factors
- PCA Principal Component Analysis
- MAEA Metamodel-Assisted Evolutionary Algorithm

Table Of contents

ACKNOWLEDGEMENTS	3
ABSTRACT	4
ACRONYMS	5
TABLE OF CONTENTS	6
LIST OF FIGURES	7
LIST OF TABLES	12
CHAPTER 1. INTRODUCTION	13
CHAPTER 2. LITERATURE REVIEW	17
2.1. MATERIALS	17
2.2. FINITE ELEMENT METHOD	41
2.3. EVOLUTIONARY ALGORITHMS	43
CHAPTER 3. MATERIAL DESIGN METHOD	46
3.1. DESCRIPTION OF NUMERICAL EXPERIMENT	46
3.2. SILK FIBRE FEM MODEL	47
3.3. SUB-COMPONENT PROPERTIES	47
3.4. MESHING	54
3.5. SIMULATION	55
3.6. DATA EXTRACTION	55
3.7. OPTIMISATION PROCEDURE	57
CHAPTER 4. OPTIMISATION PROCEDURE CONFIGURATION	59
4.1. FIBRE STRUCTURE AND PROPERTIES	59
4.2. SOLUTIONS INDEPENDENCE TO THE MESH	67
4.3. OPTIMISATION PARAMETERS	70
CHAPTER 5. FIBRE OPTIMISATION	77
5.1. CRYSTAL TOPOLOGY OPTIMISATION RUNS	77
5.2. MATERIAL PROPERTIES OPTIMISATION RUNS	88
5.3. MATERIAL COST	94
5.4. GENERAL COMMENTS ON THE OPTIMISATIONS PERFORMED	98
CHAPTER 6. 3D MODEL	100
6.1. MESH CREATION	100
6.2. SOLUTION INDEPENDENCE TO THE MESH	102
6.3. NTUA MESHING SOFTWARE	103
6.4. COMMENTS AND FUTURE WORK FOR THE 3D MODEL	105
CHAPTER 7. GENERAL CONCLUSIONS AND FUTURE WORK	106
BIBLIOGRAPHY	108

List of Figures

Figure 1: EU total GHG emissions forecast for 2050 and comparison to target.	13
Figure 2: Multi-scale simulation framework.....	14
Figure 3: Material design methodology.....	15
Figure 4: Historical shift in vehicle composition by mass (5).....	17
Figure 5: Stress-strain (σ - ϵ) curve. A. Elastic (proportionality) limit, B. Offset yield strength, D. Ultimate Tensile strength, X. Rapture (6)	18
Figure 6: A cylindrical specimen under tension load while forming a “neck”. (7)	19
Figure 7: True and Engineering Stres-Strain Curves of the 2D FEM fibre model 25% crystallinity.....	20
Figure 8: Components of stress in three dimensions. (8).....	20
Figure 9: Stiffness diagram for several material families (9).....	22
Figure 10: Stress-strain graph for three different types of materials. The area below the curve represents the tensile toughness value. (9)	22
Figure 11: Strength-Toughness diagram of different types of materials. (9).....	23
Figure 12: Stress-strain curves of a viscoelastic material for different constant strain rate loading and unloading. Higher strain rates result in higher stresses. The area inside the hysteresis loop is the energy dissipated due to internal friction.	24
Figure 13: General behaviour of a viscoelastic material under constant strain and stress loading. (A) A rectangular box of a viscoelastic material is deformed to a constant strain of 0.1. (B) The developed stress relaxes from 75 MPa to negligible values within a few ms. (C) In a creep test, a constant stress of 0.14 MPa is applied to the material, (D) resulting in an instantaneous elastic straining, followed by a creep in strain up to the equilibrium value of 4.5%. (11)	25
Figure 14: Viscoelastic substance hysteresis loop. The area in the centre of the hysteresis loop is the energy dissipated due to internal friction.	26
Figure 15: Standard Linear Solid model for viscoelastic materials.....	26
Figure 16: Schematic of the microscopic structure of nacre layers	27
Figure 17: Close-up X-ray picture of a piece of the pelvic bone. (17)	28
Figure 18: Hierarchical organization of bone.	29
Figure 19: Crack propagation in cortical bone in Parallel and Perpendicular direction. (18) .	30
Figure 20: (a) Photograph of beak cross-section in which foam (consisting of membranes in a framework of fibres) is viewable; (b) Scanning Electron Micrograph of foam and (c) 3-D visualization of structure of trabeculae constructed from computed tomography (CT) images (20)	31
Figure 21: Hierarchical structure of spider silk fibre.	33
Figure 22: Crystalline and amorphous area inside a polymer. (21).....	36
Figure 23: Formation of Spherulite.....	37
Figure 24: The Microstructure Spherulitic polyethylene.....	37
Figure 25: Nodes for canonical square elements with bilinear (left) and bi-quadratic (right) polynomial shape functions. (26)	42

Figure 26: Arrangement of nodes for linear (left), quadratic (middle) and cubic (right) Lagrange finite element approximations. (26)	42
Figure 27: Node placement for trilinear (left) and tri-quadratic (right) polynomial interpolants on a cube (hexahedron). (26).....	42
Figure 28: Node placement for linear (left), quadratic (centre) and cubic (right) interpolants on tetrahedra. (26).....	43
Figure 29: A screenshot from the GUI of EASY. (28).....	44
Figure 30: Tensile test machine (7).....	46
Figure 31: A fibre model under tension test. The left boundary of the specimen is constrained, while displacement with constant strain rate is applied at the right boundary.	47
Figure 32: The 2D model for the spider fibre with the boundary conditions.	47
Figure 33: Elasticity and stability of crystalline units from force-probe MD simulations. Stress-strain curves of two different crystal configurations, with solid black curves for averages. The inset shows the complete extension and rupture process. From (11).....	48
Figure 34: Elasticity and stability of crystalline units from force-probe MD simulations. Simulation snapshots of the rupture process. Crystalline unit is in green with the pulled strand in red. The pulling force is depicted as a spring.	49
Figure 35: Απεικόνιση της εξίσωσης (3-7).....	52
Figure 36: LS-DYNA solution versus the analytical solution of a viscoelastic material behaviour under tensile test (the continuous red line is the analytical solution and the dashed blue line is the solution from LS-DYNA)	53
Figure 37: Stresses in the crystalline and amorphous components as well as the interface segments as a function of their relative velocity. (42)	54
Figure 38: Calculation of Stiffness. The marked area is the calculated integral, while the linear elastic region is marked with a red triangle.	56
Figure 39: Flow chart. Illustration of the Evolutionary Algorithm coupled with the evaluation tool.....	58
Figure 40: LS-Dyna model for the serial arrangement, with 25% crystallinity. The pulling axis is the horizontal.	59
Figure 41: LS-Dyna model for the parallel arrangement, with 25% crystallinity. The pulling axis is the horizontal.	60
Figure 42: LS-Dyna model for the random arrangement, with 25% crystallinity.....	61
Figure 43: Serial arrangement of crystals from 0% (pure amorphous) up to 100% (pure crystal) crystallinity. The continuous blue line with circles is the strain curve and with the dashed red line with squares is the rupture stress curve.....	62
Figure 44: Parallel arrangement of crystals from 0% (pure amorphous) up to 100% (pure crystal) crystallinity. The continuous blue line with circles is the strain curve and with the dashed red line with squares is the rupture stress curve.....	62
Figure 45: Random arrangement of crystals from 0% (pure amorphous) up to 100% (pure crystal) crystallinity. The continuous blue line with circles is the strain curve and with the dashed red line with squares is the stress curve.....	63

Figure 46: Variation of stiffness with respect to the silk fibre crystallinity. The continuous blue line with circles is the random arrangement curve, with the long-dashed red line with squares is the serial arrangement curve and with the short-dashed green line with triangles is the parallel arrangement..... 64

Figure 47: Variation of toughness with respect to the silk fibre crystallinity. The continuous blue line with circles is the random arrangement curve, the long-dashed red line with squares is the serial arrangement curve and the short-dashed green line with triangles is the parallel arrangement. 65

Figure 48: Variation of the mechanical properties with fibre crystallinity. Results for three different crystalline distributions are shown as indicated by the schematics. Variation of the rapture stress and rapture strain with respect to the fibre crystallinity for 3D fibre model with (a) a parallel arrangement, (b) a random distribution and (c) a serial arrangement of crystals in the amorphous phase. (d) Variation of the initial stiffness with respect to the silk fibre crystallinity. Results for the parallel (black), random (red) and serial (green) distribution of crystalline units are shown. From (45). 66

Figure 49: Variation of the toughness with respect to the crystallinity. Results for the serial (blue with triangles), random (green with squares) and parallel (black with circles) distribution of the crystalline units are shown as indicated by the schematics. From (45).... 66

Figure 50: Part of the two different meshes made by LS-PrePost. Left mesh is with quads, the right one with triangles. Both meshes have element size 0.2. For 25% crystallinity the quad mesh has a total of 14.432 elements, when the triangles mesh has a total of 18946 elements. 67

Figure 51: 2D element independence mesh density analysis for quadrilateral elements. The continuous blue line represent the stiffness and the dashed red line represents the Ultimate Tensile Stress. 68

Figure 52: 2D element independence mesh density analysis for triangular elements. The continuous blue line represent the stiffness and the dashed red line the Ultimate Tensile Stress..... 69

Figure 53: The initial geometry of crystals for the parametric studies. With black rectangular the area where the centre of the crystal was allowed to move is marked..... 70

Figure 54: front of non-dominated solutions with the initial configurations of EASY and Inexact Pre-Evaluations enabled. The circles (blue) are the initial configuration of EASY and the squares (red) are the Inexact Pre-Evaluations. The number of parents is 12 and the number of offspring is 36..... 71

Figure 55: The front of non-dominated solutions with metamodels while altering the minimum database entries. The continuous blue line with circles is with 72 minimum entries and the dashed red line with squares is with 36 minimum selected entries. The number of parents is 12 and the number of offspring is 36..... 72

Figure 56: The front of non-dominated solutions for IPE with and without PCA enabled. The continuous blue line with circles is without PCA enabled and the dashed red line with

squares is with PCA enabled. The number of parents is 12 and the number of offspring is 36. 73

Figure 57: The front of non-dominated solutions for Distributed Evolution Algorithms. The continuous blue line with circles is the front of non-dominated solutions without DEA and with dashed red line with squares is the front of non-dominated solutions with 2 demes. The number of parents is 12 and the number of offspring is 36 without demes and 18 with demes..... 74

Figure 58: The front of non-dominated solutions with the final setting from the parametric study of EASY settings..... 75

Figure 59: Structured arrangement for 25% crystallinity. 78

Figure 60: Heat map optimisation elite 80

Figure 61: This is a clarification example to illustrate the rules for the percentage displacement..... 81

Figure 62: Percentage displacement optimisation elite structure. 82

Figure 63: The front of non-dominated solutions of the second structured optimisation. The data labels indicate the number of columns. 83

Figure 64: The front of non-dominated solutions of the second structured optimisation. The data labels indicate the number of columns. 84

Figure 65: The front of non-dominated solutions of the “structure – crystal size and displacement optimisation” is shown with blue circles, while with red squares are the results of the previous “structured optimisation 3” and with green triangles are the results from the previous structured optimisation 2. There is a significant improvement on both toughness and stiffness values..... 85

Figure 66: Elite from Structure – Crystal size – Displacement optimisation with maximum toughness..... 86

Figure 67: Elite from Structure – Crystal size – Displacement optimisation with maximum stiffness. 86

Figure 68: Rotation of the crystals. The crystals are rotated by 16degrees, in a symmetric way. A) The fibre in the initial position. B) The fibre just before the failure point 87

Figure 69: The results of crystal material optimisation. In this figure, stiffness (with blue circles) and toughness (with red square) are plotted against the crystal’s Young Modulus. . 89

Figure 70: Toughness (blue circles) and stiffness (red squares) variation in respect to crystal yield stress. 90

Figure 71: The front of non-dominated solutions of amorphous material optimisation..... 91

Figure 72: Impact of the decay constant (β) on toughness (blue circles) and stiffness (red squares). The elite values of the optimisation are plotted. 91

Figure 73: The toughness (blue circles) and stiffness (red squares) variation with respect to the short-term shear modulus..... 92

Figure 74: The toughness (blue squares) and stiffness (red squares) variation with respect to the long-term shear modulus. 93

Figure 75 Asby chart for the relative cost of materials per unit volume with respect to the Young Modulus. (7)..... 94

Figure 76: Asby chart for the relative cost of materials per unit volume with respect to the strength. For metals and polymers Strength is defined as the yield Strength and for ceramics Strength is defined as the compressive Strength. (7)..... 95

Figure 77: The front of non-dominated solutions of the material cost function optimisation. 97

Figure 78: The initial 2D cross-section plane which was used to create the 3D fibre..... 101

Figure 79: 3D mesh with the “random” position of the crystals. 101

Figure 80: 3D mesh independence analysis. The continuous blue line is convergence of stiffness and the dashed red line is the convergence of Ultimate Tensile Strength. 102

Figure 81: Real and engineering stress-strain curve of 2D and 3D fibre models with 25% crystallinity..... 103

Figure 82: Comparison of the 2D meshed cross-section. On the left is the mesh from LS-PrePost and on the right is the mesh from the in house code..... 104

Figure 83: Stress-Strain curve from LS-PrePost meshing compared with the in house meshing code. The continuous blue line is the stress-strain curve from LS-PrePost mesh; the dashed red line is the stress strain curve from in house mesh. 105

List of Tables

Table 1: Bone mechanical properties: Young modulus	29
Table 2: Mechanical properties of a typical Zirconia (ZrO ₂) (22).....	35
Table 3: Examples of highly crystalline and highly amorphous polymers. (21)	36
Table 4: Typical mechanical properties of steel and its components	38
Table 5: Typical mechanical properties of ZTA-14.....	39
Table 6: Morphological and Mechanical Characteristics of the blends presented in this Section. (J: impact strength, Fmax: maximum force at break).....	40
Table 7: Comparison between the serial and parallel's arrangement initial stiffness as calculated by the equivalent spring's model against the LS-DYNA's solution.....	64
Table 8: Mesh independence analysis. Element size analysis for mixed quadrilateral elements. The pulling velocity was 0.6 [m/s] and the LS-DYNA ran using 8 CPU.....	68
Table 9: Mesh independence analysis. Element size analysis for triangle elements. The pulling velocity was 0.6 [m/s] and the LS-DYNA ran using 8 CPU.	68
Table 10: Final options for EASY after the parametric study.....	75
Table 11: The results of the structured optimisation.....	78
Table 12: The results of the crystal size optimisation	82
Table 13: The comparison between 24% crystallinity and fully aligned grid, versus 25% crystallinity and one row with one extra crystal.	84
Table 14: The design variables' result of the structure – crystal size and displacement optimisation. The objectives can be seen in Figure 65 with blue squares. The table is sorted in ascending order for stiffness and in descending for toughness (therefore the rightmost point corresponds to the first row of table, while the leftmost point corresponds to the last row of table).....	86
Table 15: The initial fibre properties used for the Material Properties Optimisation runs. ...	88
Table 16: The design variables values of the front of non-dominated solutions (Figure 77). The values were sorted in ascending order according to the total cost values.....	97
Table 17: Mesh independence analysis using different mesh element sizes.....	102
Table 18: The comparison between the LS-PrePost and In House meshing.	104

Chapter 1. Introduction

The issue of global warming and its relation to human-induced emissions is well known. In 2009, both the European Union and G8 leaders agreed that CO₂ emissions must be cut by 80% by 2050 in order to stabilise the concentration of greenhouse gas (GHG) emissions in the atmosphere at a level of 450 ppm of CO₂ equivalent and keep global warming below the level of 2°C. Transport accounts for about one-fifth of global energy use and one-quarter of energy-related CO₂ emissions (1). To achieve the necessary deep cuts in greenhouse gas emission by 2050, transport must play a significant role and achieve 95% decarbonisation. Car ownership worldwide is projected to triple to over two billion by 2050 and, without strong global action, a respective growth of energy use and CO₂ emissions will occur (1). Figure 1 shows estimation for EU total greenhouse gas emissions. It can be seen that, following the baseline scenario which already includes large efficiency improvements, especially in industry, the emissions are expected to remain constant. The amount of additional effort that must be put in each sector in order to achieve the necessary emission cuts is clearly visible (2).

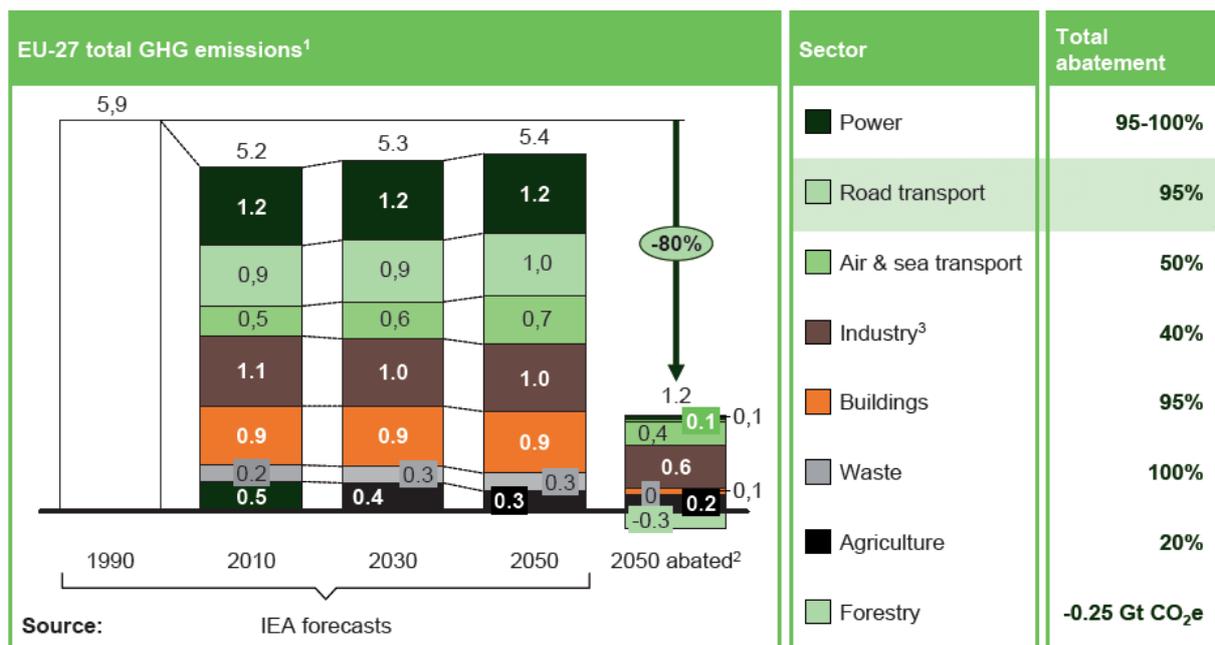


Figure 1: EU total GHG emissions forecast for 2050 and comparison to target.

Reducing vehicle weight is an important pillar for minimizing emissions and energy consumption. An effective way to achieve this is by reducing the vehicle weight, as a 1% weight reduction corresponds to ~0.65% fuel consumption improvement (3). However, the current material research approach lies on a trade-off line between performance and cost. A new material design methodology which can overcome this trade-off and lead to new cheap and lightweight materials which can be used in everyday cars would be very beneficial.

Currently, steel is the predominant material used in the automotive industry. Materials technology has developed steadily in recent years. New composite materials have been developed that combine strength with much less weight than steel. Composites consist of a mixture of different materials and usually involve strong but light elements such as titanium, aluminium, fibreglass, and carbon fibre. The cost of producing these novel materials is generally significantly higher compared to metal alloys or plastics. However, composites have the advantage of combining low weight with high structural strength. Their use is still mainly aimed to aircraft production or certain parts of luxury and sports cars. (4)

Seeking inspiration in nature, the impressive properties of several bio-materials such as spider silk are noticed. Spider silk can absorb 30 times more energy before rupture and is 6 times lighter compared to steel. In order to explain how these properties can be obtained by a pure protein material, atomic-scale analyses of the silk fibres have mainly been developed using nano-scale simulation tools, such as Molecular Dynamics (MD). Experiments and MD simulations have unfolded complex, hierarchical, nano-composite structures of the natural materials.

In order to apply the complex mechanisms of nature into automotive applications, the nano-scale design must be transferred into non-biological materials, such as synthetic polymers with spider silk-like structure. For this purpose a multi-scale simulation methodology, which combines Molecular Dynamics (MD) and Finite Element Method (FEM) simulations is necessary. MD provides accurate representation of the inter-atomic forces at nano-scale and allows the application of physicochemical laws that control the material behaviour. The results of such simulations can then be implemented in larger-scale, continuum models using FEM which can be applied in the design of the actual automotive parts. Such a process is shown schematically in Figure 2.

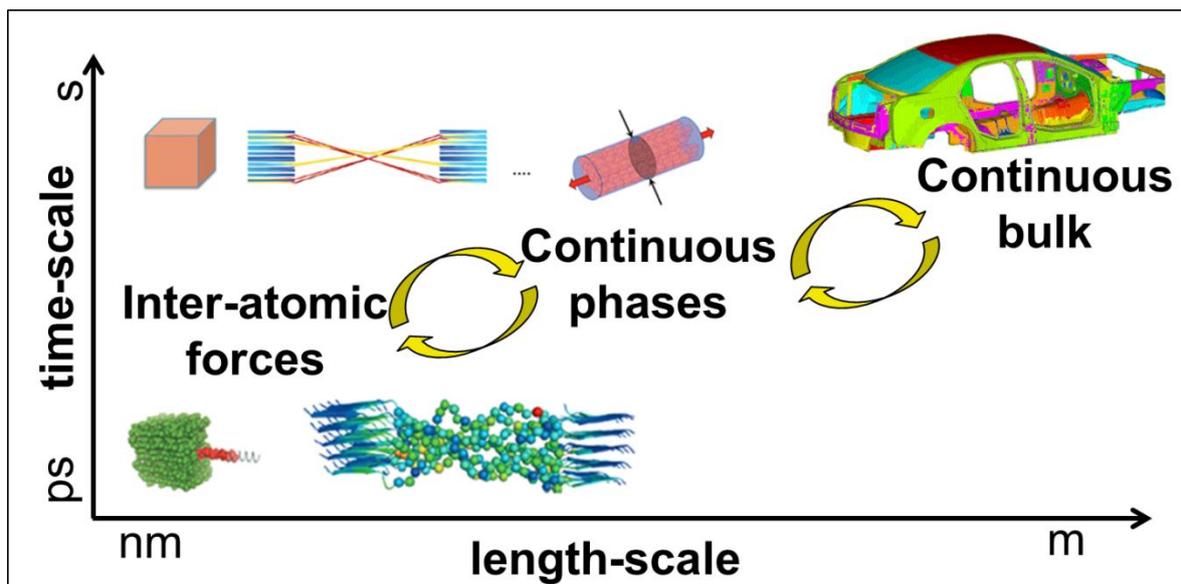


Figure 2: Multi-scale simulation framework

Simulations based on MD use thousands of discrete atoms for the material representation. As a result they provide accurate calculation of intermolecular forces, but they are usually very expensive in terms of computational time. On the other hand the Finite Element Method (FEM) represents the material as a continuum with given bulk properties. Such a representation allows the simulation of larger length scales at smaller computational cost, which explains its widespread use in engineering problems.

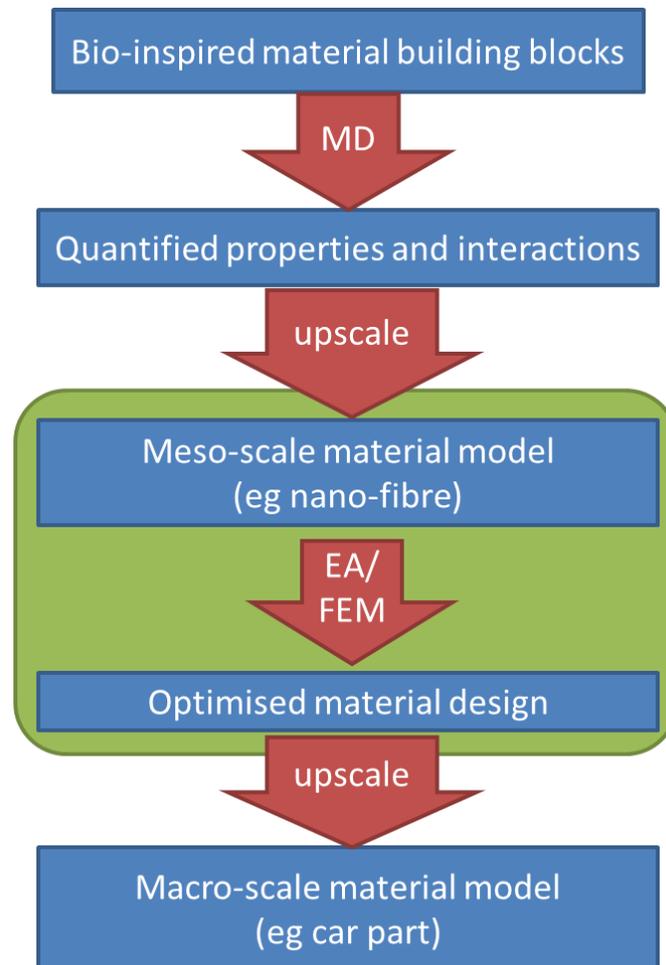


Figure 3: Material design methodology

The complete design methodology is shown schematically in Figure 3. The current work is focused on the highlighted section which deals with a meso-scale nano-composite fibre design. Using Evolutionary Algorithms as the optimisation tool combined with an FEM tool as the evaluation tool, the internal layout of a material will be automatically optimised for desired target properties.

The content of this thesis is briefly outlined below. In Chapter 2, a brief review of material mechanics is provided. Several examples of biomaterials and engineering materials are studied. Finally a brief overview of the numerical methods used in this work is provided. In Chapter 3, the material design method, based around the mechanics of a 2D fibre model is provided. In Chapter 4 the fibre model is validated and the numerical methods are

configured accordingly. In Chapter 5, several optimisation studies are presented for the derivation of nano-composite design suggestions. In Chapter 6, a 3D fibre model is presented and the challenges of the extension of the design method in three dimensions are discussed. Finally, in Chapter 7, the current work is summarised and some suggestions for next steps are provided.

Chapter 2. Literature review

In order to achieve the design of new materials, it is important to have an understanding of the physical material mechanisms and the numerical methods involved. For this purpose, the fundamentals of material mechanics are summarised in this Chapter, along with some material examples that can provide inspiration for the design direction. Furthermore, some introductory material on Finite Element Modelling and Evolutionary Algorithms are presented.

2.1. Materials

Figure 4 shows the historical shift in the materials used for cars. It is obvious that the main material used in vehicle manufacturing was and still is the steel which is preferred for its high strength and durability combined with low cost. With material process evolution and the commitment of the automakers to increase the vehicle efficiency, lighter and stronger materials such as high strength alloys, aluminium, polymers and composites (5) have gradually replaced a part of low carbon steel. Nevertheless, steel remains the predominant material used in cars.

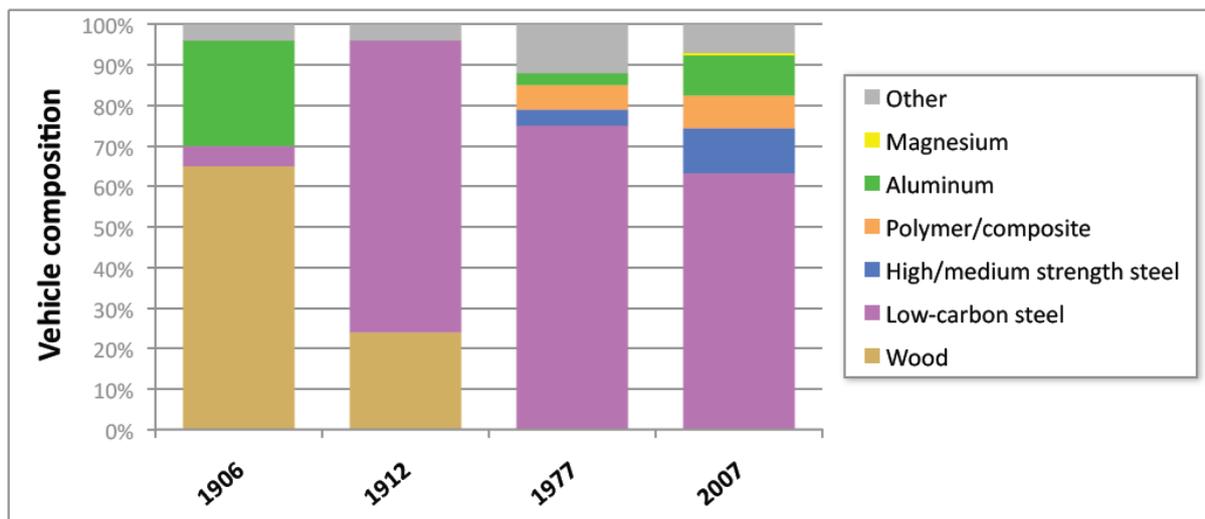


Figure 4: Historical shift in vehicle composition by mass (5)

2.1.1. Material properties

For the automotive industry, the most important factors concerning materials are foremost their safety and crashworthiness and, subsequently, weight, cost and recyclability. Thus, for the purposes of understanding and comparing different materials, it is important to study their properties.

In this Section, a brief analysis of the most important, relevant to this thesis, material properties and a brief review of some interesting materials is performed.

2.1.1.1. Stress-Strain curve

Assuming that a specimen is placed in tension-compression-testing machine, as the axial load is incrementally increased, the total length (l) is measured at each increment of the load and this is continued until the failure of the specimen takes place. Knowing the original cross-sectional area (A_0) and length of the specimen (l_0), the normal stress (σ) and the strain (ϵ) can be calculated. The graph of these quantities with the stress (σ) along the y-axis and the strain (ϵ) along the x-axis is called the stress-strain diagram. Such a typical diagram for a metal specimen is shown in Figure 5. The stress-strain diagram can differ in form for various materials.

The parameters, which are used to describe the stress-strain curve of a material, are:

- the tensile strength,
- yield strength or yield point,
- per cent elongation,
- reduction of cross-sectional area.

The first two are strength parameters; the last two indicate ductility.

The stress-strain curve of a material is an invaluable aid to describing its mechanical behaviour. In the following study, the stress-strain curve will be used extensively in order to calculate the desired properties of the specimens of interest.

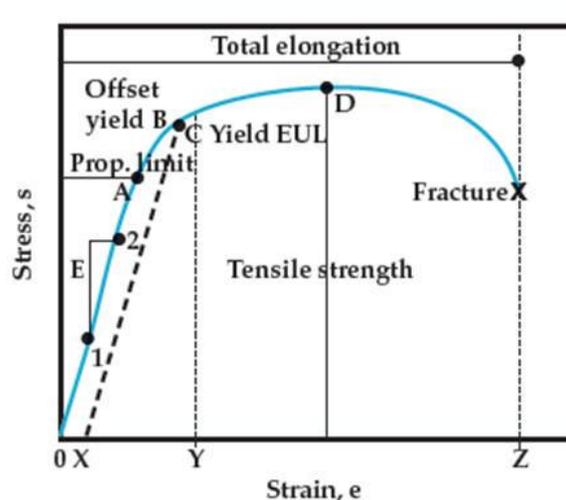


Figure 5: Stress-strain (σ - ϵ) curve. A. Elastic (proportionality) limit, B. Offset yield strength, D. Ultimate Tensile strength, X. Rapture (6)

2.1.1.1.1 Engineering versus True stress and strain

The engineering stress is determined by dividing the force load by the original cross sectional area. After the tensile strength (Section 2.1.1.3) is reached, a “neck” with a smaller cross-section is formed, as shown in Figure 6. As a result, the engineering stress-strain curve

begins to slope downwards, despite the fact that the actual stress in the specimen continues to increase.

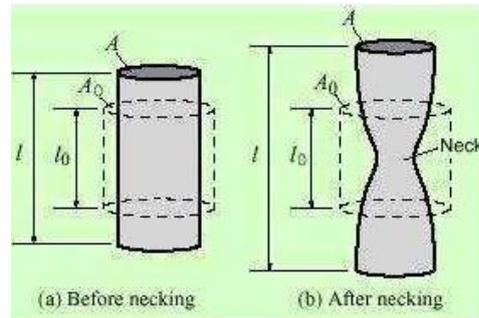


Figure 6: A cylindrical specimen under tension load while forming a “neck”. (7)

The true stress is determined by dividing the load by the smallest actual minimum cross sectional area of the specimen at any given time. The corresponding true strain at each point of the curve is computed by taking the natural logarithm of the actual length divided by the initial length. The true stress-strain curve remains ascending after the tensile strength is reached.

$$\varepsilon_{engineering} = \frac{L_f - L_0}{L_0}$$

$$\sigma_{engineering} = \frac{F}{A_0}$$

$$\varepsilon_{true} = \ln\left(\frac{L_f}{L_0}\right) = \ln(1 + \varepsilon_{engineering})$$

$$\sigma_{true} = \frac{F}{A} = \sigma_{engineering}(1 + \varepsilon_{engineering})$$

The relation among the real and engineering quantities is shown schematically in Figure 7. In this thesis, the engineering stress and engineering strain are used, unless it is explicitly stated otherwise.

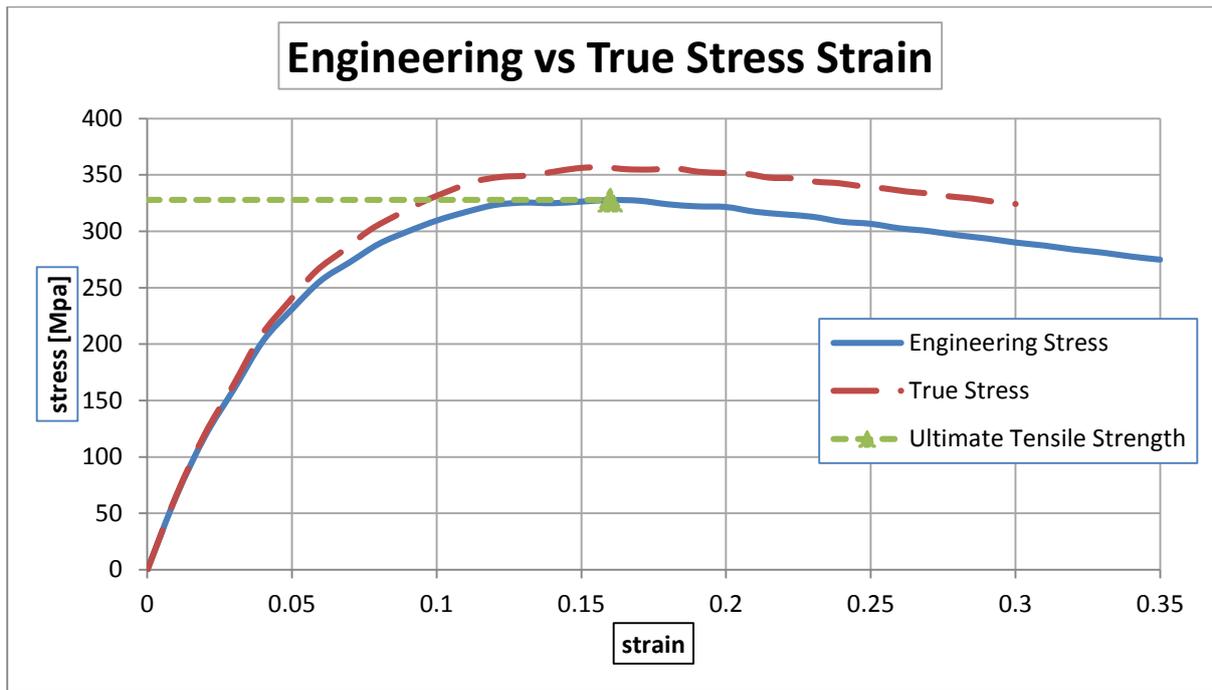


Figure 7: True and Engineering Stress-Strain Curves of the 2D FEM fibre model 25% crystallinity.

2.1.1.1.2 Stress and strain tensor

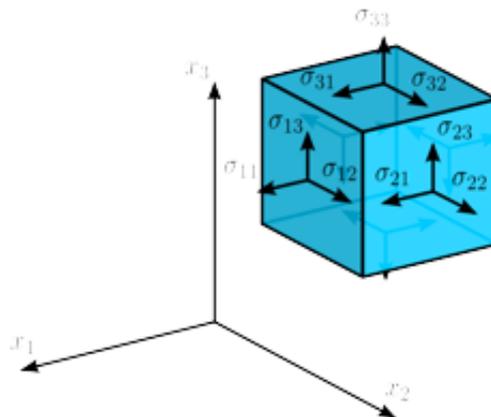


Figure 8: Components of stress in three dimensions. (8)

It is convenient to consider the stress components in reference to a given set of axes, usually a rectangular Cartesian x-y-z system. In this case, the body can be considered to be cut along three directions corresponding to the normal to the visible faces of the infinitesimal cube shown in Figure 8.

When the normal vector of a surface and the stress vector acting on that surface are colinear, the direction of the normal vector is called a principal stress direction. Each face of the cube (Figure 8) has three components of stress so there are 9 possible components of the Cauchy stress tensor, or true stress tensor, or simply called the stress tensor,

$$s_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (2-1)$$

Hydrostatic stress is the average of the three normal stress components of any stress tensor,

$$\sigma_{Hyd} = \frac{\sigma_{kk}}{3} \delta_{ij} = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}}{3} = \begin{bmatrix} \sigma_{Hyd} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{Hyd} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{Hyd} \end{bmatrix} \quad (2-2)$$

The deviatoric stress tensor can be obtained by subtracting the hydrostatic stress tensor from the Cauchy stress tensor,

$$s_{ij} = \sigma_{ij} - \sigma_{Hyd} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} - \sigma_{Hyd} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} - \sigma_{Hyd} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} - \sigma_{Hyd} \end{bmatrix} \quad (2-3)$$

The same applies for the strains.

2.1.1.2. *Yield strength*

Yield strength is the lowest stress that produces a permanent deformation in a material. In some materials such as aluminium alloys, the point of yielding is difficult to identify; thus, it is usually defined as the stress required causing 0.2% plastic strain. This is called a 0.2% proof stress.

2.1.1.3. *Tensile strength*

Tensile strength or ultimate tensile strength (UTS) or ultimate strength is the maximum tensile stress on a material experienced during a tensile test. For ductile materials it corresponds to the beginning of neck, while for brittle materials to the fracture point.

2.1.1.4. *Stiffness*

Stiffness is the rigidity of an object — the extent to which it resists deformation in response to an applied force. Young's modulus measures the resistance of a material to elastic (recoverable) deformation under axial load. Typical values of the Young's modulus for several material families are shown in Figure 9.

$$E \equiv \frac{\text{tensile stress}}{\text{strain}} = \frac{\sigma}{\varepsilon} \quad (2-4)$$

A stiff material has a high Young's modulus and changes its shape only slightly under elastic loads (e.g. diamond). A flexible material has a low Young's modulus and changes its shape considerably (e.g. rubbers).

In transport applications high stiffness combined with low weight is beneficial. In these cases materials with a large specific stiffness are desirable. In this study, stiffness will be one of the design targets.

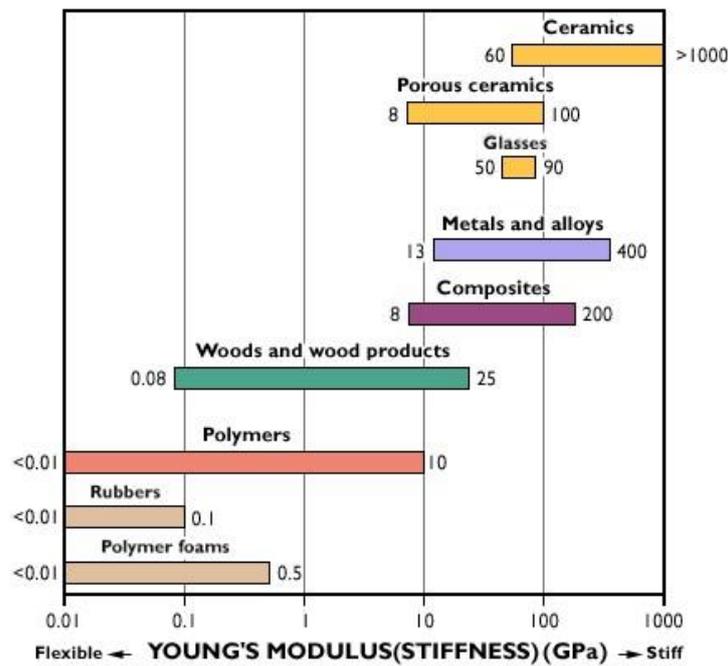


Figure 9: Stiffness diagram for several material families (9)

2.1.1.5. Toughness

Toughness is the ability of a material to absorb energy and plastically deform without fracturing. It corresponds to the amount of energy per volume that a material can absorb before rupturing.

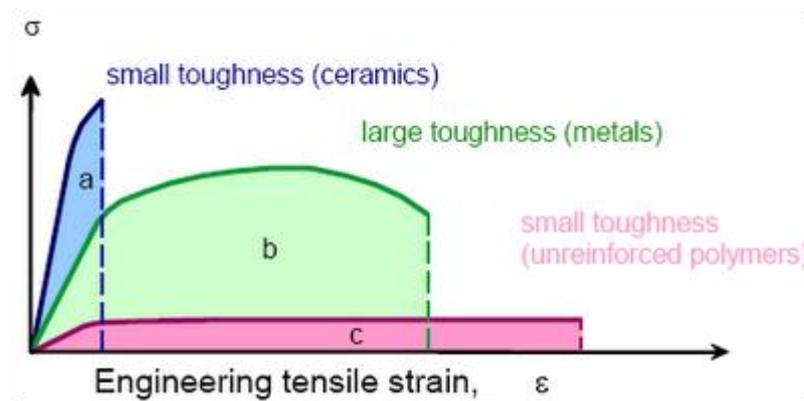


Figure 10: Stress-strain graph for three different types of materials. The area below the curve represents the tensile toughness value. (9)

$$Toughness = \frac{energy}{volumn} = \int_0^{\epsilon_f} \sigma * d\epsilon \quad (2-5)$$

As shown in Figure 10, high toughness requires a combination of strength and ductility. For example, brittle materials (such as ceramics) that are stiff and strong but with limited

ductility are not tough. On the other hand, very ductile materials with low strength (such as unreinforced polymers) are also not tough. Hence, very high stiffness and very high toughness are two objectives in conflict.

High toughness is particularly important for components which may suffer impact (cars, toys, bikes), or for components where a fracture may be catastrophic (pressure vessels, aircraft). In this study, toughness is also one of the design targets.

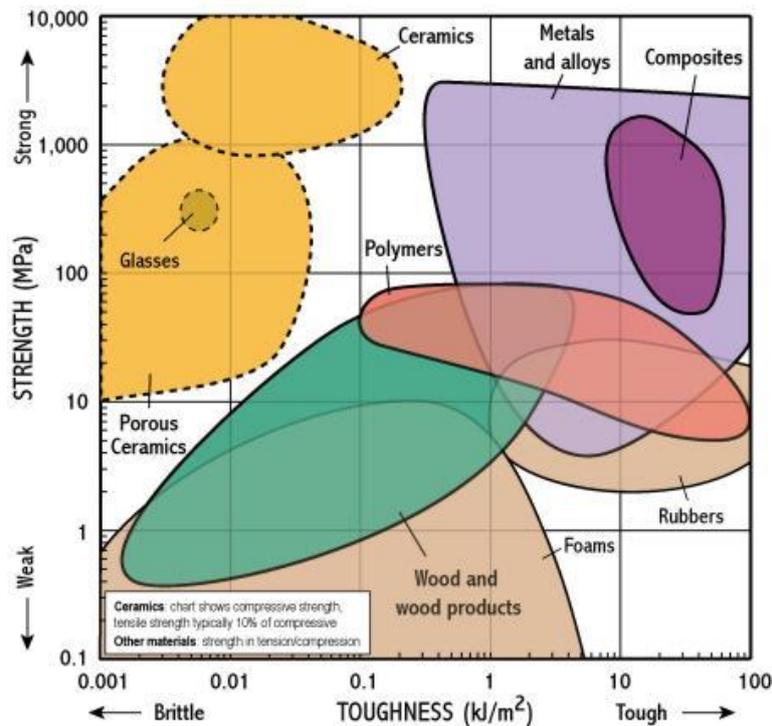


Figure 11: Strength-Toughness diagram of different types of materials. (9)

2.1.1.6. *Brittleness*

A material is brittle if, when subjected to stress, it breaks without significant deformation. Brittle materials absorb relatively little energy prior to fracture, even those of high strength. Most ceramics and glasses are brittle and, also, some polymers such as PMMA and polystyrene. Many steels become brittle at low temperatures depending on their composition and processing.

2.1.1.7. *Elasticity*

2.1.1.7.1 Elastic materials

Elasticity is the tendency of solid materials to return to their original shape after forces are applied to them. When the forces are removed, the object will return to its initial shape and size if the material is elastic.

2.1.1.7.2 Viscous materials

Viscosity is a measure of a fluid's resistance to flow. A fluid with large viscosity resists motion. A fluid with low viscosity flows easily. High viscosity materials might include honey, syrups, or gels – generally liquids that resist flow. Viscosity is also temperature dependent.

2.1.1.8. Viscoelasticity

Viscoelasticity is the property of materials that exhibit both viscous and elastic characteristics when undergoing deformation. Synthetic polymers, wood and human tissue, as well as metals at high temperature display significant viscoelastic effects. (10)

A viscoelastic material has the following properties:

- The effective stiffness depends on the rate of deformation (Figure 12). The higher the strain rate, the higher the resulting stresses.
- If a cyclic load is applied, hysteresis is seen in the stress–strain curve, leading to a dissipation of mechanical energy.
- If the strain is held constant, the stress decreases with time (relaxation), as shown Figure 13 (A-B).
- If the stress is held constant, the strain increases with time (creep), as shown in Figure 13 (C-D).

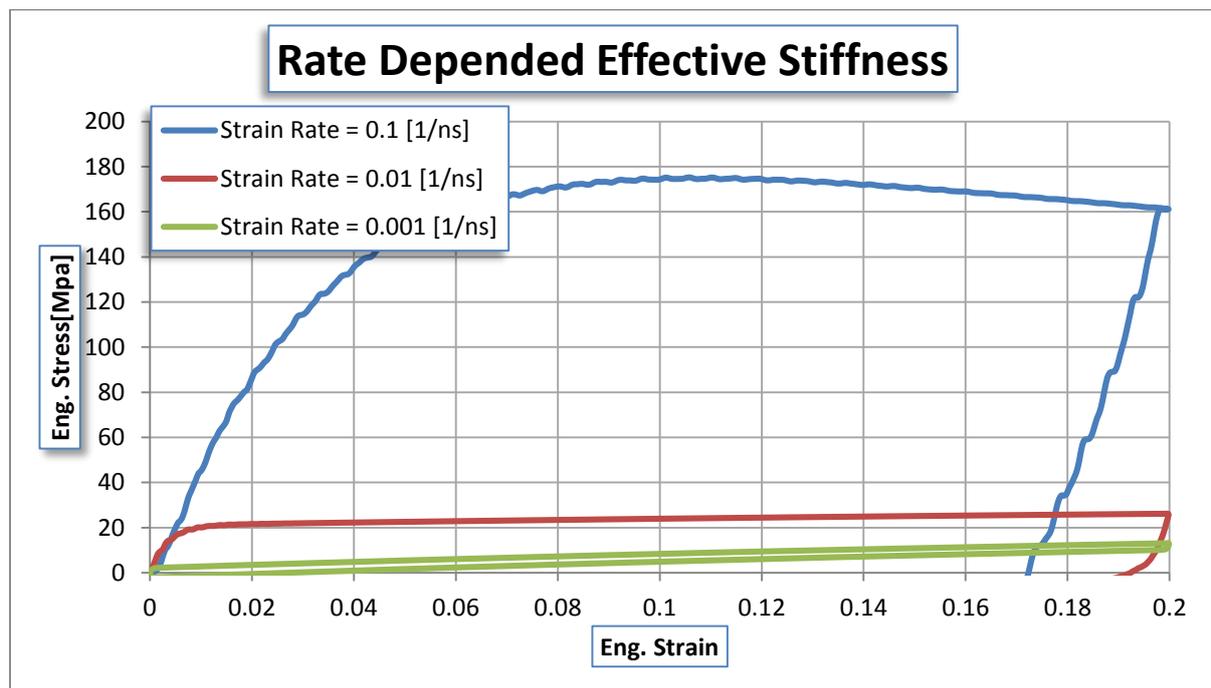


Figure 12: Stress-strain curves of a viscoelastic material for different constant strain rate loading and unloading. Higher strain rates result in higher stresses. The area inside the hysteresis loop is the energy dissipated due to internal friction.

The viscosity of a viscoelastic substance gives the substance strain rate dependence. Specifically, viscoelasticity corresponds to a molecular rearrangement. When a stress is applied to a viscoelastic material, such as a polymer, parts of the long polymer chains change positions. This movement or rearrangement is called Creep. Polymers remain solid

even when these parts of their chains are rearranging in order to accompany the stress and as this occurs, it creates a back stress in the material. When the back stress is of the same magnitude as the applied stress, the material no longer creeps. When the original stress is taken away, the accumulated back stresses will cause the polymer to return to its original form. The material creeps, thus yielding the prefix *visco-* and it also fully recovers, which gives the suffix *-elasticity*.

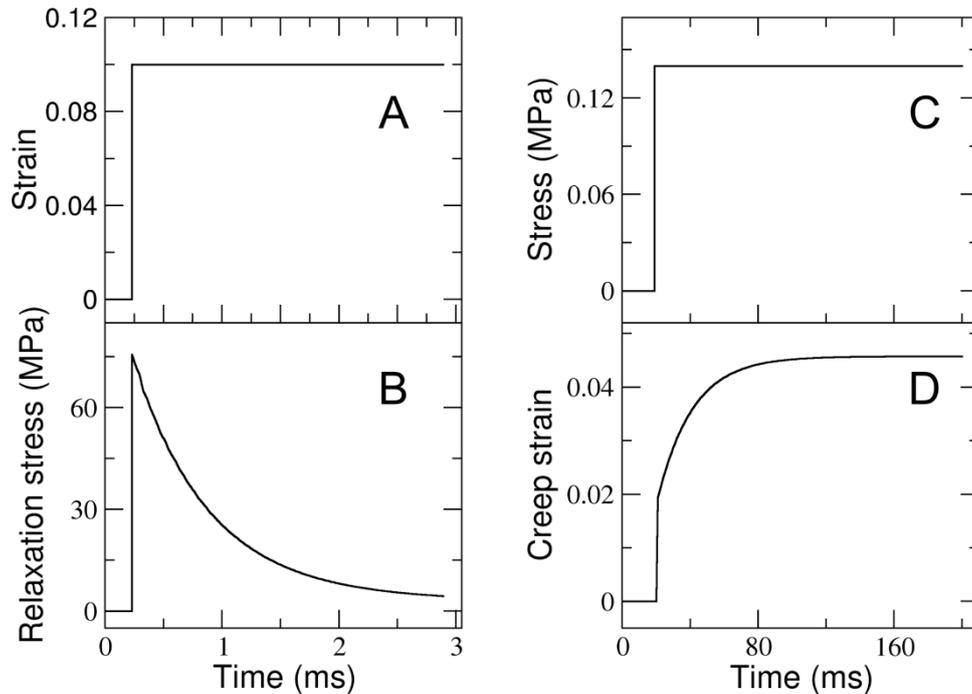


Figure 13: General behaviour of a viscoelastic material under constant strain and stress loading. (A) A rectangular box of a viscoelastic material is deformed to a constant strain of 0.1. (B) The developed stress relaxes from 75 MPa to negligible values within a few ms. (C) In a creep test, a constant stress of 0.14 MPa is applied to the material, (D) resulting in an instantaneous elastic straining, followed by a creep in strain up to the equilibrium value of 4.5%. (11)

2.1.1.8.1 Viscoelastic hysteresis

Hysteresis is the dependence of the output of a system based not only on its current input, but also on its history of past inputs. A typical mark of hysteresis is that the output forms a loop (Figure 14).

In the viscoelastic hysteresis, the area in the centre of a hysteresis loop is the energy dissipated due to material internal friction. A viscoelastic material has an elastic component and viscous component. The viscosity of a viscoelastic substance gives the substance a strain rate dependent on time. A purely elastic material does not dissipate energy (heat) when a load is applied and then removed. On the contrary, a viscoelastic material loses energy when a load is applied and then removed (Figure 14). The area in the centre of a hysteresis loop is the energy dissipated due to material internal friction.

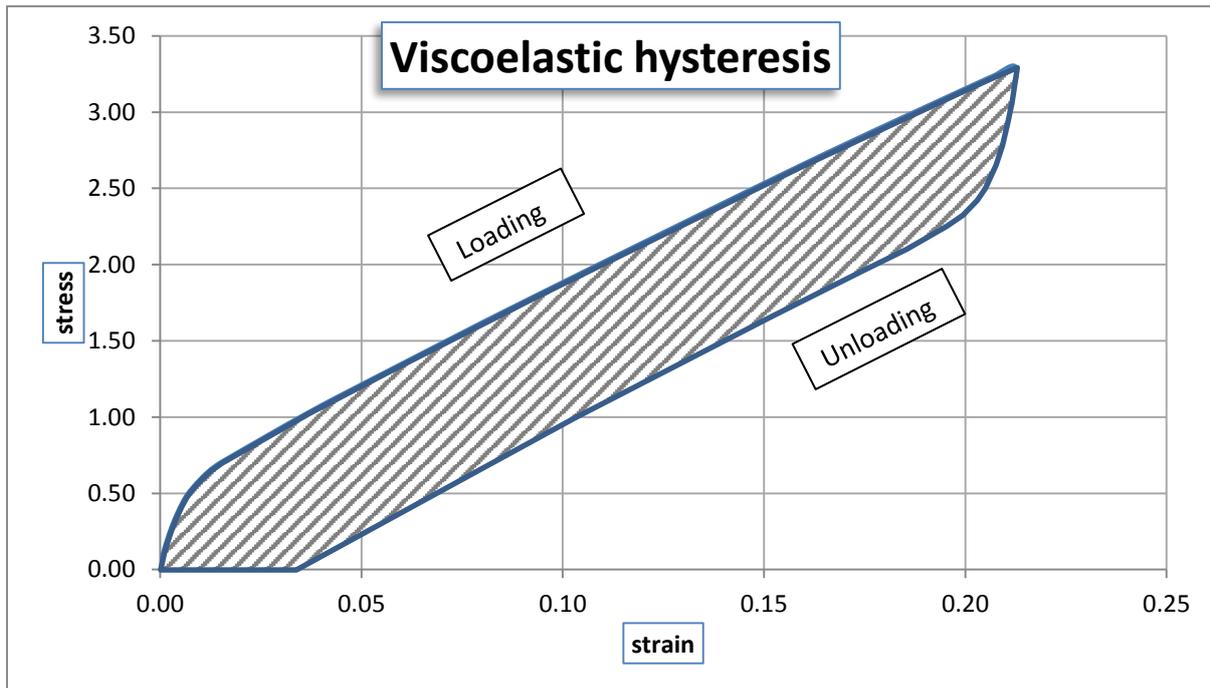


Figure 14: Viscoelastic substance hysteresis loop. The area in the centre of the hysteresis loop is the energy dissipated due to internal friction.

2.1.1.8.2 Viscoelastic model

For typical viscoelastic materials, the “Standard Linear Solid” model can be applied to describe their behaviour. The model consists of a spring in parallel with the Maxwell model (a purely viscous damper and a purely elastic spring connected in series). (12)

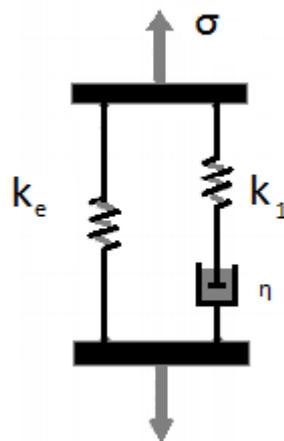


Figure 15: Standard Linear Solid model for viscoelastic materials

2.1.2. Biomaterials

Many biological systems have mechanical properties that are comparable or better than those that can be achieved using engineering materials. This is a surprising fact, considering that the basic polymers and minerals used in natural systems are relatively weak. Biological organisms produce composites that are organized in terms of composition and structure,

containing both inorganic and organic components in complex structures. They are hierarchically organized at the nano, micro and meso levels. Although biology is a mature science, the study of biological materials and systems by Materials Scientists and Engineers is recent. The extent and complexity of the subject is daunting and will require many decades of global research effort to be elucidated. (13) In this Section, a few interesting biomaterials are reviewed. These materials exhibit exceptionally high values of toughness and stiffness, while being remarkably lightweight. Such examples can provide inspiration for creating customized material designs which is the focus of this study.

2.1.2.1. *Nacre*

Nacre is also known as mother of pearl. It is an organic-inorganic composite material produced by some molluscs as an inner shell layer; it is also what makes up the outer coating of pearls. It is strong, resilient and iridescent.

Though nacre is composed of relatively weak constituent materials, its unique and highly organized design at multiple length scales enables outstanding mechanical performance including an excellent combination of stiffness, strength, impact resistance and toughness.

Nacre is a composite material consisting of alternating layers of mineral tablets separated by thin layers of a biomacromolecular “glue”. Nacre is composed of ~95 wt. % pseudo-hexagonal, polygonal, or rounded aragonite tablets (a mineral form of CaCO_3) which have dimensions of ~5–20 μm and thickness of ~0.3–1.5 μm , with the rest made up of soft organic molecules.

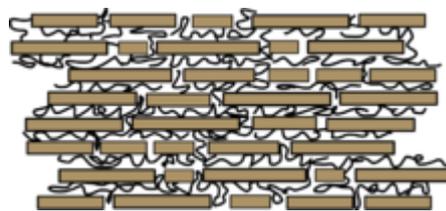


Figure 16: Schematic of the microscopic structure of nacre layers

Nacre is anisotropic, exhibits hysteresis on unloading after tensile deformation and plastically deforms up to fracture strains of ~0.018 in tension. Nacre mechanical property values have been reported as follows:

- elastic moduli: 60–80 GPa,
- tensile strength: 35–168 MPa,
- compressive strength: 100–540 MPa,
- three-point bend strength 194–2483 MPa,
- Flexural Strength ~270 MPa,
- three point bend fracture toughness 2.1–5.0 $\text{MNm}^{-3/2}$
- and three-point bend work of fracture 150–1650 Jm^{-2}

depending on the species, orientation of applied load and degree of hydration. (14) (15)

2.1.2.2. *Bone*

Bone is a living material composed of cells and blood supply encased in a strong composite structure. It is a ceramic composite, consisting of collagen, which is flexible and very tough and crystals of an apatite of calcium and phosphate, which give bone its hardness. The apatite crystals are 20-40 nm in length and 1.5-3.0 nm wide in the collagen fibre matrix. (16)

There are two principal types of bone: cortical (or compact) and cancellous (or porous). Cortical bone is found in long bones and cancellous is found in the core of bones and in flat bones.

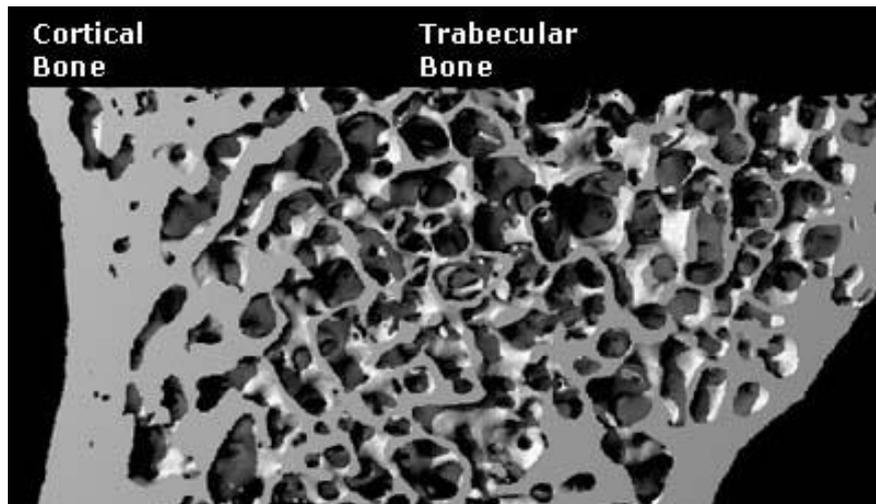


Figure 17: Close-up X-ray picture of a piece of the pelvic bone. (17)

2.1.2.2.1 *Structure*

Figure 17 shows the structure of a long bone. The surface regions consist of cortical bone; the inside is porous and is called cancellous bone. It is shaped in such a manner that strength is provided only where it is needed. The porosity of cancellous bone provides interesting mechanical properties. The mechanical strength is determined by the porosity and the manner in which this porosity is structured. The pores also perform other physiological functions and contain the marrow. Thus, the bone is a true multifunctional material. (13)

Bone is a composite of collagen, hydroxyapatite and water. Water corresponds to 15-25% of the bone volume in mammals. The structure of cortical bone is only partially understood and is hierarchical, as shown in Figure 18.

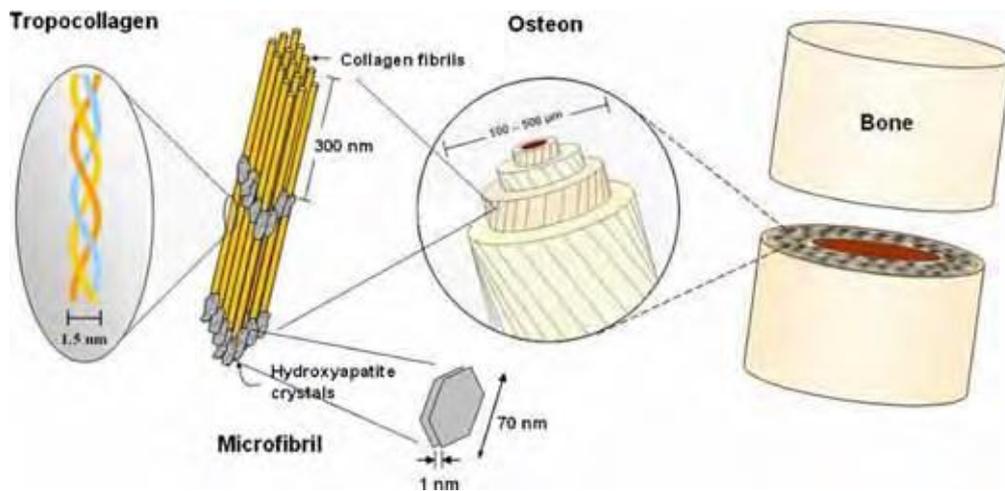


Figure 18: Hierarchical organization of bone.

2.1.2.2.2 Mechanical properties

The values for the Young's modulus of bone, compared to collagen and hydroapatite, are shown in the Table 1. The measured value of Young's Modulus also depends on temperature, decreasing with an increase in temperature and increasing in value with an increase in strain rate.

Table 1: Bone mechanical properties: Young modulus

Material	Young's Modulus, E[GPa]
Collagen (dry)	6
Bone mineral (Hydroapatite)	80
Cortical bone, longitudinal	11-21
Cortical bone, transverse	5-13

There is a large variation in measure value of both the tensile and compressive strength of bone. Different bones in body need to support different forces, so there is a large variation in strength between them.

	Longitudinal Direction	Transverse Direction
Tensile Strength [MPa]	60-70	~50
Compressive Strength [MPa]	7-280	~50

Typical stress-strain curves for compact bone, tested in tension or compression in wet condition, are approximately a straight line. Generally, bone has a maximum total elongation of only 0.5-3% and therefore is classified as a brittle rather than a ductile solid.

In contrast to the tensile and compressive strength and modulus, the values of toughness in the transverse direction are generally higher than those in the longitudinal direction. This is due to the presence of the cement lines in the microstructure. Crack propagation parallel to the osteons can occur much more easily through these regions and this significantly

decreases the fracture toughness of cortical bone in the longitudinal direction. If a crack is propagating perpendicular to an osteon it will change direction when it reaches a cement line, thus blunting the crack (Figure 19).

As a result, although bone is classified as a brittle material (with the major component being mineral), its toughness is excellent. Bone's fracture energy, is approximately $G_c = 1.5 \text{ KJ/m}^2$, which is comparable to steel at low temperatures and wood when measured parallel to the grain. This is much tougher than man-made ceramics due to the presence of the collagen fibres in bone. Since the stress-strain curves for loading and unloading are different the elasticity is time-dependent, a common feature of fibrous proteins.

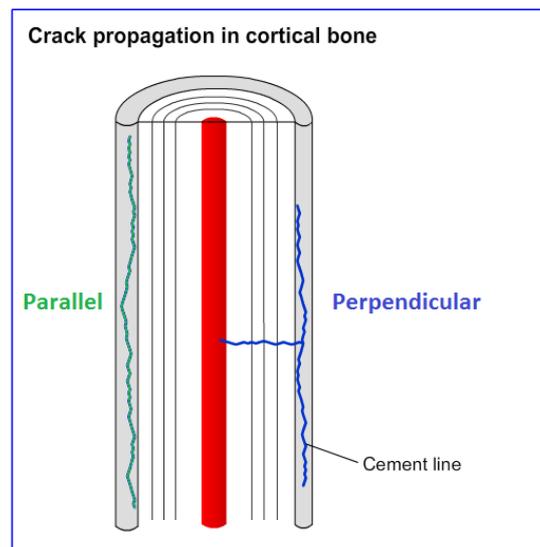


Figure 19: Crack propagation in cortical bone in Parallel and Perpendicular direction. (18)

2.1.2.3. *Toucan's beak*

Bird beaks are light-weight structures that need to possess significant specific strength. They usually fall into two categories, short and thick or long and thin. The toucan is an exception. It has a long beak that is also thick, a necessity for food gathering in tall trees. (13) (19) Moreover, a toucan's beak has a rich supply of blood vessels running along its surface so the bird's bill is suited to act as a means of radiating heat to keep the core temperature of the body stable – the bill also accounts for ~30-50% of the bird's surface area, one third of the bird length, yet only makes up about 5% of its mass. Because toucans, like other birds, cannot sweat, this would be a useful way of controlling body temperature. The scientists estimate that toucan is able to lose as much as four times its resting heat production through its beak – considerably more efficient than the elephant's ear.

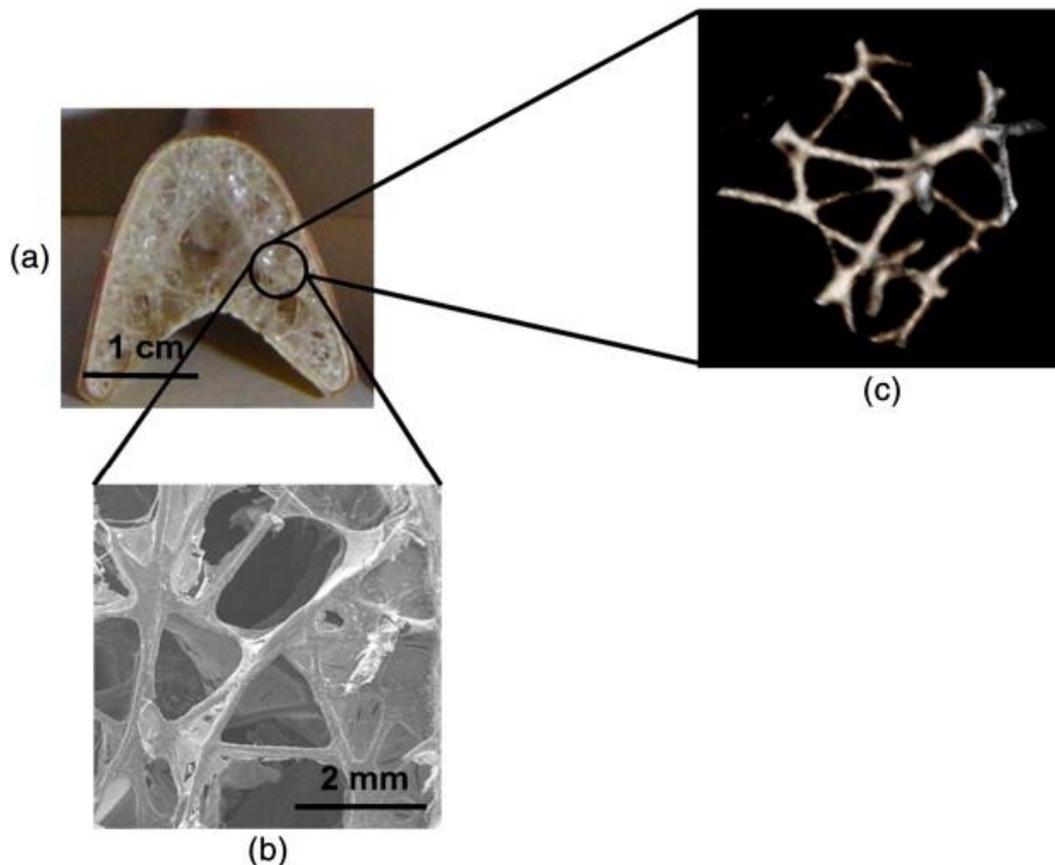


Figure 20: (a) Photograph of beak cross-section in which foam (consisting of membranes in a framework of fibres) is viewable; (b) Scanning Electron Micrograph of foam and (c) 3-D visualization of structure of trabeculae constructed from computed tomography (CT) images (20)

Using electron microscopy, the researchers have found that the exterior of the beak is made up of overlapping tiles of keratin, the sulphur-containing fibrous protein that makes up hair, fingernails and horn. The interior of the beak is constructed of rigid foam made of a network of calcium-rich bony fibres connected by membranes. The membranes are similar in composition to keratin.

The beak's solid outer shell sandwiches within it a closed-cell, foam-like structure made of struts which, together with thin protein membranes, enclose variably shaped air spaces. The solid shell layer is built of overlapping, hexagonally-shaped thin plates of keratin protein held together by organic glue. The internal closed-cell structural support is comprised of keratin fibres with greater mineralization, by calcium and other salts, than in either the membranes or the solid shell layers in order to increase hardness. The closed cell structure offers a more complex energy absorption capacity and resistance to compression than the bending deformation typical of open celled structures. The rotational deformation of cell walls, stretching of membranes and the internal gas pressure all contribute to those features. There is a synergistic effect of the shell layer and foam-like interior elements that together lead to greater strength than the sum of the strengths of those individual parts.

The structure of a Toco toucan (*Ramphastos toco*) beak was found to be a sandwich composite with an exterior of keratin and a fibrous network of closed cells made of calcium-rich proteins. The keratin layer is comprised of superposed hexagonal scales (50 μm diameter and 1 μm thickness) glued together. Its mechanical properties are:

- Tensile strength is about 50 MPa,
- Young's modulus is 1.4 GPa and
- Toughness is 53 kJ/m^3 .

There is no systematic difference between the Young's modulus and yield strength of keratin along the two directions. Thus, the keratin shell can be considered transversely isotropic.

Regarding the toucan's beak foam, its mean mechanical properties from measured specimens are

- Crushing stress 0.17 MPa,
- Young's modulus 5.6 MPa and
- Toughness 1.94 kJ/m^3 .

There is a synergistic effect between foam and shell evidenced by experiments and analysis establishing the separate responses of shell, foam and foam + shell. The foam stabilizes the deformation of the beak by providing an elastic foundation which increases its Brazier and buckling load under flexure loading.

2.1.2.4. *Spider Silk*

Spider silk is a biomaterial with remarkable mechanical properties. Orb-weaving *Araneus diadematus* spiders can have up to seven different pairs of silk glands, each producing a silk with specific purpose and unique mechanical properties. The strongest among these, the dragline silk, is one of the toughest materials known to man. The dragline silk is produced in the major ampullate gland and is used to make the framework of the web, as well as the radii and the thread that attach the web to external structures.

The dragline silk has a semi-crystalline structure consisting of a crystalline region of short polyalanine segments that form stiff β -sheet nano-crystals surrounded by amorphous glycine-rich domains, which provide extensibility of the fibre. This structure is shown schematically in Figure 21.

Spider silk is a biomaterial with unusual combination of low density, high stiffness, toughness, strength and extensibility. Typical values of its mechanical properties are:

- Density = 1.3 g/cm^3 (one sixth of steel)
- Extensibility = 0.27
- Young Modulus $E = 10\text{GPa}$ (similar to relatively soft-metal and alloys)
- Yield Strength = 1 GPa (comparable to high tensile steel)

- Toughness = 160 MJ/m³ (thrice of kevlar)

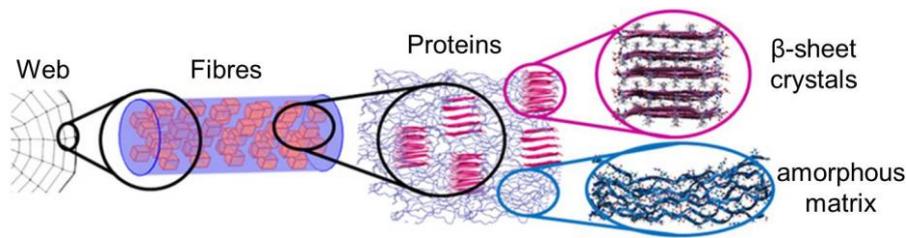


Figure 21: Hierarchical structure of spider silk fibre.

2.1.2.5. *Conclusions*

Biological materials are an extensive field. This was a brief list of a few interesting biomaterials which exhibit exceptionally high values of toughness and stiffness while they are remarkably light weighted. Some common characteristics can be observed in all the reviewed materials. They are composites combining one strong and typically brittle part and one soft part with high extensibility, viscoelastic behaviour and the ability to dissipate energy. These fundamental characteristics can provide the basis for the design of novel automotive materials at a nano-scale level.

In the following Chapters, the material modelling and optimisation are based on the spider silk structure. Several reasons contributed to this choice. First of all, it combines very high toughness with very low weight. Therefore its study can potentially lead to significant improvements compared to existing engineering materials. Additionally, the crystal content is relatively low (around 25%), which provides higher structural design flexibility and can potentially contribute to lower material cost; as it will be demonstrated below generally the stronger materials cost more. A wide range of mechanical properties have been published in previous experimental studies. Hence, this indicates a material with an inherent design flexibility which allows optimal mechanical properties for a variety of different functions and environments.

2.1.3. *Pure Engineering Materials*

In order to design automotive materials inspired by the spider fibre, pure engineering materials will be used in place of proteins, as the proteins cannot be mass-produced efficiently by humans. Furthermore, the engineering materials can provide improved mechanical properties compared to proteins.

2.1.3.1. *Metals*

The periodic table elements can be divided into metals (91 of the 118 elements), non-metals and metalloids based on their properties. Metals are commonly:

- Hard. (metals have lots of free electrons which create a huge electron pressure (on the order of 100.000 atm))
- Shiny.
- Opaque.

- Malleable (they can be hammered or pressed permanently out of shape without breaking or cracking).
- Fusible (able to be fused or melted).
- Ductile (able to be drawn into thin wire).
- Good electrical and thermal conductors. (the free electrons are free to move inside the network of metal atoms)
- Usually solid at room temperature (except mercury, which is liquid in nature).

Typical metals are Iron (Fe), Copper (Cu), Aluminium (Al), Sodium (Na), Calcium (Ca), Zinc (Zn), Magnesium (Mg), Titanium (Ti) and Uranium (U).

2.1.3.2. *Ceramic materials*

A ceramic material is a non-metallic, inorganic solid [Kingery (1976)]. (16)

Ceramic materials are inorganic and non-metallic. They are generally moulded from a mass of raw material at room temperature and gain their typical physical properties through a high temperature firing process (>1000 °C). (21) Typical properties of ceramics are listed below:

- Brittleness. Most ceramics are brittle at room temperature but not necessarily at elevated temperatures. The reason is the mixed ionic-covalent bonding that holds the constituent atoms together.
- Poor electrical and thermal conduction. The valence electrons are tied up in bonds and are not free as they are in metals.
- High melting point.
- High stiffness.
- Low degree of toughness.
- Stronger in compression than in tension.
- Chemical insensitivity. A large number of ceramics are stable in both harsh chemical and thermal environments.
- Transparent.
- Low resistance in buckling, crashing, fatigue.

One example of a ceramic material with good mechanical properties is Zirconia (ZrO₂). Zirconia ceramics have a martensite-type transformation mechanism of stress induction, which provides the ability to absorb great amounts of stress relative to other ceramic materials. It exhibits the highest mechanical strength and toughness at room temperature. Zirconia has excellent wear, chemical and corrosion resistance and low thermal conductivity. (22). Typical mechanical properties of Zirconia are listed in Table 2.

Table 2: Mechanical properties of a typical Zirconia (ZrO₂) (22)

Properties	Value
Chemical formula	ZrO ₂
Density	5.6 [g/cm ³]
Compressive Strength	2000 [MPa]
Tensile Strength	~200 [MPa]
Young's Modulus	200 [GPa]
Flexural Strength	200-500 [MPa]
Fracture Toughness	4-12 [MPa x m ^{1/2}]

Zirconia is one of the toughest ceramic materials. However, when compared to engineering alloys, it ranks between the least tough cast irons, is more expensive than most alloys, exhibits similar stiffness as steel and is better only in strength.

2.1.3.3. *Polymers*

Polymers are a large class of materials consisting of many repeating small molecules (called monomers) that can be linked together to form long chains, thus they are known as macromolecules. For example, the polyethylene polymer consists of the monomer ethylene (CH₂ = CH₂) and the repeating structural unit is $\text{+CH}_2 - \text{CH}_2\text{+}_n$.

The structure of a polymer is defined by the chemical and physical structure.

The chemical structure is defined by the constitution of the chain itself and its components and how they connect and by the arrangement of chain's components.

The physical structure is defined by the Conformation, Orientation and Crystallinity. Conformation is defined by the space occupied by a polymer molecule and is generally expressed in terms of radius of the gyration, which is an average distance from the centre of mass of the chain to the chain itself.

Orientation describes the preferred following direction of molecules or groups of molecules inside the polymer. When a polymer is stressed uniaxially, the molecules tend to become oriented in the stress direction. The orientation does not necessarily lead to crystallization; instead it can cause intense anisotropy. Orientation is primarily relevant in the cases of polymeric fibres, sheet and film.

The solid polymers can have a high or zero degree of order in the arrangement of the molecules. In the first case the polymer is characterized as crystalline, while in the second case as amorphous. Polymers tend to extend in a straight line, however this actually seldom occurs. Most polymer chains extend for a short period and then refold. Most polymers form stacks of such chains called lamella. Polymers are never completely crystalline. They typically consist of crystalline areas enclosed in lamella and from amorphous phase outside the lamella (Figure 22). The percentage of the crystalline phase is called crystallinity.

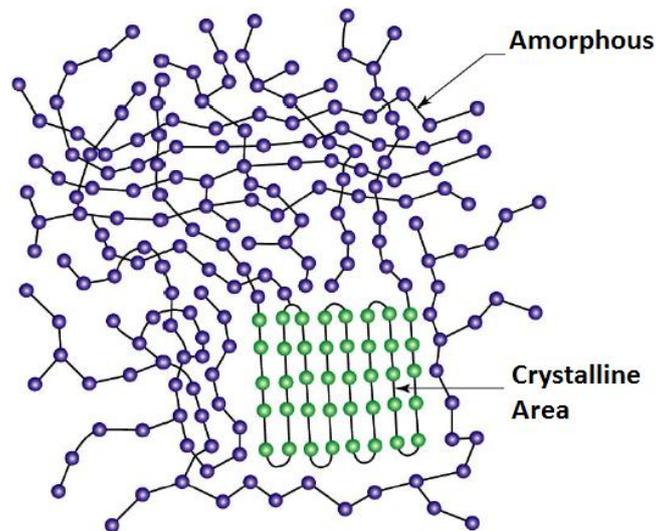


Figure 22: Crystalline and amorphous area inside a polymer. (21)

The crystalline structure provides a more resilient polymer but it also makes it more brittle. As a result, the high crystallinity polymers do not exhibit the classic plastic behaviour. The amorphous areas contribute to the flexibility of polymer.

Table 3 presents some examples of highly crystalline and highly amorphous polymers. (21)

Table 3: Examples of highly crystalline and highly amorphous polymers. (21)

Highly crystalline polymers	Highly amorphous polymers
polypropylene	PMMA
Syndiotactic polystyrene	Atactic polystyrene
Nylon	Polycarbonate
Kevlar and Nomex (amides)	Polyisoprene
Polyketones	Polybutadiene

The lamellas can develop radially around a central core as shown in Figure 23. The filaments develop in three dimensions, thereby resembling spheres rather than wheels, so the whole composition is called spherulitic (from Greek σφαῖρα = sphere and λίθος = stone). A crystalline polymer sample with a mass of a few grams can contain billions of spherulites (Figure 24).

During polymerization several parameters and technics can affect the crystallinity (e.g. the cooling rate) and the crystalline arrangement (e.g. the application of a load during the heating-cooling phase).

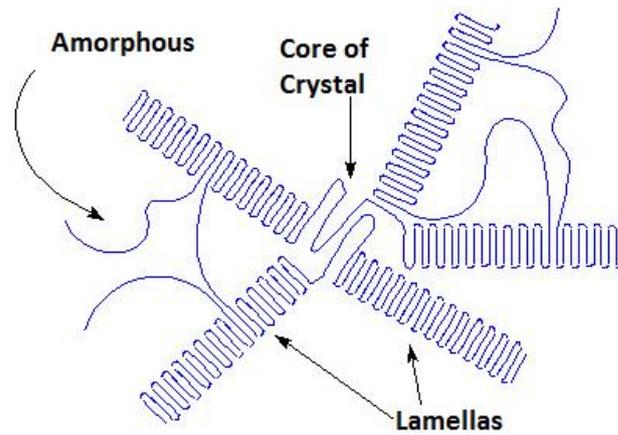


Figure 23: Formation of Spherulite

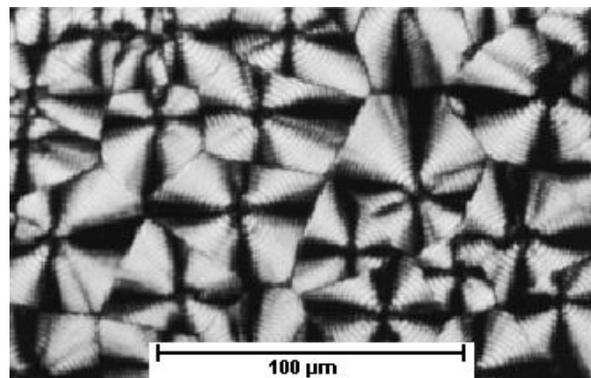


Figure 24: The Microstructure Spherulitic polyethylene

2.1.3.4. *Conclusions*

The reviewed materials in this Section offer a wide range of choices for the design of engineering materials inspired by the spider silk fibre. The polymers offer an ideal substitution for both phases of the silk fibre. The amorphous phase of the polymers has similar properties as the amorphous phase of the spider silk fibre, while the crystalline phase can potentially be used as a substitution or an auxiliary role for the crystals of the spider fibre. On the other hand, the ceramics and metals can provide a wide choice of substitution for the crystals with very high stiffness and strength.

2.1.4. *Materials in industry*

Pure engineering materials can be relatively weak. In order to achieve improved mechanical properties, combinations of different engineering materials can be used. In this Section, composites of the previously described pure engineering materials are reviewed, by analysing how existing techniques have yielded several improvements.

2.1.4.1. *Alloys*

An alloy is a mixture or solid solution, which is composed of a metal and one or more elements that can be metals or non-metals. Most pure metals are too soft, brittle or chemically reactive for practical use. Combining different ratios of metals as alloys modifies the properties of pure metals to produce desirable characteristics. The aim of making alloys

is generally to make them less brittle, harder, resistant to corrosion, or have a more desirable colour and lustre.

When the alloy cools and solidifies (crystallizes), its mechanical properties are often quite different than those of its individual constituents. A metal that is normally very soft and malleable, such as aluminium, can be altered through alloying with another soft metal, like copper. Although both metals are very soft and ductile, the resulting aluminium alloy will be much harder and stronger. Adding a small amount of non-metallic carbon to iron produces an alloy called steel. Due to its very-high strength and toughness (which is much higher than pure iron) and its ability to be greatly altered by heat treatment, steel is one of the most common alloys in modern use. By adding chromium to steel, its resistance to corrosion can be enhanced, creating stainless steel, while adding silicon will alter its electrical characteristics, producing silicon steel. Typical properties of pure metals and steel are compared in Table 4.

Table 4: Typical mechanical properties of steel and its components

	Density [g/cm ³]	Young Modulus [Gpa]	Fracture toughness [Mpa * m ^(1/2)]	Yield strength [MPa]
Aluminium	2.7	70	14-28	15-20
Copper	8.96	130	5-30	117
Iron (23)	7.874	211		
Steel	7.9	205	20-100	110-1100

2.1.4.2. *Composite ceramic materials*

2.1.4.2.1 *Zirconia Toughened Alumina*

Zirconia Toughened Alumina (ZTA) belongs to a family of ceramics that have a toughening mechanism due to transformation of the crystal structure under an applied stress. Their microstructures have been tailored to produce a significant enhancement of structural properties over basic alumina materials.

Zirconia Toughened Alumina is often used in wear applications as an intermediate solution between alumina and zirconia. It offers increased fracture toughness over alumina with a material cost less than that of zirconia. ZTA has a typical content of 10%-20% Zirconia which gives it outstanding mechanical strength and toughness. It is characterized by high temperature stability and corrosion resistance.

These improved properties are the result of a combination of factors, most significantly a phenomenon known as “transformation toughening”. When placed under stress, these zirconia particles change their crystal structure from a tetragonal to a monoclinic pattern – a transformation that results in a 3-5 % expansion, which compresses the surrounding alumina, making it more resistant to cracks. Unusually, even the stress field around a crack is enough to induce this transformation, so whenever a crack tries to advance in ZTA, the zirconia crystals expand, compressing the alumina matrix and squeezing the crack shut. (22)

Table 5: Typical mechanical properties of ZTA-14.

Property	Zta-14	Units
density	4170	[kg/m ³]
Flexural Strength	586	[MPa]
Tensile Strength	290	[MPa]
Compressive Strength	2585	[MPa]
Elastic Modulus	338	[MPa]
Shear Modulus	138	[MPa]
Poisson's Ratio	0.23	
Fracture Toughness	6	[MPa*m ^{1/2}]

2.1.4.3. Copolymers

A heteropolymer or copolymer is a polymer derived from two or more monomeric species, as opposed to a homopolymer where only one monomer is used. When the two monomers cluster together and form 'blocks' of repeating units, they result in a block copolymer. Copolymerization is used to modify the properties of manufactured plastics in order to meet specific needs, such as reducing crystallinity, modifying glass transition temperature or to improve solubility. One way of improving mechanical properties is by applying a copolymerisation technique known as rubber toughening. Elastomeric phases within a rigid matrix act as crack arrestors and so increase the energy absorption when the material is impacted. Such an example of a custom designed copolymer for combining high stiffness and high toughness is presented in the next sub-section.

2.1.4.3.1 Polyamide filled with ABC Triblock Copolymers.

In semicrystalline polymers, significant toughening can be obtained with dispersions of rubber particles.

A strong toughening effect is achieved when the rubber phase forms a submicron-sized dispersion which is usually obtained thanks to reactive blending. However, this toughening technique often requires a substantial concentration of the order of 10-20 wt % which, in turn, implies a significant loss in elastic modulus.

Using block copolymers instead of pure rubber is an interesting way to solve this issue. The amount of rubber in the filler can be reduced by introducing glassy blocks while fine dispersions of block copolymers can still be achieved through reactive blending.

The mechanical properties of polyamide systems are toughened with Polystyrene-block-polybutadiene-block-poly(methyl methacrylate) (SBM) copolymer. The tri-block contains less than 40% rubber. High impact performance is obtained with no or very little loss in elastic modulus as opposed to blends filled with pure reactive rubbers, which are substantially softened. The nanostructure and composition of block copolymer particles govern both toughening efficiency and stiffness. In particular, dynamic mechanical analysis suggests that hard domains of glassy S (glassy polystyrene) and M (poly(methyl methacrylate)) blocks

could act as stiffening agents which attenuate the softening due to the B (polybutadiene) rubber block.

To significantly reduce the amount of rubber, a symmetric composition is chosen where each component has the same molecular weight. Hence, dispersing 20 wt % of this SBM filler corresponds to an overall rubber content of only 7 wt %.

Table 6 presents the material properties of neat polyamide 12, polyamide 12 toughened with pure reactive rubber of maleated ethylene-co-propylene (EPRm) and polyamide toughened with SBM triblock.

Table 6: Morphological and Mechanical Characteristics of the blends presented in this Section. (J: impact strength, Fmax: maximum force at break)

Reference	Filler	%	J [kJ/m ²]		Fmax [N]		Impact stiffness [kN/m]		Flexular modulus [MPa]	
Neat PA12	-	-	16	-	224	-	68	-	1283	-
1	ERPm	5	33	106%	256	14%	63	-7%	-	-
2	ERPm	10	49	206%	254	13%	57	-16%	1083	-16%
3	ERPm	20	61	281%	207	-8%	44	-35%	896	-30%
4	SBM	5	19	19%	240	7%	71	4%	-	-
5	SBM	10	74	363%	264	18%	70	3%	1237	-4%
6	SBM	20	11	-31%	266	19%	65	-4%	1173	-9%

SBM copolymers containing less than 40 wt % of rubber can have great toughening effects without altering significantly the elastic modulus when being dispersed in polyamide-12. The polyamide systems toughened with these SBM dispersions exhibit an impact strength and elastic modulus that are both much higher than those obtained in the same polymer matrix filled with pure rubber particles (EPRm). (24)

2.1.4.4. *Conclusions*

The reviewed materials in this Section offer some examples of how the combination of relatively weak, brittle or soft materials, can yield significant improvements on their mechanical performance. As can be seen in most cases, composites typically combine one strong and typically brittle part with one soft part with high extensibility. It is interesting to note that many biomaterials are composite structures with similar design rules as was shown in Section 2.1.2.5.

2.1.5. *Summary*

In this Section various materials, from natural to man-made ones, were explored in order to describe the existing designs and mechanisms of lightweight materials and structures. Seeking for inspiration in nature, this Section especially focused on biomaterials which typically featured complex hierarchical structures. In the same fashion as biomaterials, the

reviewed composite industrial materials featured similar design characteristics. Driven by the spider silk high toughness and design flexibility, it was decided to focus on this material as a basis for the generation of novel lightweight designs. In order to understand the impact of the structure (Figure 21) on the mechanical properties of such a multi-scale hierarchical fibre, a continuum mechanics-based finite element method was developed. The material design process was then built around this FEM fibre model with the aim of developing a procedure which can generate the appropriate nano-structure according to the desired mechanical properties. For the purpose of the automatic structure generation, the FEM model was used as the evaluation tool in the framework of an Evolutionary Algorithm, operating as the optimization-search method.

2.2. Finite Element Method

The finite element method is a numerical technique that gives approximate solutions to problems arising in physics and engineering by numerically solving the respective systems of differential equations that describe the physical problem. The FEM has been used to solve a wide range of problems and permits physical domains to be modelled directly using unstructured meshes typically based upon triangular or quadrilaterals in 2D and tetrahedra or hexahedra in 3D. Over each finite element, the unknown variables (e.g., temperature, velocity, etc.) are approximated using basis functions; these functions can be linear or higher-order polynomial expressions in terms of the geometrical locations (nodes) used to define the finite element shape.

The quantitative assessment of the degree of simplification and the discretization error of an FE model using convergence tests, sensitivity studies and validation analyses is an essential prerequisite in order to ensure model reliability.

Adaptivity is an active research area involving either remeshing or increased interpolation order during the solution process. The method is particularly effective in structural analysis problems. Generally, there are two types of adaptation: h-adaptation (mesh refinement), where the element size varies while the orders of the shape functions are kept constant and p-adaptation, where the element size is constant while the orders of the shape functions are increased (linear, quadrilateral, cubic, etc.). (25)

2.2.1. Element types

The 2D models are typically meshed using triangular or quadrilateral elements. The linear quadrilateral element contains four nodes located at all vertices; other commonly used rectangular elements involve eight-noded quadratic and nine-noded biquadratic basis functions (Figure 25).

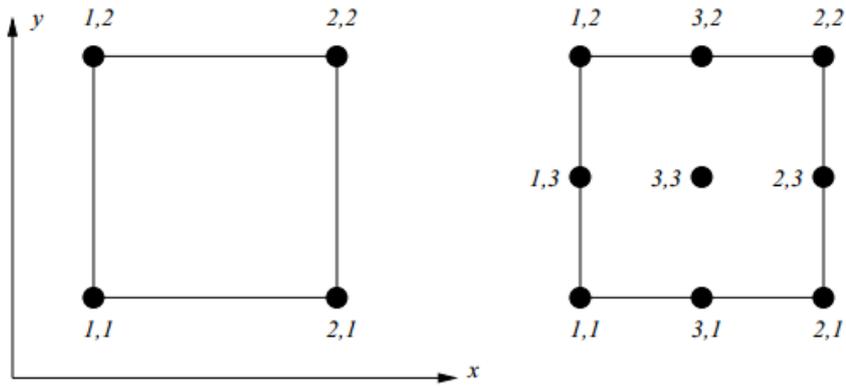


Figure 25: Nodes for canonical square elements with bilinear (left) and bi-quadratic (right) polynomial shape functions. (26)

The linear triangular element contains three nodes located at all vertices; other commonly used triangular elements involve six-noded quadratics and ten-noded cubic finite element approximations (Figure 26).

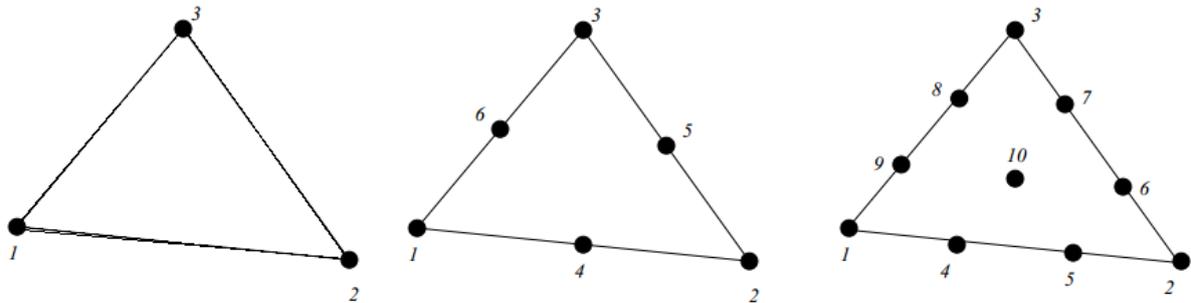


Figure 26: Arrangement of nodes for linear (left), quadratic (middle) and cubic (right) Lagrange finite element approximations. (26)

Solid elements are three-dimensional finite elements that can model solid bodies and structures without any a priori geometry simplification. A 3D FEM mesh can typically consist of tetrahedral and hexahedral elements (Figure 27 and 28).

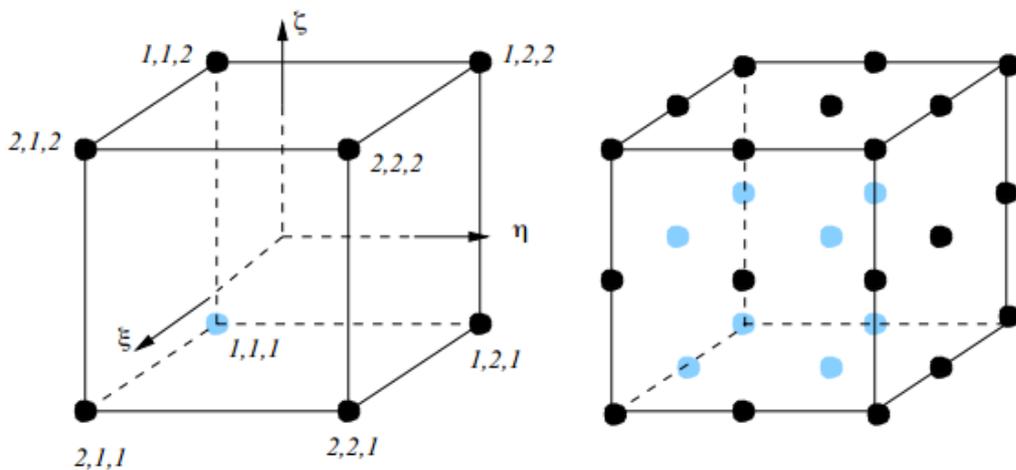


Figure 27: Node placement for trilinear (left) and tri-quadratic (right) polynomial interpolants on a cube (hexahedron). (26)

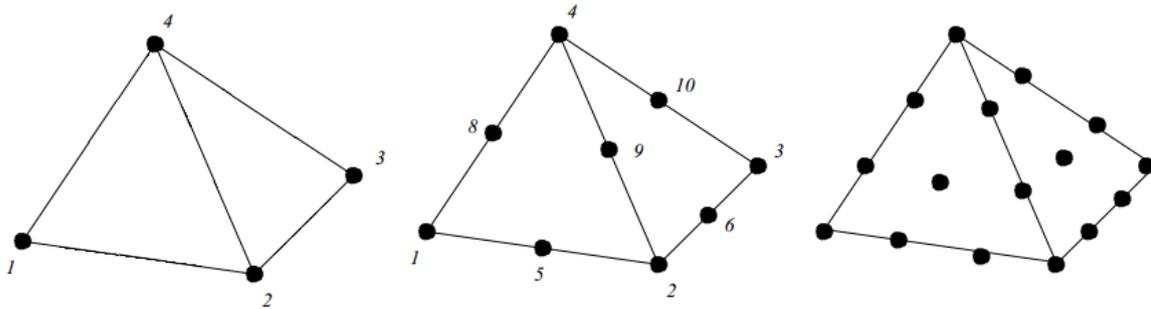


Figure 28: Node placement for linear (left), quadratic (centre) and cubic (right) interpolants on tetrahedra. (26)

In general the linear triangular and tetrahedral elements tend to yield too stiff behaviour and, thus, their use should generally be avoided.

2.3. Evolutionary Algorithms

Evolutionary Algorithms (EAs) are stochastic optimisation methods that are based on principles derived from natural evolution, such as reproduction, mutation, recombination and selection. In such a method, a population of individuals is used to represent candidate solutions in a given search space. The evolution of the population takes place after the repeated application of the above operators with the goal of driving a population of candidate solutions toward better regions of the search space, (27).

Some features of Evolutionary Algorithms are:

- They use populations of individuals which develop simultaneously, instead of individuals.
- The evolution of the population is determined by the values of one or more objective functions.
- Dynamic succession of populations takes place by creating and deleting individuals based on their fitness value.
- During the evolution of the population characteristics of the parents are inherited to the offspring, while new ones can appear stochastically.

A main disadvantage of Evolutionary Algorithms is the large number of evaluations usually required to identify the optimal solution, which is especially evident when the evaluation of the fitness functions is time consuming, such as the case with the FEM calculations performed in the present study. But, by using several techniques, the total number of evaluations can be reduced to a significant lower number.

An EA-based computation starts by randomly generating a number of individuals (the starting population). Through calls to the evaluation software, each one of the starting individuals is associated with its own cost value. If the stopping criteria are not met the creation of a new generation starts. Individuals are selected according to their fitness for the production of offspring, through recombination. All offspring are mutated with a certain probability. The cost value of the offspring is then computed. The offspring are inserted into

the population replacing the parents, producing a new generation. This cycle is performed until the stopping criteria are met. (28)

2.3.1. EASY

EASY, the Evolutionary Algorithms SYstem (28), is a software developed from the Parallel CFD & Optimisation Unit (29) of the School of Mechanical Engineering of the National Technical University of Athens (NTUA). EASY is a general purpose, high-fidelity software for the search of optimal solutions in single- or multi-objective problems.

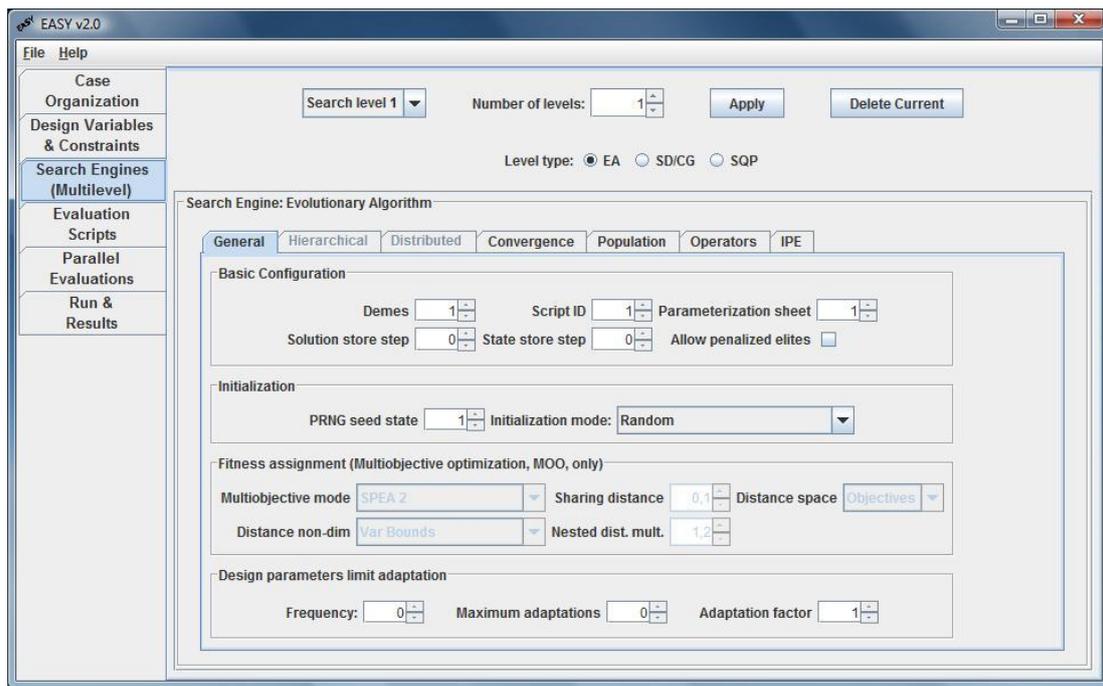


Figure 29: A screenshot from the GUI of EASY. (28)

EASY offers a variety of options. When the CPU cost per evaluation is high, the optimisation problem becomes very expensive. A known solution of this drawback is through the use of surrogate evaluation models or metamodels. Metamodels require training and therefore a set of already evaluated solutions should be available. Afterwards, in each generation, each candidate solution is calculated approximately and the most promising results are evaluated using the exact evaluation tool. In EASY, this technique is called Inexact Pre-Evaluation (IPE).

The first class of Metamodel Assisted EAs (MAEA), utilizes a metamodel which is trained in advance, separately of the evolution and after generating the required training data (off-line training). The second class uses on-line trained metamodels and the exact evaluation tool to selectively support the evolution. The metamodel is continuously retrained during the evolution and it profits the most recently collected data. This class outperforms the off-line because it changes and adapts with each generation.

The most known metamodels for their use with MAEA are the Artificial Neural Networks (ANN). Several models exist, but EASY often (through not exclusively) relies upon, Radial Basis Function Networks (RBFNs). The 'local' RBFNs are trained for each individual thus

avoiding the modelling of the entire search space through a 'global' metamodel. In addition the RBFNs are modified by taking into account the sensitivity of the cost or fitness function with respect to each one of the design parameters. For the training, a number of already evaluated solutions, stored in a database, which are closest to it are located and used. The database entries are dynamically updated by storing any previously evaluated individual along with its cost function value. (30) (31) (32)

Hierarchical EAs (HEA), also referred as multilevel evaluation algorithms, aim at reducing the optimization cost by employing different evaluation tools per level in a systematic way. The software with the highest accuracy and CPU cost is associated with the highest level which delivers the final optimal solution. On the lower levels, less accurate tools are used to explore the design space at low cost, locate promising individuals, and feed them into higher levels. (33) (34)

In the EA-based design, some of the emerging candidate designs may cause complex material interactions which need more CPU time to converge. So, the CPU cost per evaluation often varies. In contrast, Asynchronous master-slave Parallel EAs may safely overcome this problem. In order to achieve this, the asynchronous EA (AEA) control strongly interacting (overlapping) demes for multiprocessor platforms, which may optimally use any number of available processors. It is based on a spatially distributed population, arranged in demes with six nodes each. A deme overlaps with its four neighbours. This justifies the term 'strongly interacting demes' since the majority of search nodes are shared. The evolutionary operators apply within each deme only. The asynchronous operation ensures that all available CPUs remain fully busy during the optimization. (35) (36)

Chapter 3. Material Design Method

In order to achieve the efficient design of novel material nano-structures with controlled properties, a complete design methodology was developed. As discussed in the previous Chapter, the spider silk fibre was selected as the starting point for the material design. The evaluation of the mechanical properties is achieved using FEM modelling of the fibre, while the design process is driven by the Evolutionary Algorithm software. In the following Sections, the design methodology is described in detail.

3.1. Description of numerical experiment

As was discussed in Section 2.1, stiffness and toughness were selected as the mechanical properties of interest for the material design. In order to obtain these values, the fibre specimens need to be subjected to a controlled tension until failure. That test is known as tensile testing or tension test. Tensile tests are performed for several reasons and are often used during the development of new materials and processes, so that different materials and processes can be compared. Via the tensile test the stress-strain curve can be determined and subsequently the stiffness and the toughness can be calculated among the other characteristics. (37)

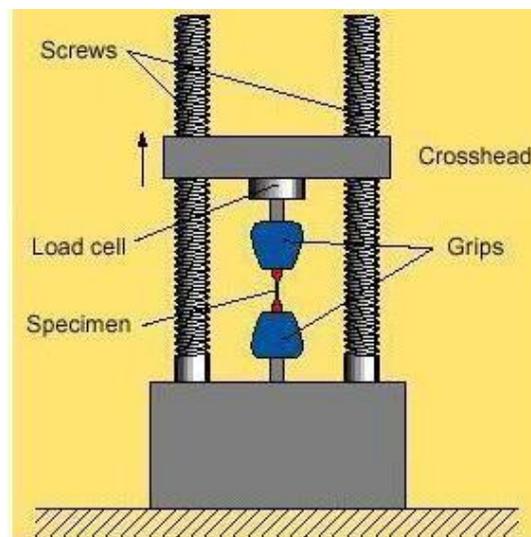


Figure 30: Tensile test machine (7)

The boundary conditions which were used for the tension test are shown schematically in Figure 31. One end of the specimen was constrained at the axial direction while displacement with constant strain rate was applied at the other end. The tensile test simulation was performed using the commercial solver LS-DYNA (version ls971s R5.1.1).

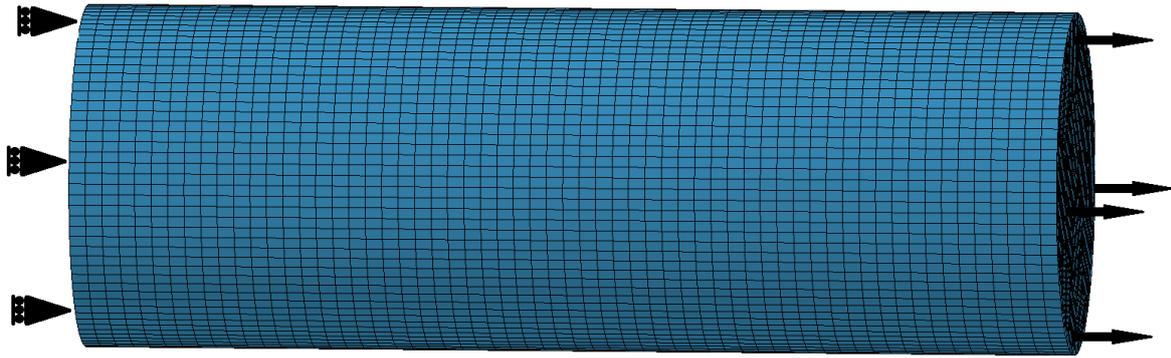


Figure 31: A fibre model under tension test. The left boundary of the specimen is constrained, while displacement with constant strain rate is applied at the right boundary.

3.2. Silk fibre FEM model

For the study of mechanical behaviour of the spider silk fibre, a two dimensional FEM model was used. This model is based on the nano-structure of spider dragline silk relying on two basic components: the crystalline subunits and the amorphous phase. The geometrical parameters of the silk model are based on previous experimental and numerical work. (11) (38) As a result, the length of the fibre was 40 nm and each crystal subunit was described as a rectangular of size $2.691 \times 2.048 \text{ nm}^2$.

The arrangement of the crystalline units inside the amorphous phase of the silk fibre is largely unknown. Therefore, a random arrangement was assumed to represent the typical fibre material.

Figure 32 shows a 2D model, created using LS-PrePost, assuming 25% crystallinity and a pseudo-random crystal arrangement. On the left side the model is constrained, while on right boundary a constant strain rate is applied (Section 3.1).

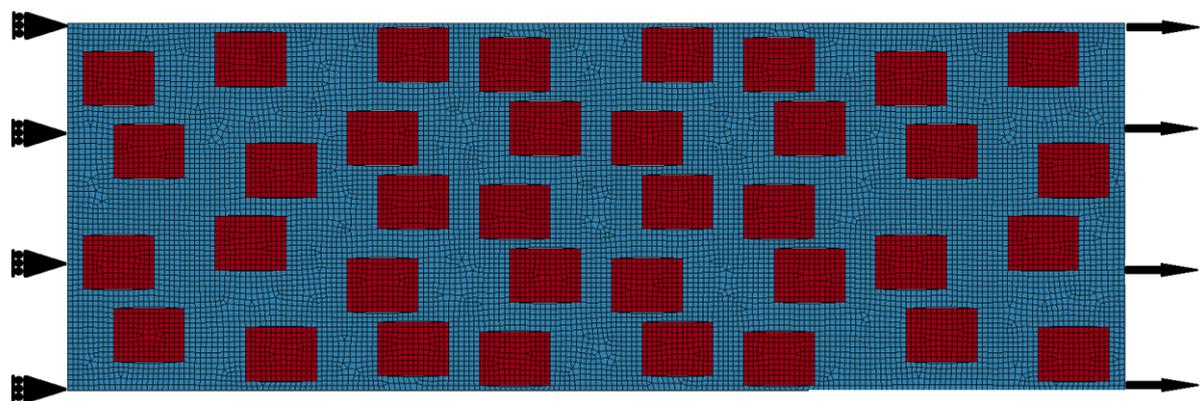


Figure 32: The 2D model for the spider fibre with the boundary conditions.

3.3. Sub-component properties

The spider dragline silk has two main components, the crystal component, which behaves like an elastoplastic material and the amorphous phase, which incorporates the rate-

dependent behaviour. The mechanical properties of each constituent were acquired from previous work (38).

3.3.1. Crystal phase

Through the crystal phase the silk behaves like an elastoplastic material, which undergoes non-reversible changes of shape in response to applied forces. The material model MAT_003_PLASTIC_KINEMATIC was used for the description of the crystal phase in LS-DYNA. The stress-strain curve of two crystal configurations is seen in Figure 33. The stiff configuration (red curve in Figure 33) was used in the current study. The physical properties of the material are $\rho = 1200 \left[\frac{kg}{m^3} \right]$, $E = 71[GPa]$, $\nu = 0.33$ and *yield stress* = $3.95[GPa]$. (11)

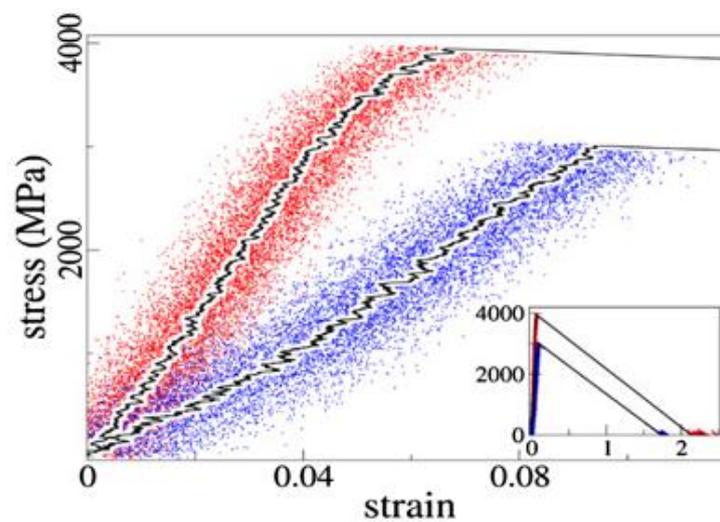


Figure 33: Elasticity and stability of crystalline units from force-probe MD simulations. Stress-strain curves of two different crystal configurations, with solid black curves for averages. The inset shows the complete extension and rapture process. From (11)

As shown in Figure 33, after the yield point, the stress decreases steeply. Figure 34 shows that beyond the yield point, the internal structure of the crystal collapses. Therefore, the yield point was selected as the crystal's failure criterion.

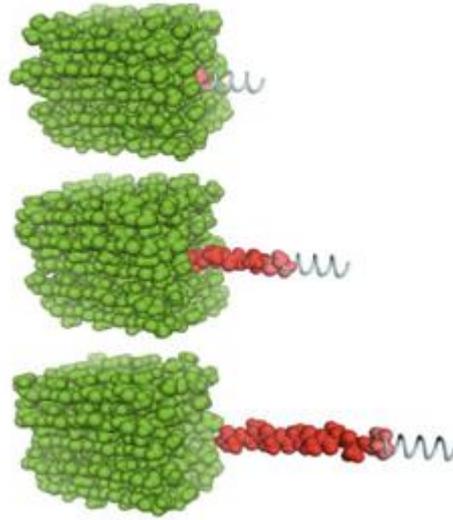


Figure 34: Elasticity and stability of crystalline units from force-probe MD simulations. Simulation snapshots of the rapture process. Crystalline unit is in green with the pulled strand in red. The pulling force is depicted as a spring.

3.3.2. Viscoelastic Amorphous phase.

The amorphous phase is the second component of the model. The viscoelastic material model, MAT_006_VISCOELASTIC, was used for the description of the amorphous phase in LS-DYNA. (39)

In this model, linear viscoelasticity is assumed for the deviatoric stress tensor (40):

$$s_{ij} = 2 * \int_0^t \varphi(t - \tau) \frac{\partial \varepsilon'_{ij}(\tau)}{\partial \tau} d\tau \quad (3-1)$$

Where:

$$\varphi(t) = G_{\infty} + (G_0 - G_{\infty}) \exp(-\beta t) \quad (3-2)$$

is the shear relaxation modulus. G_0 is the short-term shear modulus and G_{∞} is the long-term shear modulus. The short-term modulus is $G_0 = 1.66 [GPa]$. The decay constant is $\beta = \frac{G_0}{\eta}$, where η is the apparent viscosity of the material. The viscosity value $\eta = 10^4 \left[\frac{Ns}{m^2} \right]$ was obtained from the. (11)

For the amorphous phase a failure strain viscous friction theory was considered as the failure criterion. The rapture strain for the amorphous subunit was set to 70% based on results of previous simulations (41).

3.3.2.1. Analytical solution of the viscoelastic model equations

In order to understand the impact of the model constants on the physical behaviour of the viscoelastic material under the tensile test, the differential equation (3-1) is studied in more

detail. The equation (3-1) can be solved analytically if some assumptions are made. A constant pulling speed is considered and 1D geometry is assumed. As a result, all the strains apart from ε_{11} are zero and all the stresses apart from σ_{11} are zero. Thus:

$$\text{Deviatoric strain:} \quad \varepsilon'_{11} = \varepsilon_{11} - \frac{\varepsilon_{\kappa\kappa}}{3} * \delta_{ij} = \varepsilon_{11} - \frac{\varepsilon_{11}}{3} = \frac{2}{3} \varepsilon_{11} \quad (3-3)$$

$$\text{Pulling speed:} \quad u = \frac{\Delta l}{t} \quad (3-4)$$

$$\text{Strain:} \quad \varepsilon_{11} = \frac{\Delta l}{l_0} = \frac{u t}{l_0} \quad (3-5)$$

$$\left. \begin{array}{l} (3-3) \\ (3-5) \end{array} \right\} \quad \frac{\partial \varepsilon'_{11}}{\partial t} = \frac{2 u}{3 l_0} \quad (3-6)$$

$$\left. \begin{array}{l} (3-2) \\ (3-6) \end{array} \right\} \quad s_{11} = 2 \int_0^t [G_{\infty} + (G_0 - G_{\infty})e^{-\beta(t-\tau)}] \frac{2 u}{3 l_0} d\tau$$

$$\Rightarrow \quad s_{11} = \frac{4 u G_{\infty}}{3 l_0} \int_0^t d\tau + \frac{4 u (G_0 - G_{\infty})}{3 l_0} \int_0^t e^{-\beta(t-\tau)} d\tau$$

$$\Rightarrow \quad s_{11} = \frac{4 u G_{\infty}}{3 l_0} t + \frac{4 u (G_0 - G_{\infty})}{3 l_0 * \beta} (1 - e^{-\beta t})$$

$$\left. \begin{array}{l} \Rightarrow \\ (3-5) \end{array} \right\} \quad s_{11}(\varepsilon_{11}) = \frac{4}{3} G_{\infty} \varepsilon_{11} + \frac{4 u (G_0 - G_{\infty})}{3 \beta l_0} \left(1 - e^{-\frac{\beta l_0}{u} \varepsilon_{11}}\right)$$

$$\left. \begin{array}{l} \Rightarrow \\ (3-3) \end{array} \right\} \quad s_{11}(\varepsilon) = 2 G_{\infty} \varepsilon + 2 \frac{u (G_0 - G_{\infty})}{\beta l_0} \left(1 - e^{-\frac{\beta l_0}{u} \frac{3}{2} \varepsilon}\right)$$

$$\Rightarrow \quad s_{11}(\varepsilon) = C_1 \varepsilon + C_2 (1 - e^{-C_3 \varepsilon}) \quad (3-7)$$

Where:

$$C_1 = 2 G_{\infty}$$

$$C_2 = 2 * \frac{u (G_0 - G_{\infty})}{\beta l_0}$$

$$C_3 = \frac{3 \beta * l_0}{2 u}$$

For the last substitution, ε'_{11} is assumed as the only non-zero deviatoric strain.

The final equation is a function of strain and has three coefficients. The coefficients depend on G_0 , G_∞ , β , l_0 , u , where:

- l_0 , is the initial length of the specimen
- G_0 , the short-term shear modulus of the material
- G_∞ , the long-term shear modulus of the material
- β , the decay constant
- u , the pulling velocity

The equation (3-7) can describe how the viscoelastic properties affect the material behaviour. In order to illustrate this correlation the equation (3-7) is plotted in Figure 35. The equation (3-7) consists of two terms: a linear one with the coefficient C_1 and an exponential one with the coefficients C_2 and C_3 . The linear term affects the long-term behaviour of the material and consists of the long term shear modulus. As a result, it defines the slope of the stress-strain curve at high strain values. In Figure 35 this correlation is illustrated: the long-term shear modulus in curve (2) has five times lower value than in curve (1).

The exponential part affects the short term behaviour of the material. Naturally the short-term changes will also alter the long-term result. The C_2 coefficient affects the short-term material behaviour. The long-term shear modulus is usually much lower than short-term shear modulus, thus it does not contribute significantly to the short-term behaviour. In Figure 35, this correlation is illustrated via the comparison of curves 1 and 3. The short-term shear modulus in curve (3) has half the value compared to curve (1).

The coefficient C_3 affects the speed at which the viscoelastic material will advance from the short-term behaviour to the long-term behaviour and consists of the decay constant (β) and the strain-rate ($\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \frac{u}{l_0}$). In Figure 35 this correlation is illustrated with the curve (4) which has twice as much the value of the decay constant compared to curve (1). This is equivalent to having half the value of the strain-rate which corresponds to half the pulling velocity.

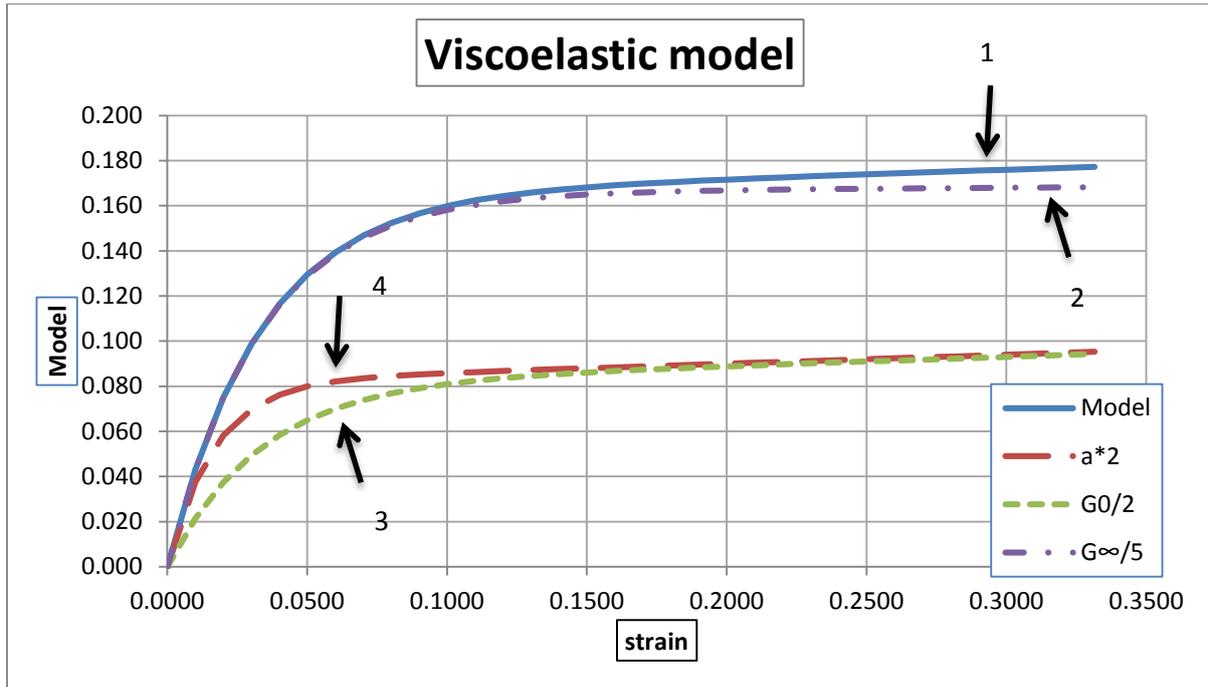


Figure 35: Απεικόνιση της εξίσωσης (3-7)

Illustration of the solution (3-7) of differential equation (3-1) of viscoelastic material with the 1D assumption. The blue, continuous line (1) is the prototype's stress strain curve with the viscoelastic properties of $G_0 = 1.66 [GPa]$, $G_\infty = 0.02 [GPa]$, $a = 3 \left[\frac{1}{ms} \right]$, $u = 6 \left[\frac{m}{s} \right]$. The purple, dash-dotted line (2), is the stress-strain curve if the long term shear modulus of the prototype model (line 1), is halved. The green, short dashed line (3) is the stress-strain curve if the short term shear modulus of the prototype line (1) is halved. The red, long dashed line (4) is the stress-strain curve if the prototype's (line 1) decay constant (a) is doubled or the pulling velocity speed (u) is halved.

The fibre model can fail because of two failure criteria: either the crystals reaches their yield stress or the amorphous phase reaches its failure strain. When increasing the pulling velocity, the crystals will have the same behaviour (they are strain-rate independent), thus they will reach the same failure strain and so their fracture point faster. This can reduce the total CPU solution time without any impact on the material behaviour. However, the viscoelastic amorphous phase is strain-rate dependent (2.1.1.8), thus, an increase in pulling velocity will lead to an increase in the stress for the same strain. Through re-examining the equation (3-7), it can be seen that the pulling velocity (u) appears in constants C_2 and C_3 together with decay constant (β). Therefore, the ratio $\beta_2 = \frac{\beta}{u}$ can be defined and used instead. It can be assumed that the same material behaviour can be achieved as long as the ratio β_2 remains constant, irrespective of the actual pulling speed. If the assumption is valid, a computational gain can be achieved without any impact on the physical response of the material. Several LS-DYNA simulations of the viscoelastic amorphous model and the full fibre model were performed and the validity of this assumption for both 2D and 3D cases was confirmed. Therefore, by adjusting the decay constant β accordingly, the ratio β_2 can be kept constant while increasing the pulling velocity, without any impact on the material behaviour.

3.3.2.2. Validation of the analytical solution

The accuracy of analytical solution (3-7) of the differential equation will be tested, as compared to the FEM reference solution (Figure 36). The analytical solution shows good agreement for the initial stiffness and the yield strain. It can be seen that the yield stress is lower than the LS_DYNA value. Additionally, after the yield point, the analytical solution shows a different trend. This is due to the declared 1D assumption that only the ϵ_{11} is non-zero. However, if the LS-DYNA's solution examined, it can be seen that the deformation in the perpendicular axis is $\epsilon_{22} \approx 0.5 \epsilon_{11} \neq 0$ for high strains. Therefore this assumption is no longer valid and results in the discrepancies shown in Figure 36.

Keeping these limitations in mind, the analytical solution can still describe reasonably well the general shape of the stress-strain curve. When adjusting the viscoelastic material properties, the analytical solution can be used as a first rough estimation of the overall system behaviour.

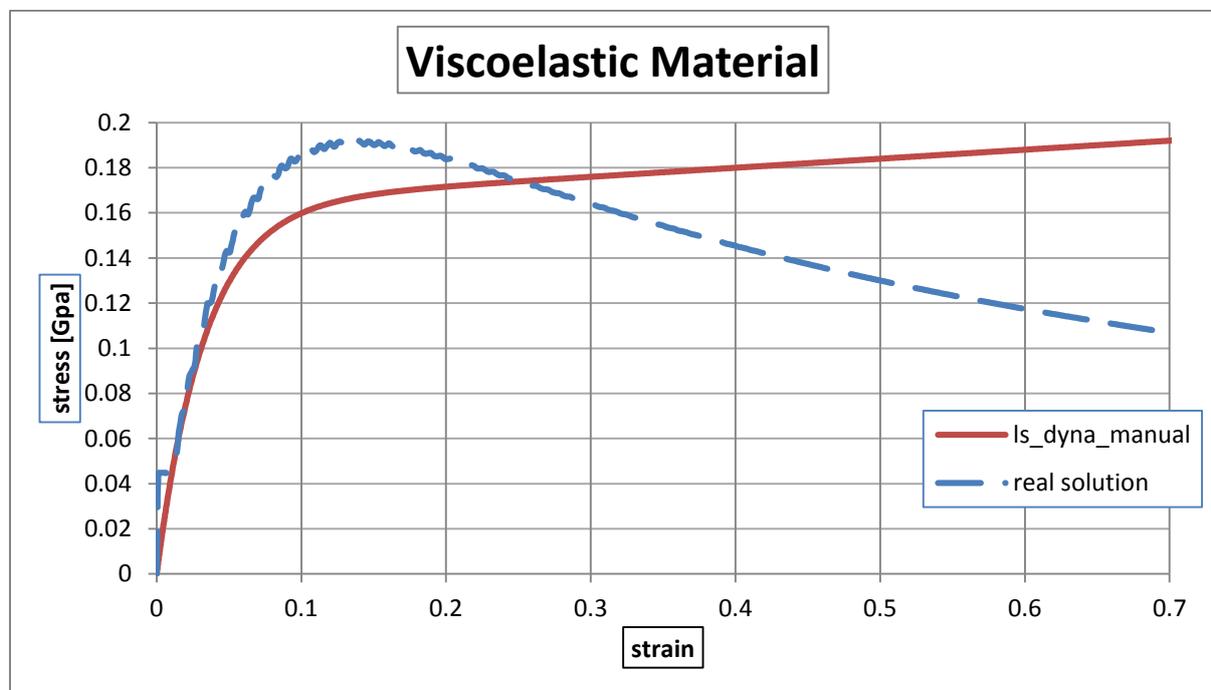


Figure 36: LS-DYNA solution versus the analytical solution of a viscoelastic material behaviour under tensile test (the continuous red line is the analytical solution and the dashed blue line is the solution from LS-DYNA)

3.3.3. Contact between the crystal and the amorphous phase

The crystalline units are connected with the amorphous phase along the fibre axis direction. In the direction perpendicular to the fibre axis, there is no direct connection between the crystalline units and the amorphous phase. Instead, the crystalline units are in contact with the amorphous and depending on the extent of interfacial friction, crystals are able to slide and therefore be redistributed within the amorphous matrix under mechanical load.

From previous work (42), the frictional behaviour between the amorphous phase and the crystalline unit has been quantified (Figure 37) using MD and FEM simulations. Figure 37 shows stresses as a function of relative velocity for the friction model. In the first loading case, the crystalline cube was pulled horizontally along an amorphous plate, corresponding to a force parallel to the silk fibre axis. For high relative velocities (>1 m/s), the stresses in the crystalline component as well as in the interface were of high magnitude and increased with increasing relative velocities. For low relative velocities (<1 m/s), stresses in both components and in the interface were not significant (nearly zero) as shown in Figure 37 A. However, no significant stresses occurred in the amorphous phase for all relative velocities. In the second loading case, the crystalline cube was pulled along a direction forming a 10 degree angle with the horizontal amorphous plate (Figure 37 B). For this slight loading inclination, stresses upon relative sliding of the two phases were significant even for velocities smaller than 1 m/s.

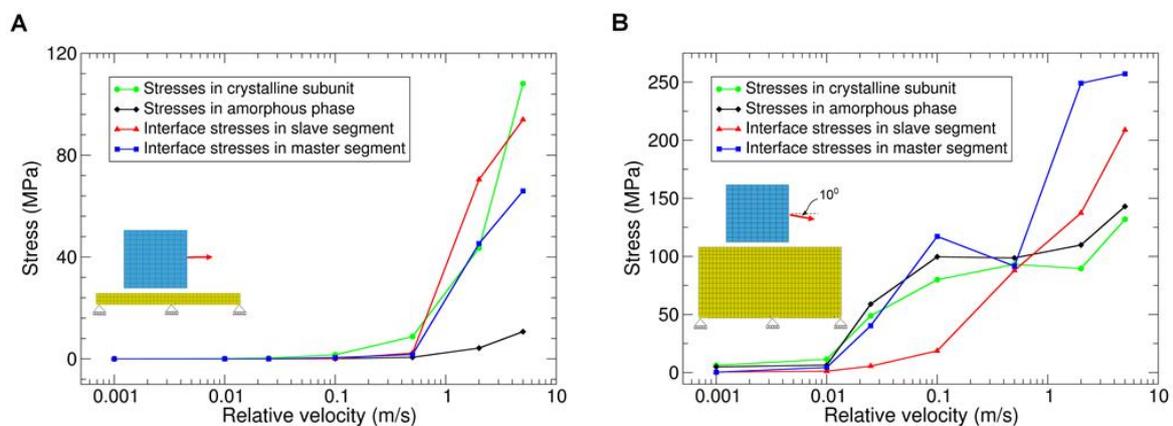


Figure 37: Stresses in the crystalline and amorphous components as well as the interface segments as a function of their relative velocity. (42)

In the starting phase of the fibre simulations it was noticed that the relative velocity between the amorphous and the crystals was low, while the relative motion was generally following the axial direction of the fibre. As a result the interface stresses were negligible and didn't have any significant impact on the fibre behaviour. Therefore it was decided to ignore the friction between the two components. Instead, a small gap between the crystals and the amorphous phase was used in order to represent the crystal-amorphous interaction.

3.4. Meshing

In order to perform the FEM simulations, the fibre model must be discretised using a two dimensional mesh. A significant requirement for the complete design method was the automatic performance of the meshing procedure, without any user intervention.

To create the mesh and the input file for the FEM solver, the commercial LS-PrePost was used. LS-PrePost offers the possibility to perform all the commands using a macro

(command file) and execute the macro without launching the LS-PrePost GUI, while executing the commands in batch mode (43).

For the purpose of the macro file creation, a python script was written, which had the model geometry as input: the size of the fibre, the size of the crystals, the number of the crystals, the position of the centre of the crystals and other options such as if a gap between the crystals and the amorphous can be considered.

3.5. Simulation

Once the mesh has been generated, the commercial solver LS-DYNA (version ls971s R5.1.1) is used for the solving the tensile test problem. LS-DYNA used as an input a file in format of a “.k” file which was created as described in Section 3.4. Each solution could be run in parallel using up to 8 CPUs.

3.6. Data extraction

Various output files can be configured as an output from LS-DYNA. In this thesis, as a boundary condition, the left side of the specimen was defined as SPC_SET (NODES), with translational constrain in the load axis direction. Therefore, the output file SPCFORC was used for calculating the stress-strain curve. The SPCFORC file contains the reaction forces on boundaries nodes for each pre-defined time interval. Hence, for calculating the strain-strain curve, a post processing script was written. This script sums the reaction forces from every node on each time interval in order to calculate the total force. Then it calculates the engineering stress by dividing the total force with the initial cross section area (Section 2.1.1.1). Additionally, in order to calculate the strain at each timestep, since the pulling velocity was constant; the script uses the simple formula

$$\varepsilon = \frac{l - l_0}{l_0} = \frac{u t - l_0}{l_0} \quad (3-8)$$

The toughness and stiffness were the two main optimisation objectives, as was previously mentioned. In order to calculate the toughness, the stress is integrated over the strain (Section 2.1.1.5) using the trapezoid rule:

$$(2-5) \Rightarrow \quad Toughness = \int_0^{\varepsilon_f} \sigma \, d\varepsilon \approx \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N (\varepsilon_{k+1} - \varepsilon_k)(\sigma_{k+1} + \sigma_k) \quad (3-9)$$

The calculation of toughness using the equation (3-9) was validated using the equation:

$$(2-5) \Rightarrow \quad Toughness = \frac{energy}{volume} \quad (3-10)$$

where the energy can be obtained from the LS-DYNA output file GLSTAT. The difference between the two toughness values from equations (3-9) and (3-10) was insignificant.

As described in Section 3.3.2.1, increasing the pulling velocity speed, reduced the total CPU solution time. However the stress-strain curve became noisier and it was not possible to use the definition of stiffness (Section 2.1.1.4) for its evaluation.

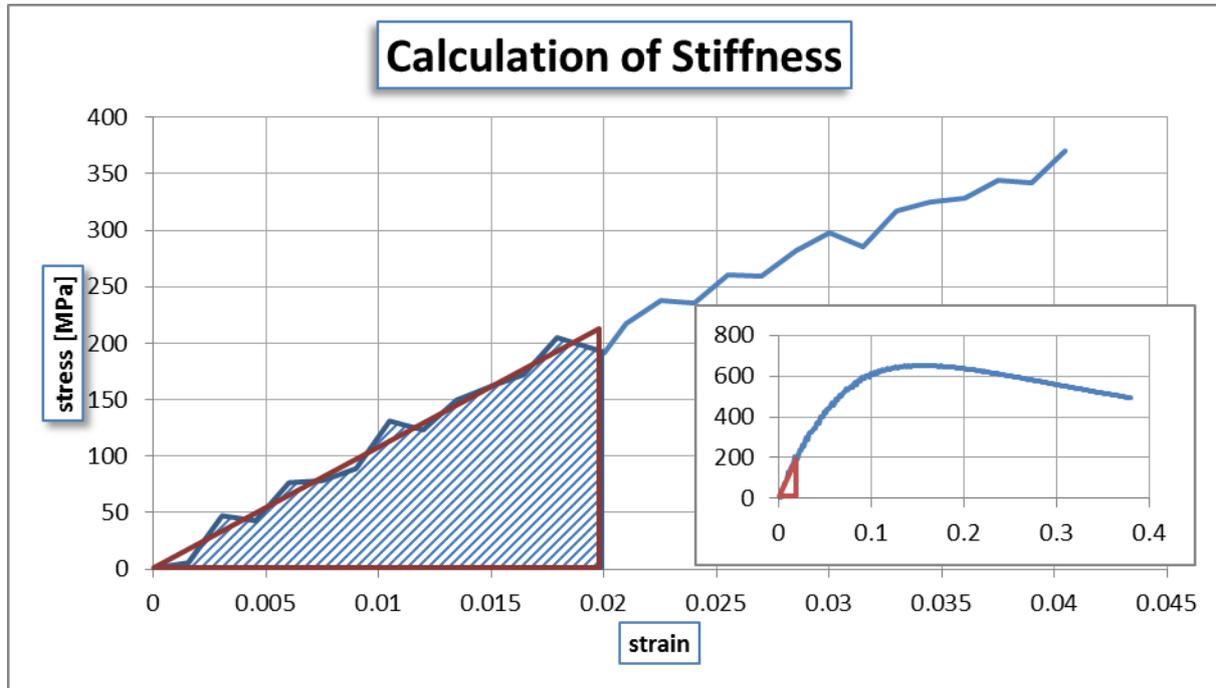


Figure 38: Calculation of Stiffness. The marked area is the calculated integral, while the linear elastic region is marked with a red triangle.

With the objective to reduce the error from the noise, the concept of integrating the curve up to a strain of 2% was introduced. This way the instantaneous error was averaged over time and therefore minimised (Figure 38). The 2% strain was chosen to allow a low enough value to ensure that the integrated region lied in the initial linear area of the stress-strain curve, but also high enough to maximise the summation filtering.

A linear stress-strain curve was assumed in the integration zone. Therefore, the integral below the curve can be described as the area of the triangle. In addition, this area corresponds to the toughness of the material up to this strain.

Hence:

(Area of triangle)

$$Toughness|_{\varepsilon_1} = \frac{\sigma_1 * \varepsilon_1}{2} \quad \Leftrightarrow$$

$$\sigma_1 = \frac{2 * Toughness|_{\varepsilon_1}}{\varepsilon_1}$$

$$(2-4) \Rightarrow E \equiv \frac{\text{tensile stress}}{\text{strain}} = \frac{\sigma_1}{\varepsilon_1} = \frac{2 * \text{Toughness}|_{\varepsilon_1}}{\varepsilon_1^2} \quad (3-11)$$

To validate the equation (3-11), the same tensile test simulation was performed with LS-DYNA, once with a pulling velocity speed of 0.6 [m/s] and once with 6 [m/s], while incorporating the respective changes for the decay constant of viscoelastic material as described in Section 3.3.2.1. The stress-strain curve with a pulling velocity speed 0.6 [m/s] was smooth, while the stress-strain curve with pulling velocity speed 6 [m/s] was much more noisy. The difference in stiffness between the two curves using Equation (3-11) was <1%. Therefore in the following simulations the pulling velocity was set at 6 [m/s] and the stiffness was computed using the equation (3-11).

3.7. Optimisation procedure

The evaluation software has been described completely in the previous Sections. The evaluation tool applied the tension test as a method of evaluating the material's mechanical properties (Section 3.1). In order to conduct the experiment using simulations, the specimen geometry was designed (Section 3.2) and its properties were defined (Section 3.3). Afterwards the model was meshed (Section 3.4) and the fully defined model was used as an input in the FEM solver (Section 3.5). The FEM solver calculated the mechanical response of the specimen, which was then used to calculate the desired mechanical properties (Section 3.6). Finally, the evaluation tool provided the objectives' values as an output for the optimisation tool.

In order to complete the automated design process, this evaluation tool was coupled with the optimisation software (EASY). The evaluation tool was considered as a "black box" for EASY. EASY provides the design variables values in a file as an output and receives the objectives' values after the evaluation problem. The whole procedure is illustrated in Figure 39.

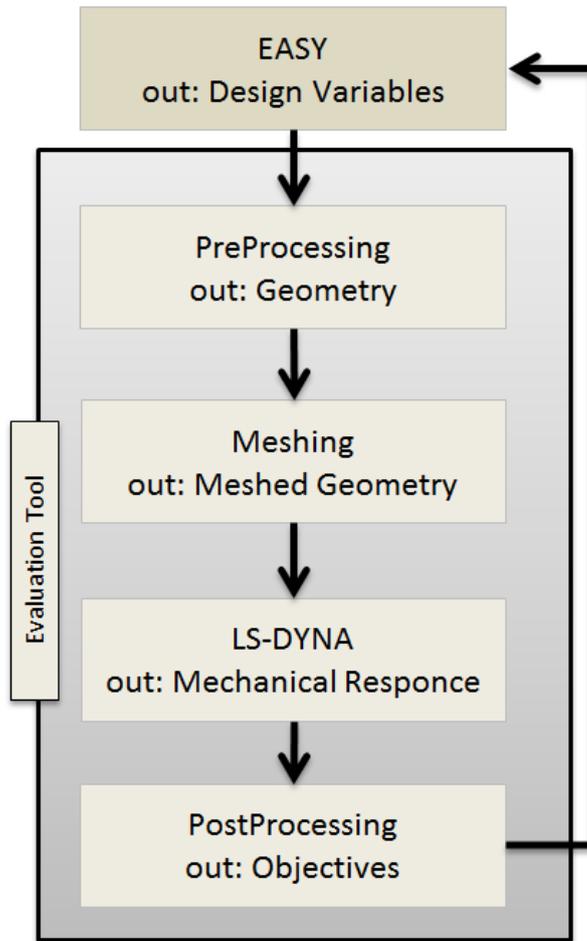


Figure 39: Flow chart. Illustration of the Evolutionary Algorithm coupled with the evaluation tool.

Chapter 4. Optimisation Procedure Configuration

The complete methodology that was developed for the automatic design of composite nano-fibres was presented in the previous Chapter. In order to perform the research of novel designs in an efficient way, each component of the method needs to be properly configured. In the following Sections the configuration of each design step is presented, along with the final settings that to used in the next Chapter.

4.1. Fibre structure and properties

The spider silk model described in Chapter 3 is used for the study of the mechanical properties of fibre material. While the approximate sizes of crystallites in the silk fibre have been determined (44), their exact arrangement along the fibre remains largely unknown and a common assumption is that of a random arrangement. In order to explore the impact of the fibre internal nano-structure on its mechanics, a full spectrum study of crystallinity variations and arrangements was performed. In order to obtain some reference points for the mechanical potential of the fibre, the random distribution was compared against two theoretical extremes of potential crystal arrangements: a serial (lamellar-like) and a parallel one (longitudinal). Finally, the model was validated against results from previous studies (45)

4.1.1. Serial arrangement

In the serial arrangement, the crystalline and amorphous phases are arranged in an alternating fashion, perpendicular to the pulling axis. In such an arrangement the softer amorphous phase is expected to dominate the mechanics.

The discrete nature of the crystals, combined with long axial deformations, led to a significant impact on the fibre behaviour. In order to achieve independence of the mechanical properties from the number of the crystals, successive divisions of the crystalline phase were performed until the resulting toughness and stiffness values presented no significant change.

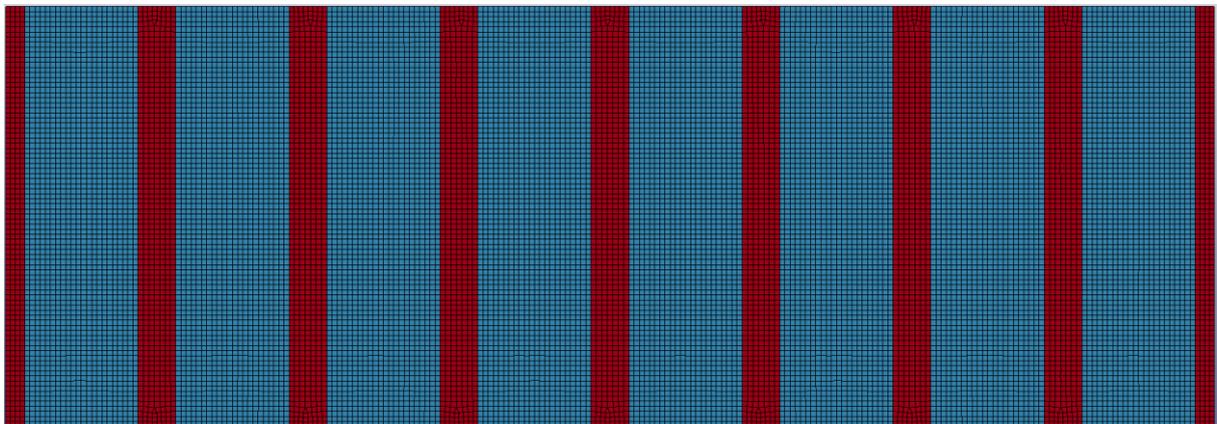


Figure 40: LS-Dyna model for the serial arrangement, with 25% crystallinity. The pulling axis is the horizontal.

This arrangement is equivalent to springs in series. The total strain of the specimen is the sum the amorphous and crystalline phase strain,

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 \quad (4-1)$$

Thus the specimen's stiffness is:

$$\frac{1}{E} = \frac{A_1}{E_1} + \frac{A_2}{E_2} \quad (4-2)$$

where:

E_1, E_2 : the stiffness of each component

A_1, A_2 : The area percentage of each component; it follows that $A_2 = (1 - A_1)$ and that A_1 corresponds to the total crystallinity.

4.1.2. Parallel arrangement

In the parallel arrangement the crystalline and amorphous phase were aligned parallel to the pulling axis. The crystalline phase was located at the core of the fibre, while the amorphous phase defined the rest of the fibre. In this case, the mechanical properties in the tensile test are expected to be dominated by the crystalline component.

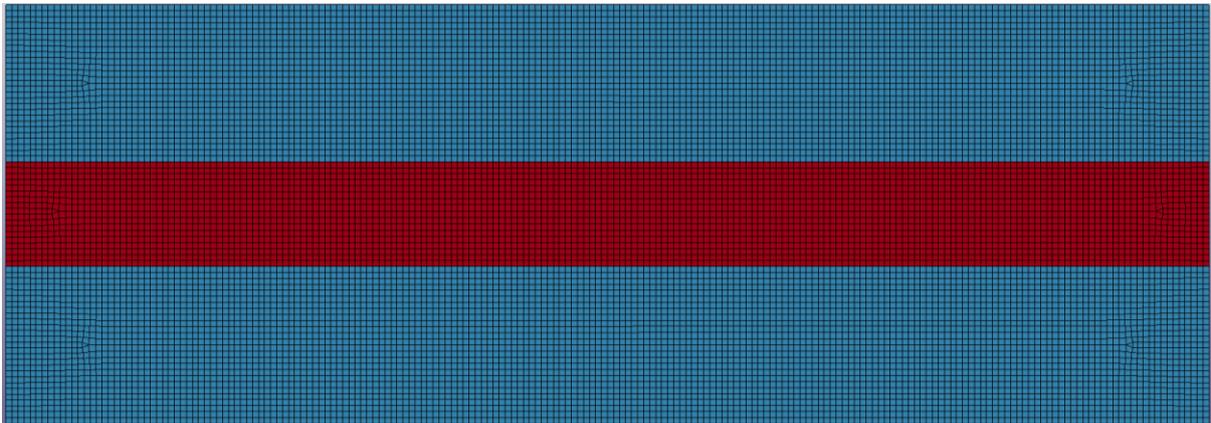


Figure 41: LS-Dyna model for the parallel arrangement, with 25% crystallinity. The pulling axis is the horizontal.

This arrangement is equivalent to springs in parallel. The strain of each component, crystalline and amorphous phase, is the same and equal to the total strain of the specimen,

$$\varepsilon = \varepsilon_1 = \varepsilon_2 \quad (4-3)$$

While the total stress is the sum of each component's stress,

$$\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 \quad (4-4)$$

Thus, the specimen's stiffness is:

$$E = A_1 * E_1 + A_2 * E_2 \quad (4-5)$$

4.1.3. Random arrangement

In order to configure and validate the reference design for spider silk fibre, several simulations with varying crystallinity levels starting from 5% up to 70% were performed. A pseudo-random arrangement, without overlapping, was used for the construction of the tests. The resulting crystal placement off 25% crystallinity is shown in Figure 42.

The maximum crystallinity that could be evaluated was 70% due to geometrical constraints. The size of the fibre and the size of the crystals were predefined. As a result, if the crystallinity of the fibre was increased beyond 70% the possible crystal displacements were extremely limited. This led to a structured-like arrangement, with toughness and stiffness similar to the serial case. As a result, cases with more than 70% crystallinity were not studied as they could not be considered random.

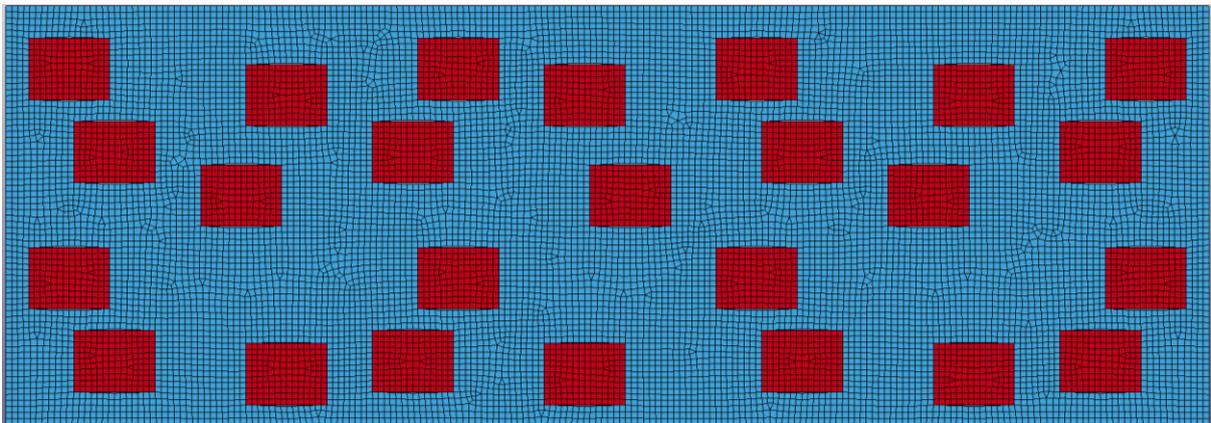


Figure 42: LS-Dyna model for the random arrangement, with 25% crystallinity.

4.1.4. Mechanical properties

In order to validate the 2D fibre model, the previously described arrangements were utilized. Initially, the mechanical properties of rupture stress and rupture strain with respect to crystallinity are plotted in the following figures for the serial, parallel and random arrangements.

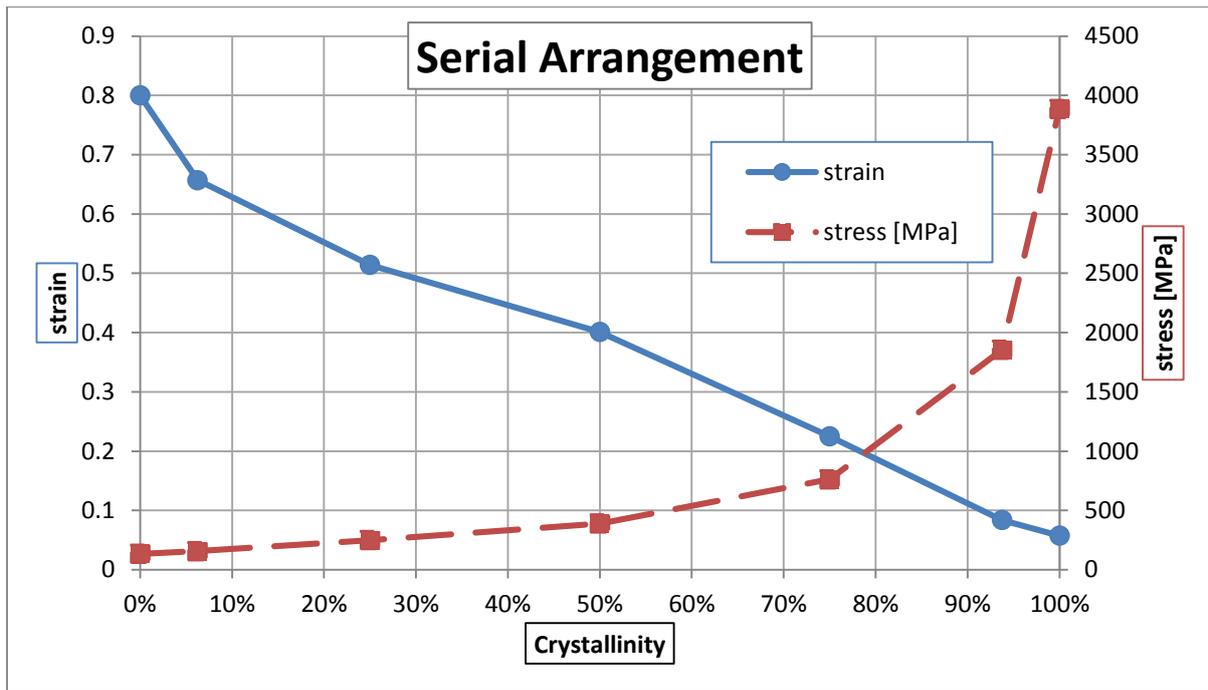


Figure 43: Serial arrangement of crystals from 0% (pure amorphous) up to 100% (pure crystal) crystallinity. The continuous blue line with circles is the strain curve and with the dashed red line with squares is the rupture stress curve.

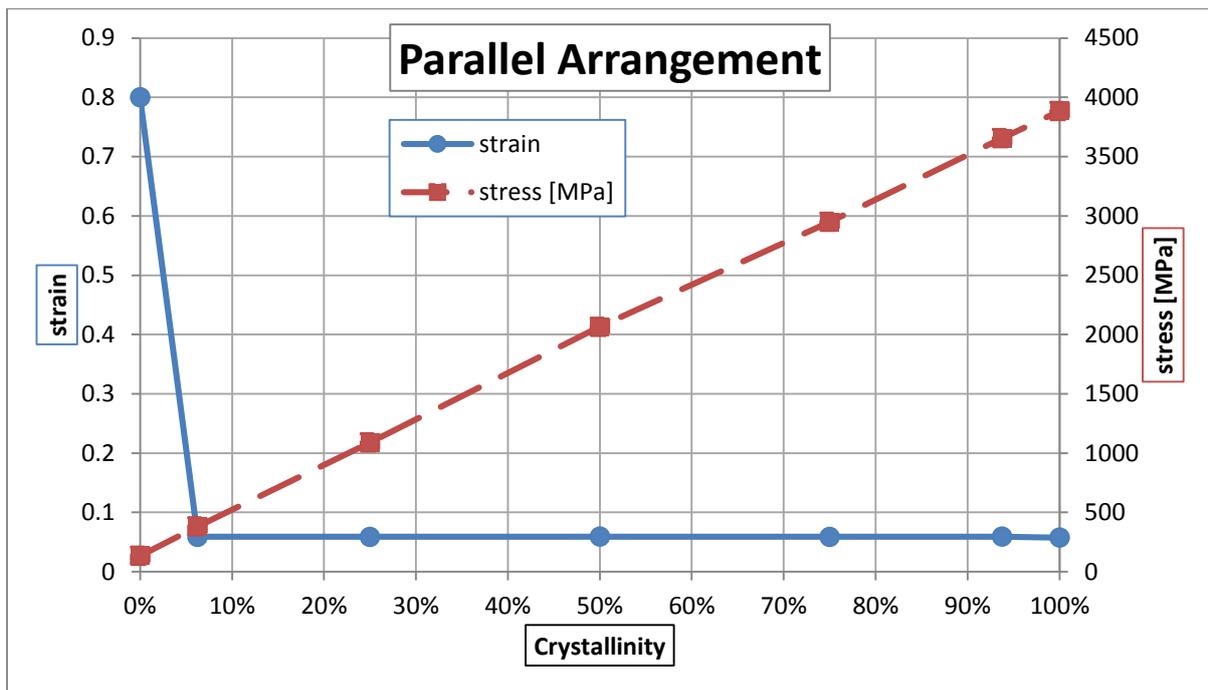


Figure 44: Parallel arrangement of crystals from 0% (pure amorphous) up to 100% (pure crystal) crystallinity. The continuous blue line with circles is the strain curve and with the dashed red line with squares is the rupture stress curve.

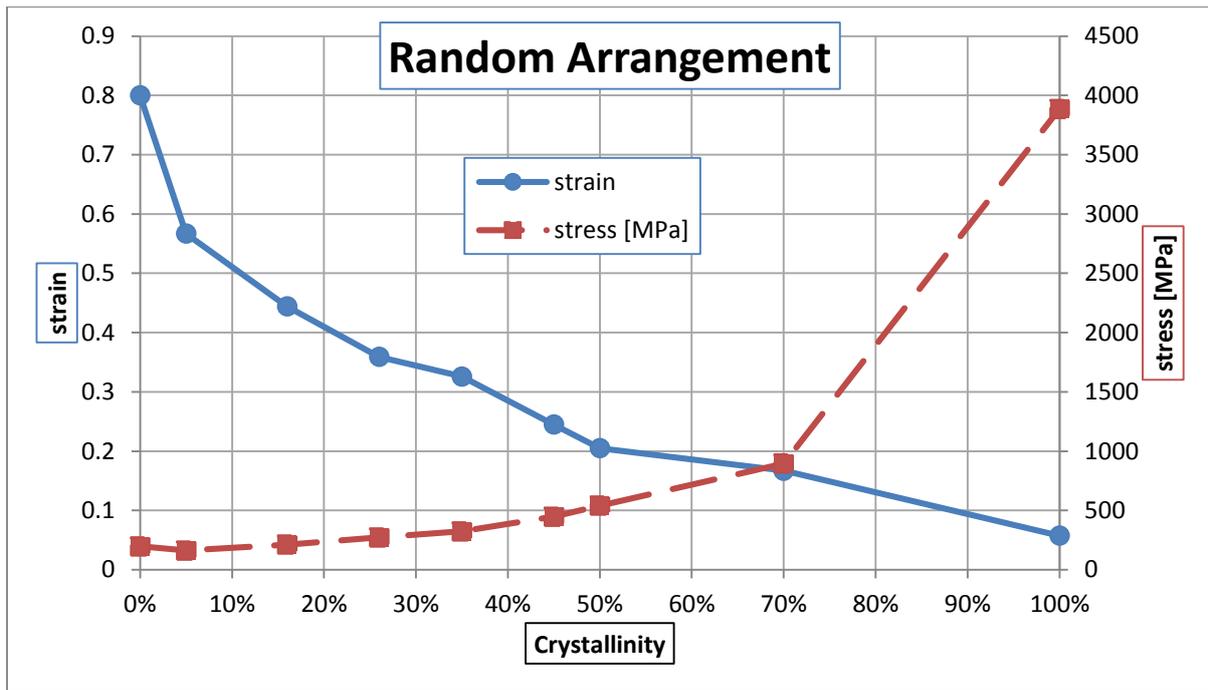


Figure 45: Random arrangement of crystals from 0% (pure amorphous) up to 100% (pure crystal) crystallinity. The continuous blue line with circles is the strain curve and with the dashed red line with squares is the stress curve.

Figures 43, 44 and 45 show the rupture stress and rupture strain curves for the serial, parallel and random arrangements of the crystalline units in the fibre silk model. An increase in the crystallinity value led to an increase in the rupture stress for all cases. As crystallinity increased up to 70%, the rupture stress increased to 0.7 GPa for the serial and 3 GPa for the parallel case, with the random arrangement case lying in between (0.9 GPa), relatively close to the serial case.

On the other hand, it can be seen that the rupture strain decreases with the increase in crystallinity for the serial and the random arrangement in a similar way. In the parallel case, the fibre behaviour is dominated by the crystal properties. As a result, the rupture strain of the parallel case remains unchanged and equal to the rupture strain of the crystal. According to equation (4-3) the specimen's total strain is equal to crystal's strain. Therefore the specimen's fracture strain could not exceed the crystal's fracture strain ($\epsilon_f = 5.87\%$) and since the amorphous' fracture strain is much higher than crystal's, the specimen would always fail due to the crystal's fracture strain.

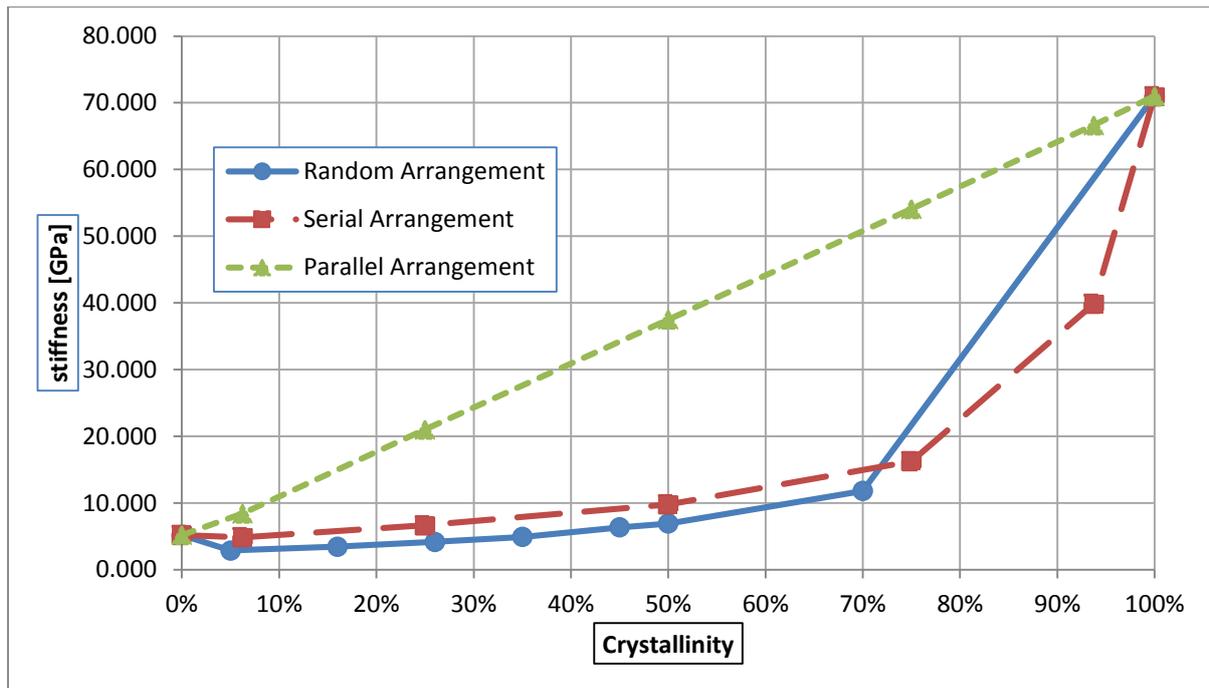


Figure 46: Variation of stiffness with respect to the silk fibre crystallinity. The continuous blue line with circles is the random arrangement curve, with the long-dashed red line with squares is the serial arrangement curve and with the short-dashed green line with triangles is the parallel arrangement.

Figure 46 shows the variation of initial stiffness with silk fibre crystallinity for parallel, random and serial arrangement. A serial assembly resulted into the lowest initial stiffness as it was dominated by the mechanical characteristics of the amorphous unit. On the other hand, the parallel assembly, being reinforced by the crystalline units throughout the silk fibre axis, resulted into the highest values of silk fibre initial stiffness. As expected, the initial stiffness value of a random arrangement silk fibre model lied between the two extremes, but this time it was closer to serial arrangement. A comparison between the serial and parallel arrangement initial stiffness as calculated by the equivalent springs model against the LS-DYNA solution is shown in Table 7. The results confirm that the serial and parallel arrangements follow the equivalent spring model.

Table 7: Comparison between the serial and parallel's arrangement initial stiffness as calculated by the equivalent spring's model against the LS-DYNA's solution.

Crystallinity	Stiffness [GPa]			
	serial distribution		parallel distribution	
	LS-DYNA	Serial Springs	LS-DYNA	Parallel Springs
6.25%	4.88	5.54	8.44	9.33
25.00%	6.68	6.79	21.02	21.66
50.00%	9.80	9.72	37.52	38.11
75.00%	16.26	17.09	54.09	54.55
93.75%	39.87	39.67	66.63	66.89

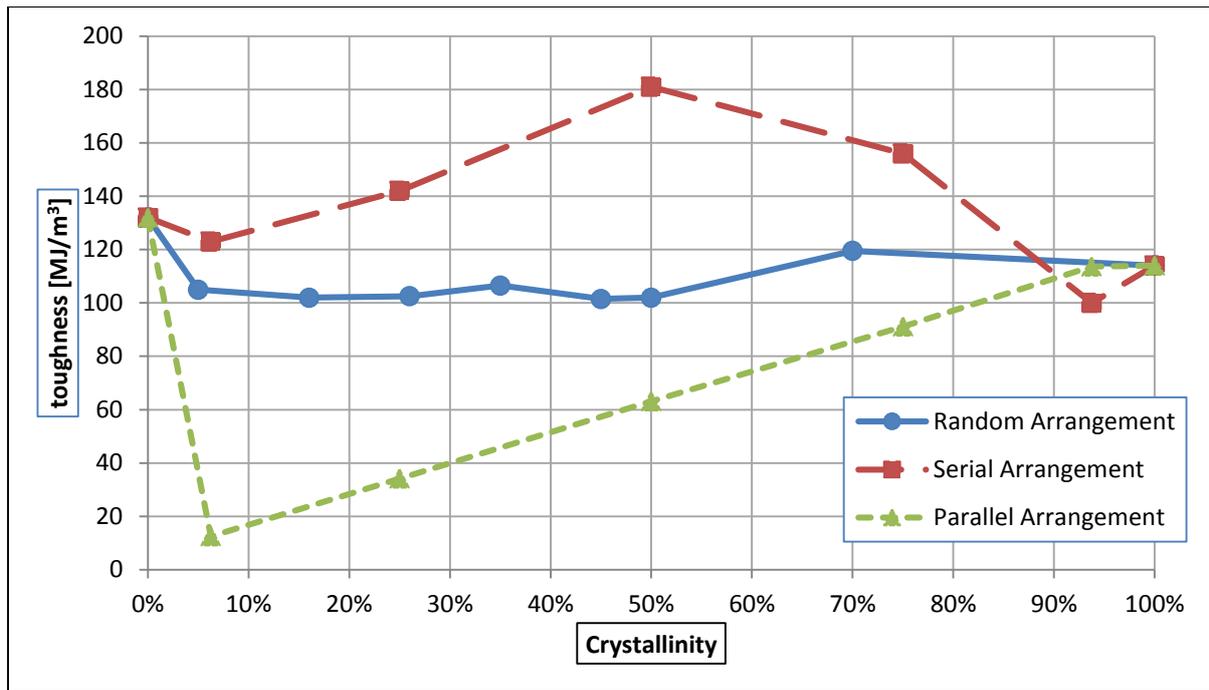


Figure 47: Variation of toughness with respect to the silk fibre crystallinity. The continuous blue line with circles is the random arrangement curve, the long-dashed red line with squares is the serial arrangement curve and the short-dashed green line with triangles is the parallel arrangement.

Figure 47 shows the variation of the toughness for the three distinct arrangements with respect to the silk fibre crystallinity. The serial arrangement largely outperformed the other two alternatives in terms of toughness, with the maximum value achieved at $\approx 50\%$ crystallinity. On the other hand, the parallel arrangement yielded the lowest values of toughness, due to the very low values of breaking strain. The random arrangement yielded a relatively constant value of $105 \text{ [MJ/m}^3\text{]}$, a range well within the reported experimental values of $120\text{--}225 \text{ MJ/m}^3$ (46) (47) (48). For the 70% crystallinity a slightly higher value for the toughness can be seen, but this can be explained by the reduction of the arrangement “randomness”.

4.1.5. Comparison with results from literature

The bulk mechanical properties such as strength, extensibility, initial stiffness and toughness obtained from the FEM simulations show good agreement with previously reported results in (11), (38), (45). For a further validation of the fibre model used in the current work, the rupture stress, rupture strain, toughness and initial stiffness for the three arrangements from (45) are plotted against the crystallinity variation in the Figures 48 and 49.

By comparing the figures, it can be seen that the computed mechanical properties for the serial and random arrangement were in good agreement with the results from (11). The parallel arrangement showed a significantly different behaviour in terms of rupture strain. This was mainly due to a different definition of the failure criteria.

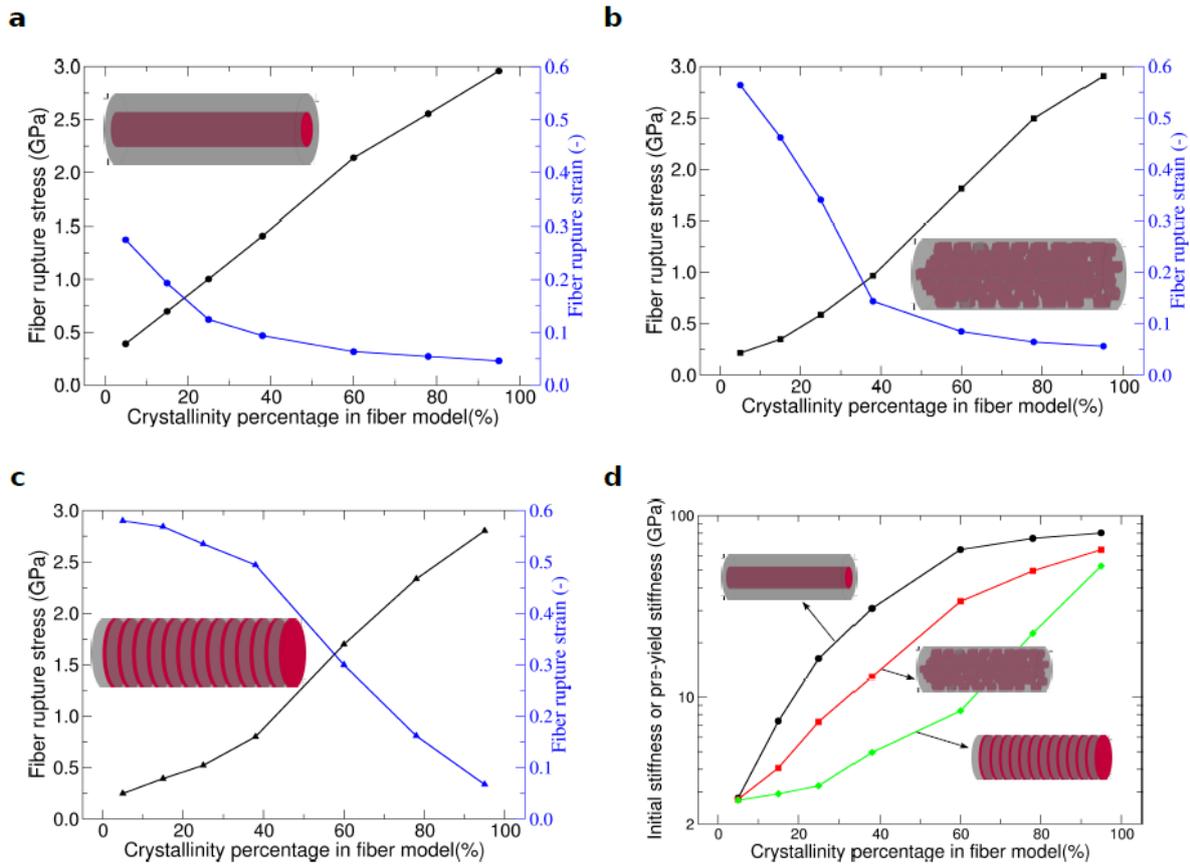


Figure 48: Variation of the mechanical properties with fibre crystallinity. Results for three different crystalline distributions are shown as indicated by the schematics. Variation of the rupture stress and rupture strain with respect to the fibre crystallinity for 3D fibre model with (a) a parallel arrangement, (b) a random distribution and (c) a serial arrangement of crystals in the amorphous phase. (d) Variation of the initial stiffness with respect to the silk fibre crystallinity. Results for the parallel (black), random (red) and serial (green) distribution of crystalline units are shown. From (45).

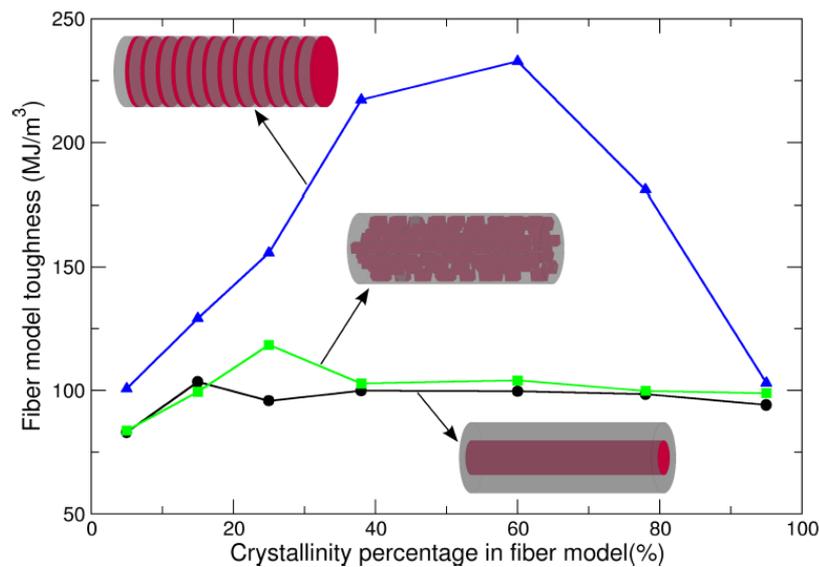


Figure 49: Variation of the toughness with respect to the crystallinity. Results for the serial (blue with triangles), random (green with squares) and parallel (black with circles) distribution of the crystalline units are shown as indicated by the schematics. From (45).

Following the validation of the 2D results against previous experimental measurements and 3D simulations, it was shown that the selected model can represent the behaviour of the real spider silk material accurately enough. Therefore this reference geometry formed the basis for all the optimisation runs that will be presented in 0.

4.2. Solutions independence to the mesh

When using the finite element method for the numerical simulation of solid mechanics, the mesh plays a crucial role. In general, a finer element discretisation yields a better approximation and more accurate calculation results. Therefore, it is very important to check the mesh independence of the numerical simulation model. In order to study mesh independency, 2D triangular and quadrilateral element types have been considered (Figure 50), as well as different element formulations and sizes.

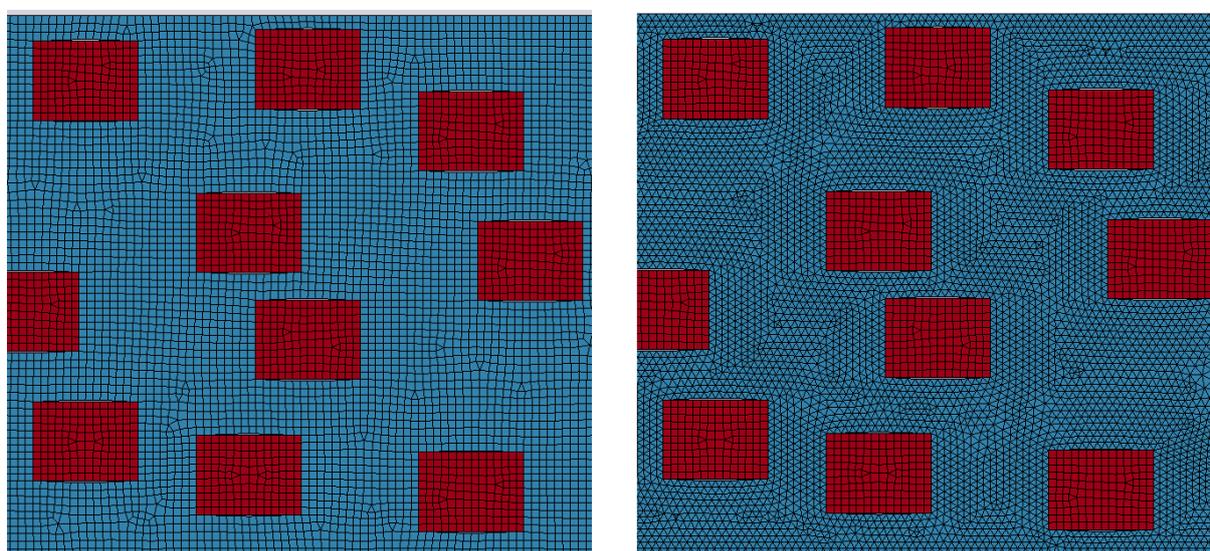


Figure 50: Part of the two different meshes made by LS-PrePost. Left mesh is with quads, the right one with triangles. Both meshes have element size 0.2. For 25% crystallinity the quad mesh has a total of 14.432 elements, when the triangles mesh has a total of 18946 elements.

In order to run a mesh convergence analysis three different element sizes were considered ranging from 0.1 to 0.4 mm. Additionally two different combinations of element types were compared: a mesh with triangular elements and a mesh dominated by quadrilateral elements and including a low number of interconnecting triangular elements.

Testing the quadrilateral mesh, the mechanical response of specimen converged for an element size of 0.2 mm. Further increase yielded no further change. (Table 8) On the other hand, the mechanical response of the mesh with triangular elements did not converge (Table 9).

Table 8: Mesh independence analysis. Element size analysis for mixed quadrilateral elements. The pulling velocity was 0.6 [m/s] and the LS-DYNA ran using 8 CPU.

Quadrilateral elements			
element size [nm]	0.1	0.2	0.4
total elements	55 737	14 432	3 996
CPU time (8 CPUs)	3h 26m 27s	0h 14m 46s	0h 1m 14s
stiffness [MPa]	6781	6800	6826
UTS [MPa]	316	316	320
fracture stress [Mpa]	286	286	291

Table 9: Mesh independence analysis. Element size analysis for triangle elements. The pulling velocity was 0.6 [m/s] and the LS-DYNA ran using 8 CPU.

Triangular elements			
element size [nm]	0.1	0.2	0.4
total elements	115 486	28 946	7 573
CPU time (8 CPUs)	12h 50m 10s	1h 39m 26s	0h 7m 22s
stiffness [MPa]	6799	6873	6943
UTS [MPa]	313	320	329
fracture stress [Mpa]	282	286	300

In the rest of this work a quadrilateral-dominated mesh with element size of 0.2 nm was used. As mentioned before (Section 3.3.2.1 and Section 3.6) the applied pulling velocity was set to 6 [m/s]. The typical total simulation time for a pulling velocity speed of 6 [m/s] for 8 CPUs was 5 min for about 25% crystallinity and the material properties of the spider silk (Section 3.3).

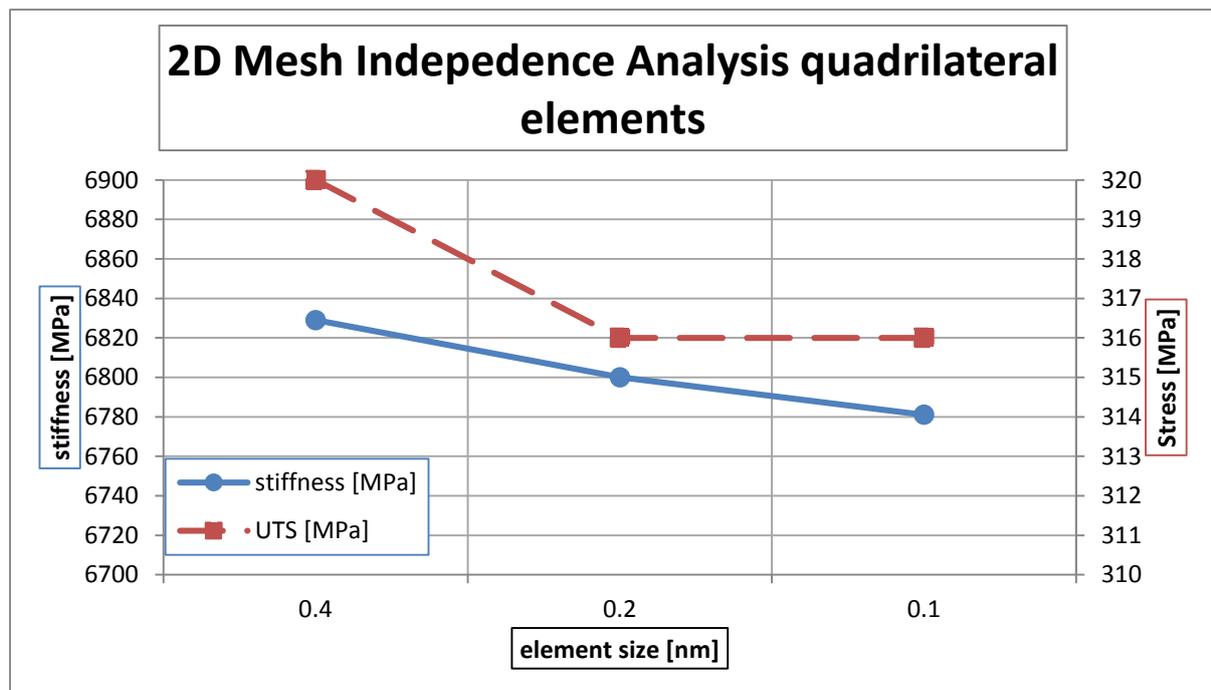


Figure 51: 2D element independence mesh density analysis for quadrilateral elements. The continuous blue line represent the stiffness and the dashed red line represents the Ultimate Tensile Stress.

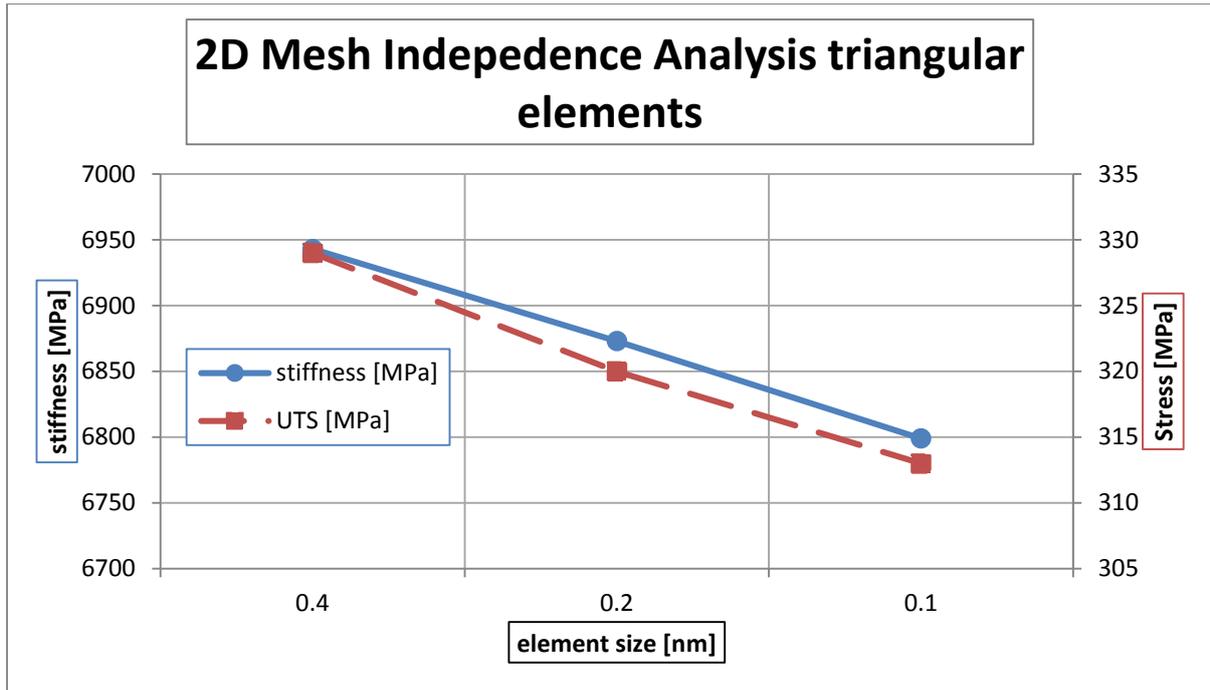


Figure 52: 2D element independence mesh density analysis for triangular elements. The continuous blue line represent the stiffness and the dashed red line the Ultimate Tensile Stress.

4.3. Optimisation parameters

As discussed in Chapter 3, the design process required the coupling of the FEM simulation with an Evolutionary Algorithm. Following the configuration and validation of the fibre numerical model, the configuration of the optimisation software EASY is presented. EASY, as reviewed in section 2.3.1, provides a variety of options. In this section, some of them are analysed in order to illustrate their impact.

In order to perform a large number of parametric studies at a reasonable timeframe, the total optimisation running time was defined as an “overnight” run on 8 CPUs, spanning 16 wall clock hours in total. This corresponds to about 188 total exact evaluations; with roughly 5.1 min for each evaluation.

A fibre geometry with 12% crystallinity was chosen as a base test case. The crystals were placed in an ordered configuration consisting of 4 columns and 3 rows, as shown in Figure 53. Each crystal was allowed to move around its centred reference location for up to 40% of the available space among its neighbours, on both directions (x and y). As design variables, the displacement of each crystal along the x and y direction were chosen, thus leading to a total of 28 design variables. The optimisation run was configured as two-objective, targeting at maximum toughness and maximum stiffness.

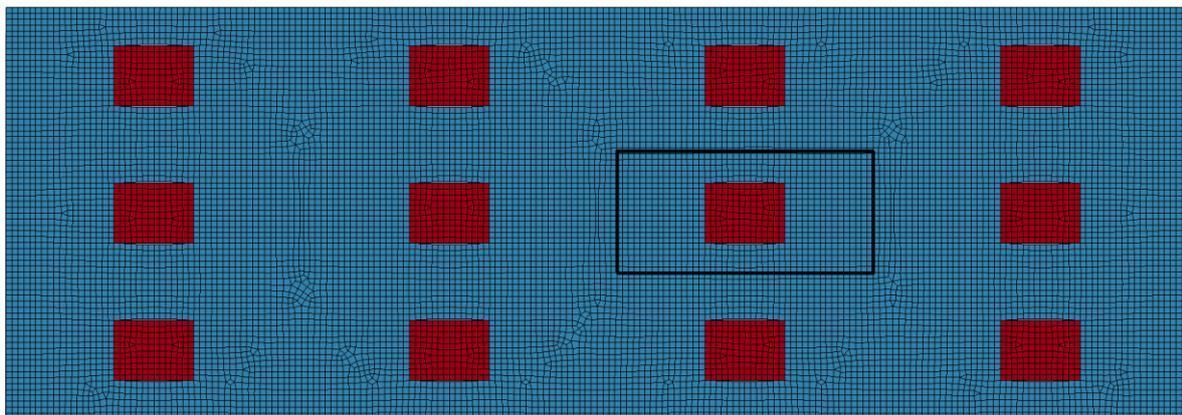


Figure 53: The initial geometry of crystals for the parametric studies. With black rectangular the area where the centre of the crystal was allowed to move is marked.

4.3.1. Initial Configuration

For the initial configuration the number of parents was set to $\mu = 12$ and the number of offspring population was set to $\lambda = 36$. The variables coding was set to “Binary-Gray”. For the crossover/recombination operator, two points per variable were used, with a crossover probability value of 0.95. After recombination, every offspring undergoes mutation with a probability of 0.2%. No metamodel-based pre-evaluation was enabled. In this parametric analysis regarding the EASY configuration, one parameter at a time was modified and its impact on the Pareto front was evaluated. Each parameter change yielding positive contribution was then fixed during the subsequent comparisons.

The run with the initial configuration was stopped after 188 exact evaluations due to the high computational cost. However, it still provided a reasonable front of non-dominated solutions (i.e. an approximation to the Pareto front) to allow a meaningful comparison with the rest of the optimisation parameters. In order to obtain results that would correspond to a typical optimisation run, the run with the initial configuration was continued for 972 exact evaluations over the course of approximately 4 days. The fronts of non-dominated solutions are shown in Figure 54.

4.3.2. Metamodel-Assisted EA using Inexact Pre-Evaluation (IPE) Scheme

In order to acquire a front of non-dominated solutions at a reduced time-frame, the first change was the use of (12, 36) Metamodel-Assisted Evolutionary Algorithm (MAEA) (i.e. a MAEA with parent and offspring populations equal to 12 and 36 respectively) with on-line trained RBF networks for the inexact pre-evaluation (IPE) of the population members. The minimum number of exact evaluations to be performed before starting the metamodel was set to 72 database (DB) entries. The DB stores all evaluated solutions and is used for training the metamodels. Each following generation typically featured 5-6 exact evaluations.

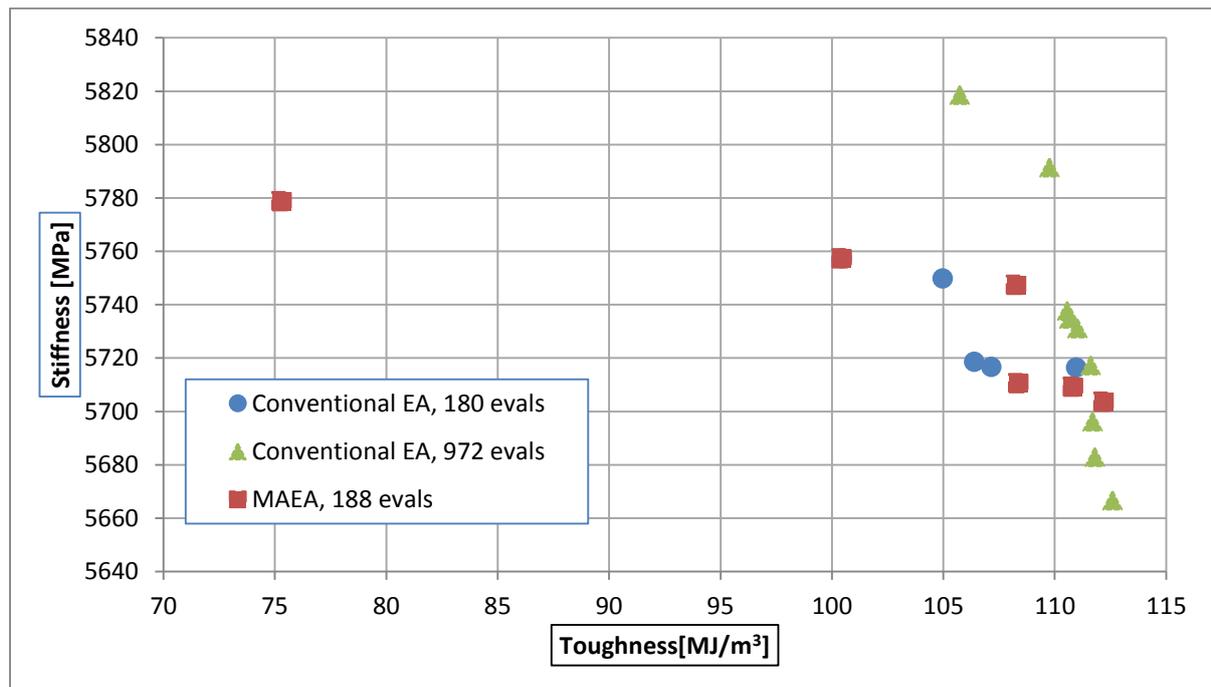


Figure 54: front of non-dominated solutions with the initial configurations of EASY and Inexact Pre-Evaluations enabled. The circles (blue) are the initial configuration of EASY and the squares (red) are the Inexact Pre-Evaluations. The number of parents is 12 and the number of offspring is 36.

Figure 54 compares the front of non-dominated solutions of the initial configuration with the one achieved using the MAEA. In order to clarify the impact of the MAEA, the front of non-dominated solutions of the initial configuration after 180 evaluations is also included in Figure 54. In this case, significant differences can be seen. The Pareto produced by the MAEA covered a wider range of toughness values, while the achieved maximum stiffness and toughness values are higher.

For a low-cost optimisation, the front of non-dominated solutions with MAEA provided a significant improvement, therefore for the rest of this parametric study, the MAEA was enabled.

4.3.3. MAEA: Total number of exact evaluations before starting IPE

In the previous Section, the initial exact evaluations were set to 72. The metamodels error indicator remained at low levels. In order to clarify the impact of the metamodel training, for the same (12, 36) MAEA, the metamodel was enabled after 36 entries (i.e. 36 evaluated candidate solutions, paired with the computed fitness values) were stored in DB, instead of 72 used before. In each generation, 5 individuals were re-evaluated on the exact tool.

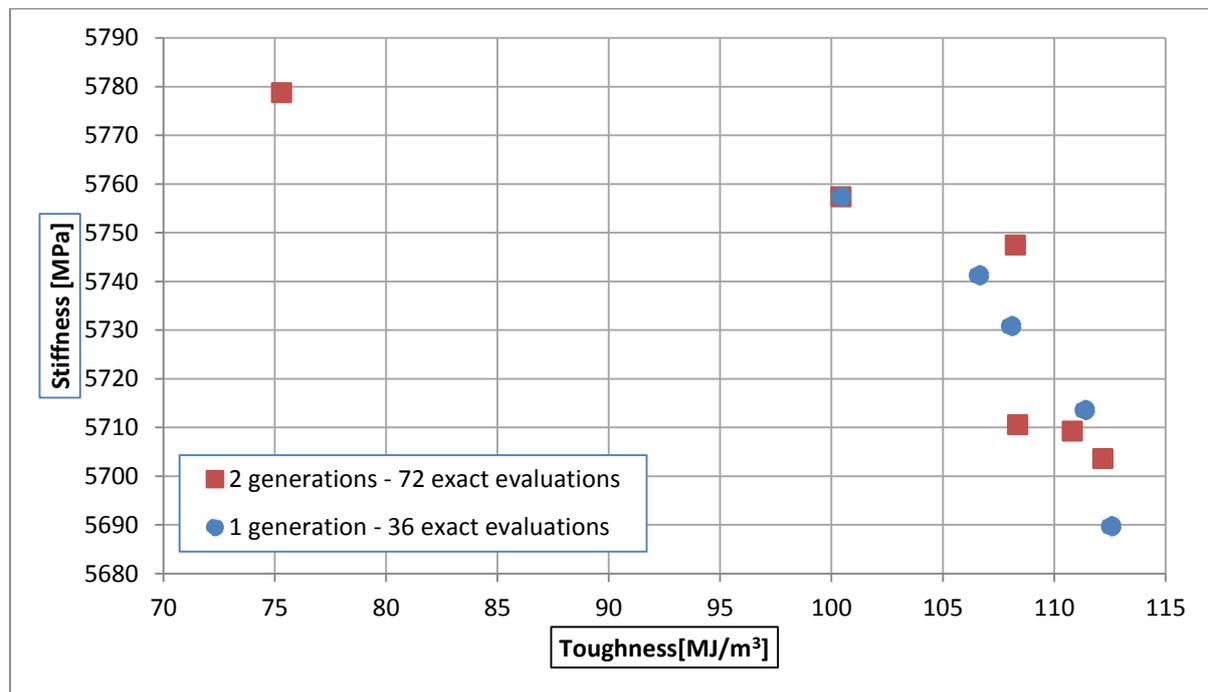


Figure 55: The front of non-dominated solutions with metamodels while altering the minimum database entries. The continuous blue line with circles is with 72 minimum entries and the dashed red line with squares is with 36 minimum selected entries. The number of parents is 12 and the number of offspring is 36.

Figure 55 compares the front of non-dominated solutions for these two cases. None of the two fronts was much better than the other and it was therefore decided to set the total number of exact evaluations before starting IPE to a 36 exact evaluations.

4.3.4. MAEA: Principal Component Analysis for Important Factors

Principal Component Analysis (PCA) is a statistical procedure which intends to reduce the correlated observed variables to a smaller set of important independent composite variables.

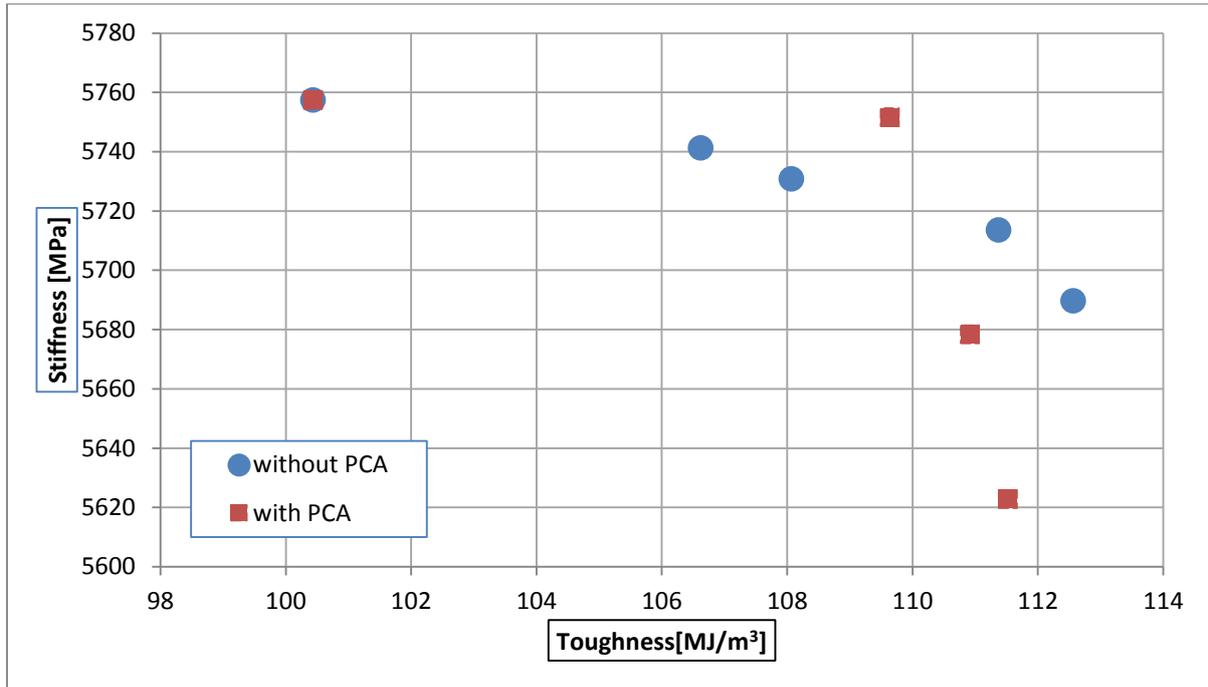


Figure 56: The front of non-dominated solutions for IPE with and without PCA enabled. The continuous blue line with circles is without PCA enabled and the dashed red line with squares is with PCA enabled. The number of parents is 12 and the number of offspring is 36.

Figure 56 compares the front of non-dominated solutions with and without the PCA enabled. A (12, 36) MAEA was used. Without PCA the front was smoother, but generally the points on the two fronts are quite close.

For the rest of this work, the PCA was selectively enabled depending on the nature of the design variables of each case.

4.3.5. DEA: Distributed Evolution Algorithms

Distributed EAs (DEA) subdivide the entire population in smaller ones, called demes, which evolve in semi-isolation by regularly exchanging the most promising among their population members.

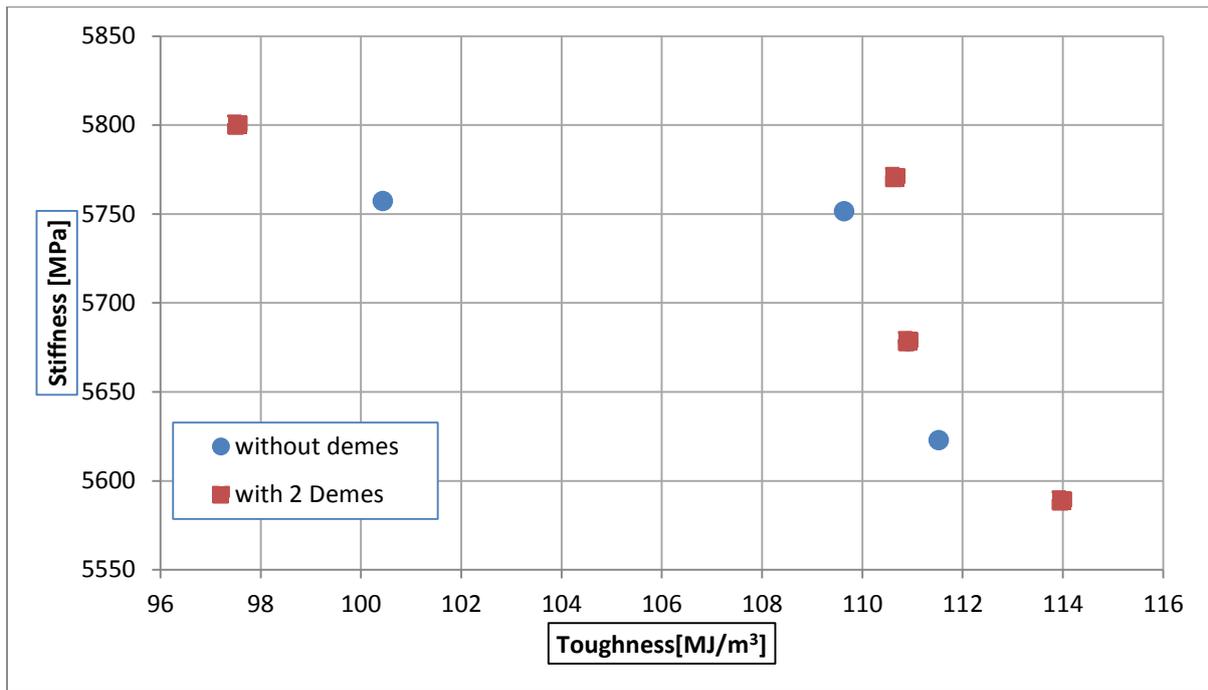


Figure 57: The front of non-dominated solutions for Distributed Evolution Algorithms. The continuous blue line with circles is the front of non-dominated solutions without DEA and with dashed red line with squares is the front of non-dominated solutions with 2 demes. The number of parents is 12 and the number of offspring is 36 without demes and 18 with demes.

A (12, 36) MAEA and a (12, 18) DMAEA were tested. The offspring population was distributed equally between the two demes, thus, for the purpose of comparison and altering only one parameter, half of the offspring population has to be chosen if 2 demes are used.

Figure 57 compares the front of non-dominated solutions with and without demes. The front of non-dominated solutions with demes provided a wider range and improved values for stiffness and toughness combinations.

4.3.6. Conclusions

In this parametric study, the configuration with DMAEA proved more efficient; therefore the options of this case were selected for the rest of this work. The initial exact evaluations before enabling IPE was set to a higher value of 110. The settings are summarised in the Table 10.

Table 10: Final options for EASY after the parametric study.

	Final settings
parents (μ)	12
offspring (λ) per deme	18
Demes	2
Parents forming an offspring	2
Coding	binary-Grey
Crossover operator	Two-points per variable (95%)
Tournament Size	2 (90%)
initial exact evaluations before starting IPE	110
PCA for Importance Factors	Enabled depending on design variables of each case

The parametric study was performed with a very strict turn-around time restriction of 16 hours. In order to obtain results that would correspond to a typical optimisation run the final settings were tested again in a very long optimisation run. In total 1147 exact evaluations were performed. The total optimisation lasted about 4 days.

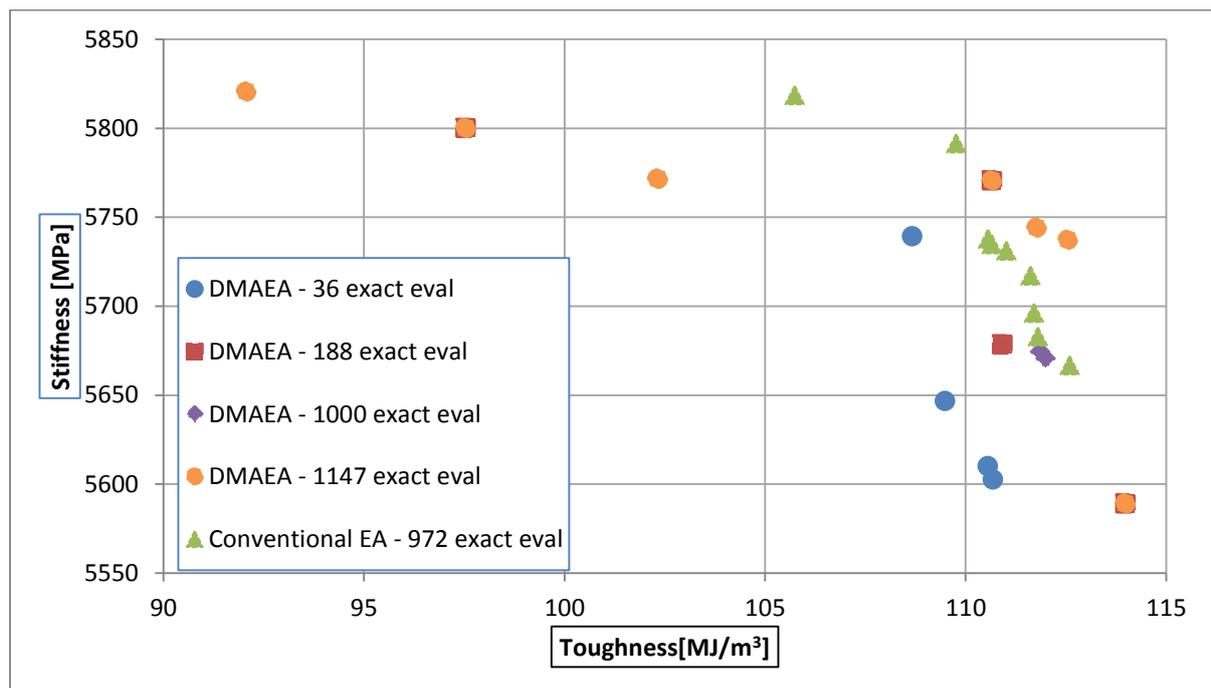


Figure 58: The front of non-dominated solutions with the final setting from the parametric study of EASY settings.

Figure 58 shows the front of non-dominated solutions after 188 exact evaluations, which was the initial time restriction. The progress of the front of non-dominated solutions after 1000 exact evaluations, as well as after 1147 exact evaluations is also shown. The generations which are presented were selected as the two generations with the most significant changes. In addition the front of non-dominated solutions of the initial configuration after 972 exact evaluations is shown.

When comparing the front of non-dominated solutions with 188 exact evaluations with the one with 1147 exact evaluation, it can be seen that the results with 188 exact evaluations had already produced some reasonable elite values. Therefore, the comparison of the EASY parameters on the basis of time-limited runs can be considered valid. As a comparison, the result of the initial configuration is also included in Figure 58.

When comparing the front of non-dominated solutions with 972 exact evaluations of the initial configuration to the one with 1000 exact evaluations with DMAEA, equivalent results can be seen. The front of non-dominated solutions without MAEA provided two values with higher stiffness when the one with MAEA provided two values with higher toughness. It is obvious that the careful tuning of the optimisation parameters led to improved results at a lower computational cost.

The above runs were not really representative of the performance of EAs of MAEAs. It would be more correct if the same runs could be repeated several times with a different seed in the random-number generator. However, this was too expensive and we could not afford it in the framework of diploma thesis.

Chapter 5. Fibre optimisation

Utilizing the spider silk fibre as a prototype, several optimisation runs were performed in order to improve its mechanical properties. Toughness and stiffness (to be maximized) were chosen as the optimisation objectives (2.1.1), as they are both particularly important for engineering applications. Additionally, the impact of virtual material properties on the fibre properties was considered. In actual applications, the cost of the materials can be equally important to the mechanical properties. Therefore, some additional optimisation runs of virtual materials were performed, where the trade-off between virtual material properties and the material cost was studied. These optimisation problems will be presented in the following Sections.

5.1. Crystal topology optimisation runs

In this Section, the impact of the fibre nano-architecture on its mechanical properties was studied. The purpose of this study was to develop design rules that can be applied in the production process of novel engineering materials. Therefore the focus was on the relative trends rather than absolute performance values of the spider silk fibre.

A direct optimisation of the crystal topology could be attempted by allowing free displacement of each crystal inside the amorphous phase. In such a case, apart from the large design space, ensuring that cases with non-overlapping crystals could be generated was a big challenge. Therefore, several crystal placement rules that would ensure large design freedom while avoiding any overlap were proposed. As a result, many of the cases presented had a relatively small number of design variables. Through the results of these cases which are presented the following Section, the target was to achieve some consistent trends that can then be used as design rules for future nano-composites.

The properties of the crystalline and amorphous phases were directly derived from the actual spider silk material, as were presented in Section 3.3.

5.1.1. Structured topology 1

For this optimisation, the crystals had a “fixed” structured position. The space was separated evenly in the axial (pulling) and perpendicular direction. The result was that the crystals were placed in a “grid” as can be seen in Figure 59. Depending on the number of the total crystals, some columns were assigned with one additional crystal. With the preference of a homogenous arrangement, the columns with an extra crystal were distributed evenly across the axial direction. Two crystallinity values were examined: 25% and 50%.

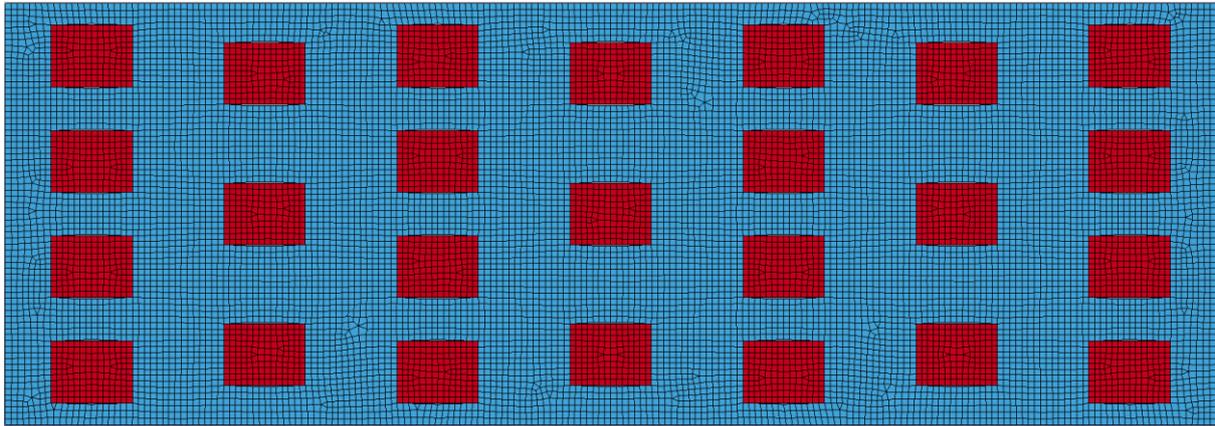


Figure 59: Structured arrangement for 25% crystallinity.

In addition, a pseudo-random displacement was introduced. Each crystal was allowed to move up to 40% of the available space among its neighbours, on both directions (x and y). Therefore, reflecting the above, the selected design variables along with their limits are the number of the columns. For 25% crystallinity the limits are from 5 to 12 columns with 3 bit discretisation and for 50% crystallinity the limits are from 9 to 12 columns with 2 bit discretisation. The second design variable is the percentage of the displacement for all the crystals for both directions from 0 up to 40% of the available space. The number of the rows is derived from the crystallinity and the number of columns. Hence, the total number of design variables is two. This simplistic optimisation case was introduced as an initial case, in order to confirm that everything performs well (the coupling among the geometry codes, the meshing codes, LS-DYNA and EASY), while providing some initial useful results. The objective for this optimisation was maximum toughness. This optimisation was run for two different crystallinity values, 25% and 50%. The three results with the highest toughness values for each crystallinity case are shown in Table 11.

Table 11: The results of the structured optimisation.

25% Crystallinity	1st	2nd	3rd
columns	5	5	5
rows	5	5	5
space * X	5.71%	0%	11.43%
Toughness [MJ/m ³]	145.4	140.44	129.4

50% Crystallinity	1st	2nd	3rd
columns	10	10	10
rows	5	5	5
space * X	0%	5.71%	17.14%
Toughness [MJ/m ³]	140.9	130.6	125.4

The resulting arrangement was very close to the serial arrangement, but with some degree of randomness. Specifically:

- For the 25% crystallinity, the toughness for zero displacement of the crystals, had almost the same value as the serial arrangement (140 [MJ/m³] versus 142 [MJ/m³])
- For a slight displacement, there was a significant improvement of toughness (5 [MJ/m³] higher value), surpassing the serial arrangement.
- Comparing the 25% and the 50% for the zero displacement, the toughness value was exactly the same.

5.1.2. “Heat” map

For this optimisation case a 2D map generation function was created, using the Inverse Fourier Transform Theorem. The generated map had some peak values which represented the centre of the crystals.

5.1.2.1. *Inverse Fourier Transform Theorem*

The Inverse Fourier Transform builds the signal frequency-by-frequency. First, the full signal is separated into N “time spikes” (samples with frequencies k). For each sample, the strength (amplitude A_k) is defined. Afterwards, the offset (phase lag ϑ_k) of each signal is applied. Lastly, the loop through every sample is done to get the full transform. (49) Thus:

$$x_n = \sum_{k=0}^{N-1} A_k \cos\left(2\pi k \frac{n}{N} + \theta_k\right) \Leftrightarrow$$

$$x_n = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} X_k e^{-i 2\pi k \frac{n}{N}} \quad (5-1)$$

Where:

$$X_k = |A_k| e^{i\theta_k}$$

Where:

- N: the number of the total samples
- n: the current sample
- k: the current frequency

5.1.2.2. *Creating the signal*

Using the principles that were described in section 5.1.2.1, a 2D signal was constructed (the map). The constructed signal was noisy, having some peaks and some valleys. Afterwards, in order to smooth the constructed signal, a weighted average of the height of the surrounding discrete points was computed and applied to the centre point. This process was repeated for each point forming the object. Finally, the highest peaks represented the centre of the crystal positions. The only limitation that was applied externally was a required minimum distance between the crystals.

This method was introduced in an attempt to fully control the position of the crystals with the least possible number of design variables.

As for design variables, five samples were selected to construct the final signal. The design variables were the frequency k of each sample with a value range from 30 to 93Hz and the amplitude A_k of each sample with values ranging from -5 to 5. The phase lag was not used as a design variable but was fixed to 0 for every sample. Therefore, the total number of design variables was 10. The objective was maximum toughness. Eventually, none of the efforts provided any exceptional result. Each different arrangement was completely random with the only limitation, a minimum distance between the crystals. The toughness values ranged between 65 and 105 [MJ/m³]. Lower values corresponded to more random arrangements, while higher ones corresponded to more serial-like arrangements (Figure 60). Despite the fact that there were no exceptional results, they indicated that a more serial oriented arrangement led to higher values of toughness, while the completely random arrangements did not yield remarkable values.

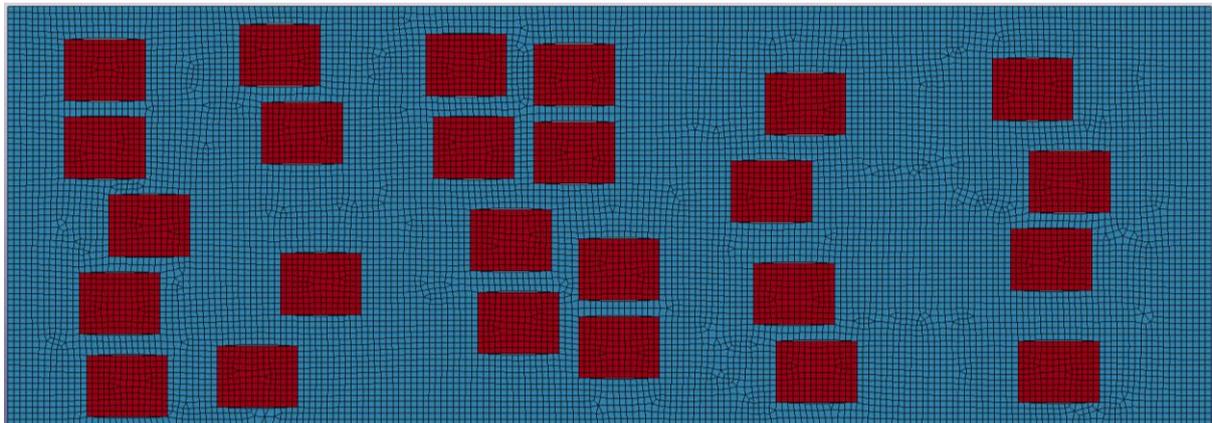


Figure 60: Heat map optimisation elite

5.1.3. Percentage displacement

This optimisation case was built based on the results from the previous Sections. While trying to achieve the highest possible toughness value, an initial structure was used. But on the other hand, while trying to increase the freedom (thus the possible ways to create the fibre), the following rules were introduced:

- 25% crystallinity was considered, arranged in 5 columns and 5 rows.
- All the crystals were placed in a compact way on the left side of the fibre.
- In order to reduce the number of design variables, the y position of each crystal was fixed. (A small random y displacement was allowed as the 'Structured topology 1' case indicated)
- As for design variables, the displacement along the x direction of each crystal was used.

- Each crystal on the rightmost column was allowed to move from its position up to the right boundary (e.g. it would move at the 80% location of the free space).
- Afterwards, the crystals in the second from the right column were allowed to move from their position, up to the next crystal. So, the total displacement of the 2nd crystal was its relative displacement factor multiplied by the displacement of the crystal from the first column (e.g. if the displacement was 40%, the total displacement would be 32%, off their initial position up to the right boundary minus one crystal, as the second crystal of the fourth row in Figure 61).
- The crystals from the remaining columns were able to move following the same procedure.

This methodology was applied independently for each row.

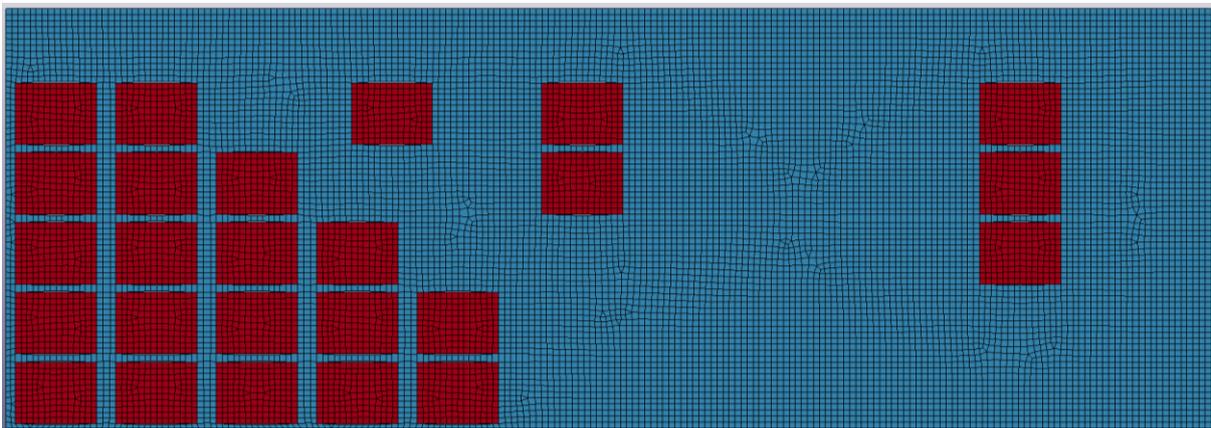


Figure 61: This is a clarification example to illustrate the rules for the percentage displacement.

The design variables for this optimisation case were the x direction percentage displacement of each crystal, as was explained in the previous Section. Therefore the total number of design variables was 25, equal to the number of crystals. The objective was maximum toughness. The possible arrangements of the above rules were extremely high (with the arising limitations).

This case had the potential to find the best arrangement in x direction (according to the previous results), but there was a big drawback. The displacement of the crystals of the first column is independent, but the second column of crystals is dependent on the first column, the third column of crystal is “twice dependent” (once on the second and once on the first) and so on. The highest value of toughness which was achieved by applying these rules for 25% crystallinity was 118 [MJ/m³]. The resulting arrangement was very close to a serial-like case. Once more, every result above 100[MJ/m³] was very close to a serial like arrangement (Figure 62)

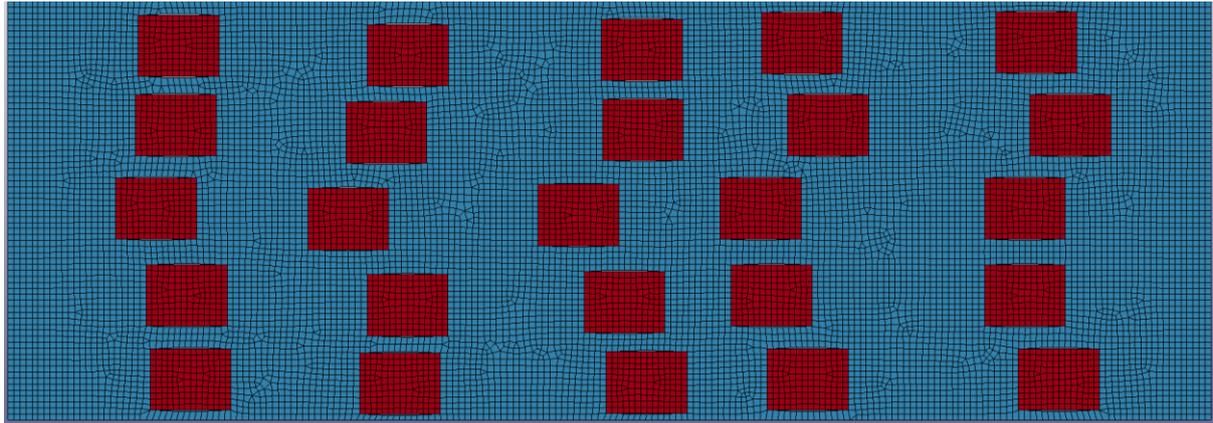


Figure 62: Percentage displacement optimisation elite structure.

5.1.4. Crystal size

Thus far, a fixed crystal size of 2.691×2.048 [nm²] was used. For this optimisation case, the height and length of the crystals were used as design variables.

While changing the size of the crystals, for a given crystallinity, their number would change. For the sake of a fair comparison, the same “randomness” for each different case is an important factor. Thus, for this optimisation case, the number of columns (and as a result the number of rows), was chosen with the aim of a ratio = columns / rows \approx 2. The size of the crystal in x (L crystal) and in y (H crystal) direction was chosen as for design variables. The limits were from 1 up to 3.5 nm for both directions. Maximum toughness and maximum stiffness were set as independent objectives on two separate optimisation runs. The three results with the highest toughness and stiffness values are shown in Table 12.

Table 12: The results of the crystal size optimisation

Target: toughness	1	2	3	
L crystal		1	1	1
H crystal		1.16	1.48	1.08
Toughness [MJ/m ³]		151.5	150	146

Target: stiffness	1	2	3	
L crystal		3.42	1.72	2.935
H crystal		1.	1.	1.329
Stiffness [GPa]		8.489	7.36	7.359

When the objective was the toughness, the crystal size ratio $\frac{L}{H}$ was low, thus the crystals’ shape corresponded to the serial arrangement. Furthermore, the crystal size was close the lower design variables’ bounds, thus, for given crystallinity, this meant a high number of crystals. On the other side, when the objective was the stiffness, the crystal size ratio $\frac{L}{H}$ was high, thus the crystals’ shape corresponded to the parallel arrangement.

5.1.5. Structured topology 2

Based on the results so far, it can be seen that an ordered arrangement has typically significantly better results than a random arrangement. Thus, the objective of this optimisation case was to find the best structured arrangement for a given crystallinity. The crystals were placed in a structured grid, with given number of rows and columns and then were moved accordingly. Independent pseudo-randomness factors were considered for the x and y crystal displacement. For design variable were chosen the number of columns ranging from 5 up 12 with 3 bit discretization, the pseudo-random displacement on x direction with limits ± 0.4 , pseudo-random displacement on y direction with limits ± 0.4 . This optimisation was a multi-objective case targeting maximum toughness and maximum stiffness. For 25% crystallinity, the resulting front of non-dominated solutions can be seen in Figure 63. A clear trade-off between the toughness and the stiffness is shown, as the number of columns increased, moving from a serial-like case to a parallel-like one.

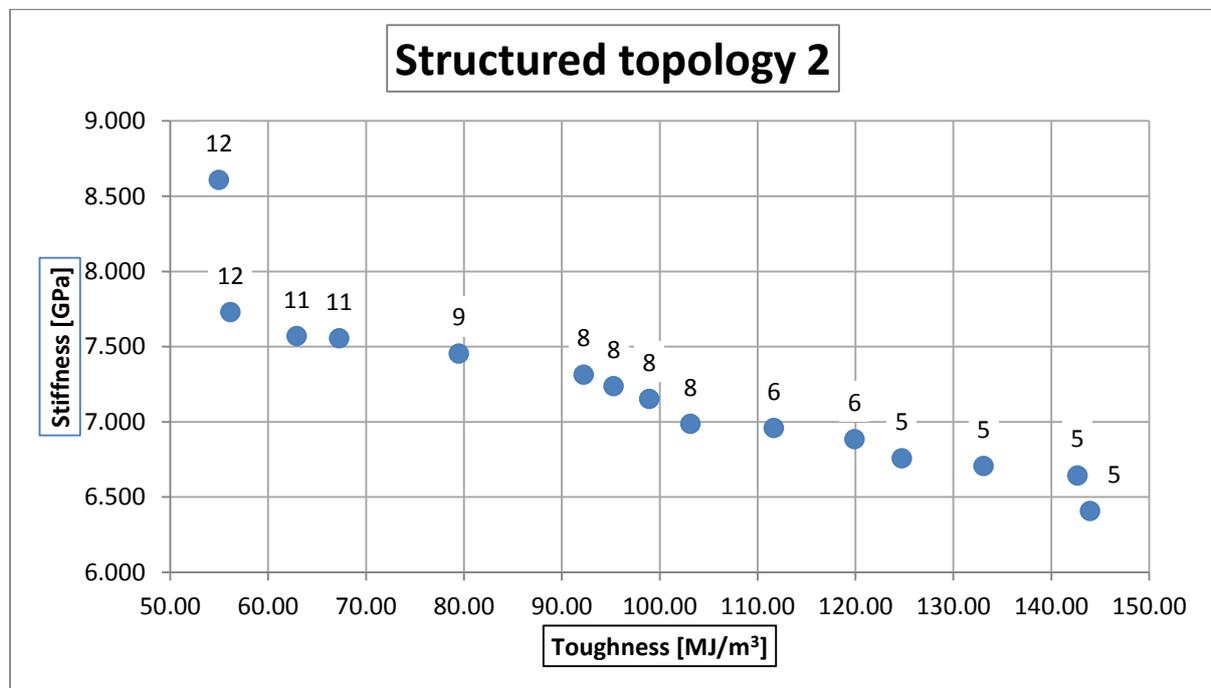


Figure 63: The front of non-dominated solutions of the second structured optimisation. The data labels indicate the number of columns.

5.1.6. Structured topology 3

Following the previous results from “Structured topology 2”, a single case was tested in more depth. In the previous case, for 12 columns, the arrangement was 12 columns x 2 rows + 1 extra crystal, which was placed in the middle column. This case was re-ran, but for 24% crystallinity, so this time the geometry was 12 columns x 2 rows + 0 extra crystals. So, the crystal locations were fully aligned. The results are shown in Table 13. The toughness and the stiffness from the fully aligned grid were significantly higher compared to the previous geometry where there was a column with one extra crystal.

Table 13: The comparison between 24% crystallinity and fully aligned grid, versus 25% crystallinity and one row with one extra crystal.

Crystallinity	Toughness	Stiffness	Columns	Rows	Extra Crystals
25%	54.97	8.608	12	2	1
24%	74.58	8.920	12	2	0

Relying on this comparison, the next optimisation case was built. The crystals were placed in a structured grid, with all columns and all rows containing exactly the same number of crystals. To achieve this, the crystallinity was allowed to vary by $\pm 1\%$. For design variables were chosen the number of columns ranging from 5 up to 12 with 3 bits discretization, the pseudo-random displacement on x direction with limits ± 0.4 , pseudo-random displacement on y direction with limits ± 0.4 . This optimisation was a multi-objective case targeting maximum toughness and maximum stiffness.

For 24-25% crystallinity, the resulting front of non-dominated solutions can be seen in Figure 64. The same the trade-off between the toughness and the stiffness as in section (5.1.5) arose, but with a considerable improvement of the mechanical properties.

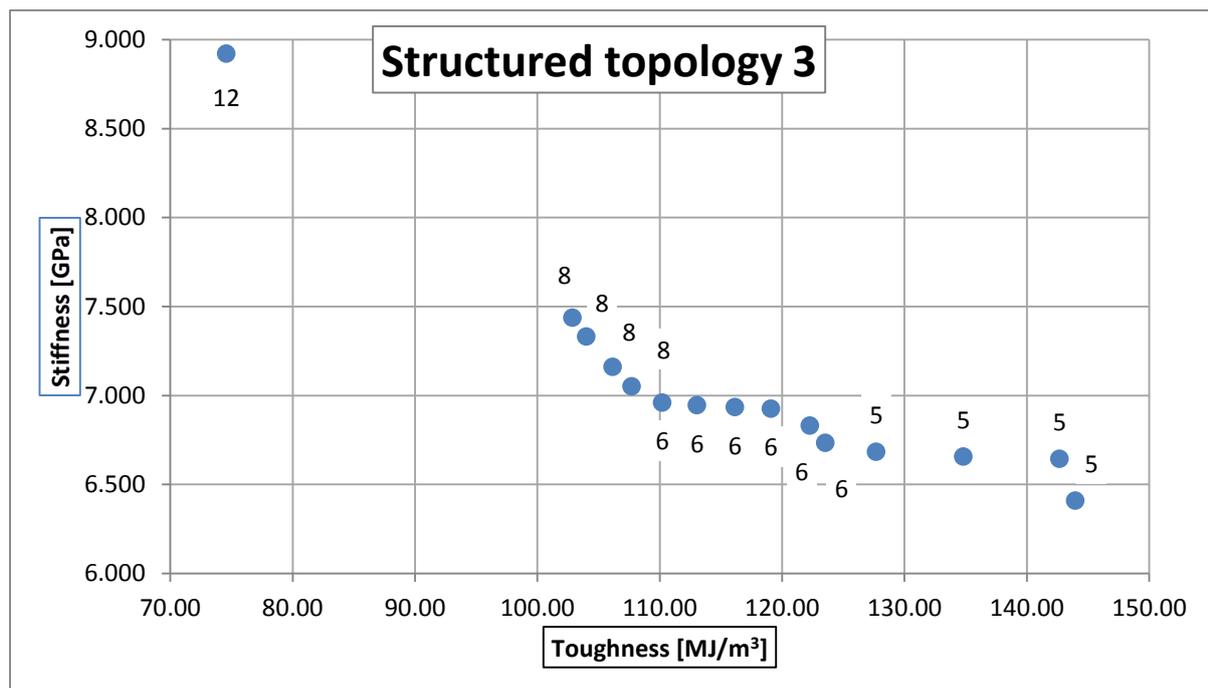


Figure 64: The front of non-dominated solutions of the second structured optimisation. The data labels indicate the number of columns.

5.1.7. Structure – Crystal Size – Displacement

This case combined all previous results as well as all design variables. The optimal size of the crystals, as well as the optimal number of columns and rows for given crystallinity were the design field. In addition, a pseudo-random displacement for each crystal was applied.

The design variables for this optimization case were the number of columns ranging from 5 up to 20 with 4 bits discretization, the number of rows from 3 up to 10 with 3 bits discretization, the ratio $\lambda = \frac{\text{Crystal Length}}{\text{Crystal Height}}$ ranging from 1/3 up to 3, the pseudo-random displacement on x direction with limits ± 0.4 and the pseudo-random displacement on y direction with limits ± 0.4 .

For a given number of columns and rows the number of crystals was fixed. So, for a given crystallinity the area of each crystal was also uniquely defined. Thus, the ratio between the two dimensions of the crystal was for a sufficient design variable for the unique definition of the crystal dimensions, as shown in the following equation.

$$\text{Crystal Height} = \sqrt{\frac{\text{Crystallinity} * \text{Area of fiber}}{\text{ratio} * \text{Number of Rows} * \text{Number of Columns}}} \quad (5-2)$$

This optimisation was a multi-objective case targeting maximum toughness and maximum stiffness. For 25% crystallinity, the results are shown in the following Figure 65 and Table 14.

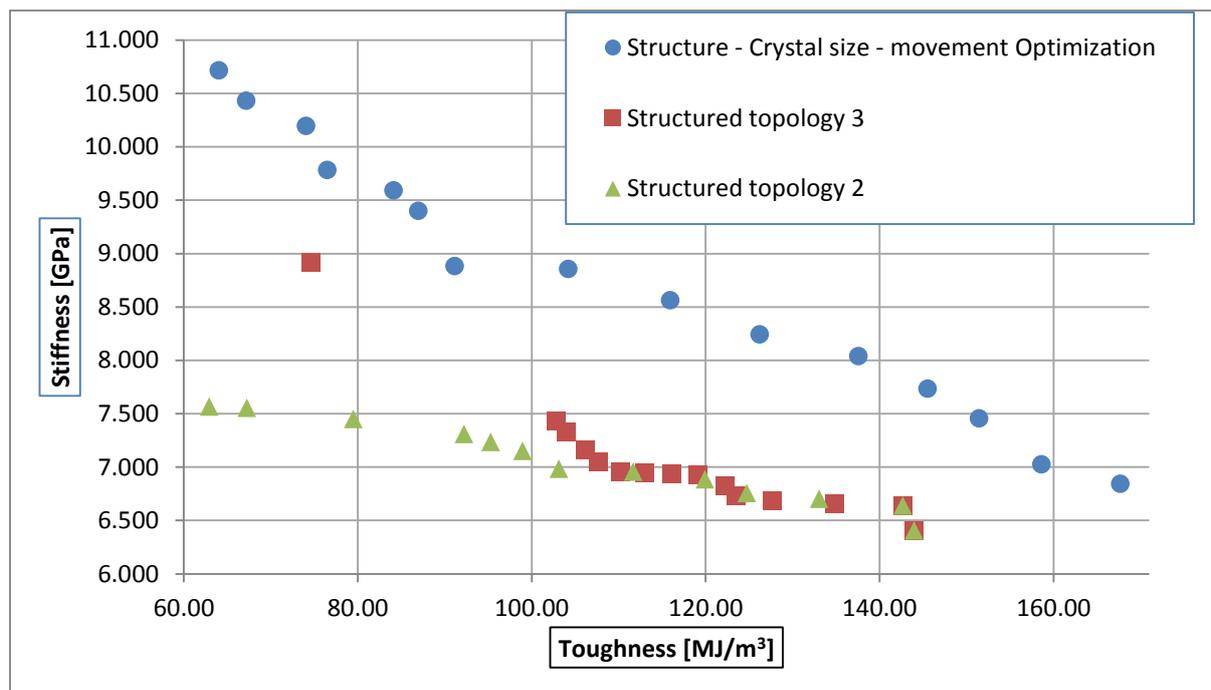


Figure 65: The front of non-dominated solutions of the “structure – crystal size and displacement optimisation” is shown with blue circles, while with red squares are the results of the previous “structured optimisation 3” and with green triangles are the results from the previous structured optimisation 2. There is a significant improvement on both toughness and stiffness values.

Table 14: The design variables' result of the structure – crystal size and displacement optimisation. The objectives can be seen in Figure 65 with blue squares. The table is sorted in ascending order for stiffness and in descending order for toughness (therefore the rightmost point corresponds to the first row of table, while the leftmost point corresponds to the last row of table).

# Columns	# Rows	ratio (λ)	Crystal length	Crystal Height	X mov	Y mov
10	10	1.4497	1.425	0.983	0	0
10	9	1.6219	1.588	0.979	0	0
8	9	3.0	2.415	0.805	0	0
12	10	2.8	1.816	0.642	0	0
12	9	3.0	1.972	0.657	0	0
9	6	3	2.749	0.943	0	0
9	5	3	3.055	1.018	0	0
10	5	3	2.898	0.966	0	0
9	4	3	3.366	1.155	0	0
10	4	3	3.146	1.113	0	0
10	4	3	3.194	1.096	0	0
8	3	3	4.061	1.436	0	0
8	3	3.0	4.183	1.394	0	0
9	3	2.7	3.770	1.375	0	0
9	3	2.8	3.829	1.354	0.08	0

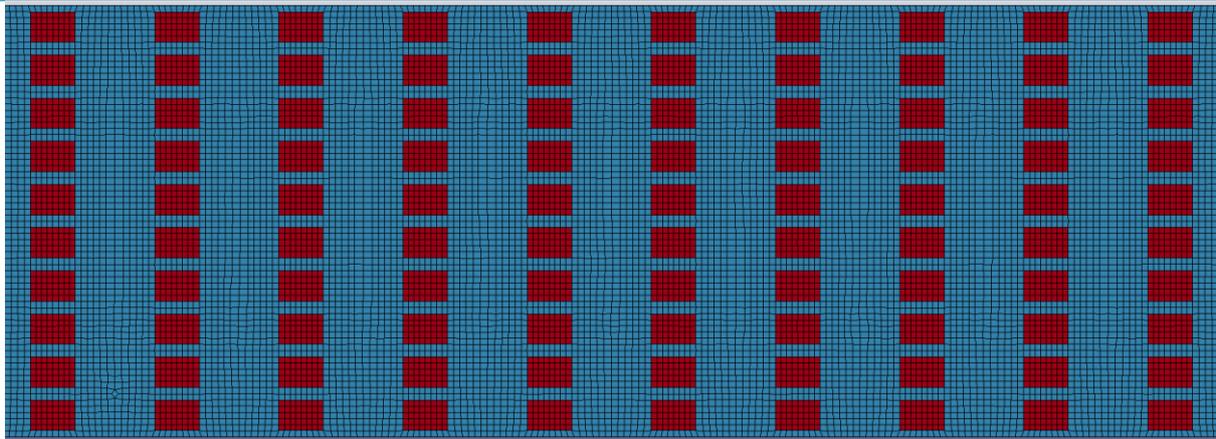


Figure 66: Elite from Structure – Crystal size – Displacement optimisation with maximum toughness.

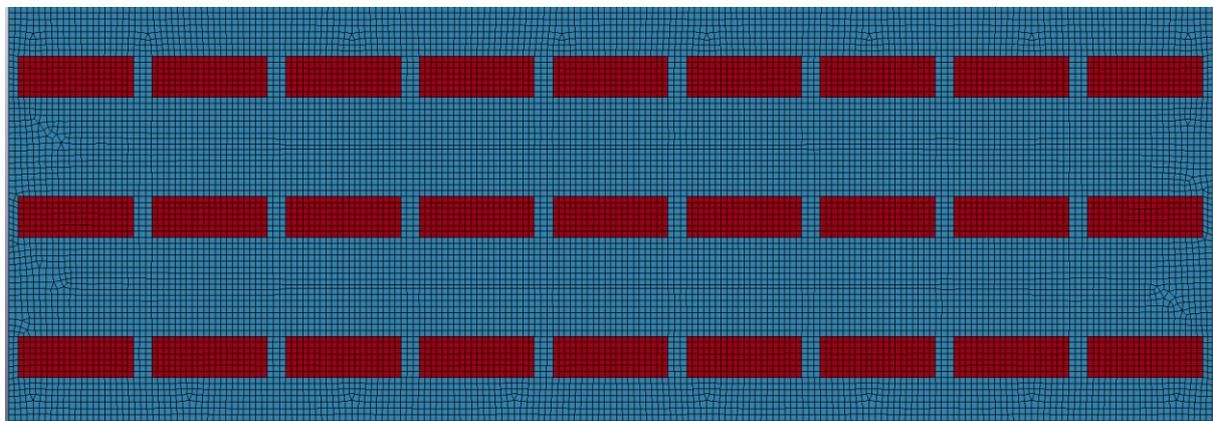


Figure 67: Elite from Structure – Crystal size – Displacement optimisation with maximum stiffness.

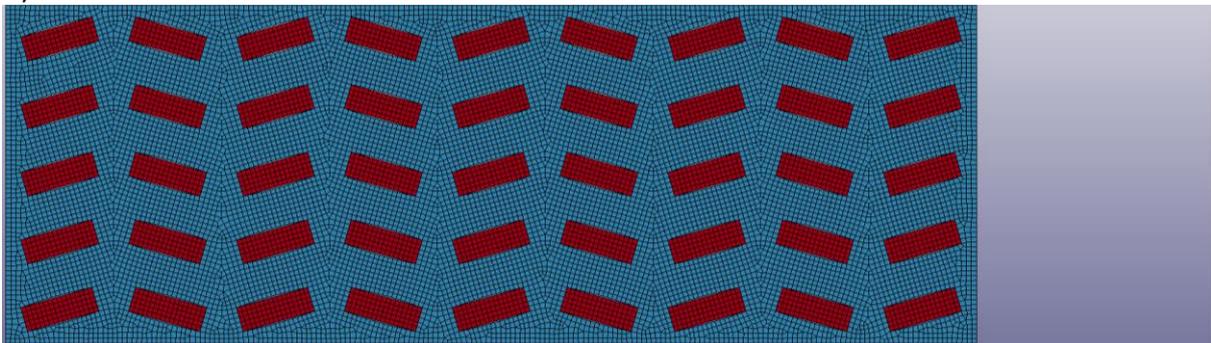
The size of crystals had a significant effect on the results. Crystals with perpendicular orientation ($\lambda < 1$) led to increased toughness, while crystals with axial orientation ($\lambda > 1$) led to increased stiffness. The range options for the number of columns, varied from 5 to 20, but the elites table consisted only of values ranging from 8 to 12. In contrast with the number of rows, where the range options was from 3 to 10, the elites table consisted of every value in range, but with the low values for maximum stiffness and high values for toughness. Considering that the number of columns was practically constant, this change in number of rows is directly related to the change in ratio of the crystal dimensions and the broad orientation of serial for toughness, parallel for stiffness.

5.1.8. Crystal rotation

In this case, the crystals were rotated in xy plane, with the intention to achieve higher values of toughness and stiffness.

As the fibre extended, the rotated crystals tended to return back to the parallel position of the pulling direction. As a result to this tendency, a perpendicular to the pulling direction force was generated. Thus, in order to eliminate this undesirable force, the rotation of the crystals took place in a symmetrical way. Figure 68 presents one example where the rotation of the crystals was $\pm 16^\circ$ in alternate columns. In Figure 68 B) the fibre is shown just before the failure point. The fibre had formed into a wavy pattern in respect to the rotation of the crystals. As the crystals tended to align with the pulling direction, local stresses were generated, leading to this wavy form.

A)



B)

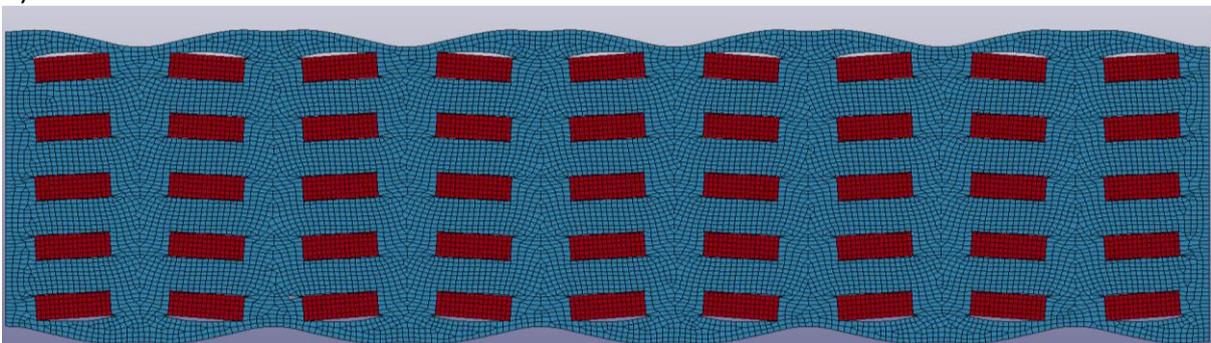


Figure 68: Rotation of the crystals. The crystals are rotated by 16degrees, in a symmetric way. A) The fibre in the initial position. B) The fibre just before the failure point

This rotation of crystals led to high strains of the amorphous material, near the crystal edges, these high strains lead to early failure of the model and lower toughness and stiffness.

5.2. Material Properties Optimisation runs

This purpose of this study is the development of a lightweight material design methodology, inspired by the spider silk properties and nano-structure. In the previous Section, the impact of the fibre nano-architecture on its mechanical properties was studied using EASY. The properties of the crystalline and amorphous phases were directly derived from the actual spider silk material. However, as discussed in Chapter 2, the actual desired material should be based on engineering building blocks such as polymers or carbon nanotubes rather than proteins. For this purpose, in the current Section, the behaviour of the specimen is examined while the mechanical properties of its components are altered.

As a prototype case, the mechanical properties of the previously described model were used and they were modified accordingly. Furthermore, the structure chosen for the model was one of the elites from the “Structure – Crystal Size – Displacement ” optimisation from Section 5.1.7. The fibre properties are summarised in Table 15.

Table 15: The initial fibre properties used for the Material Properties Optimisation runs.

Number of Columns	8
Number of Rows	9
Crystal Length [nm]	2.415
Crystal height [nm]	0.805
Crystal yield stress [GPa]	3.95
Crystal Young Modulus [GPa]	71
Viscoelastic short-term shear modulus [GPa]	1.66
Viscoelastic long-term shear modulus [GPa]	0.02
Viscoelastic decay constant / pulling velocity speed [1/nm]	0.5

5.2.1. Crystal Material Properties

This optimisation case sought to define the correlation between the crystal properties and fibre mechanical response, while keeping the properties of amorphous phase unchanged.

The design variables were mechanical properties of the crystals. The crystal Stiffness varying from 30 up to 500 GPa and the crystal yield stress from 1 up to 4 GPa. The Evolutionary Algorithm was employed as a supporting tool in a parametric study rather than tackling a real optimisation problem for this simple case of two design variables. This optimisation was a multi-objective case targeting maximum toughness and maximum stiffness.

The failure criteria for the model were: the yield stress of the crystals and the strain of amorphous phase. It is important to note that in all the calculations that were performed up to this point, the failure strain of the amorphous phase criterion was triggered, while the stress of the crystals was not high enough to lead to a failure. In Figure 69 the specimen’s

stiffness and toughness are plotted against crystal stiffness. The plotted values showed a clear impact of the crystal stiffness. Fibre stiffness and toughness are increased almost linearly until the crystal's Young modulus reached a value of $\approx 180\text{-}200$ GPa. Beyond this point, the values of fibre toughness and stiffness remained almost constant. Over the linear increase region, the crystal stiffness increased by a factor of 4. At the same time the total increase in fibre stiffness was $\sim 15\%$ while the increase in fibre toughness was $\sim 2\%$.

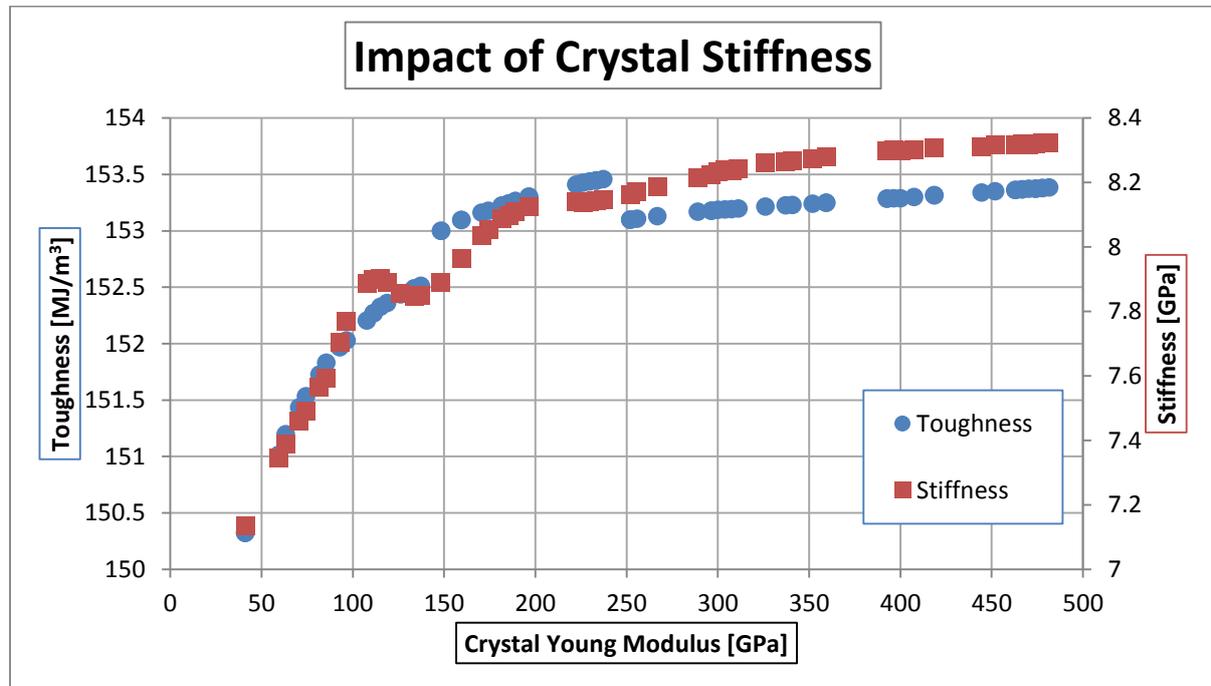


Figure 69: The results of crystal material optimisation. In this figure, stiffness (with blue circles) and toughness (with red square) are plotted against the crystal's Young Modulus.

Figure 70 presents the impact of the crystal yield stress on the fibre properties. Very low values led to an early fibre failure and consequently low toughness. As soon as the yield stress became higher than a threshold, the fibre failed because of the amorphous phase strain criterion; therefore, the crystal yield stress didn't have any further impact.

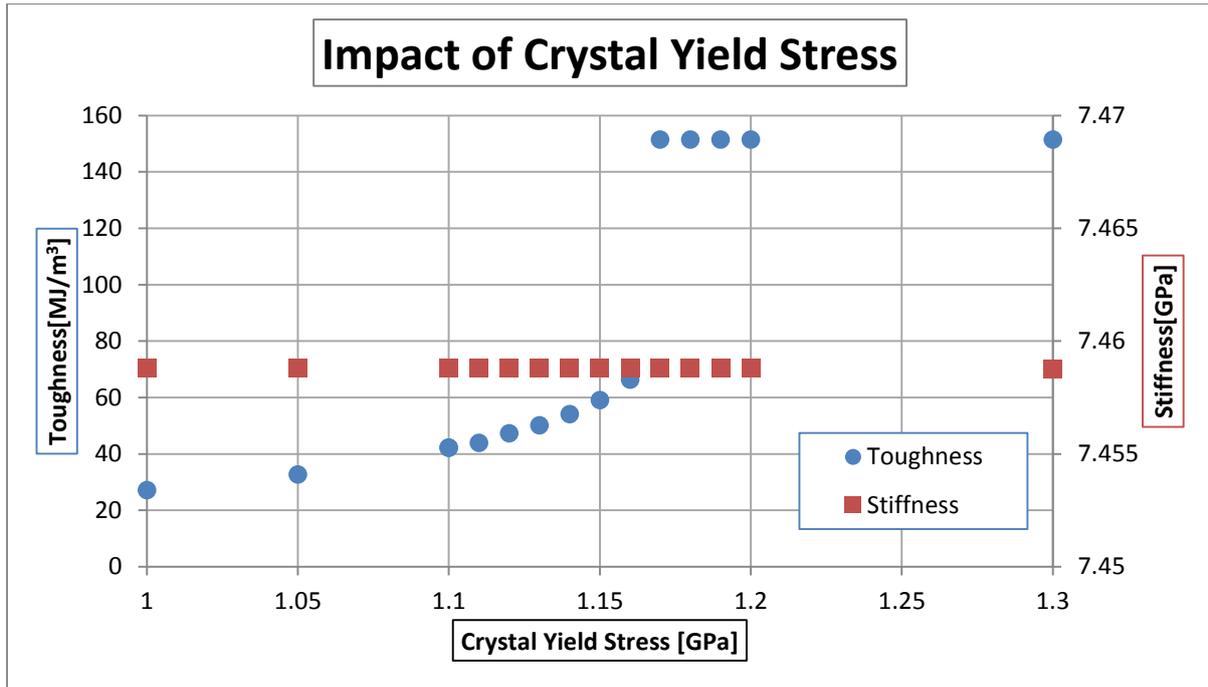


Figure 70: Toughness (blue circles) and stiffness (red squares) variation in respect to crystal yield stress.

The yield stress of the crystal did not affect the results significantly as long as it was above a threshold value. This threshold value is dependent on the amorphous phase properties. The toughness was, practically, constant. The difference between the minimum and maximum values shown was less than 4 MJ/m^3 , which is an insignificant improvement ($<3\%$) compared to the crystal stiffness modification ($>1000\%$). The stiffness, on the other hand, showed an increase in almost 1.4 GPa ($\sim 20\%$). Therefore, for the given amorphous phase properties, the crystal's Young modulus was worth it to increase, up to a value around 200 GPa . Further increase did not have significant impact on the fibre properties.

5.2.2. Amorphous Material Properties

This optimisation sought to define the correlation between the viscoelastic material properties of the amorphous phase and the fibre mechanical behaviour, while keeping the properties of the crystals fixed to the values of the prototype case. The viscoelastic material's behaviour was described in detail at Section 3.3. The pulling velocity speed was always kept constant and equal to 6 [nm/ns] . The design variables were the amorphous viscoelastic properties. The short term shear modulus (G_0) varying from 0.5 up to 3 GPa , the long term shear modulus (G_∞) from 0.003 up to 1 GPa , the decay constant (β) from 0.004 up to 10 [1/ns] . This optimisation was a multi-objective case targeting maximum toughness and maximum stiffness.

In this optimisation all three design variables, affected the outcome. The short-time shear modulus (G_0) showed a clear impact on toughness and stiffness. As G_0 increased, both the toughness and the stiffness improved. All the results in the elites table had the value of $G_0 = 3 \text{ GPa}$ which was equal to the upper limit. The long-time shear modulus (G_∞) did not yield a clear correlation with the objectives. This design variable is examined independently in order

to specify whether there is a clear trend or not. The decay constant (β) had an opposing effect for toughness and stiffness (Figure 72). As the decay constant increased the toughness increased while the stiffness decreased. As mentioned before in Sections 2.1.1.8 and 3.3.2.1, this behaviour can be explained as a higher decay constant value is equivalent to a lower pulling velocity speed which supports increased elasticity, while a low decay constant value is equivalent to a high pulling velocity speed, which yields high stiffness.

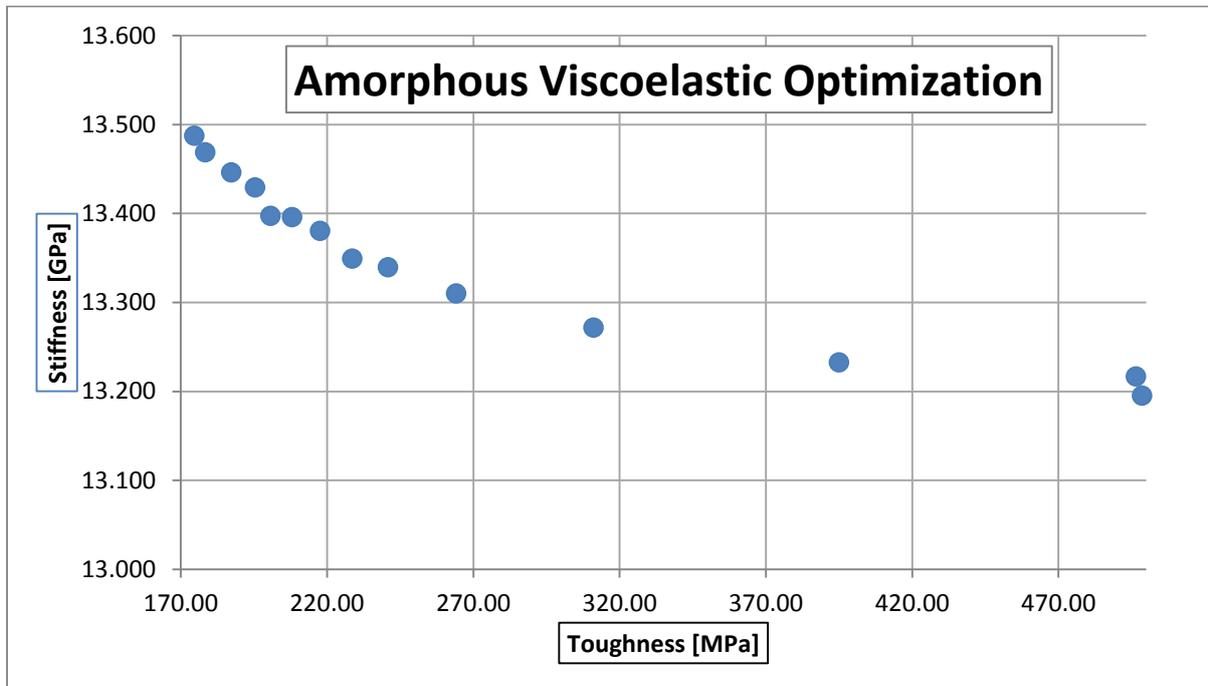


Figure 71: The front of non-dominated solutions of amorphous material optimisation.

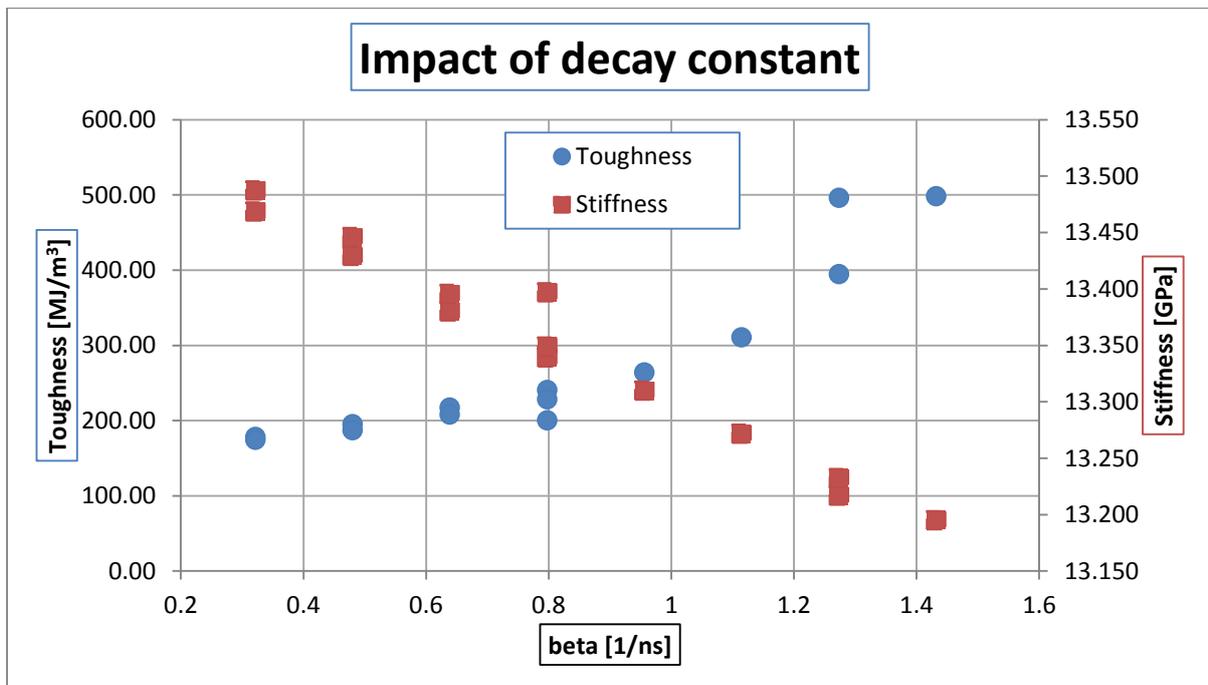


Figure 72: Impact of the decay constant (β) on toughness (blue circles) and stiffness (red squares). The elite values of the optimisation are plotted.

The results of Figure 71 showed that the value of 3 [GPa] was the elite value for the short term shear modulus. However, since the value of 3 [GPa] was the upper limit of the variable, there was no information available beyond that value. On the other hand, there was not a clear trend between long term shear modulus and stiffness or toughness. Thus, a parametric study was performed for the amorphous viscoelastic material, while changing each property individually (Figure 73, Figure 74).

As both short and long term shear modulus, increased, toughness and stiffness increased, with toughness increasing up to a certain limit. This happened because as the stiffness increased, all the internal stresses increased. As a result, after a certain value the crystals were reaching their ultimate tensile strength which then was controlling the material failure, with a negative impact on the fibre toughness.

The individual impact of the short-term and long-term shear modulus on toughness and stiffness is shown in the following figures:

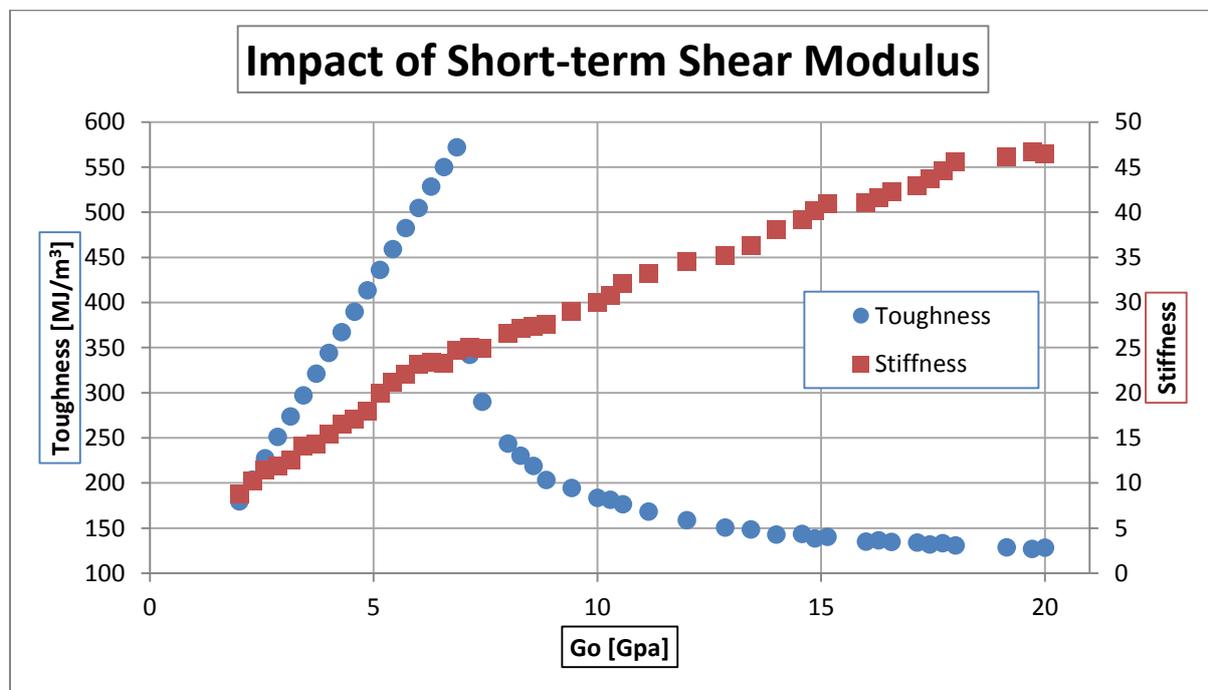


Figure 73: The toughness (blue circles) and stiffness (red squares) variation with respect to the short-term shear modulus.

Figure 73 presents the results from the short-term shear modulus analysis. The crystal failure first occurred for $G_0 \approx 7 [GPa]$. The fibre toughness for that value was 570 [MJ/m³] and the fibre stiffness was 25 [GPa]. In this case the long-term shear modulus was kept equal to the prototype case, with a value of 0.02 [GPa].

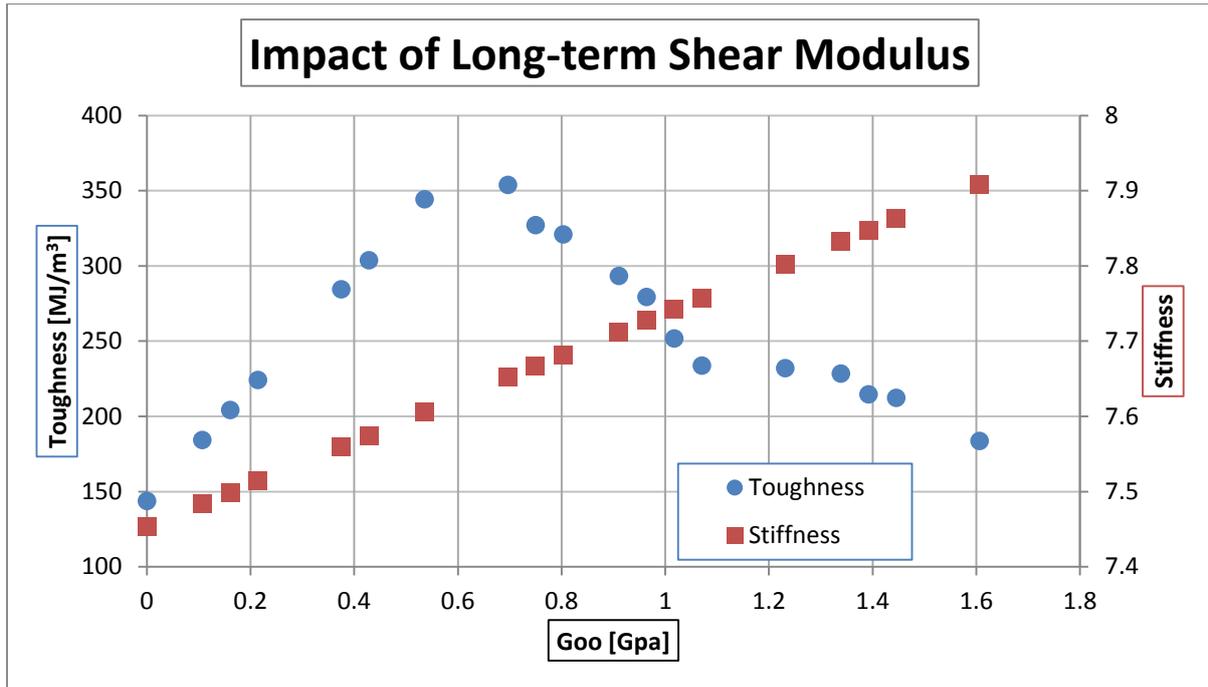


Figure 74: The toughness (blue squares) and stiffness (red squares) variation with respect to the long-term shear modulus.

Figure 74 presents the long-term shear modulus analysis. The crystal failure first occurred for $G_{\infty} \approx 0.7[GPa]$ and the fibre toughness was $355 [MJ/m^3]$, while the fibre stiffness was $7.6 [GPa]$. In this case the short-term shear modulus was kept equal to the prototype case, with a value of $1.66 [GPa]$.

Therefore, the results in this Section, along with the optimisation’s results in previous Section (5.2.2), indicated that increasing the short-term shear modulus over the long-term shear modulus, if possible, was more effective for improving the overall fibre properties.

5.3. Material Cost

In the Section 5.2 the impact of using idealised engineering materials on nano-composite fibre was studied. It was shown that the improvement of the building blocks properties led to an improvement of the fibre properties as well, as long as a balance between the crystalline and amorphous phases was kept. However, apart from the mechanical properties, an important design factor is the cost of the materials. In this section, a material cost function is defined and a fibre targeting maximum toughness and maximum stiffness with the minimum material cost is designed.

5.3.1. Definition of the material cost

To define a relative cost for the materials, this project uses the Asby charts (Figure 75, Figure 76). As a substitute for the amorphous phase of the silk fibre, the category of polymers was considered. As a substitute for the crystals, the crystalline phase of polymers (Section 2.1.3.3) was considered alongside the engineering alloys, composites and ceramics.

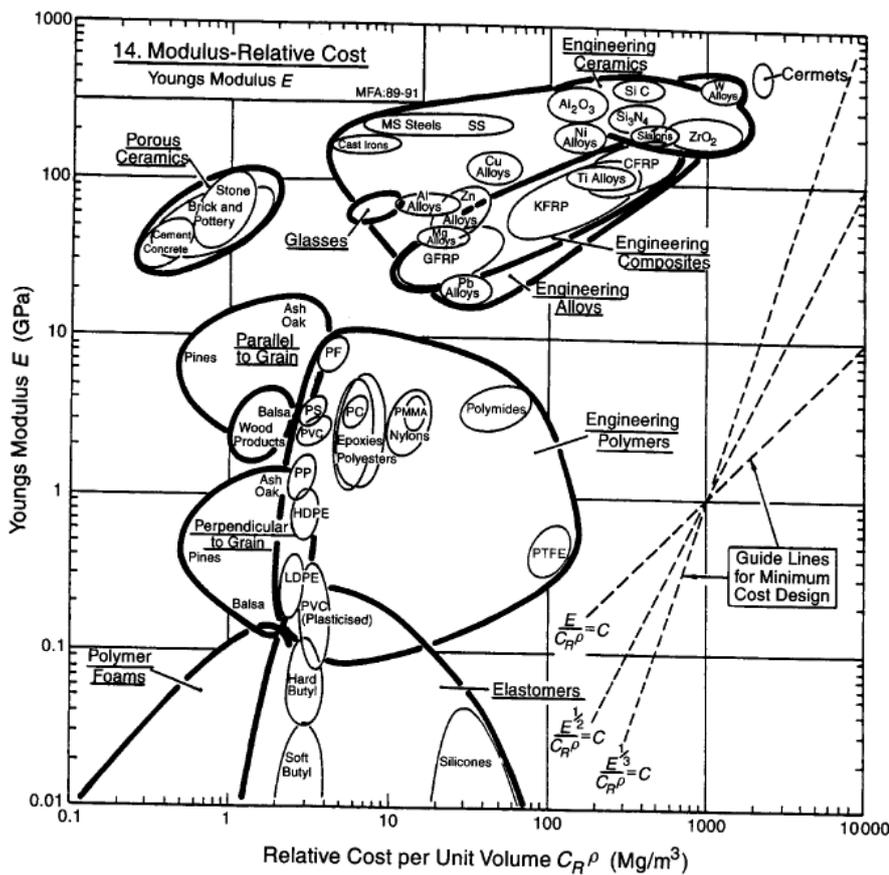


Figure 75 Asby chart for the relative cost of materials per unit volume with respect to the Young Modulus. (7)

$$Cost_{\sigma_f} = 1 + (10000 - 1) \frac{E - 10}{10000 - 10} \quad (5-4)$$

Since the crystalline units could combine arbitrary values of stiffness and strength, a weighted average was considered for the final material cost value:

$$Cost_{crystal} = 0.75 \max(cost_E, cost_{\sigma_f}) + 0.25 \min(cost_E, cost_{\sigma_f}) \quad (5-5)$$

5.3.2. Minimisation of the material cost of crystallinity and crystal properties

For the amorphous phase, the properties of spider silk were used. The viscoelastic material provide 5.2 [GPa] stiffness and 190 [MPa] yield strength, thus a relative material cost of 20 [Mg/m³] was considered.

The following formula was used to define the total material cost of the fibre:

$$cost_{material} = cost_{crystal} * A_1 + cost_{amorphous} * A_2 \quad (5-6)$$

Where:

- A_1 : the percentage of crystalline units (crystallinity)
- $A_2=1-A_1$: the percentage of amorphous

The design variables for this optimisation case were the crystallinity and the crystal material properties. More specifically, the number of columns (from 5 to 12) and the number of rows (from 3 to 6) were used to control the crystallinity, while the crystal young modulus (from 10 to 1 000 [GPa]) and the crystal yield stress (from 10 to 10 000 [GPa]) were the design variables for the crystal material properties. In total four design variables were used.

This optimisation was a three-objective case targeting at maximum toughness, maximum stiffness and minimum material cost.

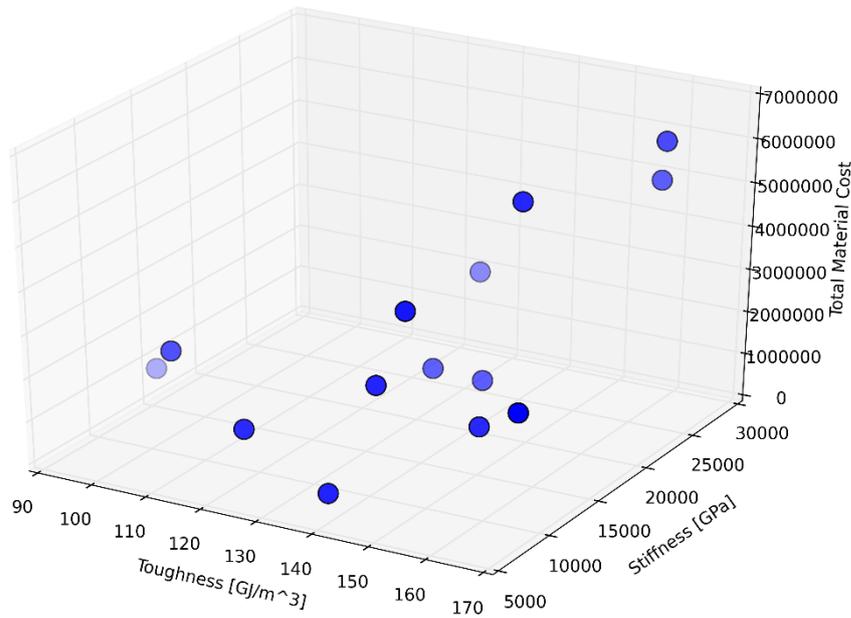


Figure 77: The front of non-dominated solutions of the material cost function optimisation.

Table 16: The design variables values of the front of non-dominated solutions (Figure 77). The values were sorted in ascending order according to the total cost values.

Elite No	Total material Cost	Number of Columns	Number of Rows	Crystal Young Modulus [GPa]	Crystal Yield Stress [MPa]
1	4.51E+04	5	5	130.00	1924.02
2	2.17E+05	10	6	53.55	4658.33
3	1.51E+05	10	6	84.52	3095.87
4	1.75E+05	11	6	87.42	3261.88
5	1.10E+05	12	3	166.77	3496.25
6	1.44E+05	7	4	594.52	2597.83
7	2.28E+05	9	5	603.23	2197.45
8	1.92E+05	11	5	364.19	3173.99
9	2.40E+05	10	3	987.42	2158.39
10	3.66E+05	10	5	889.68	2539.24
11	3.14E+05	12	5	595.48	3154.46
12	5.37E+05	11	6	969.03	3447.42
13	5.19E+05	12	6	842.26	3603.67
14	6.05E+05	12	6	953.55	3535.31
15	7.94E+04	12	6	982.58	4111.47

Figure 77 presents the front of non-dominated solutions and Table 16 presents the design variables for the plotted objectives. The objectives for this optimisation case were the maximum toughness and stiffness while minimizing a material cost function which was directly depending on the crystallinity and the mechanical properties of the crystal.

Figure 77 presents the toughness, stiffness and the total material cost. Most toughness values range between 130 and 160 MJ/m³. In Section 5.2.1 the crystal's mechanical properties were examined against the toughness and the stiffness. Reviewing the conclusions, the crystal's properties did not affect the fibre toughness, as long as they were above a reasonable value. In addition fibre stiffness was independent to crystal yield stress. There was a clear correlation between the fibre's stiffness and the total material cost. The fibre's stiffness increased linearly with the material cost. Comparing the initial structure with 5 columns and 5 rows are also shown, corresponding to the crystals' initial Young modulus 71 GPa and yield stress 3.95 GPa, the same fibre performance could be obtained at 55% of the material cost by Case 1.

5.4. General comments on the optimisations performed

This project focused on a controlled design of a two dimensional fibre model in order to discover the impact of the material nano-structure on its mechanical properties. The design objectives were two particularly important material properties for automotive applications, namely maximum toughness and maximum stiffness. Material cost was also considered as a design objective. Through this study, several interesting conclusions were drawn.

The first design study of this project was focused on the crystal topology (Section 5.1). The topology study attempted to find the correlation between the crystals and the fibre's mechanical properties. Altering the geometry, dimensions and placement of the crystals inside the amorphous phase achieved a significant improvement of the design objectives, while keeping the material properties unchanged.

For a given crystallinity, smaller crystals improved both toughness and stiffness, with an optimal minimal value. In addition, a structured arrangement of crystals, positioned in a "grid", was generally an elite result. It is important to consider that a perfectly arranged crystal placement will probably increase the material cost and the difficulty of the actual material production.

High toughness values were achieved when the crystals were positioned in more serial-like structure (high crystal columns/rows ratio). On the other hand, a more parallel like structure (low crystal columns/rows ratio) led to high stiffness values. The same findings were also valid for the crystal height/length ratio.

It was noted that a completely random distribution cannot yield very high toughness or stiffness values. It is interesting to notice, however, that in such a case, the mechanical properties are relatively independent of the crystallinity value.

The second design space was based on the material properties. Using one specific structure the crystal and amorphous material properties were examined independently. The yield stress of the crystal had no effect on the results as long it was above a threshold value so that the material failure would occur due to the amorphous phase. Higher crystal Young's

modulus also increased the stiffness of the fibre, but that is effective until a certain value because then it is limited by the strength of the amorphous phase. In general, the crystal properties has an insignificant impact on fibre toughness.

The amorphous phase properties has a direct effect on toughness and stiffness. An increase in the short-time and long-time shear moduli lead to an increase in both stiffness and toughness. The increase in the shear moduli was followed by an increase in fibre toughness up to the point where the crystals would reach their ultimate tensile strength and therefore become the reason for the fibre failure. Beyond that point, any further increase in the viscoelastic shear modulus would still lead to fibre stiffness increase, combined with a decrease of toughness. Comparing the two shear moduli, the increase in short-term shear modulus is preferable to the long-term one. A higher value of the decay constant would increase toughness while decreasing stiffness.

In the third optimisation analysis, a material cost function was defined and a fibre targeting maximum toughness and maximum stiffness with the minimum material cost was designed. The material cost was dependant on the crystallinity and the mechanical properties of the crystal. The results of this optimisation case showed a linear correlation between the fibre stiffness and its material cost. However, high toughness values were achieved even at a low material cost. This trend was due to the fact that the crystals, which had a significantly higher material cost compared to the amorphous phase, did not have a significant effect on toughness.

Chapter 6. 3D model

So far this project utilized a 2D model for reasons of model building simplicity and computational efficiency, especially in the context of optimisation runs. However, 3D geometries are necessary for the actual engineering applications. This Chapter focuses on the preparation of a 3D fibre model.

A fibre geometry represented by a cylinder can allow a higher degree of flexibility in the random placement of crystal units compared to the 2D case. However, in the process of building the model with the available numerical tools, it became apparent that the production of a completely random geometry is extremely challenging due to the meshing capabilities of the commercial software used. These challenges essentially rendered an automatic model generation impossible. In the following Sections, the first steps towards tackling this problem will be presented.

6.1. Mesh creation

A 3D FEM mesh can typically consist of tetrahedral, hexahedral and pentahedral elements. This first approach attempted to create the mesh using mainly hexahedral elements and pentahedra as transition elements.

The geometrical parameters of the silk model are based on previous experimental and numerical work. (11) (38) As a result, the length of the fibre was set to 40 nm with a diameter of 7 nm. Each crystal subunit was described as a cube with dimensions of 2.691 x 2.048 x 1.908 nm³.

Initially, a 2D cross-section plane was created, the axial extrusion of which would lead to the actual 3D cylindrical geometry. Several rectangles were placed inside this circle, with the purpose of creating rectangular columns where the crystal units could be placed with some reasonable degree of randomness. The 2D cross-section is shown in Figure 78, where the rectangles were meshed with element size 0.683 x 0.636 [nm²], thus a crystal would occupy precisely 3 x 3 elements.

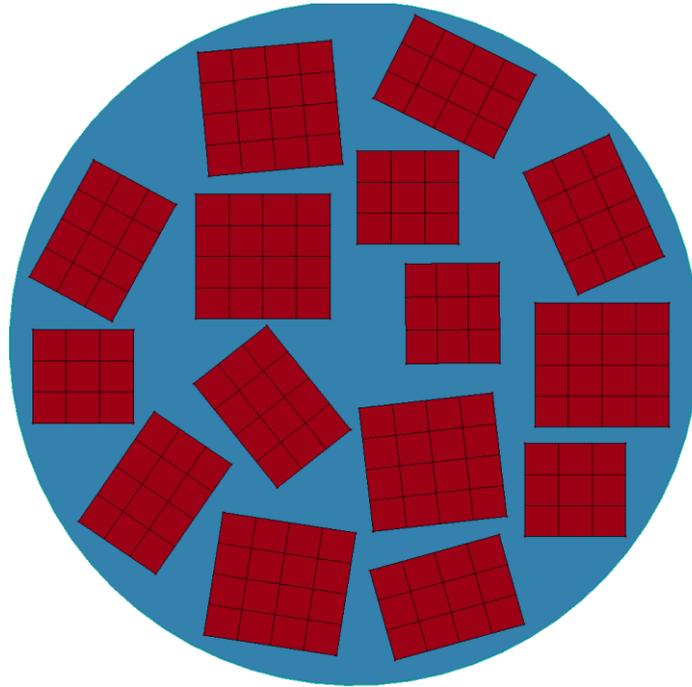


Figure 78: The initial 2D cross-section plane which was used to create the 3D fibre.

The rectangles were meshed using exclusively rectangular elements. The free space between the rectangles was meshed using a mix of quadrilateral and triangular elements. Afterwards, this mesh was stacked in the axial direction in order to create the 3D mesh. As a result, 2D quadrilateral elements led to 3D hexahedral elements while the 2D triangular elements led to 3D pentahedral elements. Finally, the crystals were placed in random available positions inside the hexahedral columns, according to the existing nodal locations. For this reason, the element dimensions were specifically selected in order to yield the correct crystal size, as each crystal could only consist of an integer number of elements.

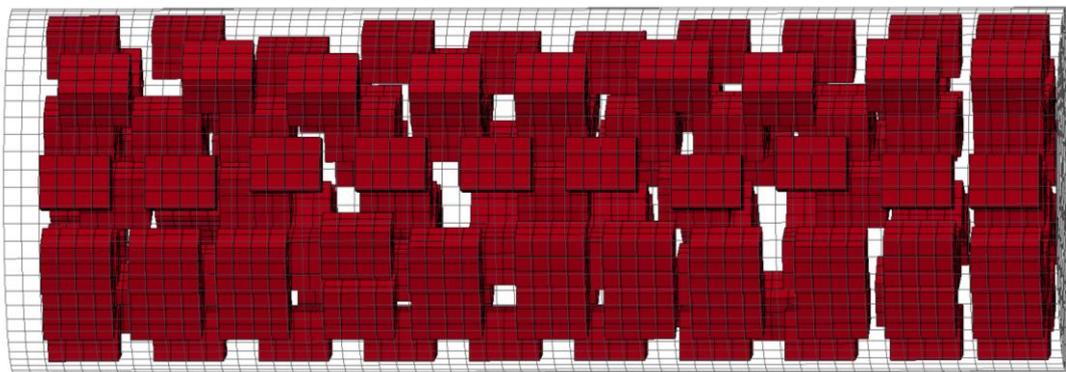


Figure 79: 3D mesh with the “random” position of the crystals.

The resulting model is shown in Figure 79. The fibre contained 15 columns with 8 to 11 crystals per column. Most of the columns contained 10 or 11 crystals. It is obvious that this approach required several steps of manual intervention and posed major constraints regarding the arbitrary positioning of the crystals.

6.2. Solution Independence to the mesh

Using the technique which was described the mesh independence of the mesh was examined. Typically, as the mesh resolution increases, the solution of the model is expected to converge towards a theoretical value that can be achieved using infinitely small mesh elements. Once the increase in the mesh density will result in change of result below a desired threshold value, it can be claimed that mesh convergence has been achieved.

Table 17: Mesh independence analysis using different mesh element sizes.

Element size	0.67	0.33	0.16
Number of Elements	23 640	166 680	1 360 320
Total CPU time	1h 19m	10h 19m	143h 43m
Stiffness [MPa]	10 775	10 353	10 220

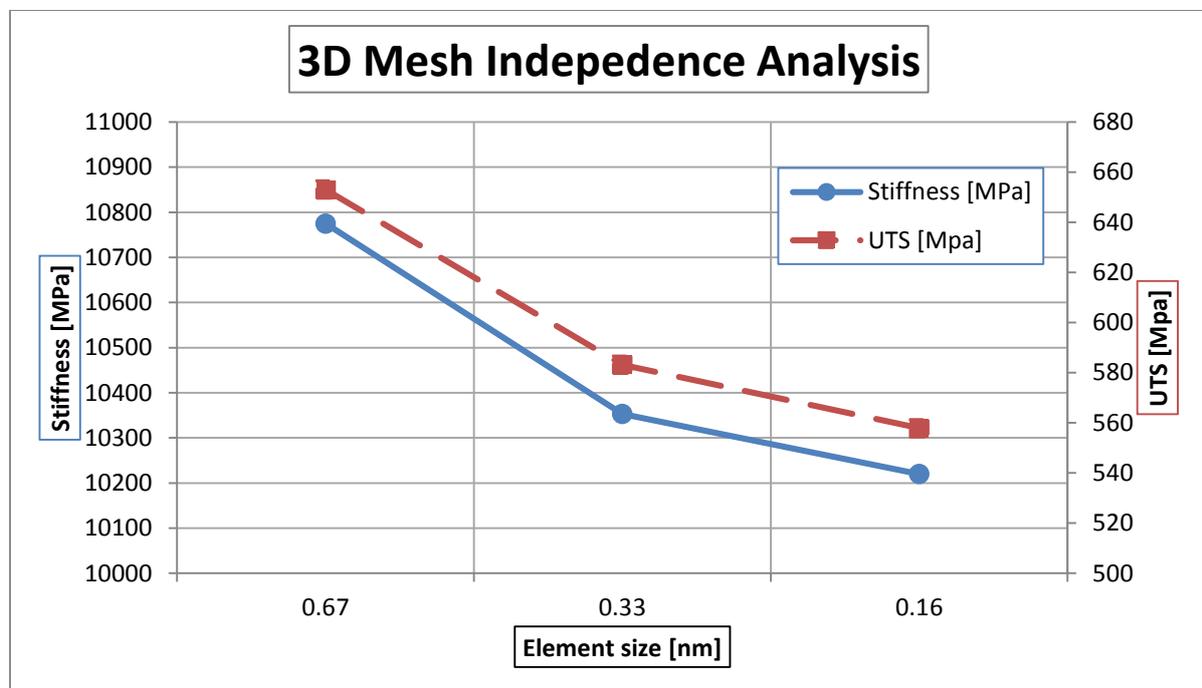


Figure 80: 3D mesh independence analysis. The continuous blue line is convergence of stiffness and the dashed red line is the convergence of Ultimate Tensile Strength.

Figure 80 presents the fibre stiffness and strength values that were calculated for the three different mesh resolutions. As the mesh density increases, the stiffness decreases. The three meshes showed an asymptotic behaviour for both quantities. It can be seen that the change in stiffness is only 1.3%. However, the relative change of strength values is more significant. A further refinement of the mesh was not performed as the computational demands of the fine mesh which was tested were already very high.

Considering that the model would be used in the future as part of an optimisation loop, the mesh with average element size 0.16nm was exceptionally time-consuming. However, the coarser meshes can still be reliably used in optimisation runs, where a relative comparison is

made. Once the design search space is more limited, finer meshes can be used for more accurate results as required.

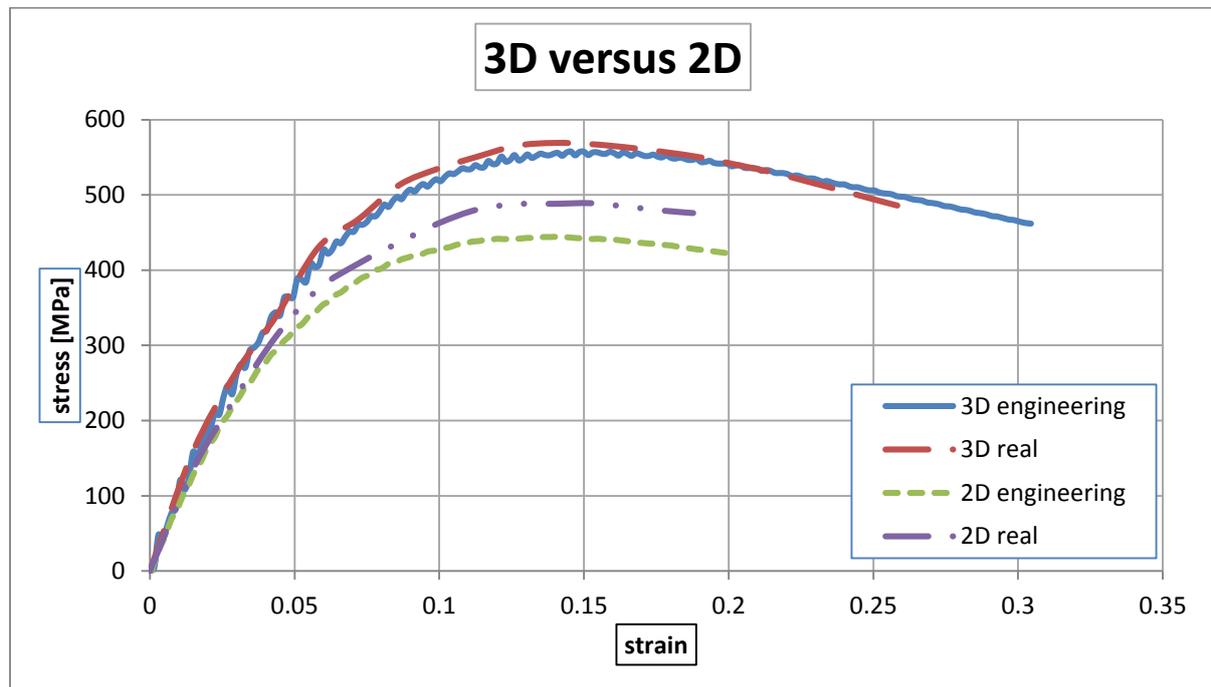


Figure 81: Real and engineering stress-strain curve of 2D and 3D fibre models with 25% crystallinity.

Figure 81 compares the real and the engineering stress-strain curve for 2D and 3D fibre models with 25% crystallinity. It can be seen the 2D model was less stiff than the 3D model and the yield stress was about 100 MPa lower. The different number of crystals, their arrangement and the one extra dimension lead to significant differences. Considering the above, the discrepancies between the two curves are considered reasonable.

6.3. NTUA meshing software

As was described in Section 6.1, the commercial software that was used presented several meshing limitations. In order to achieve the meshing step within an optimisation loop, an automatic mesh generation was necessary. There was no efficient way to create a 3D mesh, with an arbitrary position of the crystals, in an automatic way using LS-PrePost. In order to overcome this constrain, a custom meshing algorithm was introduced. This software was developed in Lab of Thermal Turbomachines, in Parallel CFD & Optimisation Unit from the PhD student Kapellos C. As a first step and for validation purposes the custom meshing algorithm was applied using the same methodology described in Section 6.1.

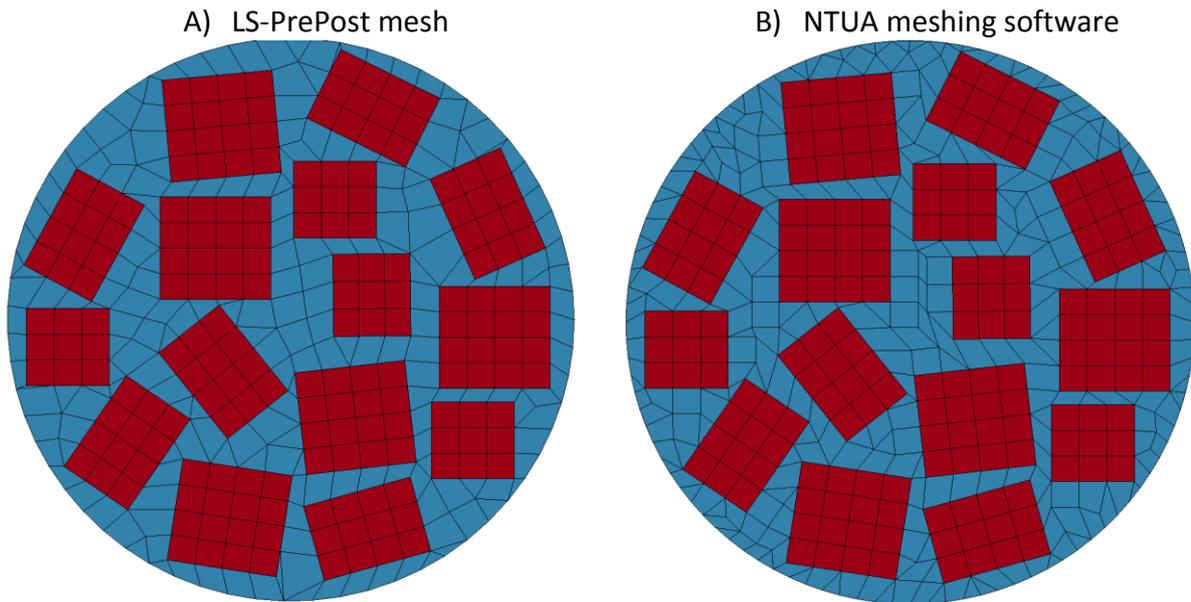


Figure 82: Comparison of the 2D meshed cross-section. On the left is the mesh from LS-PrePost and on the right is the mesh from the in house code.

For the creation of the 2D plane there was a need of a quadrilateral mesh between the crystals and the enclosing curve, this being either a rectangular or a circle (for the longitudinal and the transverse direction respectively). In the first step of the method used, each crystal, being a perfect square, was expanded in a structured way, using rectangles layer by layer, up to the point of intersection with a neighbouring crystal's final layer. Afterwards, a triangular mesh was generated using a front algorithm in the empty space which was left after the layer expansion. In the final step the triangles were connected in such a way that convex quadrilaterals were formed. The comparison of the two 2D meshed cross-sections is shown in Figure 82.

Table 18: The comparison between the LS-PrePost and In House meshing.

	LS-PrePost	In House
Elements	23 640	28 680
Failure strain	38.1%	33.5%
Total CPU time	3h 1m	1h 28m
CPU time for 33.5% strain	2h 39m	1h 28m
Stiffness [MPa]	10 775	10 775

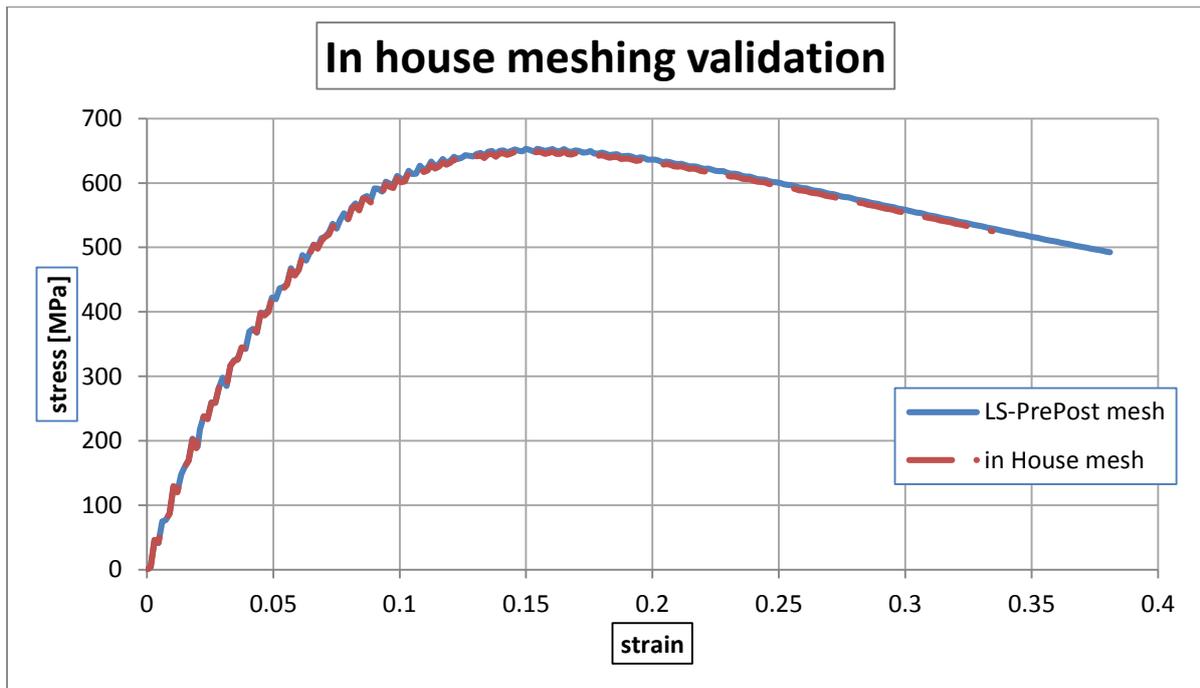


Figure 83: Stress-Strain curve from LS-PrePost meshing compared with the in house meshing code. The continuous blue line is the stress-strain curve from LS-PrePost mesh; the dashed red line is the stress strain curve from in house mesh.

The stress-strain curve results from in-house mesh showed that there was no significant difference in the fibre mechanical behaviour. The termination of the simulation due to an element failure occurred at a strain value of 0.33 compared to 0.38 when using the LS-PrePost mesh (Figure 83). In the other hand, the total CPU time for in-house mesh was 37% less for the failure strain of 33.5% (Table 18).

6.4. Comments and future work for the 3D model

The in house meshing provided promising results. The mesh quality was already comparable to LS-PrePost. In the next steps it will be fine-tuned for maximum FEM quality. More importantly, this meshing code has the potential to be extended and allow for completely random placement of crystals inside the fibres. Future steps will attempt to create a mesh with the ability for arbitrary position of the crystals and, finally, run EA for the 3D model.

Chapter 7. General conclusions and future work

Inspired from biomaterials, during this thesis, a method to design an engineering material that mimics the nature was developed. The purpose was to design cheap, lightweight materials through the application of a bio-material atomistic mechanism. The design was focused on the continuum mechanics using finite element analysis simulations. The material was based on spider silk and featured two components: one strong and typically brittle part and one soft part with high extensibility, viscoelastic behaviour and the ability to dissipate energy.

Based on findings from previous work, a two dimensional FE model was developed and validated using spider silk fibre properties. Afterwards, this FE model was coupled with an EA tool and utilized in order to unfold the design possibilities.

The 2D model optimisations indicated that a completely random arrangement of the crystals inside the amorphous phase did not yield very high values of toughness or stiffness. On the other hand, when the crystals were placed on a fully structured grid arrangement, a significant improvement of toughness and stiffness was noticed. In addition, a serial-like grid improved toughness, while a parallel-like one improved stiffness, likewise the crystal aspect ratio showed the same trend. This behaviour was in accordance with the theoretical serial and parallel reference structures.

The material and material cost analysis revealed the importance of the material properties. The mechanical properties of the amorphous phase should be in accordance with the mechanical properties of the crystalline phase for most material cost efficient design. In general, the amorphous phase was shown to have a significant impact on both fibre stiffness and toughness, while the crystal properties mainly affected the fibre stiffness.

The 2D model served a great assistance for an exploratory design analysis. The automatic design methodology based on the combination of FEM with EA was successfully applied in a variety of design cases. However 3D geometries are necessary for the actual engineering applications. Therefore, a 3D fibre model was also prepared. Several geometrical and meshing challenges were raised by the need of EA and the automatic procedures. In order to overcome the limitations, an in house meshing algorithm was developed and provided promising results.

Further development of the NTUA meshing software to allow for arbitrary position of the crystals inside the three dimensional fibre would be necessary in order to adequately explore the possibilities of the spider fibre structure. In addition, since the three dimensional fibre evaluation CPU cost is high, a complete exploitation of EASY features would be also necessary, in order to further increase the optimisation speed.

This research investigated the potential values of the subcomponents' mechanical values. These findings provide practical information, however further study investigating real

materials' mechanical values, along with a more accurate description of their interactions would be necessary for the development of the engineering material. In addition, taking into account the real cost of materials and the difficulty of manufacturing is fundamental for achieving novel cheap and lightweight designs.

Bibliography

1. International Energy Agency. *Transport, Energy and CO2: Moving towards Sustainability*. s.l. : OECD Publishing, 2009.
2. EIA (US Department of Energy, Energy Information Administration). *International Energy Outlook 2010*. 2010. DOE/EIA-0484(2010).
3. A. Casadei, R. Broda. *Impact of Vehicle Weight Reduction on Fuel Economy for Various Vehicle Architectures*. Ricardo. 2008. RD.07/71602.2.
4. S. Ashley. *Lightweight carbon-fibre and SMC body panels under development*. <http://www.sae.org/mags/aei/mater/12288>.
5. N. Lutsey. *Review of technical literature and trends related to automobile mass-reduction technology*. California : s.n., 2010.
6. *Determining Tensile Test Offset Yield Strengths using Extensometer*. ADMET <http://admet.com/blogposts/determining-tensile-test-offset-yield-strengths-using-extensometer/>.
7. D. Manolakos, Notes from the NTUA course 'Engineering materials'. <http://courseware.mech.ntua.gr/ml26012/>.
8. *Principal stresses and stress invariants*. RockMechs. <http://www.rockmechs.com/stress-strain/stress/principal-stresses-and-invariants/>.
9. *Material selection and processing*. University of Cambridge, Department of engineering. <http://www-materials.eng.cam.ac.uk/mpsite/properties/default.html>.
10. R.S. Lakes. *Viscoelastic Solids (Mechanical and Aerospace Engineering Series)*. 1998.
11. S.P. Patil, B. Markert, F. Gräter. *Rate-Dependent Behaviour of the Amorphous Phase of Spider Dragline Silk*. June 2014 .: Biophysical Journal, June 2014, Vol. 106, pp. 2511-2518.
12. D. Roylance. *Engineering Viscoelasticity*. <http://ocw.mit.edu/courses/materials-science-and-engineering/3-11-mechanics-of-materials-fall-1999/modules/visco.pdf>.
13. M.A. Meyers, P. Chen, A.Y. Lin, Y. Seki. *Biological materials: Structure and mechanical properties*.: Progress in Materials Science, January 2008, Vol. 53, pp. 1-206.
14. L. Yarris. *Scientists Create Tough Ceramic That Mimics Mother of Pearl*. Berkeley Lab. <http://newscenter.lbl.gov/2008/12/05/scientists-create-tough-ceramic-that-mimics-mother-of-pearl/>.
15. B.J. F. Bruet, H.J. Qi, M.C. Boyce, P. Panas, K. Tai, L. Frick, C. Ortiz. *Nanoscale Morphology and Indentation of Individual Nacre Tablets from the Gastropod Mollusc Trochus Niloticus*. 09: Journal of Materials Research, September 2005, Vol. 20, pp. 2400-2419.

16. C.B. Carter, M.G. Norton. *Ceramic Materials: Science and Engineering*. [ed.] 2nd.: Springer, 2013.
17. *Bone Structure*. University of Washington.
<http://depts.washington.edu/bonebio/bonAbout/structure.html>.
18. *Mechanical properties of bone*. University of Cambridge.
http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/bones/bone_mechanical.php.
19. . Y. Seki, B. Kad, D. Benson, M.A. Meyers. *The toucan beak: Structure and mechanical response*: The toucan beak: Structure and mechanical response, September 2006, Vol. 26, pp. 1412–1420.
20. R.S. Fecchioa, Y. Sekib, S.G. Boddeb, M.S. Gomesc, J. Kolososkid, J.L. Rossi Jr.a, M.A. Gioso, M.A. Meyersb. *Mechanical behavior of prosthesis in Toucan beak (Ramphastos toco)*.: Materials Science and Engineering: C, 6 April 2010, Vol. 30, pp. 460–464.
21. D. Manolakos, Notes from the NTUA course 'Advance materials'.
<http://courseware.mech.ntua.gr/ml00001/>.
22. *Zirconia Toughened Alumina*. Superior Technical Ceramics.
<http://www.ceramics.net/services/materials-engineering-expertise/zirconia-toughened-alumina>.
23. Iron. *WebElements*. <http://www.webelements.com/iron/>.
24. L. Corté, V. Rebizant, G. Hochstetter, F. Tournilhac, L. Leibler. *Toughening with Little Stiffness Loss: Polyamide Filled with ABC Triblock Copolymers*.: Macromolecules, 5 Dec 2006, Vol. 39, pp. 9365–9374.
25. D.W. Pepper, J.C. Heinrich. *The Finite Element Method: Basic Concepts and Applications*. s.l. : Taylor & Francis. ISBN 1-59169-027-7.
26. J.E. Flaherty. Amos Eaton, Departments of Computer Science and Mathematical Sciences. *Rensselaer Polytechnic Institute*. <http://www.cs.rpi.edu/~flaherje/pdf/fea4.pdf>.
27. K.C. Giannakoglou. *Optimization Methods in Aerodynamics*. Notes, National Technical University of Athens, 2005 (in Greek).
28. *EASY: the Evolutionary Algorithms SYstem*. <http://velos0.ltt.mech.ntua.gr/EASY/>.
29. K.C. Giannakoglou. <http://velos0.ltt.mech.ntua.gr/research/index.html>.
30. K.C. Giannakoglou. *Design of optimal aerodynamic shapes using stochastic optimization methods and computational intelligence*. Progress in Aerospace Sciences, 2002, Vol. 38, pp. 43-76.

31. M.K. Karakasis, A.P. Giotis, K.C. Giannakoglou. *Inexact information aided, low-cost, distributed genetic algorithms for aerodynamic shape optimization.*: International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2003, Vols. 10-11, pp. 1149-1166.
32. M. Karakasis, K.C. Giannakoglou. *On the Use of Metamodel-Assisted Multi-Objective Evolutionary Algorithms.*: Engineering Optimization, 2006, Vol. 38, pp. 941-957.
33. I.C. Karpolis, K.C. Giannakoglou. *Distributed Evolutionary Algorithms with Hierarchical Evaluation.* : Engineering Optimization, 2009, Vol. 41, pp. 1037-1049.
34. I.C. Karpolis, K.C. Giannakoglou. *A multilevel approach to single- and multiobjective aerodynamic optimizations.*: Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2008, Vol. 197, pp. 33-40.
35. V.G. Asouti, I.C. Karpolis, K.C. Giannakoglou. *A Grid-Enabled Asynchronous Metamodel-Assisted Evolutionary Algorithm for Aerodynamic Optimization.* Genetic Programming and Evolvable Machines: Parallel and Distributed Evolutionary Algorithms, Part One, 2009, Vol. 10, pp. 373-389.
36. V.G. Asouti, K.C. Giannakoglou. *Aerodynamic optimization using a parallel asynchronous evolutionary algorithm controlled by strongly interacting demes.*: Engineering Optimization, 2009, Vol. 41, pp. 241-257.
37. J.R. Davis. *Tensile Testing.* ASM international, 204. 0-87170-806-X.
38. S.P. Patil, B. Markert, F. Gräter. *Refining a Bottom-up Computational Approach for Spider Silk Fibre Mechanics.*: Proceedings of the 3rd GAMM Seminar on Continuum Biomechanics, 2012/11. Vols. II-21, pp. 75–87.
39. J.O. Hallquist. LS-DYNA Theoretical Manual. May 1998.
40. L.R. Herrmann, F.E. Peterson. *A numerical procedure for viscoelastic stress analysis.*: CPIA Publication, 1968. Seventh meeting of ICRPG Mechanical Behaviour Working Group. Vol. 177, pp. 60-69.
41. M. Cetinkaya, S. Xiao, B. Markert, W. Stacklies, F. Gräter. *Silk Fiber Mechanics from Multiscale Force Distribution Analysis.*: Biophysical Journal, 2 Mar 2011, Vol. 100, pp. 1298–1305.
42. S.P. Patil, S. Xiao, K. Gkagkas, B. Markert, F. Gräter. *Viscous Friction between Crystalline and Amorphous Phase of Dragline Silk:* PLoS ONE, 13 Aug 2014, Vol. 9.
43. Command Line Interface. *LS-PrePost Online Documentation.* <http://www.lstc.com/lsp/other/command/command.shtml>.

44. S. Xiao, W. Stacklies, M. Cetinkaya, B. Markert, F. Gräter. *Mechanical Response of Silk Crystalline Units from Force-Distribution Analysis.*: Biophysics Journal, 20 May 2009, Vol. 96, pp. 3997–4005.
45. S.P. Patil, B. Markert, F. Gräter. *Revealed Dragline Silk Fiber Mechanics with Visco-elastoplastic Material Model.*: Heidelberg Institute for Theoretical Studies.
46. J.M. Gosline, P.A. Guerette, C.S. Ortlepp, K.N. Savage. *The mechanical design of spider silks: from fibroin sequence to mechanical function.* : The Journal of Experimental Biology, 1 Dec 1999, Vol. 202, pp. 3295-3303.
47. T. Lefèvre, M.E. Rousseau, M. Pézolet. *Protein Secondary Structure and Orientation in Silk as Revealed by Raman Spectromicroscopy.*: Biophysical Journal, 2 Feb 2007, Vol. 92, pp. 2885–2895.
48. T. Köhler, F. Vollrath. *Thread biomechanics in the two orb-weaving spiders Araneus diadematus (Araneae, Araneidae) and Uloborus walckenaerius (Araneae, Uloboridae).*: Journal of Experimental Zoology, 1 Jan 1995, Vol. 271, pp. 1-17.
49. *An Interactive Guide To The Fourier Transform.* <http://betterexplained.com/articles/an-interactive-guide-to-the-fourier-transform/>.