

**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ**

**ΤΜΗΜΑ  
ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ**

**ΕΝΕΡΓΕΙΑΚΗ ΚΑΤΕΥΘΥΝΣΗ**



**ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ**

***ΕΥΡΕΣΗ ΔΙΕΠΙΦΑΝΕΙΑΣ ΣΤΑΓΟΝΑΣ ΛΙΘΙΟΥ ΣΕ  
ΠΡΟΣΦΥΣΗ ΣΕ ΚΑΤΑΚΟΡΥΦΟ ΣΥΣΤΗΜΑ ΤΡΙΧΟΕΙΔΩΝ  
ΠΟΡΩΝ***

**ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΙΑΔΗΣ ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ**

**ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ**

**ΠΕΛΕΚΑΣΗΣ ΝΙΚΟΛΑΟΣ**

## Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον καθηγητή Δρ. Νικόλαο Πελεκάση για την συνεργασία, την καθοδήγηση αλλά και για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε αναθέτοντάς μου αυτό το ενδιαφέρον θέμα και δίνοντας μου τον σημαντικό χρόνο που με πήρε να το ολοκληρώσω. Οι γνώσεις που αποκόμισα κατά την εκπόνηση της διπλωματικής αυτής θα είναι πολύτιμες στη μέλλουσα σταδιοδρομία μου και ελπίζω να θέτουν την βάση για μια καλή εξέλιξη.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένειά μου για την υποστήριξη που μου παρείχαν καθ' όλη τη διάρκεια των σπουδών μου, με υλική και ψυχολογική στήριξη και σημαντική υπομονή για την ολοκλήρωση των σπουδών μου, όπως επίσης και τον αδερφό μου, Ιωάννη Κωνσταντινίδη απόφοιτο Ηλεκτρολόγο Μηχανικό του ΑΠΘ, που με τις γνώσεις του συνέβαλε στην διαμόρφωση της συγκεκριμένης εργασίας.

# Περιεχόμενα

|  |    |
|--|----|
| Περιεχόμενα.....   | 2  |
| Πίνακας Σχημάτων .....   | 4  |
| 1. Περίληψη.....   | 6  |
| 1. Abstract .....  | 8  |
| 2. Εισαγωγή .....  | 10 |
| 2.1 Παραγωγή Ενέργειας με Πυρηνική Σύντηξη .....                                     | 10 |
| 2.2 Υγρό Λίθιο.....  | 11 |
| 2.3 Capillary Porous System .....  | 12 |
| 2.4 Υποθέσεις .....  | 15 |
| 2.5 Σκοπός της Έρευνας.....  | 16 |
| 3. Σχεδιασμός και Μεθοδολογία του Προβλήματος .....                                  | 16 |
| 3.1 Μοντελοποίηση του Προβλήματος .....  | 16 |
| 3.1.1. Φυσικές Εξισώσεις του Προβλήματος .....                                       | 16 |
| 3.1.2 Υπολογισμός Όρων Εξίσωσης Δύναμης Με Ανάλυση Γεωμετρίας.....                   | 18 |
| 3.1.3 Εξίσωση Διατήρησης Όγκου.....  | 24 |
| 3.1.4 Το πρόβλημα της Σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο.....                             | 25 |
| 3.2 Αριθμητική Μέθοδος .....   | 26 |
| 3.2.1 Πεπερασμένα Στοιχεία .....   | 26 |
| 3.2.2 Η μέθοδος Newton-Raphson για μη-γραμμικό Πρόβλημα Πεπερασμένων Στοιχείων ..... | 28 |
| 3.2.3 Master Element και Συναρτήσεις Βάσης Lagrange.....                             | 29 |
| 3.2.4 Ιακωβιανή Μεταβλητών Στοιχείου, Αντιστροφή της και Ολοκλήρωση Gauss.....       | 31 |
| 3.2.5 Αδιαστατοποίηση Μεταβλητών.....  | 33 |
| 3.2.6 Πίνακας Ιακωβιανή, Επίλυση της ARROW και Εύρεση Όρων του Πίνακα.....           | 35 |
| 3.2.7 Διαγωνιοποιημένος Πίνακας A στον Κώδικα.....                                   | 38 |
| 3.2.8 Ορθογώνιο Πλέγμα .....   | 39 |
| 3.2.9 Αντιστοίχιση Μεθόδου Επίλυσης με το Φυσικό Πρόβλημα.....                       | 40 |
| 3.3 Διαδικασία Επίλυσης.....   | 41 |
| 3.3.1 Ο Κώδικας Επίλυσης (Μέρη-Λεπτομέρειες) .....                                   | 41 |
| 3.3.2 Αρχική τιμή Σφαίρας .....  | 43 |
| 3.3.3 Αρχική τιμή Σταγόνας για Τοίχωμα σε Οριζόντιο Επίπεδο .....                    | 44 |
| 3.3.4 Μέθοδος Αντιστοίχισης σε Σφαιρικές.....  | 45 |

|  |    |
|--|----|
| 3.4 Δοκιμαστική Λειτουργία και Επαλήθευση(Benchmark-test run) .....  | 47 |
| 3.4.1 Επαλήθευση με Ημισφαίριο Μικρής Ακτίνας .....  | 47 |
| 3.4.2 Δοκιμή Λειτουργίας για Ημισφαίριο ( $\theta_{\text{επ}} = 90^\circ$ , $R_{\text{st}} = 1\mu\text{m}$ ) .....   | 49 |
| 3.4.3 Δοκιμή Λειτουργίας για Διαφορετικές Γωνίες Επαφής ( $\theta_{\text{επ}} = 30^\circ$ , $115^\circ$ , $R_{\text{st}} = 1\mu\text{m}$ ) .....                     | 52 |
| 3.4.4 Αριθμητική Σύγκλιση για Μερική σφαίρα ή Ημισφαίριο .....   | 56 |
| 3.4.5 Σύγκλιση Κώδικα με Αρχική Τιμή Προηγούμενης Λύσης για Μικρότερη Σταγόνα ( $\theta_{\text{επ}} = 45^\circ$ , $R_{\text{st}} = 1\text{-}2.32\mu\text{m}$ ) ..... | 64 |
| 3.4.6 Σύγκριση Διαφορετικών Πλεγμάτων για Μεγάλα Μεγέθη Σταγόνας( $\theta_{\text{επ}} = 45^\circ$ , $R_{\text{st}} = 1\text{-}2.32\mu\text{m}$ ) .....               | 66 |
| 3.4.7 Αριθμητική Σύγκλιση για Αρχική Τιμή από Αξονοσυμμετρικό Πρόβλημα .....   | 68 |
| 3.4.8 Συμπεριφορά για Σταγόνα Μεγαλύτερου Μήκους Επαφής για Αξονοσυμμετρικό..  | 71 |
| 4. Αποτελέσματα .....  | 73 |
| 4.1 Εύρεση Παραμέτρων και Αρχικών Προβλέψεων από Αξονοσυμμετρικό Πρόβλημα ..   | 74 |
| 4.2 Αποτελέσματα Εκτέλεσης Κώδικα για Διαφορετικά Μεγέθη Σταγόνας.....   | 74 |
| 5. Συμπεράσματα – Μελλοντική Εργασία.....  | 79 |
| 6. Βιβλιογραφία.....   | 82 |
| Παράρτημα.....   | 83 |
| Κώδικας σε Fortran .....   | 83 |

## Πίνακας Σχημάτων

|  |    |
|--|----|
| Σχήμα 1. Τόκαμακ και θέση του CPS στις πειραματικές έρευνες .....  | 11 |
| Σχήμα 2. Εικόνα του CPS A) περιβρεχόμενο από υγρό Li και B) χωρίς Li .....   | 13 |
| Σχήμα 3. Άξονες στον χώρο και επιφάνεια της σταγόνας στην μισή ημισφαιρική μορφή όπως θα εξεταστεί.....  | 17 |
| Σχήμα 4. Διανύσματα στο χώρο και γωνίες $\theta, \phi$ που καθορίζουν την θέση των σημείων της επιφάνειας .....  | 19 |
| Σχήμα 5. Σχέση γωνίας επαφής της σταγόνας με το τοίχωμα και γωνίας του εφαπτομενικού διανύσματος $m$ με τον άξονα $\gamma$ .....   | 22 |
| Σχήμα 6. Σταγόνα που προσφύεται σε εξωτερική επιφάνεια CPS και γεωμετρία αξονοσυμμετρικού .....  | 26 |
| Σχήμα 7. Μορφή τετραγωνικού (master) πεπερασμένου στοιχείου με μία διάσταση .....  | 30 |
| Σχήμα 8. Μορφή τετραγωνικού (master) πεπερασμένου στοιχείου με δύο διαστάσεις .....  | 31 |
| Σχήμα 9. Διάταξη πεπερασμένων στοιχείων και αντιστοίχιση τους με τις μεταβλητές .....  | 40 |
| Σχήμα 10 Σχεδιάγραμμα αντιστοίχισης συντεταγμένων του αξονοσυμμετρικού με τις σφαιρικές συντεταγμένες του προβλήματος.....   | 45 |
| Σχήμα 11. Ημισφαιρική σταγόνα στο χώρο σε αδιάστατη μορφή, όπως προέκυψε από την δοκιμή του προβλήματος.....   | 51 |
| Σχήμα 12. Αριστερή όψη της Ημισφαιρικής Σταγόνας .....   | 52 |
| Σχήμα 13. Αριστερή όψη σταγόνας για $\theta_{ca}= 30^\circ$ μορφής μερικής σφαίρας μεγέθους $10^{-6}$ m .....  | 53 |
| Σχήμα 14. Σχήμα υπολογισμένης σταγόνας για $\theta_{ca}= 30^\circ$ μορφής μερικής σφαίρας μεγέθους $10^{-6}$ m.....  | 54 |
| Σχήμα 15. Αριστερή όψη σταγόνας για $\theta_{ca}= 115^\circ$ μορφής μερικής σφαίρας μεγέθους $10^{-6}$ m .....   | 55 |
| Σχήμα 16. Σχήμα υπολογισμένης σταγόνας για $\theta_{ca}= 115^\circ$ μορφής μερικής σφαίρας μεγέθους $10^{-6}$ m .....  | 56 |
| Σχήμα 17A,B,Γ. Τομή επιφάνειας ημισφαιρικής σταγόνας A) με επίπεδο $\phi=0$ , B) με επίπεδο $\phi=\pi/2$ και $\gamma$ με επίπεδο $\theta=\pi/2$ .....  | 59 |
| Σχήμα 18A,B,Γ. Τομή επιφάνειας σταγόνας για διαφορετικά πλέγματα μεγέθους $10^{-3}$ m για $\theta_{ca}=45^\circ$ A) με επίπεδο $\phi=0$ , B) με επίπεδο $\phi=\pi/2$ και $\gamma$ με επίπεδο $\theta=\pi/2$ .....                    | 62 |
| Σχήμα 19. A,B,Γ. Τομή επιφάνειας σταγόνας για διαφορετικά πλέγματα μεγέθους $2*10^{-3}$ m για $\theta_{ca}=45^\circ$ A) με επίπεδο $\phi=0$ , B) με επίπεδο $\phi=\pi/2$ και $\gamma$ με επίπεδο $\theta=\pi/2$ .....                | 64 |
| Σχήμα 20A,B,Γ. Τομές επιφανειών σταγόνας διαφορετικών μεγεθών σε πλέγμα $40x25$ για $\theta_{ca}=45^\circ$ A) με επίπεδο $\phi=0$ , B) με επίπεδο $\phi=\pi/2$ και $\gamma$ με επίπεδο $\theta=\pi/2$ .....                          | 66 |
| Σχήμα 21A,B,Γ. Τομές επιφανειών σταγόνας με τρία διαφορετικά μεγέθη για πλέγματα $40x25$ και $55x30$ για $\theta_{ca}=45^\circ$ A) με επίπεδο $\phi=0$ , B) με επίπεδο $\phi=\pi/2$ και $\gamma$ με επίπεδο $\theta=\pi/2$ .....     | 68 |
| Σχήμα 22A,B,Γ. Τομή επιφάνειας σταγόνας σε διαφορετικά πλέγματα μεγέθους $5.7*10^{-4}$ m πίεσης $1000Pa$ για $\theta_{ca}=45^\circ$ A) με επίπεδο $\phi=0$ , B) με επίπεδο $\phi=\pi/2$ και $\gamma$ με επίπεδο $\theta=\pi/2$ ..... | 71 |
| Σχήμα 23A,B,Γ. Τομή επιφάνειας σταγόνας σε διαφορετικά πλέγματα μεγέθους $1.65*10^{-3}$ m πίεσης $345Pa$ για $\theta_{ca}=45^\circ$ A) με επίπεδο $\phi=0$ , B) με επίπεδο $\phi=\pi/2$ και $\gamma$ με επίπεδο $\theta=\pi/2$ ..... | 73 |

|   |    |
|---|----|
| Σχήμα 24Α,Β,Γ. Τομές επιφανειών σταγόνων σε πλέγμα 50x20 διαφορετικών $R_{st}$ για $\theta_{ca}=45^\circ$<br>Α) με επίπεδο $\phi=0$ , Β) με επίπεδο $\phi=\pi/2$ και γ) με επίπεδο $\theta=\pi/2$ .....   | 78 |
| Σχήμα 25 Α,Β Τρισδιάστατη απεικόνιση μορφής επιφάνειας σταγόνας που εφάπτεται σε<br>τοίχωμα για Α) αρχική πρόβλεψη αξονοσυμμετρικού με υπερπίεση 284 Pa και Β) Τελική<br>λύση 3Δ για την ίδια πίεση ..... | 79 |

# 1. Περίληψη

Η συγκεκριμένη διπλωματική εργασία ερευνά την μορφή της διεπιφάνειας μιας σταγόνας υγρού μετάλλου, την οποία θα αποκτήσει κατά την πρόσφυσή του σε μια στερεή κατακόρυφη επιφάνεια. Στην πραγματικότητα η στερεή επιφάνεια είναι ένα τριχοειδές σύστημα σωλήνων με πόρους (Capillary Porous System) που διαβρέχεται από υγρό λίθιο (Li) και η εξωτερική επιφάνεια του υγρού περιβάλλεται από πλάσμα σε συνθήκες κενού, όπως αυτό προκύπτει σαν αποτέλεσμα μιας αντίδρασης σύντηξης (Tokamak). Έτσι το υγρό περιβάλλει τα στερεά μέρη του συστήματος CPS και απορροφάει την θερμότητα που εκλύεται και ακτινοβολείται από το πλάσμα, συλλέγοντας την κατά την επανακυκλοφορία του διαμέσου των πόρων του CPS, προστατεύοντας έτσι τα τοιχώματα (divertor) του αντιδραστήρα Tokamak από την υπέρμετρη έκθεση σε ακτινοβολία. Για την εύρεση της μορφής της επιφάνειας επιλύεται η εξίσωση ισορροπίας δυνάμεων σε αυτήν. Για την επίλυση της τελικής εξίσωσης θα γίνει χρήση του αλγορίθμου των πεπερασμένων στοιχείων για δυο μεταβλητές (θα είναι οι γωνίες του σφαιρικού συστήματος συντεταγμένων) ώστε να υπολογιστούν η ακτίνα των σημείων της επιφάνειας και η εσωτερική πίεση στο κέντρο της σταγόνας. Λόγω της γεωμετρίας του προβλήματος (συμμετρία ως προς την κατακόρυφη επιφάνεια (YZ), κάθετη στην επιφάνεια του στερεού (XZ)) θεωρείται ότι η ανάλυση θα γίνει ευκολότερα σε σφαιρικές συντεταγμένες καθώς αυτές έχουν σταθερή τιμή στα όρια της επιφάνειας. Οι δυνάμεις σε μια απειροελάχιστη επιφάνεια  $dA$  αναλύονται στις τρεις καρτεσιανές συντεταγμένες  $xyz$  δημιουργώντας τρεις εξισώσεις που πρέπει να ισχύουν για κάθε  $dA$ . Διαλέγοντας ισορροπία δυνάμεων στον άξονα  $y$ , για την χρήση των πεπερασμένων στοιχείων γίνεται πολλαπλασιασμός της διαφορικής εξίσωσης με τις  $N$  εξισώσεις βάσης, όπου  $N$  αντιστοιχεί στις  $N$  άγνωστες τιμές της μεταβλητής  $R$  η οποία συμβολίζει την απόσταση του κάθε σημείου της επιφάνειας για διαφορετικές δοσμένες γωνίες  $\theta$  και  $\phi$  [ $R=R(\theta,\phi)$ ]. Τέλος εκτός από τον άγνωστο  $R$  που θα υπολογιστεί, θέλουμε να υπολογίσουμε και την εσωτερική πίεση. Γι' αυτό χρησιμοποιείται μια επιπλέον εξίσωση της επιλογής μας. Αυτή επιλέγεται να είναι η διατήρηση μάζας που συνεπάγεται την διατήρηση όγκου λόγω σταθερής πυκνότητας του υγρού λιθίου στην σταγόνα. Η επίλυση των παραγόμενων εξισώσεων γίνεται επαναληπτικά με την μέθοδο Newton-Raphson για διαγωνιοποιημένο πίνακα με μία επιπλέον γραμμή και μία στήλη. Εξ' αιτίας της έντονης μη-γραμμικότητας της διαφορικής εξίσωσης η προσέγγιση των αρχικών τιμών των αποστάσεων των σημείων ενδείκνυται να είναι αρκετά κοντά στην τελική λύση για να συγκλίνει η Newton-Raphson. Χρησιμοποιήθηκαν δύο τύποι αρχικής πρόβλεψης. Ο πρώτος είναι η μορφή μερικής σφαίρας για τα σημεία της επιφάνειας, για τον όγκο που αντιστοιχεί στην προσροφημένη σταγόνα. Ο δεύτερος είναι το αποτέλεσμα της επίλυσης του αντίστοιχου προβλήματος για οριζόντιο CPS, με συμμετρικό σχήμα ως προς τον κατακόρυφο άξονα, μη σφαιρικό για μεγάλες σταγόνες. Στην δεύτερη περίπτωση γίνεται αντιστοίχιση της αρχικής επιφάνειας στις σφαιρικές συντεταγμένες και επιλύεται για αντίστοιχο όγκο της σταγόνας με αυτό του αξονοσυμμετρικού. Η παραμετρική μελέτη δείχνει ότι σταγόνες μικρού όγκου διατηρούν σφαιρική μορφή με μήκος επαφής έως 1mm ενώ για σχετικά μεγαλύτερες σταγόνες η εύρεση της ακριβούς μορφής χρειάζεται καλή επιλογή πλέγματος και χρήση αρχική πρόβλεψη για οριζόντιο αξονοσυμμετρικό CPS. Καθώς ο όγκος της σταγόνας μεγαλώνει η λύση αξονικής συμμετρίας σταδιακά παύει να αποτελεί αξιόπιστη αρχική λύση. Για

μεγάλους όγκους που πλησιάζουν το οριακό μήκος επαφής της σταγόνας για την οποία το αξονοσυμμετρικό πρόβλημα αδυνατεί να δώσει λύση, η κατακόρυφη διαμόρφωση δίνει σταγόνα με μετατοπισμένη μάζα προς τα κάτω σαν να «κρέμεται». Έπειτα από το οριακό μήκος η κατακόρυφη διαμόρφωση αδυνατεί να δώσει λύση, για την ακολουθία πλεγμάτων που χρησιμοποιήθηκε. Η βέλτιστη επίλυση από πλευράς πλεγματοποίησης για το εν λόγω πρόβλημα θα υλοποιηθεί σε μελλοντική εργασία.



# 1. Abstract

The thesis project's paper is a research about the possible shape of the interface of a droplet of a liquid metal, which will get while standing on a vertical solid plane. This plane it actually is a Capillary Porous System which is wetted by liquid lithium (Li) inside the pores, while the outer surface of the droplet is surrounded by plasma in a vacuum chamber, which is formed as a result of a fusion reaction (tokamak). By this structure the liquid metal surrounds the solid parts of the CPS while absorbing the transferred heat load that it is released and radiated from the plasma to the CPS, collecting it efficiently through the recirculation of it through the metal porous structure of the CPS, thus protecting the wall (divertor) of the tokamak reactor from overexposing in radiation. In order to find the shape of the surface, the equation of forces acting on it was resolved. For the final equation that was emerged to be solved, the Finite Element Method algorithm was used, solving for two independent variables (the two angles  $\theta, \phi$  of the spherical coordinates) so the radius (R) of every point and the inner pressure of the droplet at the axis origin point to be calculated. Cause of the geometry of the problem (symmetrical to the vertical level surface(YZ) of the y and z axes , which is vertical to the solid plane(XZ)) it is considered that the analysis is easier in the spherical coordinate system, in which the angle variables have stable value to the boundaries of the droplet part that will be calculated. The forces in an infinitesimal surface  $dA$  of the droplet are analyzed to the three Cartesian coordinates, producing three equations that need to apply at every infinitesimal surface  $dA$ , in order for the whole surface to be stable. The balance of forces on the y axis was chosen to solve the radius R of the points of the surface ( $\theta, \phi$ ) with the use of Finite Element Method (FEM). The differential equation of every finite element created was multiplied with the weighted function of each point of the mesh. So there where as many equations as the points of mesh that need to find their radius. Also except of the radiuses of the points, the inner central pressure is needed to be calculated as well. For the extra unknown variable, an extra equation was needed to be solved. It was chosen to be the conservation of mass of the droplet, which was resulted in the conservation of the volume, as the density of the liquid lithium is stable throughout the droplet. The produced equations were being solved with a loop using the method of Newton-Raphson for banded matrix with an extra column and an extra row. Because of the intensive non-linearity of the differential equations the initial estimated value of the unknown variables need to be relatively close to the final calculated value, in order for the Newton-Raphson method to converge. There were used two types of initial values. The first is a shape of a partial sphere for the points of the surface, solving for the volume that it consists for the drop that is adsorbed by the CPS. The second was the result of the solution of an equivalent problem but with a horizontal CPS, in which the drop is symmetrical to the vertical axis. For the second case, a transformation of the primary surface into spherical coordinates at the points of the droplet is done and the problem is solved for the corresponding volume of the axonometric problem. The parametric analysis shows that droplets of small volume keep their spherical shape with length of contact of droplet as big as 1mm, while for relatively bigger ones, computing the exact shape needs very good choice of thick mesh and the use of the second case of horizontal droplet as an initial estimation value. As the volume of the droplet gets even bigger, the solution of the second

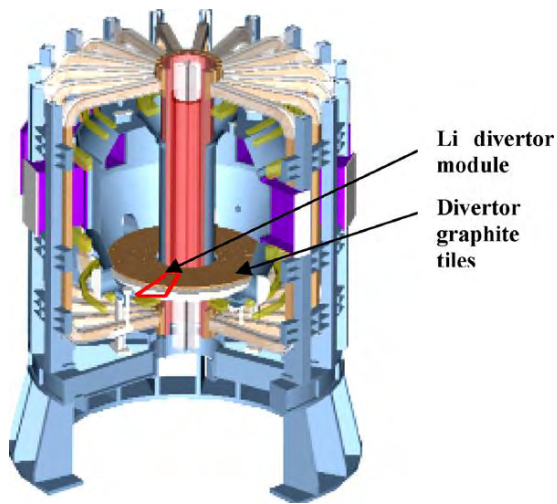
case stops being a reliable initial value. For big enough volume of droplet that the algorithm is near the point of not giving back a solution (critical length of contact  $R_{st}$ ), the vertical configuration of the problem gives a droplet with the mass shifted downwards, like it is “hanged”. After the critical length, the vertical configuration is not returning a solution or converging, for the sequence of the meshes that have been used. The optimum solution for the problem, concerned by the mesh choice, will be implemented in future work.

## 2. Εισαγωγή

### 2.1 Παραγωγή Ενέργειας με Πυρηνική Σύντηξη

Στην επιστήμη της πυρηνικής σύντηξης, της αντίδρασης που συμβαίνει στους αστέρες και ευθύνεται για την έκλυση τεραστίων ποσών ενέργειας από αυτούς προς το διάστημα, η ενέργεια που εκλύεται σε σχέση με την μάζα αντιδρώντων είναι η μεγαλύτερη δυνατή σε επίπεδο πυρήνων. Κατά την αντίδραση οι δύο πυρήνες μικρότερου μεγέθους ενώνονται για την δημιουργία ενός ή περισσότερων μεγαλύτερου. Η ιδανικότερη κατασκευή που έχει επινοηθεί και κατασκευαστεί σε μικρή και μεσαία κλίμακα ονομάζεται Τόκαμακ και είναι ένας θάλαμος σε μορφή τοροΐδη στον οποία δρουν ηλεκτρομαγνητικές δυνάμεις. Αυτές ιονίζουν τα αντιδρώντα προσδίδοντας τους ενέργεια. Αυτά αποτελούνται από ισότοπα Δευτέριο υδρογόνο και Τρίτιο υδρογόνο και βρίσκονται σε απειροελάχιστη πίεση εντός του θαλάμου. Αυτή η ενέργεια που τους προσδίδεται αυξάνει το ενεργειακό τους περιεχόμενο με αποτέλεσμα να συγκρούονται οι πυρήνες τους και να λαμβάνει χώρα πυρηνική αντίδραση παράγοντας ήλιο (He) μεγάλες ποσότητες ενέργειας και ελεύθερα νετρόνια. Η φάση των ιονισμένων αερίων σε ελάχιστη πίεση πριν την αρχή των αντιδράσεων αλλά και κατά την δράση τους, ονομάζεται πλάσμα με τα ιόντα να βρίσκονται σε τεράστιες θερμοκρασίες, της τάξεως των εκατομμυρίων βαθμών. Τα ιόντα του πλάσματος αποτρέπονται από το να προσκρούσουν στα τοιχώματα εξ' αιτίας των ηλεκτρομαγνητικών δυνάμεων του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου που ουσιαστικά τα κατευθύνει στις ροϊκές γραμμές του.

Η ενέργεια που εκλύεται κατά την αντίδραση είτε χρησιμοποιείται για την διατήρηση του πλάσματος αυξάνοντας την ενέργεια των ιόντων του πλάσματος, είτε, κυρίως, κατευθύνεται στον μανδύα (Blanket) όπου απορροφάται από το λειτουργούν μέσο (π.χ. λίθο, ήλιο) ώστε να χρησιμοποιηθεί μετά για την παραγωγή ενέργειας. Όμως αναπόφευκτά ένα σημαντικό μέρος της κατευθύνεται στον εκτροπέα (divertor) που βρίσκεται στην κατώτερη άκρη του πλάσματος και ο οποίος επιβάλλεται να αντέχει τις μεγάλες θερμοκρασίες και να μεταφέρει αποδοτικά την θερμότητα. Η θερμοκρασία που μπορεί να προκληθεί στον εκτροπέα ποικίλει από 200 έως 2000 °K [1] ανάλογα με την αποδοτικότητα της απορρόφησης της θερμότητας. Λόγω της απότομης έκλυσης μεγάλων ποσοτήτων ενέργειας και ηλεκτρομαγνητικών πεδίων, δημιουργούνται εύκολα φθορές, αστοχίες και διάβρωση.



Σχήμα 1. Τόκαμακ και θέση του CPS στις πειραματικές έρευνες

Ένα συστατικό που κοιτάει το πλάσμα (Plasma Facing Component-PFC) πρέπει να εμφανίζει κατάλληλη διάρκεια ζωής κατά την έκθεση του σε μεγάλα ποσά ενέργειας και σε βομβαρδισμό από νετρόνια. Τα προβλήματα που συνήθως εμφανίζει ένα PFC είναι φθορές, υποβάθμιση ιδιοτήτων, ρύπανση του πλάσματος με αύξηση του ατομικού του αριθμού ( $Z_{\text{eff}}$ ) και παρακράτηση Τριτίου. Η διάβρωση και φθορά ενός PFC μειώνει την διάρκεια ζωής του και επομένως μειώνει την οικονομική βιωσιμότητα της παραγωγής ενέργειας με σύντηξη [4].

## 2.2 Υγρό Λίθιο

Το υγρό λίθιο που θεωρείται σαν εναλλακτική μορφή PFC επιλέγεται αρχικά γιατί παρουσιάζει τις εξής ιδιότητες. Έχει χαμηλό ατομικό αριθμό οπότε η διασπορά του στο πλάσμα δεν αυξάνει τον ατομικό αριθμό του πλάσματος ( $Z_{\text{eff}}$ ) [1], ενεργοποιείται ραδιενεργά από νετρόνια σε πολύ χαμηλό βαθμό και έχει χαμηλή ισχύ ακτινοβολήσης. Επίσης είναι στοιχείο που είναι σε υγρή κατάσταση στις συνθήκες λειτουργίας του πλάσματος, προκαλεί την δημιουργία Τριτίου και ψύχει το περίβλημα του αντιδραστήρα σύντηξης μέσω της επανακτινοβόλησης μέρους της προσπίπτουσας ενέργειας. Σε στερεή κατάσταση εμφανίζει ασημί ανοιχτό χρώμα και σαν στοιχείο κατέχει παραμαγνητικές ιδιότητες. Ένας ακόμη σημαντικός λόγος που επιλέγεται είναι για την συμπεριφορά της αυτό-επαναφοράς του σχήματος, η οποία είναι μια γενική ιδιότητα των υγρών, άλλα και της ανανέωσης του που επιτρέπει η υγρή μορφή του μέσω ενός συστήματος χαμηλής επανακυκλοφορίας [4]. Τα μέταλλα που το περιβάλλουν είναι ανθεκτικά στην επαφή του μ' αυτό χωρίς να αντιδρούν, σε αντίθεση με την έκθεση του λιθίου σε νερό ή αέρα. Η θερμοκρασία τήξης του είναι  $180^{\circ}\text{C}$  σε πίεση περιβάλλοντος και βρασμού στους  $1358^{\circ}\text{C}$ . Ένα ακόμα σημαντικό στοιχείο του είναι η χαμηλή πίεση εξάτμισης, κρατώντας χαμηλά την διαφυγή του στο πλάσμα στην περιοχή των  $200-600^{\circ}\text{C}$  [2]. Άλλα πλεονεκτήματά του που παρουσιάζουν ενδιαφέρον είναι η παρακράτηση του υδρογόνου, η χαμηλή τάση κατά την

εκκένωση του πλάσματος, η ανακύκλωση της ποιότητας της επιφάνειας του PFC μέσα από την αντικατάσταση κατεστραμμένων μορίων από καινούρια, εκμηδενισμός των ραδιενεργών οξυγόνων και ανθράκων, η αντοχή σε μεγαλύτερη θερμοκρασία ηλεκτρονίων στον πυρήνα και η μη εμφάνιση ανωμαλιών σύστασης και ανομοιογένειες όπως τα υπόλοιπα στερεά PFC. Γενικά εμφανίζει έλλειψη διασποράς αποτελεσμάτων διάβρωσης στο πλάσμα [2,6]. Σημαντικό χαρακτηριστικό του που παρατηρήθηκε είναι η μείωση της θερμορροής εξαιτίας έντονης επανακτινοβόλησης από άτομα λιθίου ,που έχουν διασπαρθεί στην περιφέρεια του πλάσματος, προς το υπόλοιπο πλάσμα. Η ακτινοβολία του κελύφους του πλάσματος αυξάνεται με την αύξηση της θερμοκρασίας της επιφάνειας του υγρού λιθίου. Τέλος το λίθιο επηρεάζει την ποιότητα των αντιδρώντων στο πλάσμα και κατ' αποτέλεσμα την ενέργεια που παράγεται [5,6].

Η απορρόφηση και έπειτα η εκρόφηση στοιχείων του πλάσματος από το λίθιο είναι αυξημένη σε σχέση με τα στερεά υλικά καθώς παρουσιάζει μεγάλη απορρόφηση δευτέρου, υδρογόνου και ηλίου στο πρώτο τοίχωμα του εκτροπέα, τα οποία ωστόσο θα αφαιρεθούν κατά την εκρόφηση τους από το λίθιο σε θερμοκρασία υγρού λιθίου 320-350°C για το δευτέριο και 20-100 °C για το ήλιο. Δηλαδή σε μία επαναφορά θερμοκρασίας του λιθίου σε 370-500 °C θα απελευθερωθούν από το λίθιο. Αν επιλεγεί στο Τόκαμακ περιοριστής (limiter) από υγρό λίθιο τότε αυξάνονται οι εκροές λιθίου κατά την εκκένωση, η διάβρωση του λιθίου όπως και η ενέργεια που θα κατατεθεί στον Περιοριστή. Επίσης αυξάνεται το ποσοστό του ραδιενεργού λιθίου [3,5,7].

## 2.3 Capillary Porous System

Η διάταξη που έχει χαρακτηριστεί ως η αποδοτικότερη για την χρήση του υγρού λιθίου ως PFC είναι η περίπτωση που θα περιβρέχει ένα μεταλλικό δικτύωμα που διατάσσεται πλεγμένο μεταξύ του και δημιουργεί πόρους στο ενδιάμεσο μεγέθους δεκάδων έως εκατοντάδων μικρών, διαμέσου του οποίου βρίσκεται και ρέει το λίθιο, δημιουργώντας ισχυρές επιφανειακές τάσεις εξαιτίας της τριχοειδούς δράσης του υγρού με το πλέγμα. Ονομάζεται τριχοειδές πορώδες σύστημα με υγρό λίθιο (Liquid Lithium Capillary Porous System-CPS) Στην επιφάνεια που το λίθιο κοιτάει στο πλάσμα δημιουργούνται σταγόνες μεγέθους των πόρων, υπερκαλύπτοντας την έκθεση του μεταλλικού πλέγματος στο πλάσμα και αποφεύγοντας τα μειονεκτήματα ενός στερεού PFC. Τα μέταλλα που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την κατασκευή του πλέγματος είναι μολυβδαίνιο (Mo), ασάλι (Stainless Steel – SS), βανάδιο (V) ή βολφράμιο (W) [3,6].

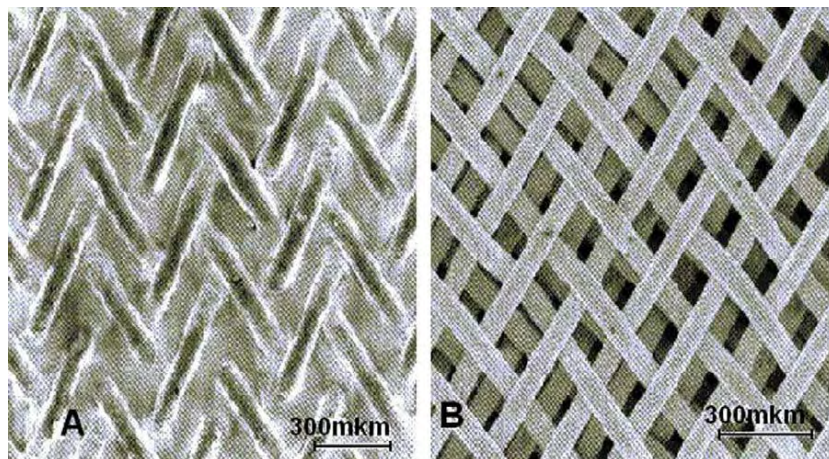
Τα πλεονεκτήματα του CPS βασίζονται στις επιφανειακές τάσεις στην εκτεθειμένη εξωτερική επιφάνεια λιθίου και είναι [1,2,3,9]

1. Η άμεση επαναφορά του σχήματος της εξωτερικής επιφάνειας μιας σταγόνας, σε αντίθεση με τις υπόλοιπες μορφές χρήσης υγρού λιθίου σε Τόκαμακ ελεύθερης ροής.

2. Η σταθεροποίηση της επιφάνειας του λιθίου κατά την δράση Υδρομαγνητικών Δυνάμεων (MHD) στην περίπτωση διαταραχής του πλάσματος κατά την σύντηξη.
3. Η μείωση της θερμορροής σε πιο λογικά πλαίσια με την έντονη επανακτινοβολήση ατόμων λιθίου στην περιφέρεια του πλάσματος, διευκολύνοντας το πρόβλημα της απόρριψης της θερμότητας των εξαρτημάτων που κοιτάν το πλάσμα, μειώνοντας και την θερμοκρασία της εξωτερικής επιφάνειας.
4. Η μείωση ατόμων λιθίου που ξεφεύγουν προς το πλάσμα, με μεγαλύτερη συγκράτηση του  $Z_{eff}$  προς το 1, τον ατομικό αριθμό ισοτόπων υδρογόνου που επιθυμείται να αποτελούν το πλάσμα.
5. Αποτροπή συσσώρευσης Τριτίου μέσα από κυκλοφορία και ανατροφοδότηση του λιθίου
6. Αποφυγή εκτόξευσης σταγόνων υγρού μετάλλου σαν αποτέλεσμα των ηλεκτρομαγνητικών δυνάμεων,  $\vec{j} \times \vec{B}$  effect, στις διαταραχές πλάσματος

Σημαντική λεπτομέρεια της πλήρωσης του CPS με λίθιο είναι η ελεγχόμενη τιμή θερμορροής αποτρέποντας υψηλές τάσεις εντός των στερεών μετάλλων λόγω απότομων αλλαγών της θερμορροής και αποτρέποντας περιπτώσεις αστοχιών και πιθανής κόπωσης των μετάλλων.

Από πειράματα που έχουν γίνει σε αρκετά ερευνητικά κέντρα που κατέχουν Τόκαμακ η θερμορροή στην επιφάνεια που μπορεί να απορροφηθεί χωρίς επιπτώσεις είναι  $100 \text{ MW/m}^2$  για πόρους κοντά στην εξωτερική επιφάνεια μεγέθους περίπου  $15 \mu\text{m}$  και μέγιστη θερμοκρασία επιφάνειας λιθίου  $1200^\circ\text{C}$ . Από αυτή την θερμοκρασία και έπειτα παρατηρείται μεγάλη εξάτμιση του λιθίου όπως και λιώσιμο επιφανειών του μεταλλικού πλέγματος..



Σχήμα 2. Εικόνα του CPS A) περιβρεχόμενο από υγρό Li και B) χωρίς Li

Πιστεύεται ότι η εφαρμογή του CPS θα βοηθήσει στην επίλυση του σημαντικού προβλήματος της αύξησης μιας επιφάνειας που χρησιμοποιείται για συλλέκτη επίπεδη πλάκα χωρίς σημαντική μεταβολή προς τα πάνω του  $Z_{eff}$  του πλάσματος. Η τριπλή δράση των επιφανειακών τάσεων προσφέρει στην εξωτερική επιφάνεια το σχήμα και την

σταθεροποίηση αυτού σε μορφή σταγόνας και την ομοιογένεια της κατανομής των ατόμων λιθίου στην εξωτερική επιφάνεια [\[1\]](#).

Ωστόσο η πίεση της τριχοειδούς δράσης παρουσίασε μεγάλη ευαισθησία στην θερμοκρασία της εξωτερικής επιφάνειας. Όσο αυξάνεται η θερμοκρασία μειώνεται η πίεση του τριχοειδούς φαινομένου, δηλαδή της επενέργειας των επιφανειακών τάσεων σε μία διεπιφάνεια [\[2\]](#).

Το διαβρωμένο λίθιο που διαφεύγει προς το πλάσμα, με την εφαρμογή ενός CPS μπορεί να συμπυκνωθεί ξανά και να πιαστεί από την ανανεωμένη εξωτερική επιφάνεια του CPS μειώνοντας τα μόρια λιθίου στο πλάσμα. Επίσης δεν θα εμφανιστούν στα τοιχώματα του δοχείου στο Τόκαμακ μόρια σκόνης του λιθίου όπως συμβαίνει με τα υπόλοιπα PFC [\[3,6\]](#).

Οι δυνάμεις που έχει να ισοσταθμίσει η πίεση του τριχοειδούς φαινομένου είναι οι ηλεκτρομαγνητικές δυνάμεις κατά την διάρκεια φαινομένου διαταραχής του πλάσματος. Γι' αυτό επιθυμείται να προκληθεί μέγιστη πίεση τριχοειδούς φαινομένου. Στο υπόλοιπο μέρος του μεταλλικού πλέγματος όμως επιθυμείται χαμηλή υδραυλική αντίσταση κατά την ροή του λιθίου για να ανακυκλωθεί και να μεταφέρει τις μεγάλες ποσότητες θερμότητας. Οπότε οι διατάξεις του πλέγματος κατασκευάζονται με μεγάλους πόρους στο εσωτερικό τάξεως 50-100  $\mu\text{m}$  αλλά στην εξωτερική επιφάνεια πυκνώνει η πλέξη για μείωση μεγέθους του πόρου σε περίπου 15  $\mu\text{m}$ , ώστε να ενισχυθεί η ιδιότητα της επιφανειακής τάσης [\[4,6\]](#).

Στα πειράματα που ερευνήθηκαν, ένα σύστημα υγρού λιθίου σε CPS εμφάνισε τις εξής ιδιότητες. Πρώτον η θερμική αγωγιμότητα του PFC ήταν 5 με 6 φορές υψηλότερη από ένα μέταλλο σε στερεή κατάσταση. Η θερμοκρασία της εξωτερικής επιφάνειας που θα προκαλέσει λιώσιμο του συλλέκτη είναι μιάμιση με δυο φορές μεγαλύτερη από τις θερμοκρασίες που θα αρχίσει να λιώνει ένα στερεό μέταλλο. Η αντοχή του συστήματος είναι 3 με 6 φορές μεγαλύτερη δείχνοντας ανθεκτικότητα σε θερμικές τάσεις εντός του συλλέκτη. Επίσης ο συντελεστής θερμικής διαστολής του συστήματος αποδείχθηκε 4 φορές μικρότερος από τα υπόλοιπα υλικά. Τέλος οι απώλειες ραδιενέργειας είναι αρκετές φορές χαμηλότερες από τα υπόλοιπα υλικά [\[8\]](#).

Η ιδιότητα να επαναφέρεται στην ακριβώς ίδια θέση έπειτα από μία διαταραχή του πλάσματος και η δυνατότητα να απορροφάει την ενέργεια τέτοιων κυμάτων χωρίς σοβαρές καταστροφές καθιστούν την τεχνολογία του CPS σαν πρώτη επιλογή ως PFC. Η χαμηλή παραγωγή ραδιενεργών στοιχείων, η αντοχή σε διόγκωση του υλικού και ταυτόχρονη αύξηση της πυκνότητας (neutron-induced swelling) του έπειτα από βομβαρδισμό νετρονίων προς αυτό κατά την πυρηνική αντίδραση είναι δύο ακόμη πλεονεκτήματα της χρήσης του λιθίου .

Για τον περιορισμό της διαφυγής λιθίου στο πλάσμα χρειάζεται επαρκής ενεργή ψύξη του συλλέκτη ώστε να διατηρείται η θερμοκρασία της εξωτερικής επιφάνειας σε τιμές έως 500-550°C. Η μεγάλη θερμορροή επίσης έχει δείχθει ότι επιδρά αρνητικά στην ποιότητα επιφάνειας του divertor του Τόκαμακ και για να αποφευχθεί ενδείκνυται η χρήση βολφραμίου ή μολυβδαινίου ως υλικών του λεπτού δικτυώματος του πλέγματος [\[8\]](#).

Ένα ακόμη φαινόμενο κατά την εφαρμογή του εν λόγω συστήματος είναι η ακτινοβολία ιόντων λιθίου που έχουν διασπαρθεί ή εξατμιστεί από την θερμαινόμενη υγρή επίστρωση

λιθίου και τα οποία θα παίξουν τον ρόλο μιας προφυλακτικής κουβέρτας που επανακτινοβολεί ενέργεια προς το πλάσμα και ως αποτέλεσμα βοηθάει στην εξομάλυνση θερμorroή προς το Πρώτο Τείχος του Τόκαμακ [5].

Η ασυμβατότητα του υγρού λιθίου με νερό προκαλεί αδύνατη μια άμεση ψύξη του λιθίου μέσω της επαφής του με νερό. Συνεπώς χρειάζεται η επιλογή διαφορετικού λειτουργούντος μέσου ώστε να επιτευχθεί η ενεργή ψύξη του συστήματος [2].

Σ έναν περιοριστή Λιθίου η πιο ψυχρή επιφάνεια του έχει την δυνατότητα συμπύκνωσης και συλλογής των ιόντων λιθίου που χουν διαχυθεί στο πλάσμα κατά την επαφή του περιοριστή με αυτό. Οι δυνάμεις επιφανειακής τάσης θα ωθήσουν άτομα λιθίου μέσα στο CPS ώστε να καλύψουν τις απώλειες στο σημείο πρόσκρουσης με τον περιοριστή [6].

Το τρίτιο που χει συσσωρευτεί στο υγρό λίθιο μπορεί να ελέγχεται και να διαχωρίζεται από αυτό μέσω μιας μικρής επανακυκλοφορίας Λιθίου από και προς το CPS διατηρώντας σε χαμηλό επίπεδο τη συγκέντρωση Τριτίου και έτσι διατηρώντας καλύτερη συμπεριφορά του Λιθίου. Όταν υπάρχουν ακαθαρσίες στο λίθιο παρατηρήθηκε ότι μειώνεται η ισχύς της επιφανειακής τάσης [2].

Λόγω της δημιουργίας στρώματος ιόντων λιθίου ανάμεσα στο πλάσμα και στην επιφάνεια του PFC η ποσότητα ενέργειας που φτάνει στην εξωτερική επιφάνεια είναι μόλις 7% της ενέργειας που εκλύεται κατά την διαταραχή του πλάσματος καθώς το μεγαλύτερο μέρος προσλαμβάνεται από το στρώμα ιόντων και επανακτινοβολείται στο πλάσμα. Το αποτέλεσμα είναι να προστατεύεται η εξωτερική επιφάνεια και όλο το CPS από μεγάλες θερμorroές και θερμοκρασίες. Αντιστοίχως όμως κατά την περίπτωση μιας φυσιολογικής εκκένωσης του πλάσματος η ενέργεια που μπορεί να δεχτεί το CPS φτάνει στο 50% δείχνοντας μια εξαιρετική απορρόφηση θερμότητας. Όμως είναι σημαντικό η παραπάνω σταθεροποιητική λειτουργία της εξάτμισης του λιθίου να μην ξεπερνάει ένα μέγιστο επιτρεπτό όριο προκειμένου να αποφευχθεί η μόλυνση του πυρήνα του αντιδραστήρα και η αποσταθεροποίηση του πλάσματος. Τέλος, πρέπει να αναφερθεί ότι δεν επιτυγχάνεται μεγάλη ανακύκλωση του υδρογόνου κατά την χρήση λιθίου ως PFC.

## 2.4 Υποθέσεις

Κατά την ανάλυση του προβλήματος και την μετάφρασή του σε μαθηματικές εξισώσεις επιλέχθηκαν συγκεκριμένες υποθέσεις για την απλοποίησή του σε πιο επιλύσιμη μορφή. Αρχικά η επίπεδη στερεή εξωτερική επιφάνεια του πλέγματος του PFC θεωρείται ομοιόμορφο τοίχωμα και όχι δικτυωτό μεταλλικό πλέγμα που δημιουργεί πόρους. Αυτό προκύπτει από το γεγονός ότι η σταγόνα η σταγόνα θεωρείται μεγέθους αρκετά μεγαλύτερου των πόρων του πλέγματος ώστε να καλύπτει όλη την στερεή επιφάνεια του PFC. Συγκεκριμένα θεωρούμε ότι η σταγόνα καλύπτει όλη την εξωτερική επιφάνεια του πλέγματος η οποία εκλαμβάνεται ως ένα επίπεδο τοίχωμα, και διενεργούμε παραμετρική μελέτη σαν συνάρτηση της διαφοράς πίεσης μεταξύ του reservoir που παρέχει το λίθιο και του περιβάλλοντος πλάσματος.

Μια δεύτερη υπόθεση χρειάστηκε για τον συντελεστή επιφανειακής τάσης  $\sigma$  του λιθίου καθώς πειραματικά αποδείχθηκε ότι η συνθήκη που το επηρεάζει είναι η θερμοκρασία με αποτέλεσμα να μειώνεται όσο αυξάνεται η θερμοκρασία του υγρού λιθίου και έτσι



εξασθενούν οι επιφανειακές δυνάμεις. Στο πρόβλημα το υλικό θεωρείται σταθερής θερμοκρασίας και επομένως η επιφανειακή τάση λαμβάνεται ως σταθερά.

Επίσης μια σημαντική αλλαγή του εξεταζόμενου προβλήματος σε σχέση με το πραγματικό είναι η παράβλεψη των ηλεκτρομαγνητικών δυνάμεων που προκαλούνται από τη λειτουργία του Τόκαμακ και οι υδρομαγνητικές δυνάμεις που παρατηρούνται εξαιτίας της κίνησης των ιόντων του πλάσματος οι οποίες είναι τυχαίες σε κατεύθυνση και ένταση, ενώ εμφανίζουν πολύ μεγάλες κορυφώσεις της έντασης του μαγνητικού πεδίου που δημιουργούν. Τέλος, πρέπει να αναφερθεί ότι οι διαμοριακές δυνάμεις που αναπτύσσονται μεταξύ του πλέγματος και του υγρού λιθίου θεωρούνται αμελητέες. Ωστόσο σε μεγέθη σταγόνας της τάξης των μικρών ή λιγότερο μπορούν να επηρεάσουν την συμπεριφορά της ισορροπίας και της μορφής της σταγόνας και δεν θα πρέπει να θεωρούνται αμελητέες.

## 2.5 Σκοπός της Έρευνας

Η επιλογή του συγκεκριμένου θέματος έγινε ώστε να υπολογισθεί το κρίσιμο μέγεθος όγκου υγρού και το ανάλογο σχήμα της διεπιφάνειας, πέραν του οποίου θα αναστραφεί μια σταγόνα υγρού λιθίου που ισορροπεί σε μια επίπεδη στερεή επιφάνεια, όταν η διευθέτηση της τελευταίας αλλάξει και από οριζόντια μετατραπεί σε κατακόρυφη στερεή επίπεδη επιφάνεια. Από ένα μέγεθος και έπειτα το υγρό θα χάσει όγκο και δεν θα στέκεται πάνω στο πλέγμα για το συγκεκριμένο πρόβλημα. Θα βρεθεί το μέγιστο μήκος ανωτέρου και κατωτέρου σημείου σταγόνας στο οποίο συγκρατείται το υγρό και η επίλυση μπορεί να επιτευχθεί με τις συγκεκριμένες τεχνικές που θα αναπτυχθούν στην συνέχεια. Με την ισορροπία δυνάμεων θα βρεθεί το τελικό σχήμα που σχηματίζεται χρησιμοποιώντας σφαιρικές συντεταγμένες στο σύστημα. Η εμφάνιση απόκλισης από σταγόνα μορφής σφαίρας θα αποδείξει από τι μέγεθος σταγόνας και έπειτα οι δυνάμεις βαρύτητας παίζουν ρόλο στην ισορροπία της σταγόνας του υγρού λιθίου.

## 3. Σχεδιασμός και Μεθοδολογία του Προβλήματος

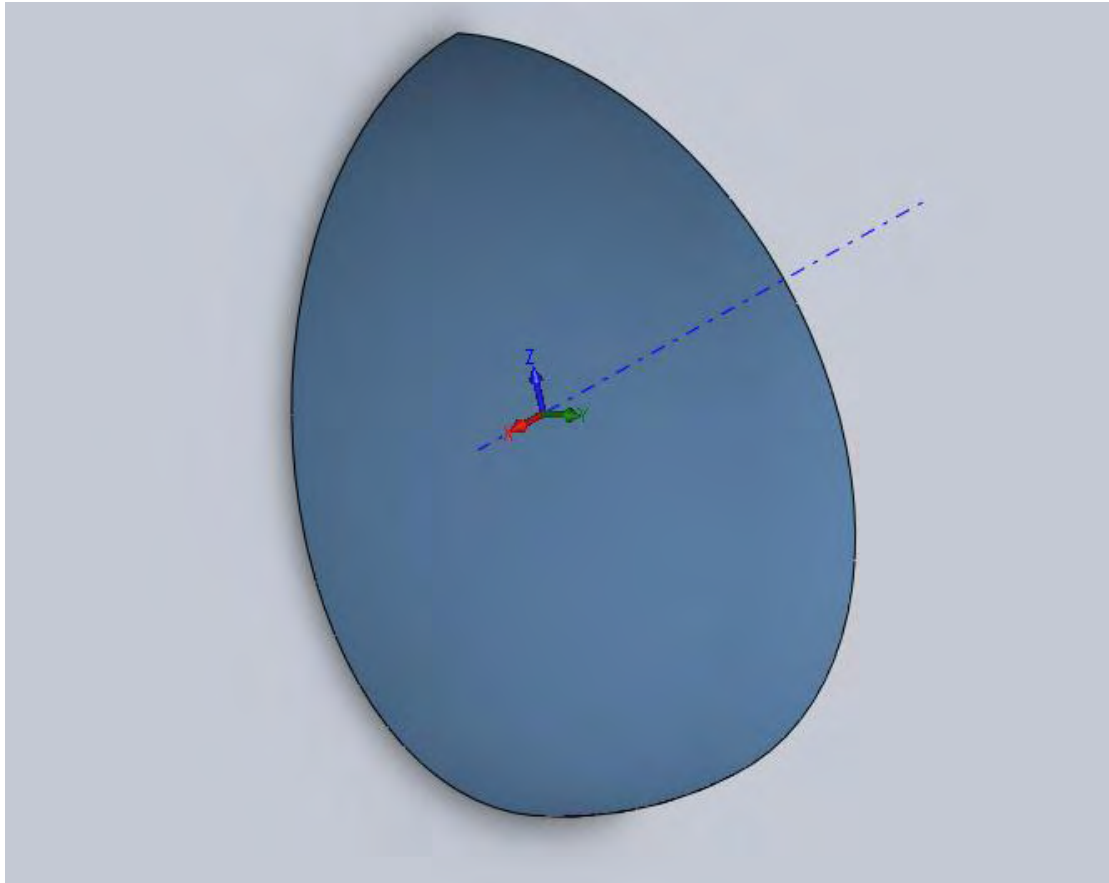
### 3.1 Μοντελοποίηση του Προβλήματος

#### 3.1.1. Φυσικές Εξισώσεις του Προβλήματος

Στο φυσικό πρόβλημα της σταγόνας που δημιουργείται στην διεπιφάνεια του υγρού λιθίου με το πλάσμα οι δυνάμεις που δρουν είναι οι δυνάμεις πίεσης, βαρύτητας και οι δυνάμεις λόγω επιφανειακής τάσης του υγρού. Για την ισορροπία και στήριξη της σταγόνας πρέπει αυτές να ισορροπούν σε κάθε σημείο της όπως και στο σύνολο τους.

Επομένως το κάθετο ισοζύγιο τάσεων είναι το ακόλουθο:

$$(P_{in} - P_{out})\vec{n} + 2H\sigma\vec{n} = 0 \quad (1)$$



Σχήμα 3. Άξονες στον χώρο και επιφάνεια της σταγόνας στην μισή ημισφαιρική μορφή όπως θα εξεταστεί

Όπου  $P_{in}$  και  $P_{out}$  είναι η εσωτερική πίεση και η εξωτερική πίεση στην διεπιφάνεια,  $H$  είναι η μέση κυρτότητα της επιφάνειας  $dA$ ,  $\sigma$  η επιφανειακή τάση σε μονάδες Πασκάλ (Pa) επί μέτρα (m) και  $\vec{n}$  το διανυσμα καθετο στην απειροστη επιφάνεια. Στο κεντρικό σημείο του συστήματος η πίεση είναι  $P_0$  και μεταβάλλεται ανάλογα με το ύψος του σημείου της διεπιφάνειας  $z$  από αυτό το σημείο, λόγω της βαρύτητας ( $\rho g z$ ). Επειδή η επίλυση θα γίνει σε σφαιρικές συντεταγμένες ισχύει ότι το ύψος  $z$  ισούται με:  $z = R \cos \theta$

Επομένως:  $P_{in} = P_0 - \rho g z$

ή  $P_{in} = P_0 - \rho g R \cos \theta$

και με αντικατάσταση στην εξίσωση δυνάμεων(1):

$$(P_0 - \rho g z - P_{out})\vec{n} + 2H\sigma\vec{n} = 0$$

Ορίζοντας σύστημα καρτεσιανών συντεταγμένων, ως κατακόρυφος άξονας τίθεται ο  $z$  και ως κάθετος στην επιφάνεια ο  $y$ . Ο τρίτος οριζόντιος άξονας και παράλληλος στην επιφάνεια είναι ο  $x$ . Οι δυνάμεις που δέχεται η επιφάνεια είναι η δύναμη διαφοράς πιέσεων στην διεπιφάνεια υγρού-κενού και οι δυνάμεις επιφανειακής τάσης.

Η δύναμη διαφοράς πιέσεων είναι κάθετη στην επιφάνεια, όπως και οι δυνάμεις επιφανειακής τάσης, οι οποίες κατευθύνονται προς στην εσωτερική μεριά της επιφάνειας του υγρού και έχουν στόχο την ελαχιστοποίηση του μεγέθους της εκτεθειμένης επιφάνειας.

### 3.1.2 Υπολογισμός Όρων Εξίσωσης Δύναμης Με Ανάλυση Γεωμετρίας

Για την κατασκευή των εξισώσεων για τα πεπερασμένα στοιχεία όπως θα εξηγηθεί στην συνέχεια, πολλαπλασιάζεται μια συνάρτηση βάρους στην εξίσωση δυνάμεων. Θα αναλυθεί στην συνέχεια η σημασία της. Έπειτα πολλαπλασιάζονται επί την απειροστή επιφάνεια και ολοκληρώνουμε σε όλο το μήκος της επιφάνειας A.

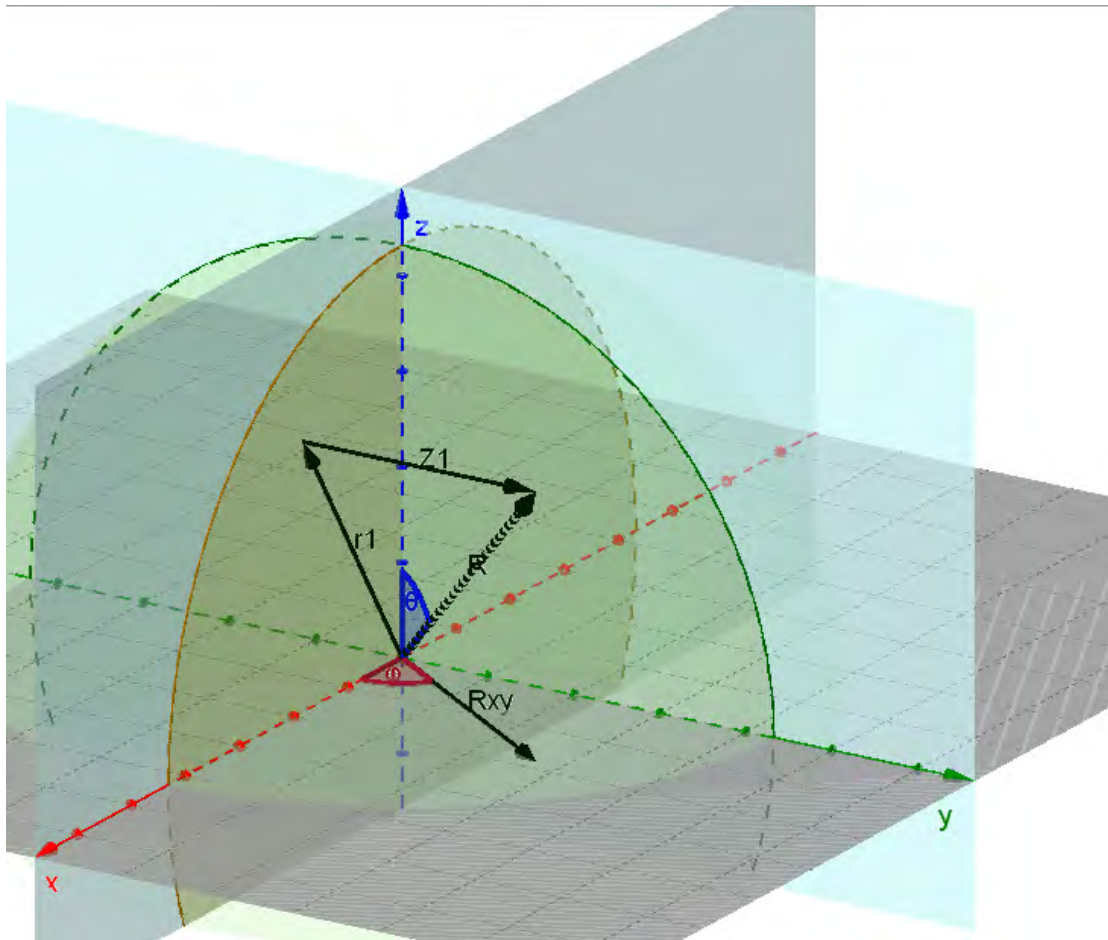
$$B_i(P_0 - \rho g z - P_{\text{out}})\vec{n} + 2H\sigma B_i\vec{n} = 0$$

$$\iint_{A_{\text{tot}}} B_i(P_0 - \rho g R \cos\theta - P_{\text{out}})\vec{n} dA + \iint_{A_{\text{tot}}} 2H\sigma B_i\vec{n} dA = 0 \quad (2)$$

Σύμφωνα με την μαθηματική θεωρία μέσης κυρτότητας επιφανειών όταν πολλαπλασιάζεται με κάποια διανυσματική συνάρτηση και ολοκληρώνεται για όλη την επιφάνεια ισχύει ότι:

$$\iint_A 2Hf\vec{n} dA = \oint_{\partial S} \vec{m}f dl - \iint_A \vec{\nabla}_s f dA$$

όπου το  $\vec{n}$  είναι το μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα της απειροστής επιφάνειας, ενώ  $\vec{m}$  είναι το μοναδιαίο εφαπτομενικό διάνυσμα στα όρια της επιφάνειας που έχει κατεύθυνση εφαπτομενικά προς τα έξω από την επιφάνεια. Το  $\vec{\nabla}_s$  ορίζεται ως το επιφανειακό ανάδελτα μιας μη διανυσματικής, βαθμωτής συνάρτησης (Surface Gradient) και θα αναλυθεί στην συνέχεια, ενώ f είναι μια οποιαδήποτε βαθμωτή συνάρτηση. Στο πρόβλημα μας θα επιλεγεί  $f=B_i\sigma$



Σχήμα 4. Διανύσματα στο χώρο και γωνίες  $\theta, \phi$  που καθορίζουν την θέση των σημείων της επιφάνειας

Το  $dS$  είναι το συνολικό όριο μιας επιφάνειας  $S$ , το οποίο στην γενική περίπτωση είναι μια καμπύλη στο χώρο. Στην δικιά μας περίπτωση ορίζεται από την τομή της επιφάνειας με τον τοίχο, όπως και με το επίπεδο συμμετρίας που ορίζουν οι άξονες  $Y$  και  $Z$ . Η επιλογή των συντεταγμένων έγινε σε σφαιρικές ώστε να είναι σταθερή η  $\phi$  στις δυο καμπύλες που ορίζουν το όριο. Συγκεκριμένα στην καμπύλη  $dS_1$ , δηλαδή στην επαφή με τον τοίχο το  $\phi=0$ , ενώ στην καμπύλη  $dS_2$  με το επίπεδο συμμετρίας  $YZ$ , το  $\phi = 90$  μοίρες.

$$\text{ισχύει ότι } \oint_{dS} \vec{m}B_i \sigma dl = \int_{dS_1} \vec{m}B_i \sigma dl_1 + \int_{dS_2} \vec{m}B_i \sigma dl_2 \quad (3) .$$

Έτσι θα παραχθεί η παρακάτω εξίσωση διανυσμάτων αντικαθιστώντας την (3) στην (2):

$$\iint_{A_{tot}} B_i (P_0 - \rho g R \cos \theta - P_{out}) \vec{n} dA + \int_{dS_1} \vec{m}B_i \sigma dl_1 + \int_{dS_2} \vec{m}B_i \sigma dl_2 - \iint_{A_{tot}} \vec{\nabla}_s (\sigma B_i) \vec{n} dA = 0 \quad (4)$$

Οι συνοριακές συνθήκες βγαίνουν από την φύση του προβλήματος. Λόγω της επιλογής σφαιρικού συστήματος, τα σημεία  $\theta=0$  και  $\theta=\pi$  αντίστοιχα, είναι σημεία στα οποία το  $\phi$  μπορεί να μεταβληθεί από 0 έως  $\pi/2$  αλλά και πάλι θα αντιστοιχεί στο ίδιο σημείο, το οποίο μάλιστα θα είναι γνωστής απόστασης  $R$  από το κέντρο, που θα δίνεται εξ' αρχής και δεν θα μπορεί να μεταβληθεί κατά την υπολογιστική επίλυση του προβλήματος. Στον άξονα των  $\phi$  έχουμε δυο δεδομένα στα άκρα που θα απλοποιήσουν την μορφή του προβλήματος.

Για  $\phi=0$  η γωνιά επαφής  $\theta_{CA}$  της σταγόνας με τον τοίχο θεωρείται ότι έχει μια σταθερή τιμή που δίνεται εξ αρχής. Για γωνιά  $\phi=\pi/2$  γνωρίζουμε ότι υπάρχει συμμετρία της επιφάνειας στο συγκεκριμένο επίπεδο με αποτέλεσμα το  $\vec{m}$  να είναι εφαπτομενικό στην επιφάνεια και κάθετο στην επιφάνεια συμμετρίας.

Το αποτέλεσμα των συγκεκριμένων συνοριακών συνθηκών για το  $\phi$  είναι να προτιμήσουμε την εξίσωση της διανυσματικής εξίσωσης για τις συνιστώσες των διανυσμάτων στον άξονα  $y$ , όπου το  $\vec{m}$  στο  $\phi=\pi/2$  έχει μηδενική συνιστώσα στον  $y$ , επειδή είναι κάθετο και είναι συμμετρικό το σχήμα ως προς αυτόν τον άξονα. Επίσης στο  $\phi=0$  η συνιστώσα του  $\vec{m}$  είναι άμεσα εξαρτημένη από την γωνιά επαφής, που είναι σταθερή κατά μήκος του  $\theta$  και την γνωρίζουμε. Αυτό επιτυγχάνεται πολλαπλασιάζοντας όλη την εξίσωση (4) με  $\vec{e}_y$ .

$$\iint_{A_{tot}} B_i(P_0 - \rho g R \cos\theta - P_{out})n_y dA + \int_{dS_1} m_y B_i \sigma dl_1 + \int_{dS_2} m_y B_i \sigma dl_2 - \iint_{A_{tot}} \vec{\nabla}_s(\sigma B_i) \cdot \vec{e}_y dA = 0 \quad (5)$$

Από αυτή την εξίσωση αυτά που γνωρίζουμε είναι η πυκνότητα  $\rho$  του υγρού, η επιτάχυνση βαρύτητας  $g$ , η εξωτερική πίεση από την επιφάνεια  $P_{out}$ , και η επιφανειακή τάση  $\sigma$  του υγρού. Τα υπόλοιπα μέρη της εξίσωσης θα αναλυθούν συναρτήσει των  $R, \theta$  και  $\phi$ . Συγκεκριμένα το  $R$  είναι η απόσταση του κάθε σημείου από το κέντρο των αξόνων. Κανονικά είναι μεταβλητή ανεξάρτητη του συστήματος μας. Ωστόσο επειδή τα σημεία όλα μαζί υποδηλώνουν μια επιφάνεια, τότε χρειάζονται μονάχα δυο ανεξάρτητες χωρικές μεταβλητές για την περιγραφή της με αποτέλεσμα το  $R$  να ισούται  $R = R(\theta, \phi)$

Με χρήση της αναλυτικής γεωμετρίας θα υπολογιστούν τα υπόλοιπα μέρη της εξίσωσης. Το διάνυσμα θέσης κάθε σημείου της επιφάνειας ορίζεται ως  $\vec{r} = R(\theta, \phi)\vec{e}_r$  ή σε καρτεσιανές συντεταγμένες  $\vec{r} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z$ . Ο ορισμός για το μοναδιαίο διάνυσμα το κάθετο στην επιφάνεια  $\vec{n}$  σε σφαιρικές συντεταγμένες είναι  $\vec{n} = \frac{\vec{r}_\theta \times \vec{r}_\phi}{|\vec{r}_\theta \times \vec{r}_\phi|}$ , όπου  $\vec{r}_\theta = R_\theta(\theta, \phi)\vec{e}_r + R(\theta, \phi)\vec{e}_\theta$  και  $\vec{r}_\phi = R_\phi(\theta, \phi)\vec{e}_r + R(\theta, \phi)\sin\theta\vec{e}_\phi$  είναι τα εφαπτομενικά διανύσματα της επιφάνειας, ενώ  $R_\theta, R_\phi$  είναι οι παραγωγοί της συναρτήσεως  $R$  ως προς τα  $\theta$  και  $\phi$  αντίστοιχα. Οπότε εκτελώντας τους υπολογισμούς:

$$\vec{r}_\theta \times \vec{r}_\phi = R^2 \sin\theta \vec{e}_r - RR_\theta \sin\theta \vec{e}_\theta - RR_\phi \vec{e}_\phi$$

και

$$\vec{n} = \frac{\vec{r}_\theta \times \vec{r}_\phi}{|\vec{r}_\theta \times \vec{r}_\phi|} = \frac{R^2 \sin\theta \vec{e}_r - RR_\theta \sin\theta \vec{e}_\theta - RR_\phi \vec{e}_\phi}{R \sin\theta \sqrt{R^2 + R_\theta^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2\theta}}} \quad (6)$$

Για τον υπολογισμό των επιφανειακών ολοκληρωμάτων ως προς τα  $\theta$  και  $\phi$  πρέπει να υπολογιστεί η απειροστή επιφάνεια ως προς το γινόμενο  $d\theta d\phi$ . Εξ ορισμού είναι η επιφάνεια που δημιουργείται από το εμβαδόν των  $\vec{r}_\theta d\theta$  επι εξωτερικό γινόμενο  $\vec{r}_\phi d\phi$

δηλαδή:

$$dA = \left| \vec{r}_\theta \times \vec{r}_\phi \right| d\theta d\phi = R \sin\theta \sqrt{R^2 + R_\theta^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2\theta}} d\theta d\phi \quad (7)$$

Με την ίδια λογική για τα επικαμπύλια ολοκληρώματα η απειροστή καμπύλη  $dl_1$  στην οποία υπολογίζεται το ολοκληρωμα, σε σχέση με μια απειροστή διαφορά  $d\theta$  είναι το μετρο του  $\vec{r}_\theta d\theta$ ,  $\left| \vec{r}_\theta d\theta \right|$ , δηλαδή:

$$dl_1 = \sqrt{R^2 + R_\theta^2} d\theta \quad (8)$$

Από την αναλυτική γεωμετρία είναι γνωστό ότι για το μοναδιαίο διάνυσμα του άξονα  $\gamma$  ισχύει:

$$\vec{e}_y = \sin\theta \sin\phi \vec{e}_r + \cos\theta \sin\phi \vec{e}_\theta + \cos\phi \vec{e}_\phi$$

Για την συνιστώσα του  $\vec{n}$  στον άξονα  $\gamma$  υπολογίζεται η προβολή της ως προς τον άξονα με αποτέλεσμα

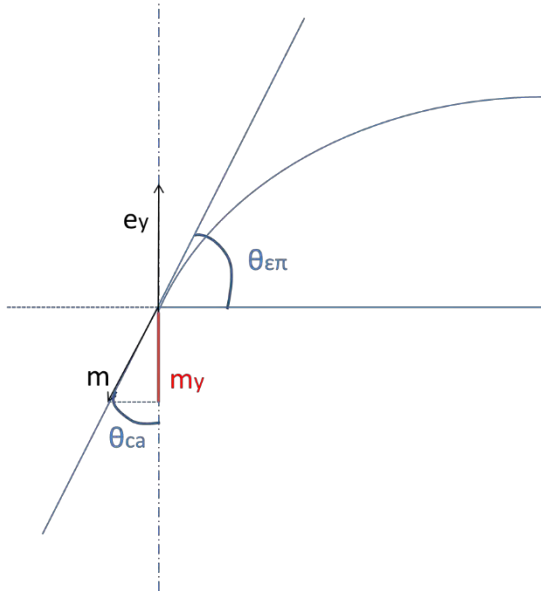
$$n_y = \vec{n} \cdot \vec{e}_y = \frac{R^2 \sin^2\theta \sin\phi - RR_\theta \sin\theta \cos\theta \sin\phi - RR_\phi \cos\phi}{R \sin\theta \sqrt{R^2 + R_\theta^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2\theta}}} \quad (9)$$

Για την συνιστώσα του  $\vec{m}$ , υπολογίζεται η προβολή ως το εσωτερικό γινόμενο με το μοναδιαίο  $\vec{e}_y$ . Επειδή και τα δυο διανύσματα είναι μοναδιαίο, δηλαδή έχουν μέτρο μονάδα, χρησιμοποιείται ο τύπος με το συνημίτονο της ενδιάμεσης γωνίας  $\theta_{ca}$ , για την οποία ξέρουμε από την γεωμετρία ότι είναι συμπληρωματική της γνωστής γωνίας επαφής  $\theta_{\epsilon\pi}$ .

$$m_y = \vec{m} \cdot \vec{e}_y = \left| \vec{m} \right| \left| \vec{e}_y \right| \cos\theta_{ca} = \cos\theta_{ca} \quad (10)$$

Από την γεωμετρία των διανυσματων για το συνημιτονο θα ισχυει ότι:

$$\cos\theta_{ca} = -\cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta_{\epsilon\pi}\right)$$



Σχήμα 5. Σχέση γωνίας επαφής της σταγόνας με το τοίχωμα και γωνίας του επαπτομενικού διανύσματος  $m$  με τον άξονα  $y$

Το επιφανειακό ανάδελτα είναι ένα διανυσματικό ανάδελτα, που ενεργεί κατά μήκος μιας επιφάνειας. Σύμφωνα με τον ορισμό το επιφανειακό ανάδελτα μιας συνάρτησης υπολογίζεται ως

$$\vec{\nabla}_s(f) = \vec{\nabla}(f) - \vec{n} \left( \vec{n} \cdot \vec{\nabla}(f) \right)$$

Ωστόσο έπειτα από πράξεις και έχοντας θεωρήσει πρώτη διανυσματική παραγωγό αυτή του  $\theta$  για τον υπολογισμό του  $\vec{n}$  καταληγουμε στην:

$$\vec{\nabla}_s = \vec{a}_1 \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{a}_2 \frac{\partial}{\partial \phi}$$

ώπου τα  $\vec{a}_1$  και  $\vec{a}_2$  θέτονται ως:  $\vec{a}_1 = \frac{\vec{r}_\phi \times \vec{n}}{|\vec{r}_\theta \cdot \vec{r}_\phi \times \vec{n}|}$ ,  $\vec{a}_2 = \frac{\vec{n} \times \vec{r}_\theta}{|\vec{r}_\theta \cdot \vec{r}_\phi \times \vec{n}|}$

Οπότε γνωρίζοντας τα διανύσματα του επιφανειακού ανάδελτα και του μοναδιαίου του άξονα  $Y$  σε σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων, μπορεί να γίνουν οι πράξεις για τον όρο της εξίσωσης μας(5):

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}_s(B_i) \cdot \vec{e}_y = & \left( \sin\theta \sin\phi \left( R R_\theta \sin\theta \frac{\partial B_i}{\partial \theta} + R \frac{R_\phi}{\sin\theta} \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \right. \\ & + \cos\theta \sin\phi \left( \left( R^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2\theta} \right) \sin\theta \frac{\partial B_i}{\partial \theta} - R_\theta \frac{R_\phi}{\sin\theta} \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \\ & \left. + \cos\phi \left( -R_\theta R_\phi \frac{\partial B_i}{\partial \theta} + (R^2 + R_\theta^2) \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \right) / \left( R \sin\theta \left( R^2 + R_\theta^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2\theta} \right) \right) \end{aligned}$$

(11)

Αφού έχουν βρεθεί όλοι οι οροί της εξίσωσης(5), αντικαθιστώντας τους (7)-(11) προκύπτει η εξίσωση που έχουμε να επιλύσουμε με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων. Όμως η τελική που αναγράφεται προκύπτει έπειτα από την απλοποίηση του ορού  $dA = R \sin \theta \sqrt{R^2 + R_\theta^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2 \theta}} d\theta d\phi$  με αυτούς των άλλων δυο βασικών ορων, δηλαδή

$$\iint_A B_i (P_0 - \rho g R \cos \theta - P_{\text{out}}) n_y dA - \iint_A \sigma \vec{\nabla}_s(B_i) \cdot \vec{e}_y dA + \int_{ds_1} m_y B_i \sigma dl_1 = 0 \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} & \iint_A B_i (P_0 - \rho g R \cos \theta - P_{\text{out}}) \frac{R^2 \sin^2 \theta \sin \phi - R R_\theta \sin \theta \cos \theta \sin \phi - R R_\phi \cos \phi}{R \sin \theta \sqrt{R^2 + R_\theta^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2 \theta}}} R \sin \theta \sqrt{R^2 + R_\theta^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2 \theta}} d\theta d\phi \\ & - \iint_A \sigma \left( \sin \theta \sin \phi \left( R R_\theta \sin \theta \frac{\partial B_i}{\partial \theta} + R \frac{R_\phi}{\sin \theta} \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \right. \\ & + \cos \theta \sin \phi \left( \left( R^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2 \theta} \right) \sin \theta \frac{\partial B_i}{\partial \theta} - R_\theta \frac{R_\phi}{\sin \theta} \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \\ & \left. + \cos \phi \left( -R_\theta R_\phi \frac{\partial B_i}{\partial \theta} + (R^2 + R_\theta^2) \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \right) \\ & / \left( R \sin \theta \left( R^2 + R_\theta^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2 \theta} \right) \right) R \sin \theta \sqrt{R^2 + R_\theta^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2 \theta}} d\theta d\phi \\ & + \int_{ds_1} \cos \theta_{ca} B_i \sigma \sqrt{R^2 + R_\theta^2} d\theta = 0 \end{aligned}$$

Η παραπάνω σχέση με τις απλοποιήσεις δίνει το πρώτο Υπόλοιπο (Residual) του προβλήματος μας για  $i$  από 1 έως N που αντιστοιχεί στο σύνολο σημείων που δημιουργείται από το πλέγμα σε  $\theta$  και  $\phi$ .



$$\begin{aligned}
\text{Res}1_i = & \iint_A B_i (P_0 - \rho g R \cos\theta - P_{\text{out}}) (R^2 \sin^2\theta \sin\phi - R R_\theta \sin\theta \cos\theta \sin\phi - R R_\phi \cos\phi) \\
& - \sigma \left[ \sin\theta \sin\phi \left( R R_\theta \sin\theta \frac{\partial B_i}{\partial \theta} + R \frac{R_\phi}{\sin\theta} \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \right. \\
& + \cos\theta \sin\phi \left( \left( R^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2\theta} \right) \sin\theta \frac{\partial B_i}{\partial \theta} - R_\theta \frac{R_\phi}{\sin\theta} \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \\
& \left. + \cos\phi \left( -R_\theta R_\phi \frac{\partial B_i}{\partial \theta} + (R^2 + R_\theta^2) \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \right] \frac{1}{\sqrt{R^2 + R_\theta^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2\theta}}} d\theta d\phi \\
& + \int_{ds_1} \cos\theta_{ca} B_i \sigma \sqrt{R^2 + R_\theta^2} d\theta = 0
\end{aligned}
\tag{12}$$

### 3.1.3 Εξίσωση Διατήρησης Όγκου

Στο συγκεκριμένο πρόβλημα που χτίζεται για επίλυση υπάρχουν N εξισώσεις με N-2ηρη άγνωστα  $R_i$  (είναι γνωστά για  $\theta=0$  και  $\theta=\pi$  κατά μήκος του  $\phi$ ) και μια άγνωστη εσωτερική πίεση  $P_0$  στο κέντρο. Για αυτή την άγνωστη πίεση χρειάζεται μια ακόμη εξίσωση που να ισχύει ταυτόχρονα. Επιλέγεται η εξίσωση διατήρησης της μάζας, η οποία ωστόσο ανάγεται σε εξίσωση διατήρησης του όγκου υποθέτοντας ότι το υγρό είναι ασυμπίεστο για σταθερή θερμοκρασία. Έτσι ο όγκος του υγρού είναι σταθερός και αποτελεί δεδομένο του προβλήματος. Ο υπολογισμός του όγκου για μια οποιαδήποτε επιφάνεια στο χώρο γίνεται ως εξής:

$$V = \iiint_V r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi,$$

με το  $r$  να πηγαίνει από 0 έως την τελική απόσταση της επιφάνειας  $R=R(\theta, \phi)$ . Οπότε ολοκληρώνοντας ως προς το  $r$ , συνεπάγεται ότι ο όγκος της σταγόνας υπολογίζεται από το ολοκλήρωμα:

$$V = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^\pi \frac{R^3}{3} \sin\theta d\theta d\phi$$

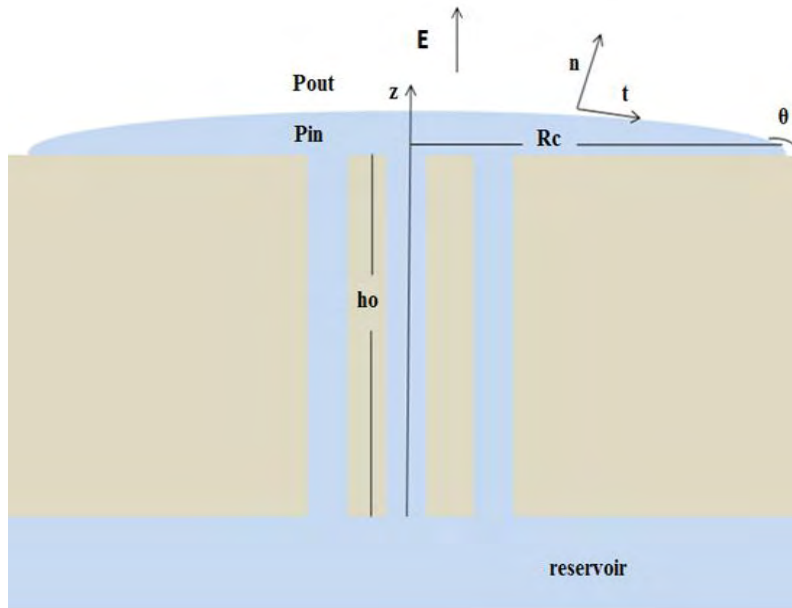
Για την περίπτωση σφαιρικής σταγόνας που προσκολλάται στο επίπεδο με γωνία  $\theta$  ο όγκος δίδεται από την σχέση

$$V = \frac{4\pi R_0^3}{3} \left[ 1 - \frac{3}{2} \cos\theta_{\varepsilon\pi} + \frac{\cos^3\theta_{\varepsilon\pi}}{2} \right] \xrightarrow{R_{St}/R_0 = \sin\theta_{\varepsilon\pi}} V = \frac{4\pi R_{St}^3}{3 \sin^3\theta_{\varepsilon\pi}} \left[ 1 - \frac{3}{2} \cos\theta_{\varepsilon\pi} + \frac{\cos^3\theta_{\varepsilon\pi}}{2} \right]
\tag{13\alpha}$$

### 3.1.4 Το πρόβλημα της Σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο

Μια περίπτωση που σχετίζεται με το συγκεκριμένο πρόβλημα είναι η μορφή που θα πάρει η επιφάνεια του υγρού στις ειδικές συνθήκες του προβλήματος (ίδιο υγρό και ίδιες ιδιότητες του) αλλά στην περίπτωση που κάθετοι στην πάνω οριζόντια επιφάνεια ενός συστήματος τριχοειδών πόρων CPS και ο άξονας της δύναμης της βαρύτητας είναι κάθετος στο οριζόντιο επίπεδο στον οποίο δίνεται το όνομα  $Z1$ . Σ' αυτό το πρόβλημα η μορφή που θα πάρει η σταγόνα θα είναι συμμετρική ως προς τον κατακόρυφο άξονα και αρκούν δυο συντεταγμένες ενός σημείου της τομής για να δοθεί το συνολικό προφίλ της τομής και έπειτα να δημιουργηθεί από αυτό η επιφάνεια στον χώρο, λόγω συμμετρίας. Το συγκεκριμένο πρόβλημα λύθηκε για ισορροπία δυνάμεων βαρύτητας και επιφανειακής τάσης. Σαν φυσικά δεδομένα του δίνονται η γωνία επαφής  $\theta_{\text{επ}}$  που δημιουργεί η σταγόνα με το τοίχωμα, η πίεση της τροφοδότησης του υγρού  $P_0$ , και το βάθος από όπου τροφοδοτείται και είναι  $h_0$ .

Ο αλγόριθμος σε Fortran που το επιλύει, υπολογίζει για κάθε προβολή  $r1$  του σημείου της επιφάνειας στο επίπεδο, το ύψος  $Z1$  του σημείου, όπως και το μέγιστο σημείο ( $r1_{\text{max}}$ ) που θα επεκταθεί η σταγόνα ως προς το επίπεδο και το μεγαλύτερο ύψος που θα έχει κατά την τομή της επιφάνειας με τον άξονα  $Z1$ , το  $Z1_{\text{max}}$ . Το πρώτο δίνεται στο τελευταίο ζεύγος τιμών για  $Z1=0$  και το δεύτερο στο πρώτο ζεύγος τιμών για  $r1=0$  του αρχείου αποτελεσμάτων του προγράμματος. Τέλος το πρόβλημα εκτυπώνει και τον όγκο όλης της επιφάνειας ως προς γωνία  $\theta=2\pi$ , δηλαδή το σύνολο της επιφάνειας της σταγόνας που δημιουργείται. Επιθυμείται να διαβαστεί το συγκεκριμένο προφίλ, να μεταφραστεί σε σφαιρικές συντεταγμένες και να θεωρηθεί ως αρχική τιμή της απόστασης για τους κόμβους, όπως και αρχική τιμή της κεντρικής μας πίεσης. Τέλος ζητείται ο όγκος ρευστού που περιέχεται στο παραπάνω προφίλ να είναι δεδομένος. Επομένως όταν θα αναστραφεί το συγκεκριμένο υγρό από επίπεδο οριζόντιο σε κατακόρυφο, επιθυμείται να μην μεταβληθεί ο όγκος του και κατά συνέπεια η μάζα του, παρά μοναχά να παραμορφωθεί η επιφάνεια του σε μια άλλης μορφής σταγόνα, αλλά ίδια γωνία επαφής.



Σχήμα 6. Σταγόνα που προσφύεται σε εξωτερική επιφάνεια CPS και γεωμετρία αξονοσυμμετρικού

Στο πρόγραμμα εκτυπώνεται η πίεση στην βάση ανατροφοδότησης καθώς και η πίεση στο ύψος  $h_0$  που είναι το ύψος του κεντρικού σημείου της σταγόνας από το επίπεδο ανατροφοδότησης. Αυτή η πίεση που αντιστοιχεί στο δικό μας πρόβλημα είναι  $P_0 = P_R - \rho g h_0$

Μας ενδιαφέρει να δούμε παραμετρικά, σαν συνάρτηση της μειούμενης διαφοράς πίεσης,  $P_0 - P_{out}$ , μεταξύ της δεξαμενής τροφοδότησης του υγρού λιθίου και του περιβάλλοντος αερίου, την αλλαγή του σχήματος της σταγόνας που καλύπτει την εξωτερική επιφάνεια του CPS και να βρούμε την κρίσιμη τιμή της πίεσης  $P_r$  κάτω της οποίας η βαρύτητα παίζει σημαντικό ρόλο με αποτέλεσμα, πέραν μίας κρίσιμης τιμής, η επιφανειακή τάση να αδυνατεί να συγκρατήσει την σταγόνα. Για να διευκολυνθεί η παραμετρική μελέτη θα χρησιμοποιηθεί η αύξηση του όγκου της σταγόνας που προσκολλάται στην στερεά επιφάνεια σαν ελεύθερη παράμετρος, αντί της μείωσης της υπερπίεσης στην αποθήκη τροφοδότησης.

## 3.2 Αριθμητική Μέθοδος

### 3.2.1 Πεπερασμένα Στοιχεία

Η μέθοδος βασίζεται στον διαχωρισμό των σημείων ενός χώρου για μια άγνωστη μεταβλητή σε πεπερασμένα σημεία που ορίζονται από μια συγκεκριμένη γεωμετρία και την επίλυση των εξισώσεων που δημιουργούνται πάνω σε αυτά τα σημεία. Έχουν εκτεταμένη χρήση σε επίλυση διαφορικών εξισώσεων με δυο ή τρεις ανεξάρτητες χωρικές μεταβλητές για προβλήματα επιφανειών, συνήθως περίπλοκων σχημάτων. Χρησιμοποιεί λιγότερες εξισώσεις από αυτές που λύνουν προβλήματα διαφορικών εξισώσεων με πεπερασμένες διάφορες, όπως επίσης μπορεί να απλοποιήσει αρκετά το πρόβλημα για ανωμαλίες στην μορφή του πλέγματος και στα όρια, με την χρήση ιδιοτήτων απλοποίησης των σχημάτων.

Στην αρχή της μεθόδου η διαφορική εξίσωση πολλαπλασιάζεται με μία συνάρτηση βάρους  $B_i$  που σχετίζεται με ένα κόμβο του πλέγματος και το σύνολο αυτών των εξισώσεων χρησιμοποιείται για να προκύψει σύγκλιση της εξίσωσης γύρω από ένα σύνολο σημείων. Πιο συχνή χρήση έχουν οι πολυωνυμικές συναρτήσεις βάσεις τύπου Lagrange για γραμμική παρεμβολή των σημείων που βρίσκονται στο ίδιο στοιχείο. Έπειτα η περιοχή που θα γίνει ολοκλήρωση της διαφορικής χωρίζεται σε υποτιμήματα, που ενώνονται με συγκεκριμένα σημεία-κόμβους μεταξύ τους. Ουσιαστικά οι τιμές της ανεξάρτητης μεταβλητής πρέπει να ικανοποιούν τις αρχικές εξισώσεις που δημιουργούνται σε μια λογική ολοκληρώματος-βάρους. Η ανεξάρτητη μεταβλητή υπολογίζεται ως προσέγγιση με έναν γραμμικό συνδυασμό πολυωνύμων και πιθανών τιμών ή παραμέτρων της μεταβλητής που σχετίζονται με κάποιον κόμβο.

Τα πεπερασμένα στοιχεία χρησιμοποιούνται για την επίλυση διαφορικών εξισώσεων συνήθως πάνω σε μια συγκεκριμένη επιφάνεια ή σταθερό όγκο, όπου πρέπει να ισχύει μια εξίσωση σε όλη την επιφάνεια ή όγκο. Η λογική είναι ότι η επιφάνεια χωρίζεται σε χωρία, που ονομάζονται στοιχεία (elements) και επιθυμείται η τιμή της εξαρτημένης μεταβλητής σε κάθε κόμβο του πλέγματος για το στοιχείο να ισορροπεί σε μια λύση ώστε να ισχύει η εξίσωση σ όλο τον χώρο του στοιχείου. Σε διαφορική εξίσωση με δυο ανεξάρτητες μεταβλητές το κάθε στοιχείο πρέπει να περιλαμβάνει τουλάχιστον δυο διαφορετικές τιμές της κάθε εξαρτημένης μεταβλητής σχηματίζοντας απλά γεωμετρικά σχήματα, είτε κάποιο τρίγωνο είτε κάποιο τετράπλευρο. Σε ένα σημείο  $(\theta_0, \varphi_0)$  της επιφανειας που είναι μέσα σε ένα στοιχείο, ισχύει ότι η τιμή της ανεξάρτητης μεταβλητής  $R(\theta_0, \varphi_0) = \sum R_i W_i$  με  $R_i$  να είναι η τιμή του  $R$  σε ένα κόμβο  $i$  και η συνάρτηση βάρους για αυτόν τον κόμβο

Συνήθως σε μια διαφορική δεύτερης τάξης θα χρησιμοποιηθεί η λογική του αδυνάμου μετασχηματισμού (weak formulation) όπου πολλαπλασιάζεται η εξίσωση με την συνάρτηση βάρους του σημείου και έπειτα γίνεται ολοκλήρωση κατά παράγοντες για να προκύψει η συνάρτηση ως γραμμική της  $R_i$  και ως διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης, δημιουργώντας μορφή πινάκων επίλυσης για τις εξισώσεις πεπερασμένων στοιχείων ως προς τις τιμές των κόμβων. Αυτή η διαδικασία προτιμάτε καθώς μαλακώνει η συνέχεια που χρειάζεται για την προσέγγιση της άγνωστης εξαρτημένης μεταβλητής ώστε να μεταφερθεί ο όρος δεύτερης παραγώγου σε όρο πρώτης παραγώγου αλλά της συνάρτησης βάρους των πεπερασμένων στοιχείων. Έτσι ταυτόχρονα ορίζονται κατευθείαν σε κάθε σημείο οι συνοριακές συνθήκες με πρώτες παραγώγους από το σύστημα. Είναι οι γνωστές ως συνοριακές συνθήκες Neumann ή φυσικές συνοριακές συνθήκες.

Για το κάθε σημείο του πλέγματος όπου γίνεται ολοκλήρωση της εξίσωσης σε σχέση με ένα βάρος του κόμβου, για να συμπεριληφθεί σε διαφορετικά στοιχεία γίνεται πρόσθεση των εξισώσεων που δημιουργούνται για τα διαφορετικά στοιχεία με αποτέλεσμα να γίνεται χρήση της ιδιότητας της συνέχειας των στοιχείων και της διασύνδεσης μεταξύ τους.

Μια ειδίκευση των πεπερασμένων στοιχείων που θα χρησιμοποιηθεί είναι η περίπτωση που η συνάρτηση γραμμικής παρεμβολής για προσέγγιση της συνάρτησης της άγνωστης μεταβλητής είναι η ίδια με το βάρος που πολλαπλασιάζεται η κάθε εξίσωση για να υπολογιστεί το ολοκλήρωμα της γύρω από ένα όριο. Αυτή ονομάζεται μέθοδος Galerkin και στο συγκεκριμένο πρόβλημα επιλέγονται οι συναρτήσεις γραμμικής παρεμβολής Lagrange και για τις δύο χρήσεις. Η κάθε συνάρτηση βάσης έχει ορό διάφορο του 0 μόνο για σημεία

της επιφάνειας που ανήκουν σε εκείνα τα πεπερασμένα στοιχεία που εμπεριέχουν το σημείο που αντιστοιχεί στην συνάρτηση βάσης.

### 3.2.2 Η μέθοδος Newton-Raphson για μη-γραμμικό Πρόβλημα Πεπερασμένων Στοιχείων

Για την μορφή μη-γραμμικής διαφορικής εξίσωσης η βασική εξίσωση πολλαπλασιάζεται με τις εξισώσεις βάσης ωστόσο δεν προκύπτει γραμμικότητα ως προς τις τιμές των κόμβων της εξαρτημένης μεταβλητής με αποτέλεσμα να χρειάζεται μορφοποίηση. Σ' αυτές τις περιπτώσεις χρησιμοποιείται η μέθοδος Newton-Raphson προσαρμοσμένη για σύστημα εξισώσεων, κατά την οποία βρίσκεται πόσο πρέπει να μεταβληθεί η τιμή της κάθε μεταβλητής για να μηδενίζει την εξίσωση, σε περίπτωση που η κλίση της εξίσωσης ως προς αυτή την μεταβλητή έμενε αμετάβλητη μέχρι την ρίζα της εξίσωσης. Προϋποθέτεται ότι η αρχική τιμή δοκιμής είναι κοντά στην επιθυμητή ρίζα και μακριά από κάποια άλλη ρίζα αυτής. Αυτή η μέθοδος προσεγγίζει την λύση τετραγωνικά εφόσον βρίσκεται κοντά σ αυτήν. Ουσιαστικά στο συγκεκριμένο πρόβλημα υπολογίζεται η παράγωγος κάθε εξίσωσης ως προς την τιμή της μεταβλητής  $R$  σε ένα σημείο  $i$ . Το άθροισμα των παραγώγων των μεταβλητών σε κάθε σημείο για μια εξίσωση  $\frac{\partial Res_i}{\partial R_j}$  επι μια διαφορά μεταξύ της τωρινής τιμής του σημείου και μιας καινούριας  $\Delta R_j$  θα πρέπει να μηδενίζεται και ταυτόχρονα η τιμή των μεταβλητών να μηδενίζει την κάθε εξίσωση ώστε να θεωρείται η λύση του προβλήματος. Αυτή είναι η θεωρία Newton-Raphson γενικά για επίλυση συστήματος μη-γραμμικών εξισώσεων.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} -\Delta x_1 \\ \vdots \\ -\Delta x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}$$

Ο κεντρικός πίνακας που δημιουργείται για μια επανάληψη της Newton-Raphson ονομάζεται Ιακωβιανός πίνακας που εμπεριέχει όλες τις παραγώγους των εξισώσεων ως προς τις άγνωστες τιμές που ψάχνουμε. Εκτελώντας τις παραγώγους προκύπτουν τρεις οροί που χρειάζονται ειδική αντιμετώπιση. Είναι οι παραγωγοί της μεταβλητής  $R$  και των παραγώγων της ως προς τα  $\theta$  και  $\phi$  (ορίζονται ως οι μεταβλητές του προβλήματος παρακάτω),  $R_\theta$  και  $R_\phi$  ως προς τις τιμές των κόμβων των στοιχείων  $R_j$ . Σύμφωνα με την θεωρία των πεπερασμένων στοιχείων που δίνουν την εξίσωση  $R(\theta, \phi) = \sum R_j B_j$  εκμαιεύεται ότι:

- i) Για την επίλυση πεπερασμένων στοιχείων με δυο ανεξάρτητες μεταβλητές  $(\theta, \phi)$ :

$$\frac{\partial R}{\partial R_j} = B_j(\theta, \phi)$$

$$\frac{\partial R_\theta}{\partial R_j} = \frac{\partial B_j(\theta, \phi)}{\partial \theta}$$

$$\frac{\partial R_\phi}{\partial R_j} = \frac{\partial B_j(\theta, \phi)}{\partial \phi}$$

- ii) Για την επίλυση του πεπερασμένου στοιχείου στο όριο  $\phi=0$ , όπου είναι συνάρτηση μόνο του  $\theta$

$$\frac{\partial R}{\partial R_j} = B_j(\theta)$$

$$\frac{\partial R_\theta}{\partial R_j} = \frac{\partial B_j(\theta)}{\partial \theta}$$

Γενικά σε μια επίλυση πεπερασμένων στοιχείων με Newton-Raphson, επειδή η μεταβλητή υπολογίζεται προσεγγιστικά με τα σημεία ενός πεπερασμένου στοιχείου, αγνοώντας την συμπεριφορά της άγνωστης μεταβλητής χρειάζεται πολύ αξιόπιστη αρχική τιμή για σύγκλιση. Σε διαφορετική περίπτωση οι ιακωβιανοί όροι που δημιουργούνται για το κάθε σημείο είναι δυνατόν να παραπλανήσουν την τελική λύση που ίσως αντιστοιχεί σε άλλο μακρινό στοιχείο.

### 3.2.3 Master Element και Συναρτήσεις Βάσης Lagrange

Η επιλογή της μορφής του στοιχείου έχει συμμετοχή στην επιρροή ενός κόμβου από τους γειτονικούς του. Μια συνηθισμένη μορφή είναι τρεις κομβοί ανά πλευρά του στοιχείου και ονομάζεται τετραγωνική μορφή επειδή η συνάρτηση βάσης παίρνει μορφή τετραγωνικού πολυωνύμου κατά την παρεμβολή σε τρία σημεία του στοιχείου. Για το ολοκλήρωμα στη συνοριακή συνθήκη που δημιουργείται και έχει μορφή υπολογισμού ολοκληρώματος εξίσωσης πολλαπλασιασμένη με συνάρτηση βάσης και ολοκληρώνεται σε μία μεταβλητή, δηλαδή μια συνήθης διαφορική μη-γραμμική. Επομένως θα δημιουργείται όρος πεπερασμένου στοιχείου με μία ανεξάρτητη μεταβλητή (το  $\theta$ ) και την άλλη σταθερή. Για ένα στοιχείο με τρεις κόμβους στην σειρά πάνω στην ευθεία του  $\theta$  θα ισχύουν οι τύποι για τις συναρτήσεις βάσης Lagrange:

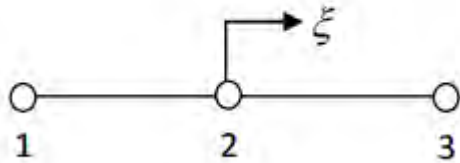
$$B_1 = \frac{1}{2}\xi(\xi - 1)$$

$$B_2 = -(\xi + 1)(\xi - 1)$$

$$B_3 = \frac{1}{2}\xi(\xi + 1)$$

, όπου το  $\xi$  πηγαινει από το -1 για την αρχή της ευθείας εως το 1 στο τέλος της

## Τετραγωνικό Στοιχείο 1-Δ



Σχήμα 7. Μορφή τετραγωνικού (master) πεπερασμένου στοιχείου με μία διάσταση

Η μετατροπή που κάναμε με το  $\xi$  να πηγαίνει στις τιμές  $-1$  έως  $1$  αντί για το  $\theta$  στις τιμές  $\theta_1$  έως  $\theta_3$  του πλέγματος του, είναι μια αντιστοίχιση που γίνεται σε άλλη μεταβλητή για να χρησιμοποιηθεί το ίδιο στοιχείο κάθε φορά. Στην θεωρία των πεπερασμένων στοιχείων αυτό ονομάζεται Μάστερ (master element) είναι τετραγωνικής μορφής και για την αντιστοίχιση με τα διαφορετικά στοιχεία που προκύπτουν στο πραγματικό πλέγμα μας χρησιμοποιείται μια μετατροπή με Ιακωβιανό πίνακα και θα αναλυθεί στην συνέχεια.

Στο δισδιάστατο πρόβλημα μας η μορφή του τετραγωνικού θα αναπαραχθεί σε κάθε πλευρά, και στις εσωτερικές, ώστε να έχουν τρία σημεία. Με αυτό τον τρόπο δημιουργείται ένα τετραγωνικό στοιχείο εννιά σημείων με συντεταγμένες το  $\eta$  και το  $\xi$  που πηγαίνουν από  $-1$  έως  $1$ . Οι συναρτήσεις βάσης Lagrange για την προσέγγιση της μεταβλητής μέσα στο master element είναι οι εξής:

$$B_1 = \frac{1}{4}\eta(\eta - 1)\xi(\xi - 1)$$

$$B_2 = -\frac{1}{2}(\eta + 1)(\eta - 1)\xi(\xi - 1)$$

$$B_3 = \frac{1}{4}\eta(\eta + 1)\xi(\xi - 1)$$

$$B_4 = -\frac{1}{2}\eta(\eta - 1)(\xi + 1)(\xi - 1)$$

$$B_5 = (\eta + 1)(\eta - 1)(\xi + 1)(\xi - 1)$$

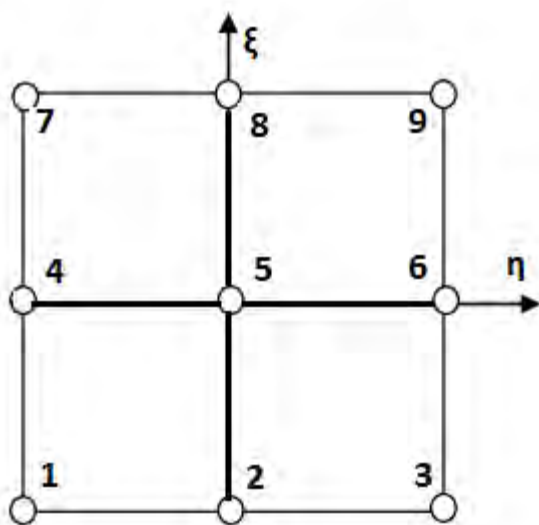
$$B_6 = -\frac{1}{2}\eta(\eta + 1)(\xi + 1)(\xi - 1)$$

$$B_7 = \frac{1}{4}\eta(\eta - 1)\xi(\xi + 1)$$

$$B_8 = -\frac{1}{2}(\eta + 1)(\eta - 1)\xi(\xi + 1)$$

$$B_9 = \frac{1}{4}\eta(\eta + 1)\xi(\xi + 1)$$

### Τετραγωνικό Στοιχείο 2-Δ



Σχήμα 8. Μορφή τετραγωνικού (master) πεπερασμένου στοιχείου με δύο διαστάσεις

Αυτές οι συναρτήσεις ονομάζονται πολυώνυμα Lagrange. Μια ακόμη ιδιότητα των συναρτήσεων παρεμβολής που δημιουργούνται είναι ότι σε κάθε σημείο εντός του στοιχείου με  $\theta$  και  $\varphi$  ισχύει ότι  $\sum B_i(\theta, \varphi) = 1$  για  $i = 1, n$  με το  $n$  να είναι το πλήθος των σημείων του κάθε στοιχείου, στην δικιά μας περίπτωση 3 για το όριο και 9 για το διδιάστατο πρόβλημα. Η χρήση αυτών των συναρτήσεων έχει μια ευκολία στην μορφή τετράγωνου ότι ο υπολογισμός ενός ολοκληρώματος μέσα στο ολοκλήρωμα γίνεται πιο εύκολα με την μέθοδο Gauss για τις τιμές  $\xi, \eta$  από -1 έως 1 όπως ακριβώς αντιστοιχούν στον υπολογισμό ολοκληρωμάτων αγνώστων συναρτήσεων με σημεία Gauss. Συγκεκριμένα χρησιμοποιείται η αριθμητική ολοκλήρωση Gauss-Legendre και προς τις δύο κατευθύνσεις. Η επιλογή του τετραγωνικού στοιχείου και των ορίων του έγινε επίτηδες έτσι ώστε να ταιριάζει σ' αυτήν την μέθοδο που απλοποιεί τις πράξεις ολοκλήρωσης εντός του στοιχείου, ακόμη και για καμπυλωτές πλευρές του στοιχείου. Οι τετραγωνικές φόρμουλες της μεθόδου Gauss-Legendre χρησιμοποιούν πολυώνυμα Legendre βαθμού  $p$  για τον υπολογισμό των σημείων Gauss και των βαρών τους στην ολοκλήρωση.

#### 3.2.4 Ιακωβιανή Μεταβλητών Στοιχείου, Αντιστροφή της και Ολοκλήρωση Gauss.

Η μετατροπή των μεταβλητών από  $\xi$  και  $\eta$  σε  $\theta$  και  $\varphi$  γίνεται με χρήση παρεμβολής καθώς οι μεταβλητές  $\theta$  και  $\varphi$  είναι διακριτές. Συναρτήσεις παραμετροποίησης είναι του συλλ:  $\theta = \sum \theta_i \psi_i(\xi, \eta)$  με το  $i$  να πηγαίνει έως ένα βαθμό παραμετροποίησης  $m$ . Επιθυμούμε το



$n$  να είναι μεγαλύτερο ή ίσο από τον αριθμό των κόμβων  $n$  για την εξαρτημένη μεταβλητή  $R$  ώστε να υπάρχει αρκετή ακρίβεια στα σημεία της γεωμετρίας. Για ισορροπία αλλά και ευκολία στο πρόγραμμα επιλέγονται οι συναρτήσεις  $\psi$  να ναι ίδιες με τις συναρτήσεις βάσεις, που είναι τύπου Lagrange και ίσων σημείων. Επομένως  $B_i = B_i(\theta, \varphi) = B_i(\theta(\eta, \xi), \varphi(\eta, \xi))$

Οι σχέσεις συσχετισμού των δύο διαφορετικών συστημάτων δίνονται από τις παράγωγους των  $B_i$  ως προς τις διαφορετικές μεταβλητές μας. Συγκεκριμένα ισχύουν

$$\frac{\partial B_i}{\partial \xi} = \frac{\partial B_i}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \frac{\partial B_i}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \quad \text{και} \quad \frac{\partial B_i}{\partial \eta} = \frac{\partial B_i}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} + \frac{\partial B_i}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial \eta}$$

και βάζοντας τις δυο εξισώσεις με μορφή πίνακα παίρνουμε ότι

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial B_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial B_i}{\partial \eta} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} & \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \theta}{\partial \eta} & \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial B_i}{\partial \theta} \\ \frac{\partial B_i}{\partial \varphi} \end{Bmatrix}$$

με αποτέλεσμα την δημιουργία του δισδιαστατου πίνακα που ονομάζεται Ιακωβιανή των μετατροπών ( $J$ ).

Ισχύει ότι  $d\theta \ d\varphi = |\det(J)| \ d\eta \ d\xi$

Από τη μέθοδο έχουμε την παραγωγή της συνάρτησης Lagrange ως προς τα  $\eta$ ,  $\xi$  και χρειάζεται να βρούμε με τον αντίστροφο πίνακα της Ιακωβιανής για να υπολογιστούν οι τιμές των παραγώγων σε κάθε διαφορετικό στοιχείο στα  $\theta$  και  $\varphi$ .

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial B_i}{\partial \theta} \\ \frac{\partial B_i}{\partial \varphi} \end{Bmatrix} = [J^{-1}] \begin{Bmatrix} \frac{\partial B_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial B_i}{\partial \xi} \end{Bmatrix}$$

την οποία αντίστροφο βρισκουμε με τις πράξεις πινάκων της γραμμικής αλγεβρας.

Αυτός έχει τιμή

$$[J^{-1}] = \frac{1}{\det(J)} \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} & -\frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \\ -\frac{\partial \theta}{\partial \xi} & \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \end{pmatrix}$$

με  $\det(J) = \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} - \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \frac{\partial \theta}{\partial \xi}$

Οπότε προκύπτουν:

$$\frac{\partial B_i}{\partial \theta} = \left( \frac{\partial B_i}{\partial \eta} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} - \frac{\partial B_i}{\partial \xi} \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \right) \frac{1}{\det(J)}$$

$$\frac{\partial B_i}{\partial \varphi} = \left( -\frac{\partial B_i}{\partial \eta} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \frac{\partial B_i}{\partial \xi} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) \frac{1}{\det(J)}$$

τα οποία θα υπολογιστουν στο ολοκλήρωμα για κάθε διαφορετικό στοιχείο.

Η παραγωγοί των  $\theta$  και  $\varphi$  ως προς  $\eta$ ,  $\xi$  βρίσκονται από τον συσχετισμό:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \eta} (\sum B_i(\xi, \eta)) = \sum \theta_i \frac{\partial B_i(\xi, \eta)}{\partial \eta}$$

Ο τελευταίος όρος υπολογίζεται με την παραγωγή των πολυωνύμων Lagrange ως προς η ή ξ.

Έχοντας βρει ποια εξίσωση πρέπει να ολοκληρωθεί στα σημεία θ και φ ενός στοιχείου, τότε κάνοντας την αλλαγή μεταβλητών σε η, ξ και αλλάζοντας τα σημεία ολοκλήρωσης σε -1 έως 1, για να επιλυθεί ένα ολοκλήρωμα μιας εξίσωσης με τέτοια όρια μορφής τετράγωνου, χρησιμοποιείται η μέθοδος Gauss. Για κάθε κατεύθυνση επιλέγεται ένας αριθμός σημείων που θα υπολογίζεται το ολοκλήρωμα και χρησιμοποιώντας την μορφή Gauss-Legendre τα σημεία της ολοκλήρωσης και τα βάρη της ολοκλήρωσης για κάθε σημείο υπολογίζονται με συγκεκριμένο τύπο. Αυτός χρησιμοποιεί τα πολυώνυμα Legendre βαθμού όσα και τα σημεία της κάθε κατεύθυνσης η ή ξ. Τα σημεία Gauss που χρησιμοποιούνται είναι οι ρίζες αυτού του πολυωνύμου και τα βάρη είναι η συμμετοχή τους στο τελικό ολοκλήρωμα από τον τύπο

$$w_i = \frac{2}{(1 - x_i^2)[P'_n(x_i)]^2}$$

με  $w_i$  να είναι το βάρος της ολοκλήρωσης και  $x_i$  το σημείο Gauss της ολοκλήρωσης, στο οποίο υπολογίζεται η βασική μας συνάρτηση που θα ολοκληρωθεί. Τέλος το n υποδηλώνει τον βαθμό πολυωνύμου Lagrange και συνεπάγεται και το πλήθος αριθμών Gauss που θα επιλεγεί για την ολοκλήρωση. Ο τύπος που προκύπτει έχοντας τις τιμές για τα σημεία Gauss και τα βάρη τους είναι:

$$\int_{Ael} F(\eta, \xi) |det(J)| d\eta d\xi = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 F(\eta, \xi) |det(J)| d\eta d\xi = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m F(\eta_i, \xi_j) |det(J)| W_i W_j$$

στην οποία σχέση ολοκλήρωσης τα  $\eta_i, \xi_j$  είναι οι τιμές των σημείων Gauss όπως επιλέχθηκαν από τον πίνακα για πλήθος n και m αντίστοιχα και τα  $W_i, W_j$  είναι τα αντίστοιχα βάρη τους ολοκλήρωσης που πολλαπλασιάζονται επί την τιμή της συνάρτησης.

### 3.2.5 Αδιαστατοποίηση Μεταβλητών

Για την αδιαστατοποίηση της εξίσωσης επιθυμούμε οι μεταβλητές R και P<sub>0</sub> να αδιαστατοποιηθούν όπως και οι όροι στην εξίσωση. Η απόσταση διαιρείται με ένα γνωστό μήκος, στην συγκεκριμένη περίπτωση με το μήκος R<sub>st</sub>, το οποίο δηλώνει την απόσταση σε μέτρα των δύο άκρων σε σχέση με το κέντρο. Η πίεση αδιαστατοποιείται με έναν αριθμό με αντίστοιχες μονάδες και για την συγκεκριμένη περίπτωση χρησιμοποιούμε τον όρο επιφανειακή τάση σ προς χαρακτηριστικό μήκος R<sub>st</sub> ( $\frac{\sigma}{R_{st}}$ ). Για ευκολία στις υπόλοιπες πράξεις όλοι οι όροι της εξίσωσης διαιρούνται με τον όρο  $\sigma * R_{st}$ .

$$R = \frac{R}{Rst}$$

$$P_0 = \frac{P_0}{\frac{\sigma}{Rst}}$$

$$P_{out} = \frac{P_{out}}{\frac{\sigma}{Rst}}$$

$$V = \frac{V}{Rst^3}$$

$$Bo = \frac{R_{st}^2 \rho g}{\sigma}$$

$$\theta_{\varepsilon\pi}$$

όπου οι δύο πρώτες αποτελούν τους αγνώστους και οι τρεις τελευταίες τις παραμέτρους του προβλήματος. Αντικαθιστώντας στην εξίσωση (12) και κάνοντας τις πράξεις

$$\begin{aligned} \text{Res}_1 = & \iint_A B_i \left( P_0 - \frac{Rst^2}{\sigma} \rho g R \cos\theta - P_{out} \right) (R^2 \sin^2\theta \sin\phi - RR_\theta \sin\theta \cos\theta \sin\phi \\ & - RR_\phi \cos\phi) \\ & - \left[ \sin\theta \sin\phi \left( RR_\theta \sin\theta \frac{\partial B_i}{\partial \theta} + R \frac{R_\phi}{\sin\theta} \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \right. \\ & + \cos\theta \sin\phi \left( \left( R^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2\theta} \right) \sin\theta \frac{\partial B_i}{\partial \theta} - R_\theta \frac{R_\phi}{\sin\theta} \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \\ & \left. + \cos\phi \left( -R_\theta R_\phi \frac{\partial B_i}{\partial \theta} + (R^2 + R_\theta^2) \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \right] \frac{1}{\sqrt{R^2 + R_\theta^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2\theta}}} d\theta d\phi \\ & + \int_{dS_1} \cos\theta_{ca} B_i \sqrt{R^2 + R_\theta^2} d\theta = 0 \end{aligned}$$

(14)

Για την εξίσωση (13) διατήρησης του όγκου που πρέπει να μηδενίζεται κατά την επίλυση, με την αδιαστατοποίηση του όγκου για αδιάστατη απόσταση R, έχουμε:

$$\text{Res}_2 = \int_0^{\pi/2} \int_0^\pi \frac{R^3}{3} \sin\theta d\theta d\phi - \frac{V}{Rst^3} = 0$$

(15)

### 3.2.6 Πίνακας Ιακωβιανή, Επίλυση της ARROW και Εύρεση Όρων του Πίνακα

Για στοιχεία 9 σημείων κάθε σημείο μπορεί να επηρεάσει μέχρι 32 υπόλοιπα σημεία στην τιμή που θα πάρουν, λόγω του ότι θα έχει επιρροή το πολύ σε 4 διαφορετικά στοιχεία (αν βρίσκεται σε γωνιακή θέση σε ένα στοιχείο των 9 σημείων το καθένα -  $4*8=32$ ) για τα οποία 32 σημεία μπορεί να απέχει το πρώτο από το τελευταίο στον πίνακά μας έως και  $(4*n_{nth}+4)$  σημεία, οπου  $n_{nth}$  είναι το σύνολο των σημείων στο πλέγμα ηγαίνοντας από  $\theta=0$  έως  $\pi/2$ . Αυτό κάνει τον πίνακα μας να έχει μια διαγωνιοποίηση τόσων στοιχείων εκτός από την τελευταία γραμμή, την τελευταία στήλη και το τελευταίο στοιχείο του πίνακα.

Τα τελευταία λόγω της μιας παραπάνω διαφορετικής μορφής εξίσωσης (η οποία θα εισαχθεί κατά την μοντελοποίηση του προβλήματος για τον υπολογισμό της παραπάνω μεταβλητής Πίεσης  $P_0$ ) αλλά και της διαφορετικής μεταβλητής, θα έχουν μη-μηδενικές τιμές διαμορφώνοντας έναν μορφοποιημένο διαγωνιοποιημένο πίνακα που μπορεί να θεωρηθεί σχήματος βέλους (ARROW). Θα πρέπει να χρησιμοποιηθεί ειδικός αλγόριθμος επίλυσης πίνακα τέτοιας μορφής για κάθε επανάληψη της Newton – Raphson, αποδίδοντας την τιμή  $\Delta R$  για πιθανή σύγκλιση της μεθόδου.

Η τελευταία γραμμή (Row) θα υπολογιστεί ως  $\frac{\partial Res_2}{\partial R_j}$ , και επειδή κάθε σημείο συμμετέχει στον υπολογισμό του όγκου, θα έχει και ορό μη μηδενικό.

Η τελευταία στήλη (Column) θα είναι οι όροι όλων των εξισώσεων με τις εξισώσεις βάσης του συνόλου των κύριων εξισώσεων Residual 1 που θα υπολογίζονται ως προς την μεταβλητή  $P_0$  ( $\frac{\partial Res_{i1}}{\partial P_0}$ ). Ο τελευταίος ορός του πίνακα θα πάρει την μεταβολή της δεύτερης εξίσωσης ως προς την πίεση ( $\frac{\partial Res_2}{\partial P_0}$ ) και στην μορφή του πίνακα ARROW ονομάζεται Head – Κεφαλή. Για το παρακάτω σχήμα το N είναι το πλήθος κόμβων που δημιουργείται στο πλέγμα και αντιστοιχεί στο πλήθος συναρτήσεων βάσης του προβλήματος των πεπερασμένων στοιχείων.

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial Res1_1}{\partial R_1} & \dots & \frac{\partial Res1_1}{\partial R_N} & \frac{\partial Res1_1}{\partial P_0} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial Res1_N}{\partial R_1} & \dots & \frac{\partial Res1_N}{\partial R_N} & \frac{\partial Res1_N}{\partial P_0} \\ \frac{\partial Res2}{\partial R_1} & \dots & \frac{\partial Res2}{\partial R_N} & \frac{\partial Res2}{\partial P_0} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} -\Delta R_1 \\ \vdots \\ -\Delta R_N \\ -\Delta P_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Res1_1 \\ \vdots \\ Res1_N \\ Res2 \end{pmatrix}$$

Οπότε κάνοντας τις παραγωγίσεις των δυο συναρτήσεων ως προς τις μεταβλητές των τιμών των αποστάσεων για τους κόμβους του πλέγματος μας  $R_j$  και την εσωτερική κεντρική πίεση  $P_0$  θα προκύψουν τέσσερις οροί που θα πρέπει να μπουν στον αλγόριθμο

Ονομάζοντας τον Ιακωβιανό πίνακα των βασικών εξισώσεων A τότε ισχύει ότι

$$A_{ij} = \frac{\partial Res1_i}{\partial R_j}, \quad \text{για } i, j = 1, N$$

$$A_{N+1,j} = \frac{\partial Res2}{\partial R_j}, \quad \text{για } j = 1, N$$

$$A_{i,N+1} = \frac{\partial Res1_i}{\partial P_0}, \quad \text{για } i = 1, N$$

$$A_{N+1,N+1} = \frac{\partial Res2}{\partial P_0}$$

Κατά την αδιαστατοποίηση μιας μεταβλητής διαιρώντας την με ένα ορό με ίδιες μονάδες, χρειάζεται να τροποποιηθεί η εξίσωση ούτως ώστε να δέχεται την νέα μεταβλητή σαν τιμή.

Για παράδειγμα για  $R_{\alpha\delta} = \frac{R}{R_{st}}$  τότε στην εξίσωση αντικαθίσταται όπου  $R$  το  $R = R_{\alpha\delta} R_{st}$ .

Αντιστοίχως γίνεται με την μεταβλητή της πίεσης και του όγκου με τον αντίστοιχο ορό που έχει διαιρεθεί. Σημαντική λεπτομέρεια είναι ότι αν στην εξίσωση υπάρχει ορός παραγωγού ως προς  $\theta$  ή  $\phi$  τότε αντικαθίσταται από τον ορό  $R_{\theta} = \frac{\partial R}{\partial \theta} = \frac{\partial}{\partial \theta} (R_{\alpha\delta} R_{st}) = R_{st} \frac{\partial R_{\alpha\delta}}{\partial \theta}$ .

Υπολογίζοντας τους συγκεκριμένους ορούς, πραγματοποιώντας τις πράξεις για τις εξισώσεις (14) και (15), όπως επίσης και τις απαραίτητες αντικαταστάσεις προκύπτει ότι:

Κύριο μέρος(Main Matrix):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial Res_i}{\partial R_j} = & \iint_A [B_i \left( -\frac{Rst^2}{\sigma} \rho g B_j \cos\theta \right) (R^2 \sin^2\theta \sin\phi - RR_\theta \sin\theta \cos\theta \sin\phi - RR_\phi \cos\phi)] \\
& + [B_i \left( P_0 - \frac{Rst^2}{\sigma} \rho g R \cos\theta - P_{out} \right) (2RB_j \sin^2\theta \sin\phi - (B_j R_\theta \\
& + R \frac{\partial B_j}{\partial \theta}) \sin\theta \cos\theta \sin\phi - (B_j R_\phi + R \frac{\partial B_j}{\partial \phi}) \cos\phi)] \\
& - \{ [(\sin\theta \sin\phi \left( \left( B_j \frac{R_\phi}{\sin\theta} + R \frac{\partial B_j}{\partial \phi} \frac{1}{\sin\theta} \right) \frac{\partial B_i}{\partial \phi} + \left( B_j R_\theta + R \frac{\partial B_j}{\partial \theta} \right) \sin\theta \frac{\partial B_i}{\partial \theta} \right) \\
& + \cos\theta \sin\phi \left( - \left( \frac{\partial B_j}{\partial \theta} R_\phi + R_\theta \frac{\partial B_j}{\partial \phi} \right) \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right. \\
& + \left. \left( 2RB_j + \frac{2R_\phi}{\sin^2\theta} \frac{\partial B_j}{\partial \phi} \right) \sin\theta \frac{\partial B_i}{\partial \theta} \right) \\
& + \cos\phi \left( \left( 2RB_j + 2R_\theta \frac{\partial B_j}{\partial \theta} \right) \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right. \\
& \left. \left. - \left( \frac{\partial B_j}{\partial \phi} R_\theta + R_\phi \frac{\partial B_j}{\partial \theta} \right) \frac{\partial B_i}{\partial \theta} \right) \right] \frac{1}{\sqrt{R^2 + R_\theta^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2\theta}}} \\
& + [(\sin\theta \sin\phi \left( RR_\theta \sin\theta \frac{\partial B_i}{\partial \theta} + R \frac{R_\phi}{\sin\theta} \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \\
& + \cos\theta \sin\phi \left( \left( R^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2\theta} \right) \sin\theta \frac{\partial B_i}{\partial \theta} - R_\theta \frac{R_\phi}{\sin\theta} \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) + \cos\phi (-R_\theta R_\phi \frac{\partial B_i}{\partial \theta} \\
& + (R^2 + R_\theta^2) \frac{\partial B_i}{\partial \phi}) \left( - \frac{RB_j + R_\theta \frac{\partial B_j}{\partial \theta} + \frac{R_\phi}{\sin^2\theta} \frac{\partial B_j}{\partial \phi}}{(R^2 + R_\theta^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2\theta})^{\frac{3}{2}}} \right)] d\theta d\phi \\
& + \int_{dS_1} \cos\theta_{ca} B_i \frac{RB_j + R_\theta \frac{\partial B_j}{\partial \theta}}{\sqrt{R^2 + R_\theta^2}} d\theta = 0
\end{aligned}$$

Επί πλέον Σειρά(Row in Arrow):

$$\frac{\partial Res_2}{\partial R_j} = \int_0^{\pi/2} \int_0^\pi R^2 B_j \sin\theta d\theta d\phi$$

Επί πλέον Στήλη(Column in Arrow):

$$\frac{\partial Res_i}{\partial P_0} = \iint_A B_i (R^2 \sin^2\theta \sin\phi - RR_\theta \sin\theta \cos\theta \sin\phi - RR_\phi \cos\phi) d\theta d\phi$$

Κορυφή(Head):

$$\frac{\partial \text{Res}_2}{\partial P_0} = 0$$

### 3.2.7 Διαγωνιοποιημένος Πίνακας A στον Κώδικα

Το συγκεκριμένο πρόβλημα που στήθηκε για επίλυση σε αλγόριθμο πεπερασμένων στοιχείων με επαναλήψεις Newton-Raphson, έχει μια λεπτομέρεια που θα έκανε την επιλογή της μεθόδου ασύμφορη αν δεν αποφευχθεί. Κατά την διακριτοποίηση του δισδιάστατου προβλήματος σε κόμβους δημιουργούνται  $n$  σημεία ανά την κατεύθυνση  $\theta$  για κάθε  $\phi$  και αντίστοιχα  $m$  σημεία ανά την  $\phi$  για κάθε  $\theta$ . Αποτέλεσμα είναι να δημιουργείται ένα πλήθος  $N$  κόμβων που ισούται με  $N = n * m$ . Κατά την κατασκευή των εξισώσεων πολλαπλασιάζοντας με την συνάρτηση βάσης κάθε κόμβου, δημιουργούνται ένας τεράστιος αριθμός εξισώσεων για τον πίνακα  $A$  στον οποίο αποθηκεύεται το Κύριο Μέρος των εξισώσεων των πεπερασμένων στοιχείων για τον Ιακωβιανό Πίνακα, που έχει διαστάσεις  $N \times N$  και πρέπει να επιλυθεί με μέθοδο επίλυσης συστημάτων. Επειδή αυτές απαιτούν πολλές επαναλήψεις χρησιμοποιείται η ιδιότητα της διαγωνιοποίησης πινάκων. Λόγω της ιδιότητας των πεπερασμένων στοιχείων ότι μόνο ένας κόμβος του ίδιου στοιχείου έχει επιρροή σε μια εξίσωση που να πολλαπλασιασμένη με εξίσωση βάσης από κόμβο του ίδιου στοιχείου. Το αποτέλεσμα ότι, όπως έχει αναφερθεί ήδη, για έναν ορό του πίνακα  $A$  ο υπολογισμός του επηρεάζεται από την τιμή απόστασης  $R_j$  των 8 υπολοίπων κόμβων και εφόσον είναι γωνιακός κόμβος τότε από 32 κόμβους των 4 στοιχείων που συνορεύουν σε αυτόν. Κατά την διάταξη τους στον πίνακα μας αυτός ο κόμβος από τον πάνω γωνιακό του στοιχείου που είναι τελευταίο απέχει έως  $2n+2$  σημεία στον πίνακα. Αυτή η απόσταση ονομάζεται εύρος διαγωνιοποίησης πίνακα ή BANDWIDTH. Την ίδια απόσταση στον πίνακα έχει και από την αντίθετη μεριά (το πρώτο κόμβο του πρώτου κατά σειρά στοιχείου). Δηλαδή και στην σειρά του και στην στήλη του ορού, όλα οι οροί με απόσταση μεγαλύτερη από  $2n+2$  είναι μηδενικοί. Για βελτιστοποίηση και στον χώρο που θα χρησιμοποιηθεί από την μνήμη Ram ο πίνακας  $A$  αποθηκεύεται όχι με μορφή  $N \times N$  αλλά με την δεύτερη διάσταση του να έχει μέγεθος με  $2 * (2n+2)$  για την διαφορά από πάνω μέχρι κάτω συν ένα (+1) για τα στοιχεία της διαγώνιου. Οπότε το τελικό μέγεθος του πίνακα βγαίνει  $N \times M$  ή  $(n * m) \times (4n+5)$ . Ορίζεται  $BAND = (M+1)/2 = 2n+3$  και συμβολίζεται ως  $A'_{ik}$ . Επόμενο βήμα αυτού του πίνακα είναι η μέθοδος αντιστοίχισης του κάθε σημείου του παλιού τετραγωνικού  $A_{ij}$  στον  $A'_{ik}$ . Σ αυτήν την μέθοδο η σειρά του ορού μένει η ίδια  $i$  όμως η στήλη που μπαίνει στον  $A'_{ik}$  σχετίζεται με την στήλη του ορού  $j$  με την εξίσωση

$$k = j - i + \frac{band}{2} + 1$$

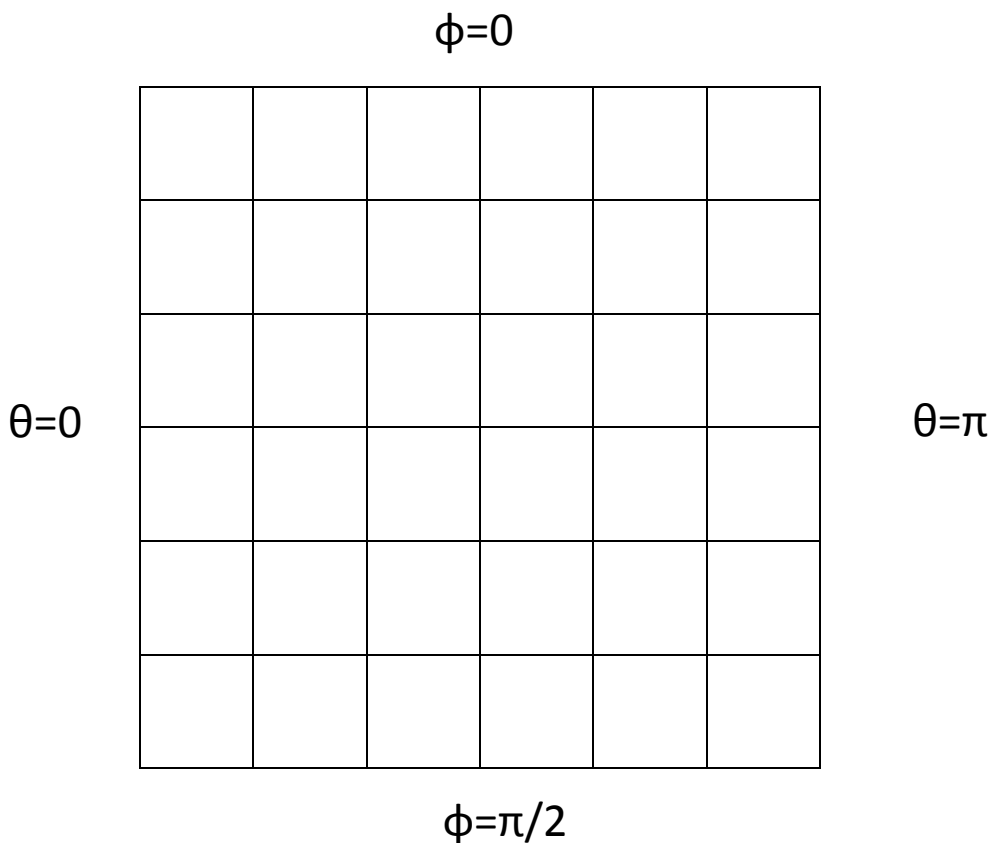
$$A_{ij} = \begin{bmatrix} A_{1,1} & & A_{1,BAND} & 0 & & 0 \\ & \ddots & & & & \\ A_{BAND,1} & & & & & 0 \\ 0 & & & & & A_{N,N-BAND+1} \\ & & & & & \\ 0 & & & 0 & A_{N-BAND+1,N} & A_{N,N} \end{bmatrix}$$

$$A'_{ik} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & A_{1,1} & A_{1,2} & \dots & A_{1,BAND} \\ 0 & 0 & A_{2,1} & & & \vdots \\ A_{BAND,1} & & & & & A_{N-BAND+1,N} \\ \vdots & & & & & 0 \\ A_{N,N-BAND+1} & \dots & A_{N,N} & 0 & & 0 \end{bmatrix}$$

### 3.2.8 Ορθογώνιο Πλέγμα

Η κατασκευή του πλέγματος έχει πολλές παραμέτρους που θα μπορούσαν να περιπλέξουν το πρόβλημα. Η περίπτωση η μεταβλητή μας να ναι κομμάτι επιφάνειας με συγκεκριμένες συντεταγμένες και θέσεις και έλλειψη γραμμικότητας προκαλεί την μετατροπή του αρχικού πλέγματος σε μορφή μάστερ στοιχείου τετραγωνικής μορφής, αρκετά περιπλοκή, αν και πάλι χρησιμοποιούνται οι ίδιες εξισώσεις όπως το αρχικό πρόβλημα. Από την στιγμή που οι μεταβλητές  $\theta$  και  $\phi$  ορίζονται ως ανεξάρτητες μεταβλητές επιλογής του χρήστη στο πρόβλημα, και δεν τις περιορίζει κάποια περίεργη επιφάνεια στην οποία θα πρέπει να ολοκληρωθούν, χωρίζονται σε ίσα τμήματα ανά κατεύθυνση μέχρι το όριο τους. Δημιουργείται ένα ορθογώνιο πρόβλημα με κόμβους  $2 \cdot n_{el} + 1$  στο πλήθος, με  $n_{el}$  να δηλώνει τον αριθμό των στοιχείων που θα χρησιμοποιηθούν είτε στην μια διεύθυνση είτε στην άλλη. Εφόσον επιλεγεί ίδιος αριθμός στοιχείων ανά κάθε κατεύθυνση δημιουργείται τετραγωνικό πλέγμα.





Σχήμα 9. Διάταξη πεπερασμένων στοιχείων και αντιστοίχισή τους με τις μεταβλητές

### 3.2.9 Αντιστοίχιση Μεθόδου Επίλυσης με το Φυσικό Πρόβλημα

Για την αντιστοίχιση του φυσικού προβλήματος μας σε έναν αλγόριθμο που επιλύει ένα πρόβλημα διαφορικής εξίσωσης σε δυο διαστάσεις με πεπερασμένα στοιχεία, που χρησιμοποιεί επαναληπτική μέθοδο Newton-Raphson για την μη-γραμμικότητα της εξίσωσης ως προς τις μεταβλητές, θα ορισθεί η πρώτη μεταβλητή του προγράμματος ως η  $\theta$  και η δεύτερη θα είναι η  $\phi$ . Κατά τον σχηματισμό των κόμβων των στοιχείων μας για την άγνωστη μεταβλητή  $R$  στο  $\theta$  και  $\phi$ , το  $R$  θα είναι κατά μήκος του  $\theta$  και για το  $\phi$  θα επανέρχεται για  $\theta=0$ , δηλαδή το δεύτερο, το τρίτο στοιχείο κλπ., θα πηγαίνουν προς τα μεγαλύτερα  $\theta$  για ίδιο  $\phi$ , ενώ όταν φτάσει στο τελευταίο  $\theta=\pi$ , θα πάει για την επόμενη τιμή του  $\phi$  από το  $\theta=0$ .

Μια σημαντική λεπτομέρεια για την διαμόρφωση της Ιακωβιανής των πεπερασμένων στοιχείων είναι ότι κάθε συνάρτηση που βρίσκεται στο ολοκλήρωμα και μεταβάλλεται στα  $\theta$  και  $\phi$ , δηλαδή τα  $R, R_\theta, R_\phi, \theta$  και  $\varphi$ , υπολογίζεται μέσα στο στοιχείο ως άθροισμα των τιμών των κόμβων επί την συνάρτηση βάρους για το συγκεκριμένο  $\theta$  και  $\phi$  που πρέπει να τα υπολογίσουμε. Για παράδειγμα θα βρεθεί η παράγωγος της απόστασης  $R$  ως προς το  $\theta$  με τον τύπο  $R_\theta(\theta, \varphi) = \sum R_i \frac{\partial B_i(\theta, \varphi)}{\partial \theta}$ , όπου  $i$  είναι οι διαφορετικοί κομβοί του στοιχείου

από το πρώτο έως τον ένατο και  $R_i$  είναι η τιμή της απόστασης  $R$  από το κέντρο του αντίστοιχου κόμβου.

Στο όριο  $\phi=0$  βρισκόμαστε στην περίπτωση του υπολογισμού ενός ολοκληρώματος που είναι μη μηδενικό ανάλογα με το αν είμαστε σε  $\theta$ , που βρίσκεται μέσα σε τέτοιο στοιχείο με έναν από τους κόμβους του να συμπίπτει με την συνάρτηση βάσης της βασικής εξίσωσης για εκείνο τον κόμβο. Τότε χρειάζεται να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα αυτής, με πιο εύκαιρη λύση την αντιστοίχιση σε ένα πρόβλημα πεπερασμένων στοιχείων με μια μεταβλητή το  $\theta$ . Ο υπολογισμός του ολοκληρώματος θα γίνει όπως γίνεται και για το σύστημα των πεπερασμένων στοιχείων με 2 αγνώστους, μόνο που εδώ οι συναρτήσεις βάσεις θα ναι καινούργιες για μια μεταβλητή το  $\theta$ .

### 3.3 Διαδικασία Επίλυσης

#### 3.3.1 Ο Κώδικας Επίλυσης (Μέρη-Λεπτομέρειες)

Ο αλγόριθμος της επίλυσης εκτελείται σε πρόγραμμα Fortran και αποτελείται από τα εξής μέρη.

Με ένα αρχείο κειμένου Input ο χρήστης προσδίδει στον κώδικα τις τιμές των παραμέτρων του προβλήματος. Εισάγεται ο αριθμός των στοιχείων που θα χρησιμοποιηθούν σε κάθε κατεύθυνση, το μήκος των αξόνων όπου θα γίνει η ολοκλήρωση, ο αριθμός σημείων Gauss, οι τιμές τους, τα βάρη τους και η συνθήκη σύγκλισης. Από φυσικά νούμερα δίνονται το μήκος αναφοράς που αντιστοιχεί στο ήμισυ της απόστασης μεταξύ των δύο πόλων, ο όγκος της σταγόνας που προσφύεται στο τοίχωμα, η εξωτερική πίεση, η πυκνότητα του υγρού και η σταθερά επιτάχυνσης της βαρύτητας.

Το παρόν πρόβλημα επιλύεται για το σχήμα της προσκολλημένης σταγόνας  $R(\theta, \phi)$  αδιαστατοποιημένο με το ήμισυ της απόστασης μεταξύ των πόλων και την εσωτερική πίεση για δεδομένο όγκο. Λόγω δε της μη γραμμικής εξάρτησης της καμπυλότητας από το σχήμα θα χρειασθεί επαναληπτική διαδικασία για τον υπολογισμό του τελευταίου καθώς και της πίεσης σε αδιάστατη μορφή. Για τον σκοπό αυτό χρειάζεται αξιόπιστη αρχική πρόβλεψη αυτών των αγνώστων του προβλήματος, η οποία θα προέλθει από την αντίστοιχη λύση για οριζόντιο αξονοσυμμετρικό CPS. Η λύση αυτή παρέχει, για δεδομένη εσωτερική πίεση της προσκολλημένης σταγόνας, τον όγκο της καθώς και το μήκος που καταλαμβάνει αυτή επάνω στο στερεό υπόστρωμα. Στην παρούσα εργασία είναι επιθυμητό να διερευνηθεί η ύπαρξη λύσεων με ίδιο μήκος μεταξύ των πόλων για τον ίδιο όγκο της σταγόνας, στο πλαίσιο της κατακόρυφης διαμόρφωσης. Έτσι επιλέγονται το μήκος αυτό και ο όγκος που δίνει η οριζόντια διαμόρφωση ως παράμετροι του προβλήματος, και ζητείται ο υπολογισμός του σχήματος καθώς και της πίεσης της σταγόνας. Τα δύο τελευταία μεγέθη παρέχονται με την μορφή αρχικής πρόβλεψης μέσω της αντίστοιχης λύσης για οριζόντιο CPS. Με τον τρόπο αυτό διερευνάται η ισχύς των δυνάμεων πρόσφυσης ώστε να υπερνικήσουν την βαρύτητα παρέχοντας έτσι κατακόρυφη στατική διαμόρφωση της σταγόνας. Επειδή δε για μεγάλες σχετικά διαφορές πίεσης το σχήμα που παίρνει η

οριζόντια διαμόρφωση είναι μέρος σφαίρας που προσκολλάται στο τοίχωμα με δεδομένη γωνία επαφής, εδώ υπάρχει και διαθέσιμη αναλυτική περιγραφή αυτής της διαμόρφωσης, αυτή είναι και η πρώτη αρχική πρόβλεψη που χρησιμοποιούμε για το πρόβλημα. Καθώς μειώνεται η διαφορά πίεσης στην οριζόντια διαμόρφωση ο όγκος της σταγόνας μεγαλώνει, το σχήμα αποκλίνει από το σφαιρικό και συνεπώς ως αρχική συνθήκη χρησιμοποιείται η επίλυση του αξονοσυμμετρικού προβλήματος.

Τα παραπάνω υλοποιούνται στο κύριο μέρος του κώδικα στο οποίο αρχικά γίνεται η επιλογή της μορφής με την οποία θα δοθεί η αρχική τιμή της απόστασης από το κέντρο. Οι δυνατότητες είναι είτε: 1) να θεωρηθεί ως αρχική τιμή μια μορφή σφαίρας για τα σημεία της επιφάνειας που είναι προσκολλημένη πάνω στο στερεό υπόστρωμα με δεδομένη γωνία επαφής, για τον χώρο που βρίσκεται το πρόβλημα μας. Ο όγκος σε αυτήν την περίπτωση δίδεται από την σχέση (13α).

2) να θεωρηθεί μια παλιότερη τελική τιμή αδιάστατης απόστασης από κέντρο για ίδια γωνία επαφής, αλλά διαφορετικής απόστασης μεταξύ του ανώτερου και κατώτερου σημείου επαφής και διαφορετικού όγκου που θα ορίζεται από την νέα απόσταση. Το σχήμα όσο και ο όγκος θα δίνονται από την αναλυτική λύση για κομμάτι σφαίρας με δοσμένη γωνία επαφής. Στην περίπτωση αυτή η αριθμητική επίλυση θα επηρεαστεί μέσω της αύξησης της αδιάστατης εξωτερικής πίεσης,  $P_{out}/(\sigma/R_{st})$ , και του αριθμού Bond ( $Bo = (R_{st}^2 \rho g) / \sigma$ ) που εκφράζει την σημασία της βαρύτητας.

3) να διαβαστεί το προφίλ ενός αξονοσυμμετρικού σχήματος ως προς τον άξονα Y και να αναπαραχθεί τρισδιάστατα, με ταυτόχρονη μετατροπή του σε σφαιρικές συντεταγμένες (από τις αρχικές κυλινδρικές) καθώς επίσης και η τιμή της πίεσης  $P_0$ , ως αρχική πρόβλεψη για δεδομένο χαρακτηριστικό μήκος  $R_{st}$  και όγκο. Τα τελευταία προέκυψαν από την επίλυση του αξονοσυμμετρικού προβλήματος που έδωσε το συγκεκριμένο προφίλ.

4) Τέλος να διαβαστεί προηγούμενη αριθμητική λύση που βρέθηκε με χρήση της παρούσας τρισδιάστατης μεθοδολογίας, ως προς το σχήμα και την πίεση, όμως ο όγκος και το μήκος θα αντιστοιχούν σε αξονοσυμμετρικό σχήμα που προέκυψε για μικρή διαφορά πίεσης.

Η συνέχεια έχει την αρχή της επανάληψης του υπολογισμού των πινάκων για την Newton-Raphson και της επίλυσης τους με την ARROW. Αν δεν επιτυγχάνεται η επιθυμητή σύγκλιση, μπαίνει στην υπορουτίνα DOMI της δημιουργίας των διαφορετικών δισδιάστατων στοιχείων όπου υπολογίζονται τα ολοκληρώματα του κάθε όρου για τις εξισώσεις που επηρεάζει. Επόμενο κομμάτι είναι ο υπολογισμός των ολοκληρωμάτων για τα πεπερασμένα στοιχεία του ορίου στο  $\phi=0$ , όπως και η επιβολή των σταθερών τιμών στα  $\theta=0$  και  $\theta=\pi$ . Η υπορουτίνα για τις συνοριακές συνθήκες ονομάζεται BOUND. Έπειτα από τον υπολογισμό του πίνακα B των Residuals και του Ιακωβιανού πίνακα A, όπως και των υποπινάκων τελευταίας γραμμής ROW, τελευταίας στήλης COLUMN και του τελευταίου διαγώνιου στοιχείου HEAD της Ιακωβιανής, μεταφέρονται στην εξωτερική υπορουτίνα ARROW για τον υπολογισμό της διαφοράς με την προηγούμενη τιμή λύσης, δηλαδή τα  $\Delta R_j$  και  $\Delta P_0$ , τα οποία μάλιστα δίνονται πίσω από τον πίνακα των υπολοίπων (RESIDUALS), τον B. Βρίσκονται οι νέες τιμές για τα  $R_j$  και  $P_0$  όπως και υπολογίζεται το άθροισμα των αποκλίσεων από τις

προηγούμενες τιμές ώστε να συγκριθεί με την συνθήκη σύγκλισης. Αν ικανοποιηθεί η συνθήκη τυπώνονται τα αποτελέσματα σε αρχείο .dat .

### 3.3.2 Αρχική τιμή Σφαίρας

Η πρώτη περίπτωση αρχικής τιμής για το πρόβλημα είναι να οριστεί το πρόβλημα μετατροπής ενός τμήματος σφαίρας για το υγρό του συγκεκριμένου προβλήματος σε κατακόρυφο επίπεδο. Υπολογίζεται ο όγκος του συγκεκριμένου τμήματος μέσα από ειδική εξίσωση για μερική σφαίρα, και επιθυμείται να παραμείνει σταθερός για τον υπολογισμό της μορφής της επιφάνειας και της απόστασης από το κεντρικό σημείο του προβλήματος. Η αρχική πίεση δίνεται τόση ώστε να ισχύει  $\Delta P = 2\sigma/R_{\sigma\phi}$  που είναι η πίεση της επιφανειακής τάσης σε μια απειροστή επιφάνεια, για μια σταγόνα μορφής σφαίρας . Η αδιαστατοποίηση γίνεται ως προς το ήμισυ της απόστασης του ανώτερου ή του κατώτερου σημείου από το κεντρικό που ισούται με  $R_{st} = R_{sf} * \sin(\theta_{\epsilon\tau\iota})$ . Επομένως και η αδιαστατοποίηση του όγκου και της πίεσης θα γίνει αντίστοιχα. Η γωνία επαφής είναι ουσιαστικά η μοναδική μεταβλητή που δίνει ο χρήστης στο πρόβλημα αφού ορίζεται ότι  $P_{01} = 2$  ως μια αδιάστατη τιμή η οποία αντιστοιχεί στην περίπτωση που το μήκος αναφοράς είναι η ακτίνα της σφαίρας. Στο πρόβλημα μας το μήκος αναφοράς που ορίζεται είναι η απόσταση του άνω και κάτω σημείου επαφής της επιφάνειας με τον τοίχο από το κέντρο των αξόνων και όχι η ακτίνα της σφαίρας. Επίσης σημαντικό ρόλο παίζει η τιμή της αδιάστατης μεταβλητής Bond, η οποία είναι ανάλογη του τετραγώνου του μήκους αναφοράς. Εφόσον είναι μέρος σφαίρας θεωρείται ότι η αδιαστατοποίηση θα συμβεί με την απόσταση των σημείων της επαφής στο τοίχωμα από το κέντρο του επιπέδου μας. Οπότε η ήδη αδιαστατοποιημένη πίεση πρέπει να υπολογιστεί εκ νέου με το καινούριο μήκος αναφοράς. Έστω η μεταβλητή  $P_0$  σε μονάδες Pascal, η μεταβλητή  $P_{01}$  αδιαστατοποιημένη πίεση ως προς το κέντρο της σφαίρας και  $P_{02}$  η αδιαστατοποιημένη πίεση ως προς το κέντρο των αξόνων. Καθώς το θεωρητικό κέντρο της σφαίρας σε περίπτωση μερικής σφαίρας διαφέρει από το κέντρο των αξόνων που χρησιμοποιείται, πρέπει να γίνει αναγωγή της πίεσης αυτής σε αδιάστατη μορφή με διαφορετικό μήκος αναφοράς. Τότε ισχύει:

$$P_{01} = \frac{P_0}{R_{\sigma\phi}}$$

και

$$P_{02} = \frac{P_0}{R_{st}}$$

βρίσκοντας την σχέση της αδιαστατοποιημένης ως προς την σφαίρα με την αδιαστατοποιημένη πίεση ως προς την απόσταση της διεπαφής από κέντρο. Διαιρώντας τις δύο εξισώσεις προκύπτει

$$P_{02} = \frac{R_{st}}{R_{\sigma\varphi}} P_{01} = \sin(\theta_{\varepsilon\pi}) P_{01}$$

Με την ίδια μεθοδολογία αποδεικνύεται ότι

$$V_{02} = \frac{R_{\sigma\varphi}^3}{R_{st}^3} V_{01} = \frac{1}{\sin^3(\theta_{\varepsilon\pi})} V_{01}$$

Οι τύποι για τον όγκο της μερικής σφαίρας και την απόσταση κάθε σημείου της από το κέντρο των συντεταγμένων υπολογίζονται από την αναλυτική γεωμετρία για  $\theta$  από 0 έως  $\pi$  και  $\varphi$  από 0 έως  $\pi/2$ . Έτσι προκύπτει ότι ο όγκος ενός τεταρτοσφαιριδίου που προσκολλάται σε επίπεδη επιφάνεια με γωνία επαφής  $\theta_{\varepsilon\pi}$  δίνεται από την σχέση:

$$V = \frac{\pi R_{\sigma\varphi}^3}{3} \left( 1 - \frac{3}{2} \cos \theta_{\varepsilon\pi} + \frac{1}{2} \cos^3 \theta_{\varepsilon\pi} \right)$$

ενώ η απόσταση του κάθε σημείου της από το κέντρο με τον τύπο:

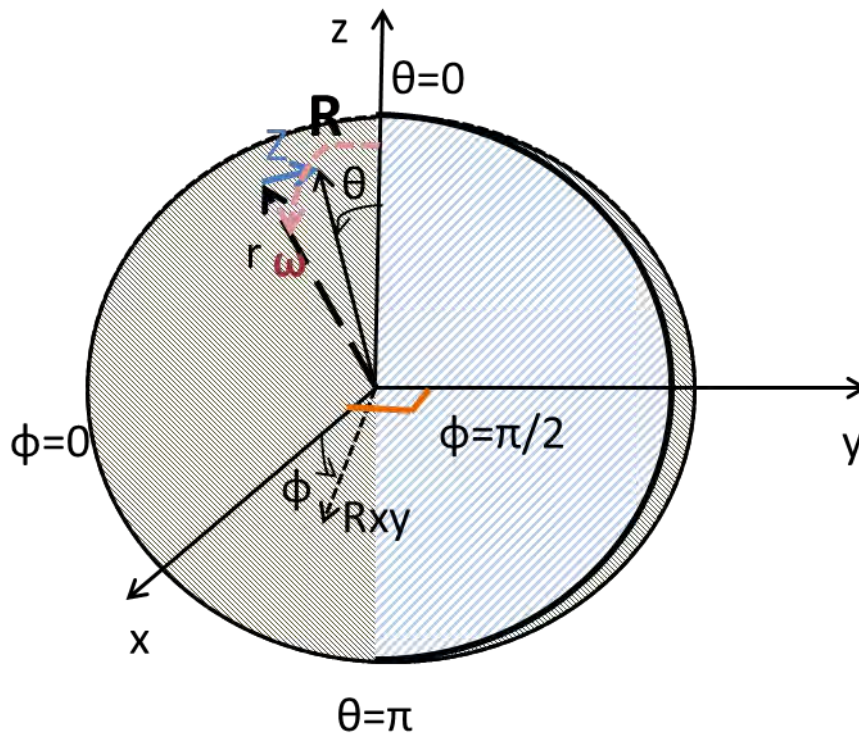
$$R = R_{\sigma\varphi} \left( \sqrt{\cos^3 \theta_{\varepsilon\pi} \sin^2 \theta \sin^2 \varphi + \sin^2 \theta_{\varepsilon\pi}} - \cos \theta_{\varepsilon\pi} \sin \theta \sin \varphi \right)$$

### 3.3.3 Αρχική τιμή Σταγόνας για Τοίχωμα σε Οριζόντιο Επίπεδο

Η επίλυση του προβλήματος για το προφίλ της επιφάνειας της σταγόνας πάνω σε ένα οριζόντιο επίπεδο, δίνεται ως συνδυασμός ζευγών τιμών της προβολής  $r_1$  του σημείου της επιφάνειας ως προς το επίπεδο και του ύψους  $Z_1$ , το οποίο βγαίνει συναρτήσεως της προβολής  $r_1$ .

Στρέφοντας το επίπεδο που κάθετα η σταγόνα από οριζόντιο σε κατακόρυφο πρέπει να γίνει μετατροπή του κυλινδρικού συστήματος σε σφαιρικές συντεταγμένες με διαφορετικό κατακόρυφο άξονα  $z$ . Το  $Z_1$  του κυλινδρικού προβλήματος αντιστοιχεί στην προβολή του διανύσματος της απόστασης από το κέντρο του σφαιρικού συστήματος ως προς τον οριζόντιο άξονα  $y$  του κατακόρυφου προβλήματος, που είναι ο κάθετος άξονας στο κατακόρυφο επίπεδο ( $Z_1 \leftrightarrow y$ ). Το  $r_1$  υποδηλώνει την προβολή του διανύσματος του σημείου στην επιφάνεια της σταγόνας πάνω στο επίπεδο  $xz$  του κατακόρυφου προβλήματος. Στις σφαιρικές συντεταγμένες ισχύει ότι η προβολή ενός διανύσματος σε σφαιρικές συντεταγμένες στον άξονα  $y$  ισούται με την απόσταση από το κέντρο επί τα ημίτονα των  $\theta$  και  $\varphi$ .

$$y = R \sin \theta \sin \varphi = Z_1$$



Σχήμα 10 Σχεδιάγραμμα αντιστοίχισης συντεταγμένων του αξονοσυμμετρικού με τις σφαιρικές συντεταγμένες του προβλήματος

Γνωρίζοντας τις τιμές κάθε ζεύγους των  $r_1, Z_1$  μπορεί να υπολογιστεί η τιμή της απόστασης  $R$  του σημείου, για το οποίο ωστόσο αγνοείται η θέση του στο χώρο. Η απόσταση βρίσκεται από το πυθαγόρειο για το τρίγωνο που σχηματίζουν τα τρία διανύσματα.

$$R = \sqrt{r_1^2 + Z_1^2}$$

Για να αντιστοιχηθεί μια απόσταση  $R$  που προκύπτει από τα ζεύγη των  $r_1, Z_1$  σε ένα σημείο του πλέγματος μας με συγκεκριμένες τιμές για τα  $\theta$  και  $\phi$ , θα χρειαστεί να χρησιμοποιηθεί κάποια μορφή προσέγγισης των σημείων με σφαιρικές συντεταγμένες από τα σημεία με συντεταγμένες  $(r_1, z_1, \omega)$  την  $\omega$  που υπολογίστηκαν. Παρακάτω δίνεται αναλυτικά μία τέτοια διαδικασία περιγραφής του αξονοσυμμετρικού σχήματος με το εστραμμένο σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων του σχήματος 9.

### 3.3.4 Μέθοδος Αντιστοίχισης σε Σφαιρικές

Μια επιλογή είναι να επιλυθεί προσεγγιστικά η εξίσωση που δημιουργείται για  $r_1$  από 0 έως  $r_{\max}$ , για όλες τις διαφορετικές τιμές του πλέγματος, θεωρώντας το  $Z_1$  συνάρτηση με μεταβλητή το  $r_1$ . Γνωρίζοντας τις τιμές του  $Z_1$  για συγκεκριμένες τιμές του  $r_1$  δημιουργείται μία συνάρτηση που θα κάνει γραμμική παρεμβολή αυτών με τις συναρτήσεις παρεμβολής Lagrange. Για λιγότερο υπολογιστικό βάρος μπορεί να δημιουργηθεί αυτή η συνάρτηση τμηματικά ανά πεπερασμένα στοιχεία και να ενωθούν στους κόμβους που ενώνουν τα

συγκεκριμένα στοιχεία. Τέλος λόγω της μη γραμμικότητας της εξίσωσης θα προτιμηθεί η επίλυση με Newton-Raphson εφόσον ικανοποιούνται οι συνθήκες για μη απόκλιση της μεθόδου. Εξ' αιτίας της μεγάλης ανομοιογένειας της εξίσωσης, επειδή θα αποτελείται από αυτογενή κομμάτια, χρειάζεται η αρχική προσέγγιση λύσης που προβλέπεται από τον χρήστη να βρίσκεται κοντά στην τελική.

Η μορφή που θα δώσει η προσέγγιση της συνάρτησης του  $Z_1$  με συναρτήσεις βάσης θα είναι

$$Z_1(r_1) = \sum_{i=1}^{nnode} Z_{1i} B_i(r_1)$$

Αντικαθιστώντας προκύπτει η εξίσωση που πρέπει να επιλυθεί.

$$Z_1 = R \sin\theta \sin\varphi \Rightarrow$$

$$\frac{Z_1}{R} = \sin\theta \sin\varphi \Rightarrow$$

$$\frac{Z_1(r_1)}{\sqrt{r_1^2 + Z_1(r_1)^2}} = \sin\theta \sin\varphi \Rightarrow$$

$$\frac{\sum Z_{1i} B_i}{\sqrt{r_1^2 + (\sum Z_{1i} B_i)^2}} = \sin\theta \sin\varphi$$

Επιλύοντας την παραπάνω σχέση, θέτοντας τις τιμές για γωνίες  $\theta$  και  $\varphi$  που αντιστοιχούν σε σημεία του πλέγματος επιλύεται η εξίσωση με άγνωστη την  $r_1$ . Λόγω της μη γραμμικότητας της σχέσης θα χρησιμοποιηθεί η μέθοδος Newton-Raphson.

Μια από τις προϋποθέσεις της Newton-Raphson είναι να μην μηδενίζεται η εξίσωση της παραγώγου σε κάποιο σημείο από την αρχική τιμή και πηγαίνοντας προς την προσεγγιστική λύση, καθώς θα προκληθεί διαίρεση με το μηδέν στον σχηματισμό της νέας τιμής που προσεγγίζει την λύση. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα για  $r_1=0$  το  $Z_1$  παίρνει την μέγιστη τιμή του ενώ τα  $\varphi$  και  $\theta$  είναι  $\pi/2$ . Επομένως η εξίσωση και η παράγωγος μηδενίζονται. Για το συγκεκριμένο σημείο του πλέγματος θα αποφευχθεί να βρεθεί λύση με επίλυση της Newton-Raphson αλλά θα οριστεί κατ' ευθείαν η τιμή της απόστασης από το κέντρο  $R$  για  $r_1=0$ , ως ακολούθως:

$$R\left(\theta = \frac{\pi}{2}, \varphi = \frac{\pi}{2}\right) = Z_{1max}(r_1 = 0)$$

Όταν επιτευχθεί σύγκλιση της Newton-Raphson σε μία λύση  $r_{1res}$  τότε για εκείνα τα  $\theta_j$  και  $\varphi_j$  του πλέγματος αντιστοιχίζεται

$$R_j(\theta_j, \varphi_j) = \sqrt{r_{1res}^2 + \left(\sum Z_{1i} B_i(r_{1res})\right)^2}$$

## 3.4 Δοκιμαστική Λειτουργία και Επαλήθευση (Benchmark-test run)

### 3.4.1 Επαλήθευση με Ημισφαίριο Μικρής Ακτίνας

Για το συγκεκριμένο πρόβλημα η δοκιμή επαλήθευσης που χρησιμοποιήθηκε για τον κώδικα ήταν η επιλογή του να δίνεται πολύ μικρή απόσταση των άνω και κάτω άκρων από το κέντρο σε επίπεδο μικρών ώστε να θεωρούνται μηδαμινές οι δυνάμεις βαρύτητας στην σταγόνα και να σχηματίζει μορφή σφαίρας λόγω των επιφανειακών τάσεων στην τελική λύση. Σαν παράμετροι στον κώδικα δίνονται αρχική πίεση και απόσταση από το κέντρο που αντιστοιχούν σε σφαίρα. Όπως επίσης τίθεται γωνία επαφής με το τοίχωμα 90 μοιρών. Έτσι το τελικό αποτέλεσμα οφείλει να είναι κομμάτι σφαίρας και μάλιστα ένα μισό ημισφαίριο.

Η φυσική απόδειξη της προηγούμενης θεωρίας είναι ότι για την περίπτωση σφαίρας το ισοζύγιο απλοποιείται σε ισορροπία ανά απειροστή επιφάνεια των δυνάμεων της πίεσης και των δυνάμεων λόγω της επιφανειακής τάσης. Επίσης μηδενίζονται οι όροι που πολλαπλασιάζονται επί την τιμή της εφαπτομένης της ακτίνας προς το  $\theta$  ή προς το  $\phi$ , καθώς η τελική λύση σφαίρας δίνει σταθερή αδιάστατη απόσταση από το κέντρο ίση με 1. Επίσης ο αδιάστατος όγκος που θα ορίζει, με βάση την ακτίνα του ημισφαιρίου, αντιστοιχεί σε  $\pi/3$ . Η τιμή προκύπτει καθώς  $4\pi/3$  είναι ο όγκος ολόκληρης σφαίρας με ακτίνα 1 και το χωρίο που ασχολείται το πρόβλημα είναι το μισό ενός ημισφαιρίου ή αλλιώς  $1/4$  σφαίρας.

Σε μια σταγόνα μορφής σφαίρας με συντελεστή επιφανειακής τάσης  $\sigma$  και ακτίνα σταγόνας  $R_{\sigma\phi}$  η διαφορά πίεσης υγρού-αερίου που χρειάζεται για να ισορροπούνται οι επιφανειακές δυνάμεις δίνεται από τον τύπο  $\Delta P = 2\sigma / R_{\sigma\phi}$ . Θέτοντας τιμή αδιαστατοποίησης των πιέσεων τον όρο  $\sigma / R_{\sigma\phi}$ , η αδιάστατη τιμή διαφοράς πίεσης που επιλύει την εξίσωση του προβλήματος, για πολύ μικρή ακτίνα, είναι  $\Delta P = 2$ . Έτσι για επίλυση της εξίσωσης μ' αυτήν την τιμή ως τελική λύση για εσωτερική πίεση  $P_0$  (η εξωτερική θεωρείται μηδενική,  $\Delta P = P_{in} - P_{out}$ ) αντιστοιχεί το πρόβλημα σε σχήμα σφαιρικό.

Η επαλήθευση της τελικής αδιάστατης εξίσωσης (14) που χρησιμοποιήθηκε για την δημιουργία των πεπερασμένων στοιχείων και την επίλυση της Newton-Raphson γίνεται όταν για περίπτωση σφαίρας που ισχύει ότι η απόσταση από κέντρο είναι σταθερή και ανεξάρτητη των μεταβλητών  $\theta$  και  $\phi$  ( $R(\theta, \phi) = R_{\sigma\phi}$ ). Υπολογίζοντας τα ολοκληρώματα και παραβλέποντας τον όρο της βαρυτικής δύναμης στο ισοζύγιο τάσεων, όλοι οι όροι της βασικής εξίσωσης απλοποιούνται και μηδενίζονται, θεωρώντας την γωνία επαφής  $\theta_{\text{επ}} = 0$  μοίρες και αντικαθιστώντας την στον όρο της συνοριακής συνθήκης αποδεικνύεται ότι όλοι οι όροι αλληλοαναιρούνται και η  $R_{\sigma\phi}$  είναι λύση της εξίσωσης.



$$\begin{aligned}
& \iint_A B_i \left( P_0 - \frac{Rst^2}{\sigma} \rho g R \cos\theta - P_{\text{out}} \right) (R^2 \sin^2\theta \sin\phi - RR_\theta \sin\theta \cos\theta \sin\phi - RR_\phi \cos\phi) \\
& - \left[ \sin\theta \sin\phi \left( RR_\theta \sin\theta \frac{\partial B_i}{\partial \theta} + R \frac{R_\phi}{\sin\theta} \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \right. \\
& + \cos\theta \sin\phi \left( \left( R^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2\theta} \right) \sin\theta \frac{\partial B_i}{\partial \theta} - R_\theta \frac{R_\phi}{\sin\theta} \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \\
& \left. + \cos\phi \left( -R_\theta R_\phi \frac{\partial B_i}{\partial \theta} + (R^2 + R_\theta^2) \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \right] \frac{1}{\sqrt{R^2 + R_\theta^2 + \frac{R_\phi^2}{\sin^2\theta}}} d\theta d\phi \\
& + \int_{dS_1} \cos\theta_{ca} B_i \sqrt{R^2 + R_\theta^2} d\theta = 0
\end{aligned}$$

Απλοποιώντας όλους τους όρους που εμπεριέχουν  $R_\theta = R_\phi = 0$  τότε προκύπτει η εξίσωση που θα πρέπει να μηδενίζεται:

$$\begin{aligned}
& \iint_A B_i \left( P_0 - \frac{Rst^2}{\sigma} \rho g R \cos\theta - P_{\text{out}} \right) (R^2 \sin^2\theta \sin\phi) \\
& - \left[ \cos\theta \sin\phi \left( (R^2) \sin\theta \frac{\partial B_i}{\partial \theta} \right) + \cos\phi \left( (R^2) \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \right] \frac{1}{\sqrt{R^2}} d\theta d\phi \\
& + \int_{dS_1} \cos\theta_{ca} B_i \sqrt{R^2} d\theta = 0
\end{aligned}$$

Για την οποία κάνοντας διαδοχικές πράξεις και θεωρώντας το  $R_{st}^2$  απειροστό, αφού η σφαίρα είναι μεγέθους μικρομέτρου, ισχύει ότι:

$$\begin{aligned}
& \iint_A B_i (P_0 - P_{\text{out}}) (R^2 \sin^2\theta \sin\phi) \\
& - \left[ \cos\theta \sin\phi \left( (R^2) \sin\theta \frac{\partial B_i}{\partial \theta} \right) + \cos\phi \left( (R^2) \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right) \right] \frac{1}{R} d\theta d\phi \\
& + \int_{dS_1} -\cos(0^\circ) B_i R d\theta = 0 \Rightarrow
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \iint_A B_i (P_0 - P_{\text{out}}) (R^2 \sin^2\theta \sin\phi) - \left[ \sin\theta \cos\theta \sin\phi R \frac{\partial B_i}{\partial \theta} + R \cos\phi \frac{\partial B_i}{\partial \phi} \right] d\theta d\phi \\
& + \int_{dS_1} -B_i R d\theta = 0
\end{aligned}$$

Από ιδιότητες ολοκληρωμάτων και τριγωνομετρίας, και συγκεκριμένα του νόμο των τετραγώνων, του ημιτόνου διπλής γωνίας και την ολοκλήρωσης κατά παράγοντες ισχύουν ότι:

$$\iint_A \sin\theta \cos\theta \sin\phi R \frac{\partial B_i}{\partial \theta} d\theta d\phi = \iint_A -\sin\phi \cos 2\theta B_i R d\theta d\phi$$

και

$$\iint_A R \cos\phi \frac{\partial B_i}{\partial \phi} d\theta d\phi = \int_{dS_1} -B_i(\theta, 0) R d\theta + \iint_A \sin\phi B_i R d\theta d\phi$$

Για  $R=1$  και  $P_0 - P_{out} = 2$  που είναι η αδιάστατη πίεση για μια σφαίρα

$$\begin{aligned} \iint_A B_i 2 (\sin^2\theta \sin\phi) - [-\sin\phi \cos 2\theta B_i + \sin\phi B_i] d\theta d\phi - \int_{dS_1} -B_i(\theta, 0) d\theta \\ + \int_{dS_1} -B_i d\theta = 0 \end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας την ταυτότητα  $\cos 2\theta = 1 - 2\sin^2\theta$

$$\begin{aligned} \iint_A B_i 2 (\sin^2\theta \sin\phi) - [-\sin\phi(1 - 2\sin^2\theta)B_i + \sin\phi B_i] d\theta d\phi - \int_{dS_1} -B_i(\theta, 0) d\theta \\ + \int_{dS_1} -B_i d\theta = 0 \end{aligned}$$

και όλοι οι όροι αλληλοαναιρούνται αποδεικνύοντας ότι η εξίσωση επιλύεται για  $R=R_{σφαίρας}$ .

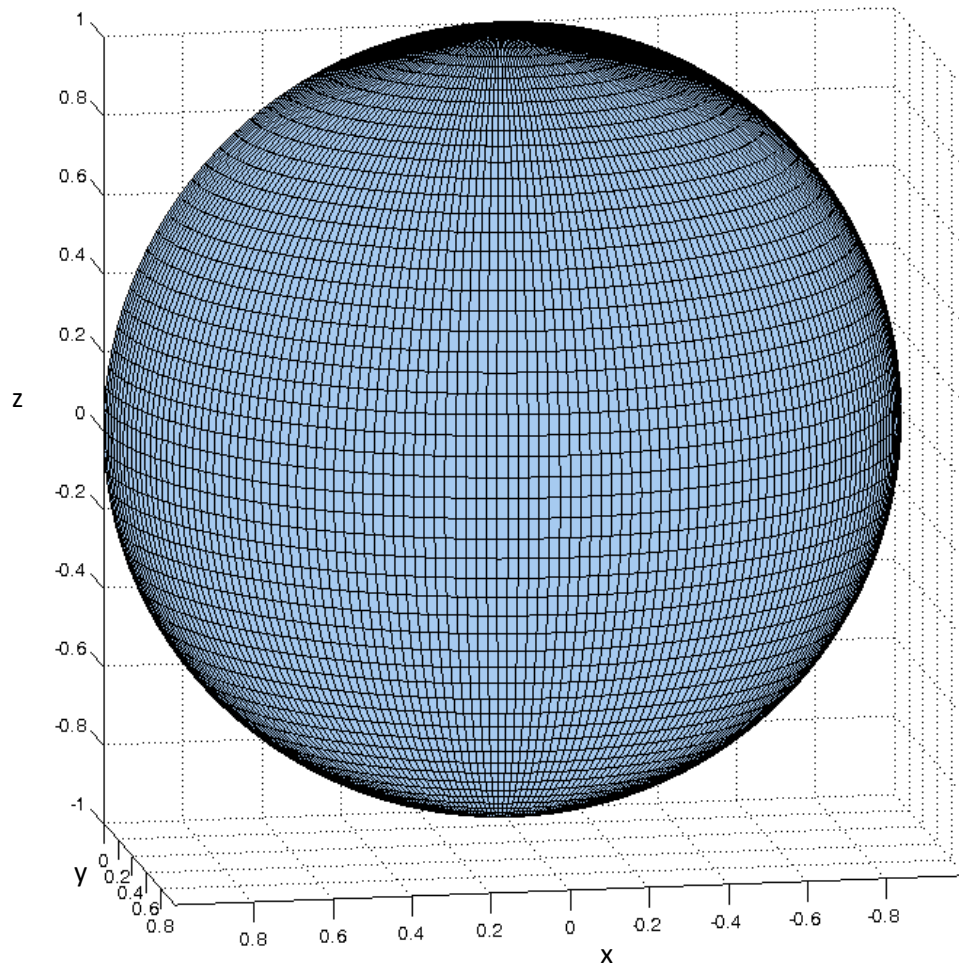
### 3.4.2 Δοκιμή Λειτουργίας για Ημισφαίριο ( $\theta_{επ} = 90^\circ$ , $R_{st} = 1\mu\text{m}$ )

Στο δοκιμαστικό τρέξιμο του προγράμματος, επιθυμείται να υπολογιστεί από το πρόγραμμα η απόσταση των σημείων από κέντρο αξόνων που να αντιπροσωπεύουν επιφάνεια σφαίρας, η οποία είναι η λύση στο οριζόντιο για μεγάλη υπερπίεση. Για να επιστραφεί σφαίρα χρειάζεται να οριστεί στο πρόγραμμα πολύ μικρή ακτίνα σταγόνας ώστε ο όρος της βαρύτητας να τείνει στο μηδέν. Από την τελική αδιαστατοποιημένη εξίσωση ο όρος που προέκυψε για την συμμετοχή της βαρύτητας στην διαφορά πίεσης της διεπιφάνειας είναι  $-\frac{Rst^2}{\sigma} \rho g R \cos\theta$  που σημαίνει ότι η συμμετοχή της βαρύτητας είναι ανάλογη του τετραγώνου της απόστασης  $Rst$  του ανώτερου και κατώτερου σημείου. Θέτοντας αυτή την απόσταση σε επίπεδο μικρών ή και λιγότερο, δηλαδή τάξης του  $10^{-6}$  μέτρων ο όρος εξαιτίας του τετραγώνου γίνεται απειροελάχιστος και ουσιαστικά δεν συνεισφέρει στην τελική εξίσωση. Το αποτέλεσμα είναι να επιδρούν μόνο οι δυνάμεις διαφοράς πίεσης και επιφανειακών τάσεων δίνοντας την ελάχιστη δυνατή επιφάνεια που μπορεί να καταλαμβάνει ο συγκεκριμένος όγκος υγρού δηλαδή τη μορφή σφαίρας.

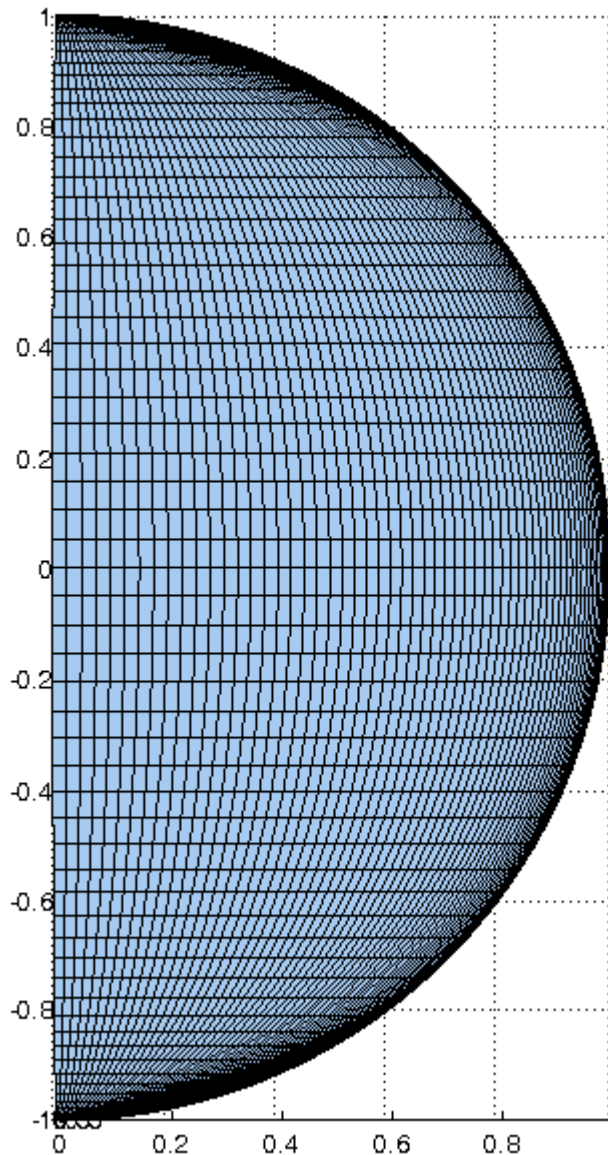
Στη πρώτη εκτέλεση του προγράμματος χρειάζεται να οριστούν οι τιμές των παραμέτρων του προβλήματος. Η πυκνότητα του υγρού λιθίου σε θερμοκρασίες λειτουργίας θεωρείται σταθερή και ίση με  $500 \text{ kg/m}^3$ . Η επιτάχυνση της βαρύτητας χρησιμοποιείται προσεγγιστικά με τιμή  $10 \text{ m/s}^2$ . Η πιο κρίσιμη επιλογή παραμέτρου και ταυτόχρονα πιο δύσκολη να οριστεί με ακρίβεια είναι ο συντελεστής επιφανειακής τάσης του λιθίου στις θερμοκρασίες λειτουργίας. Όπως έχει γίνει αναφορά στην εισαγωγή οι θερμοκρασίες λειτουργίας του

υγρού μέσου λιθίου στο CPS ποικίλουν από 200 έως 1200 βαθμούς κελσίου (°C). Σε μια τέτοια περιοχή θερμοκρασιών έγιναν διάφορα πειράματα για το λίθιο και τη συμπεριφορά του συντελεστή επιφανειακής τάσης. Γενικά όσο αυξάνεται η θερμοκρασία του συστήματος και ειδικώς στην επιφάνεια του CPS τόσο μειώνεται η ιδιότητα της επιφανειακής τάσης και συνεπώς μειώνεται ο συντελεστής. Η μείωση έχει μικρότερη επιρροή σε σχετικά χαμηλές θερμοκρασίες αλλά στις μεγάλες θερμοκρασίες παρουσιάζει εκθετική μείωση. Σε θερμοκρασίες έως και 500°C μια ενδεικτική και αντιπροσωπευτική τιμή είναι  $\sigma = 0.4 \text{ kg/s}^2$ . Επιπρόσθετες μεταβλητές που πρέπει να οριστούν για το πρόβλημα της σφαίρας είναι ότι η γωνία επαφής με το τοίχωμα για την συγκεκριμένη περίπτωση είναι 90 μοίρες. Το τελικό αποτέλεσμα θα προσδιοριστεί στις τιμές της ακτίνας για τα σημεία του πλέγματος στο χώρο που δημιουργείται για  $\theta$  από 0 έως  $\pi$  και  $\phi$  από 0 έως  $\pi/2$  και αντιστοιχεί σε ένα μισό ημισφαίριο. Όπως έχει αναφερθεί ήδη λόγω της μη γραμμικότητας της εξίσωσης η σημασία της αρχικής τιμής είναι πολύ έντονη. Αρχική απόκλιση σε ποσοστό 100% από την τελική λύση θα προκαλέσει και μη σύγκλιση του προβλήματος όπως αποδείχθηκε από διάφορες δοκιμές. Στην περίπτωση της δοκιμαστικής εκτέλεσης του κώδικα για ημισφαιρική επιφάνεια η αρχική τιμή είναι η αδιάστατη τιμή 1, ως σταθερή απόσταση από το κέντρο της σφαίρας για όλο τον χώρο. Η τιμή αυτή αναμένεται να επιστραφεί και ως τελική λύση. Όποια απόκλιση από την πραγματική τιμή προκύψει εκλαμβάνεται ως αριθμητικό λάθος αποκοπής λόγω της πεπερασμένης ακρίβειας της μεθόδου των πεπερασμένων αρχείων, καθώς και του αριθμητικού υπολογισμού των ολοκληρωμάτων με την μέθοδο Gauss. Ο όγκος που θα πρέπει να επιλυθεί είναι ο όγκος που καταλαμβάνει ένα μισό ημισφαίριο δηλαδή το ένα τέταρτο (1/4) του όγκου μιας σφαίρας  $V_{\sigma\phi} = \frac{4}{3}\pi R^3$ . Για αδιάστατη ακτίνα  $R=1$  προκύπτει αδιάστατος όγκος  $4\pi/3$ . Η υπερπίεση του προβλήματος είναι  $P_0=2\sigma/R_{\sigma\phi}$  και υπολογίζεται 800000Pa.

Το σχήμα της επιφάνειας που δημιουργείται για το σύνολο της σταγόνας παρουσιάζεται στα παρακάτω σχήματα. Το πρόγραμμα επιλύθηκε για τη μισή σταγόνα και το υπόλοιπο θεωρήθηκε από την συμμετρία ως προ το επίπεδο YZ της σταγόνας.



Σχήμα 11. Ημισφαιρική σταγόνα στο χώρο σε αδιάστατη μορφή, όπως προέκυψε από την δοκιμή του προβλήματος

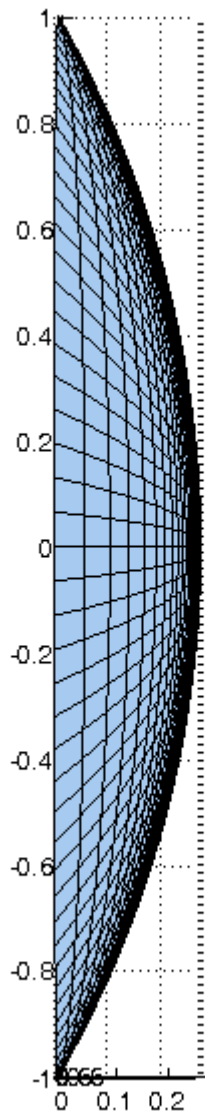


Σχήμα 12. Αριστερή όψη της Ημισφαιρικής Σταγόνας

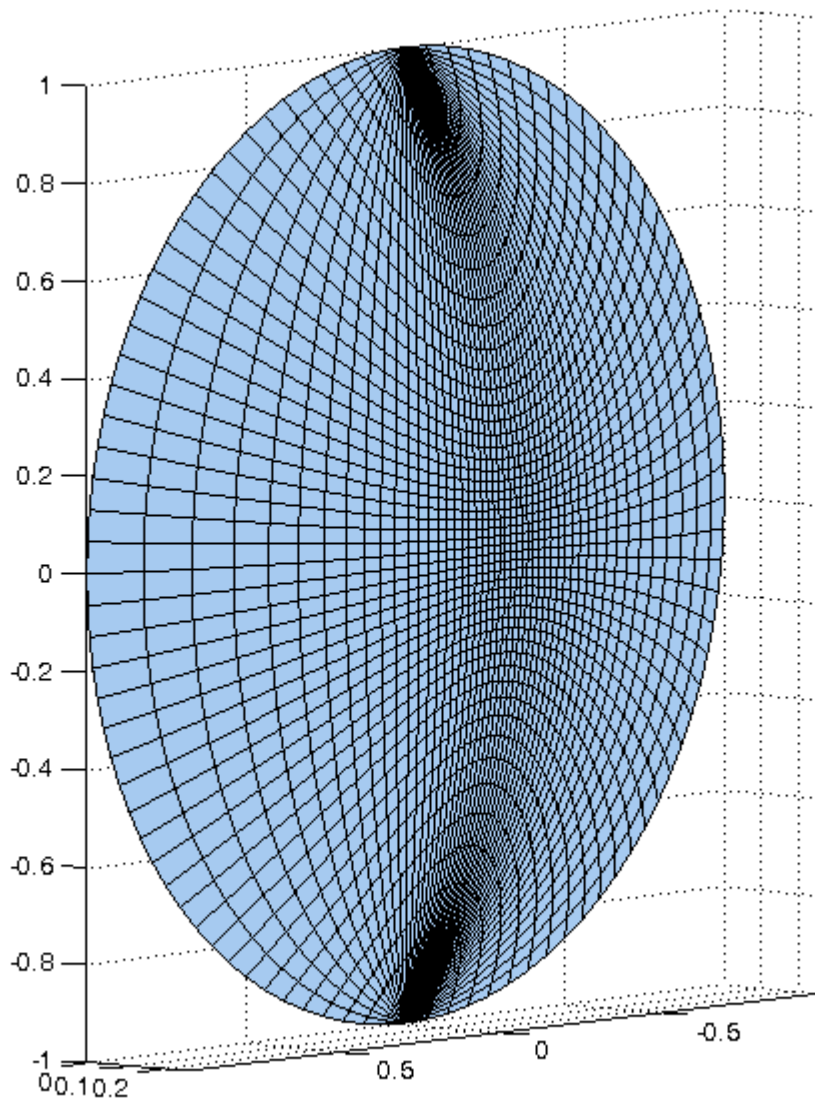
### 3.4.3 Δοκιμή Λειτουργίας για Διαφορετικές Γωνίες Επαφής ( $\theta_{\text{επ}} = 30^\circ$ , $115^\circ$ , $R_{\text{st}} = 1\mu\text{m}$ )

Μια ακόμη δοκιμή της συμπεριφοράς του αλγορίθμου πραγματοποιήθηκε για τιμή γωνίας επαφής της σταγόνας με το τοίχωμα  $\theta_{\text{ca}}=30^\circ$ . Οι υπόλοιπες παράμετροι θα παραμείνουν σταθεροί όπως επίσης και η απόσταση της αρχής των αξόνων από τα πάνω και κάτω σημεία επαφής που είναι ίση με  $10^{-6}$  m. Ο υπολογισμός της αρχικής τιμής απόστασης ενός σημείου από το θεωρητικό κέντρο της σφαιρικής σταγόνας θα γίνει μέσω του τύπου που έχει αναπτυχθεί στο κεφάλαιο 3.2.4 για αρχικές τιμές σφαιρικού σχήματος. Ομοίως θα υπολογιστεί ο όγκος που πρέπει να ικανοποιεί η σταγόνα όταν έχει σφαιρική μορφή,

ανεξαρτήτως βαρυτικών δυνάμεων. Η υπερπίεση υπολογίζεται από την γνώση ότι  $P_{01}=2$ , επομένως εκτελώντας τις πράξεις  $P_0=400000\text{Pa}$ . Το σχήμα που προέκυψε ως τελική λύση του αλγορίθμου είναι το εξής.

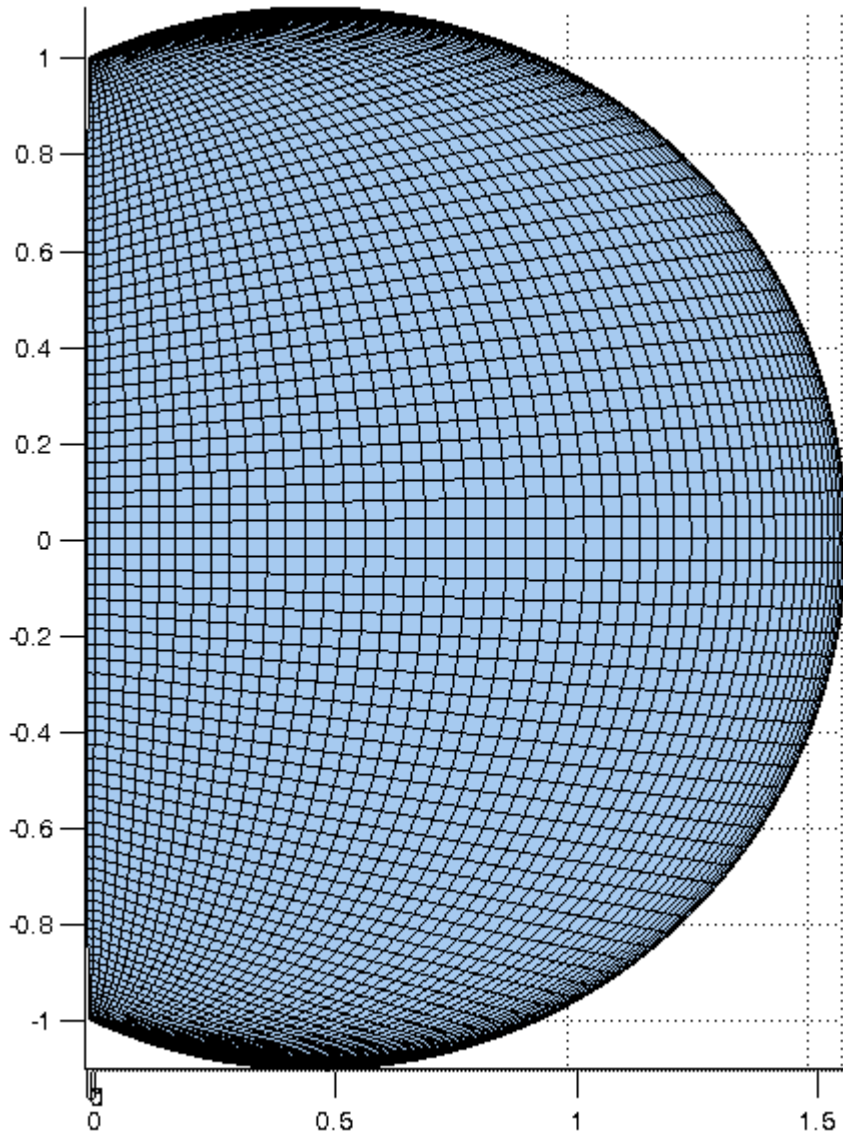


Σχήμα 13. Αριστερή όψη σταγόνας για  $\theta_{ca}=30^\circ$  μορφής μερικής σφαίρας μεγέθους  $10^{-6}\text{ m}$



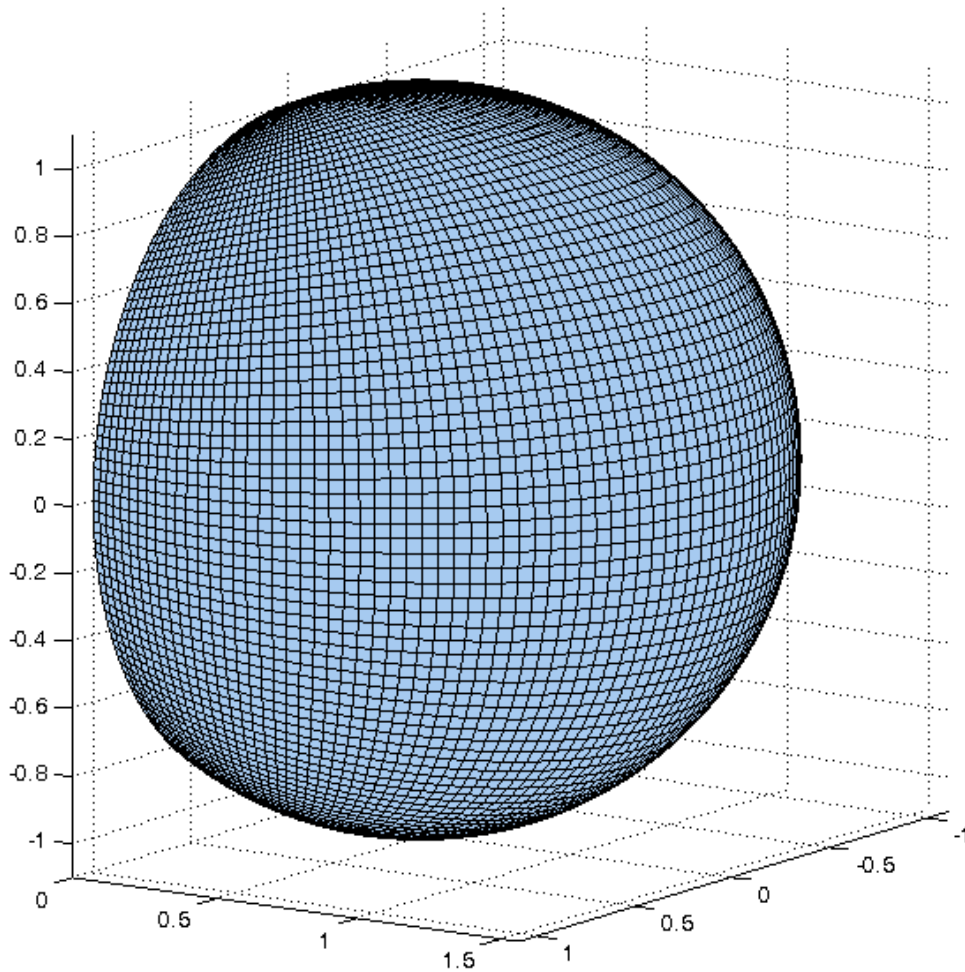
Σχήμα 14. Σχήμα υπολογισμένης σταγόνας για  $\theta_{ca} = 30^\circ$  μορφής μερικής σφαίρας μεγέθους  $10^{-6}$  m

Ομοίως για γωνία επαφής μεγαλύτερης των  $90^\circ$ , έστω ότι είναι  $\theta_{ca} = 115^\circ$  προκύπτει το αποτέλεσμα και με υπερπίεση υπολογισμένη  $P_0 = 725046$  Pa :



Σχήμα 15. Αριστερή όψη σταγόνας για  $\theta_{ca} = 115^\circ$  μορφής μερικής σφαίρας μεγέθους  $10^{-6}$  m

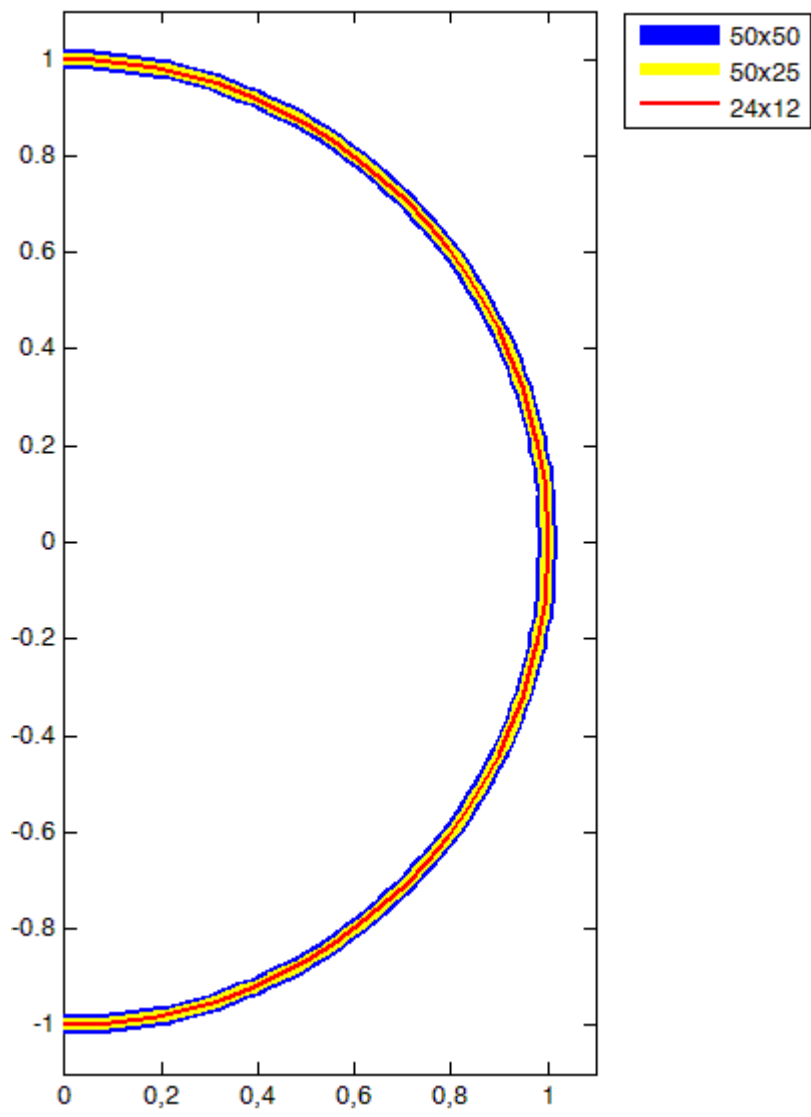


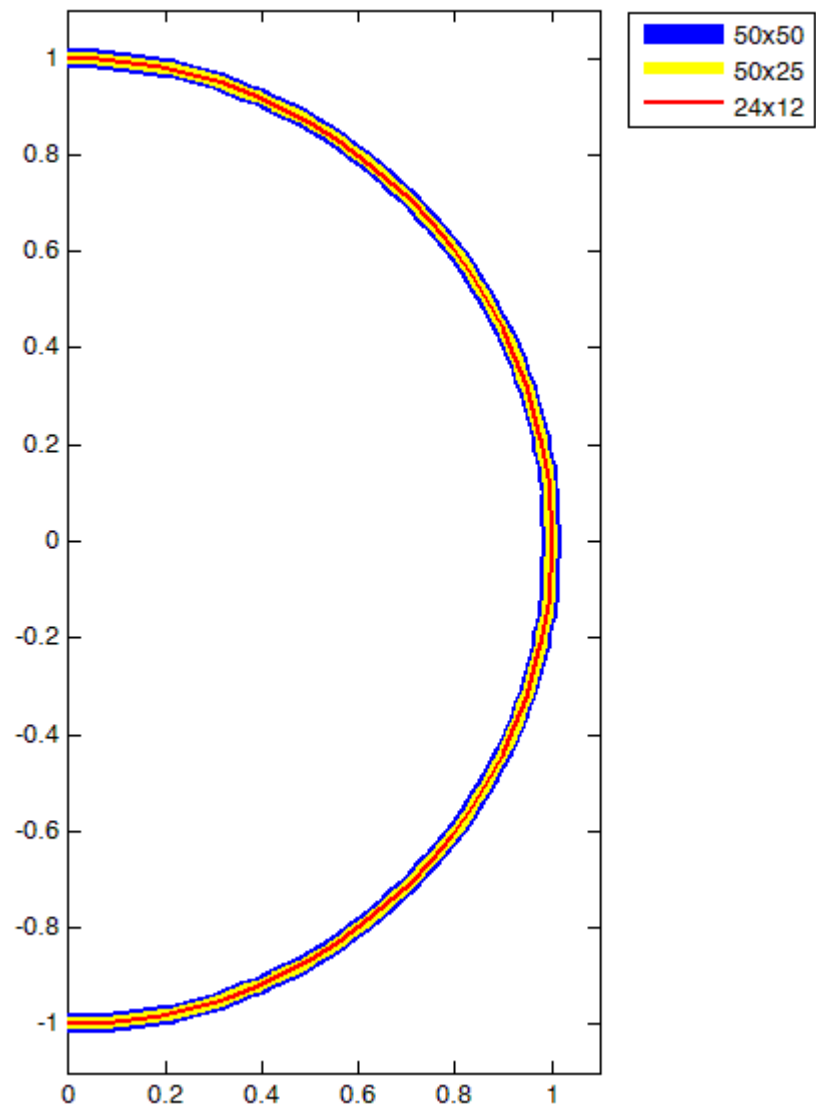


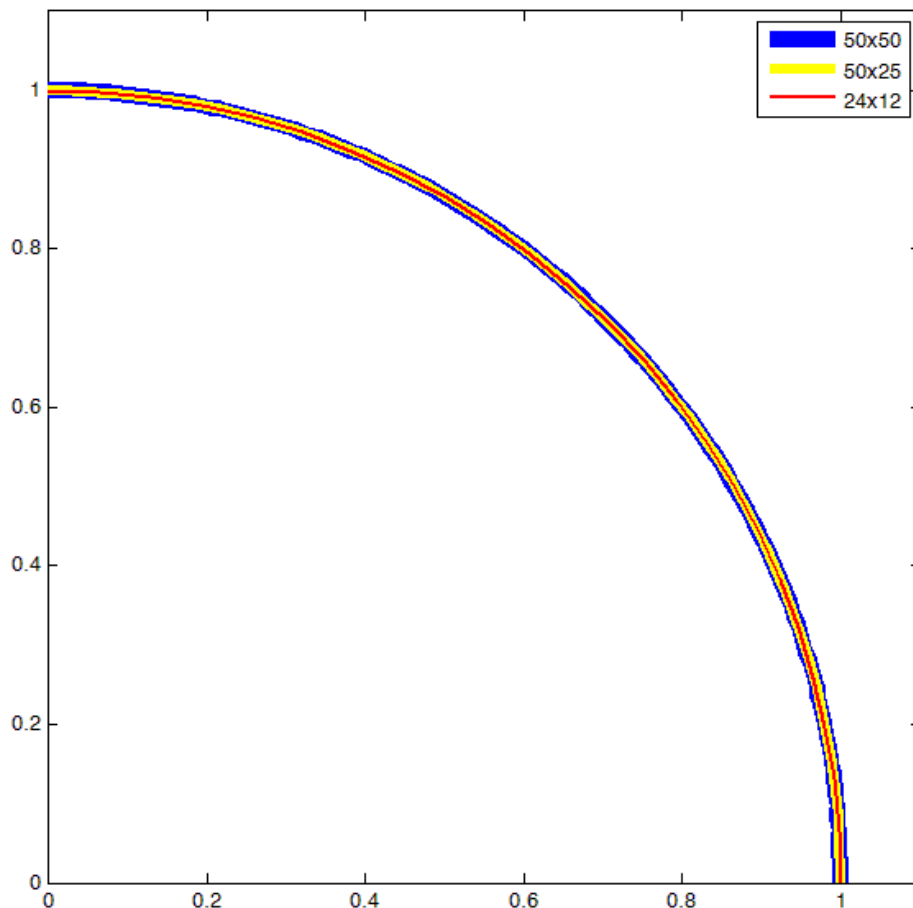
Σχήμα 16. Σχήμα υπολογισμένης σταγόνας για  $\theta_{ca} = 115^\circ$  μορφής μερικής σφαίρας μεγέθους  $10^{-6}$  m

### 3.4.4 Αριθμητική Σύγκλιση για Μερική σφαίρα ή Ημισφαίριο

Για την ανάλυση της ανεξαρτησίας του πλέγματος δοκιμάστηκαν τρία διαφορετικά πλέγματα για κάθε γωνία επαφής των δοκιμαστικών εκτελέσεων. Συγκεκριμένα το πρώτο προσεγγιστικό σε μία λογική τιμή είναι το  $24 \times 12$  με 24 να αντιστοιχεί στα πεπερασμένα στοιχεία κατά τον άξονα των  $\theta$  και 12 στον άξονα των  $\phi$ . Κατά συνέπεια θα δημιουργηθούν 49 και 25 σημεία στον κάθε άξονα αντίστοιχα. Τα δύο επιπλέον πλέγματα που εξετάστηκαν για σύγκριση είναι:  $50 \times 25$  και  $50 \times 50$ . Στην συνέχεια συγκρίθηκαν οι τιμές της τελικής επιφάνειας στα επίπεδα α) επαφής της σταγόνας με το τοίχωμα ( $\phi=0$ ), β) επίπεδο συμμετρίας YZ ( $\phi= \pi/2$ ) και γ) οριζόντιο επίπεδο, κάθετο στο τοίχωμα, που διέρχεται από την αρχή των αξόνων XY ( $\theta= \pi/2$ ) για να αποδειχθούν οι συγκλίσεις του πλέγματος στην λύση. Και στο κεφάλαιο των αποτελεσμάτων τα τρία συγκεκριμένα προφίλ των τελικών επιφανειών θα εμφανίζονται και συγκρίνονται μεταξύ τους.







Σχήμα 17A,B,Γ. Τομή επιφάνειας ημισφαιρικής σταγόνας Α) με επίπεδο  $\phi=0$ , Β) με επίπεδο  $\phi=\pi/2$  και γ) με επίπεδο  $\theta=\pi/2$

Το συμπέρασμα από τις συγκρίσεις των διαφορετικών πλεγμάτων για ίδια γωνία επαφής και σταγόνα μεγέθους μικρών είναι η σταδιακή σύγκλιση των αποτελεσμάτων σε μια επιφάνεια μορφής μερικής σφαίρας. Παρατηρείται ότι δεν επηρεάζει η μορφή του πλέγματος στην ακρίβεια της τελικής λύσης σε σταγόνες μεγέθους μικρών καθώς η αρχική τιμή είναι πολύ ακριβής και σχεδόν ταυτόσημη του τελικού αποτελέσματος, όπως αναμενόταν και από την θεωρία. Συγκεκριμένα αν και υπήρχε σύγκλιση της τελικής λύσης του αποτελέσματος σε 8 δεκαδικό ψηφίο, παρουσιάστηκε απόκλιση 5<sup>ου</sup> δεκαδικού ψηφίου από την αναλυτική ακριβή ομοιόμορφη λύση. Αιτία αυτού είναι πιθανώς η απόκλιση του υπολογισμού των ολοκληρωμάτων με την μέθοδο Gauss σε σχέση με την πραγματική τιμή τους.

Στην συνέχεια χρειάζεται να εξεταστεί η σύγκλιση του κώδικα για μεγαλύτερο μήκος επαφής της ακτίνας της σταγόνας και η συμπεριφορά των αποτελεσμάτων για διαφορετικά πλέγματα επίλυσης

Η πρώτη περίπτωση που εξετάστηκε είναι η περίπτωση να ικανοποιεί συνθήκη όγκου και αντίστοιχης απόστασης «καρφιτσωμένων» σημείων από την αρχή των αξόνων, που αντιστοιχούν σε μερική σφαίρα με συγκεκριμένη γωνία επαφής στην οποία η βαρύτητα

είναι αμελητέα. Μεγαλώνοντας το μέγεθος της σταγόνας, δηλαδή αυξάνοντας τον όγκο και την αντίστοιχη ακτίνα, η επιφάνεια αναμένεται να πάρει διαφορετική μορφή ισορροπίας λόγω της επίδρασης των βαρυτικών δυνάμεων. Η παραμετρική αυτή μελέτη είναι ανάλογη της μείωσης της υπερπίεσης στον αποθηκευτικό χώρο του υγρού.

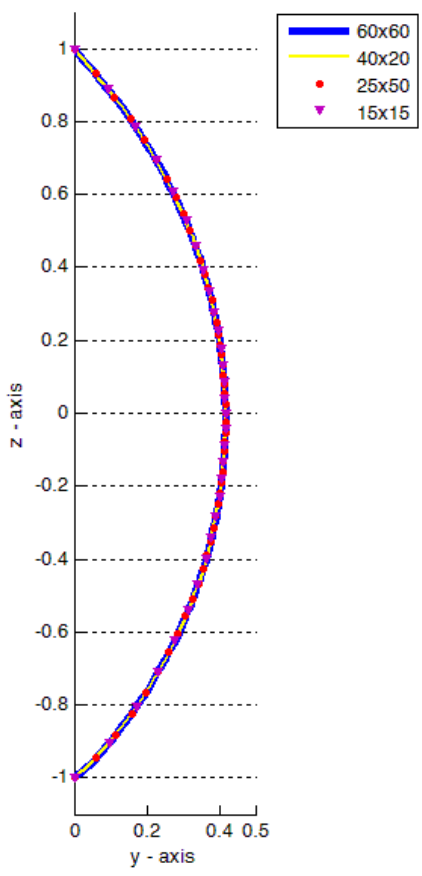
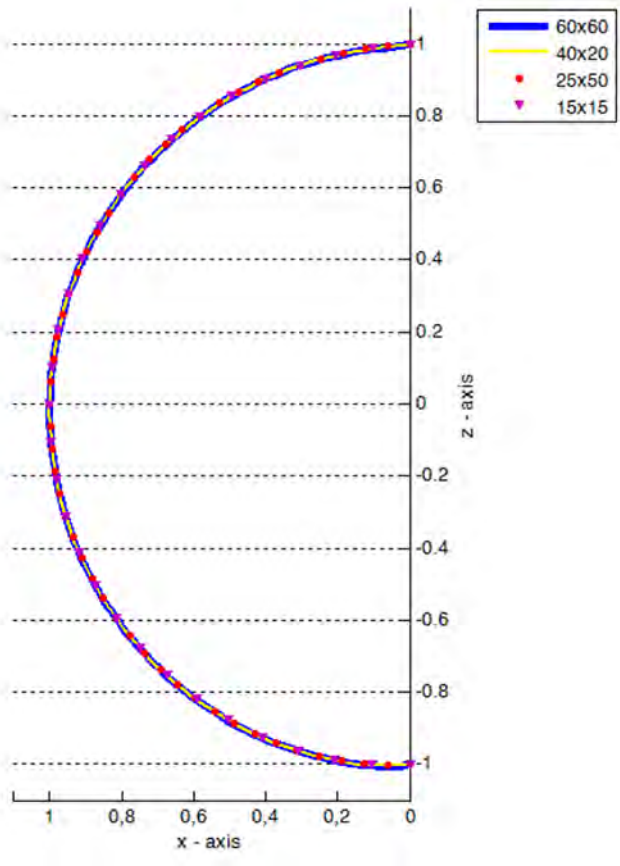
Ωστόσο σαν αρχική τιμή για να βρει λύση το πρόβλημα του δίνουμε την λύση μερικής σφαίρας για την συγκεκριμένη επιλεγμένη γωνία επαφής. Από ένα σημείο και μετά όσο μεγαλώνει η σταγόνα η μορφή θα αλλάζει όλο περισσότερο και σαν αρχική τιμή που βρίσκεται πιο κοντά στο τελικό αποτέλεσμα δίνεται από τον χρήστη το τελικό αποτέλεσμα μιας προηγούμενης εκτέλεσης για μερική σφαίρα μικρότερου μεγέθους και ίδιας γωνίας επαφής, σε σχέση με αυτό που εξετάζεται. Η αρχική αυτή λύση θα δοθεί σε αδιαστατοποιημένη μορφή ώστε να επεξεργάζεται το πρόγραμμα μόνο το σχήμα και όχι την πραγματική επιφάνεια που προέκυψε για μικρότερο όγκο. Ο νέος όγκος που θα δοθεί ως παράμετρος και η νέα υπερπίεση που θα δοθεί ως αρχική πρόβλεψη θα αντιστοιχούν σε μερική σφαίρα του νέου μήκους επαφής και έπειτα θα αδιαστατοποιούνται επ' αυτής. Αυτή η τακτική αποδείχθηκε να έχει αποτέλεσμα και να συγκλίνει σε λύση σε κάποιες περιπτώσεις για τις οποίες η αρχική τιμή σφαίρας αποτυγχάνει λόγω της σημαντικής απόκλισης της από την πραγματική λύση.

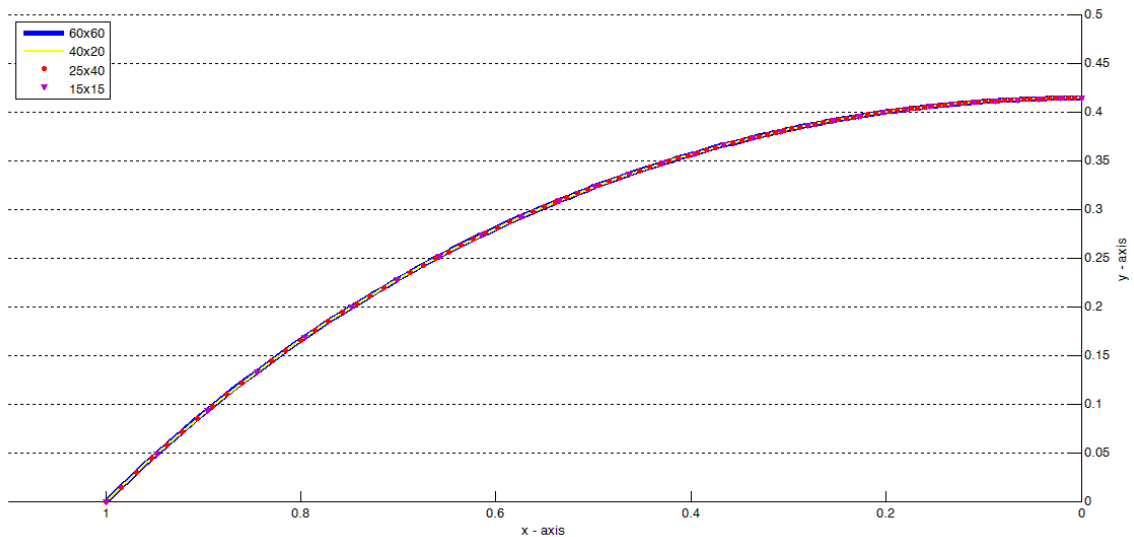
Σε κάθε διαφορετική επιφάνεια που υπολογίζεται από το πρόγραμμα παρουσιάζονται τα τρία προφίλ που αναφέρθηκαν προηγουμένως, το προφίλ διεπιφάνειας με τοίχωμα, αυτό του κατακόρυφου συμμετρικού επιπέδου κάθετο στο τοίχωμα και αυτό που είναι κάθετο στο τοίχωμα και οριζόντιο περνώντας από το κέντρο των αξόνων.

Η εκτέλεση του προγράμματος έγινε για μεγέθη ακτίνας μεγαλύτερα της τάξεως του μικρομέτρου. Η γωνία που εξετάστηκε είναι  $\theta_{ca}=45^\circ$  και η πρώτη εκτέλεση έγινε για συνθήκη ακτίνας «καρφιτσωμένων» σημείων  $R_{st}=10^{-3}$  m. Ο όγκος προκύπτει από την γωνία επαφής για μορφή μερικής σφαίρας αδιάστατος ως προς την ακτίνα. Το πρόγραμμα εκτελέστηκε με τέσσερα πλέγματα πεπερασμένων στοιχείων ως προς τους άξονες  $\theta$  και  $\phi$  αντίστοιχα:

i) 60x60,      ii) 40x20,      iii) 25x50,      iv) 15x15.

Πρέπει να σημειωθεί ότι τα συγκεκριμένα προφίλ παρουσιάζονται για αδιαστατοποιημένες τιμές, οπότε η τιμή 1 αντιστοιχεί σε  $10^{-3}$  m.





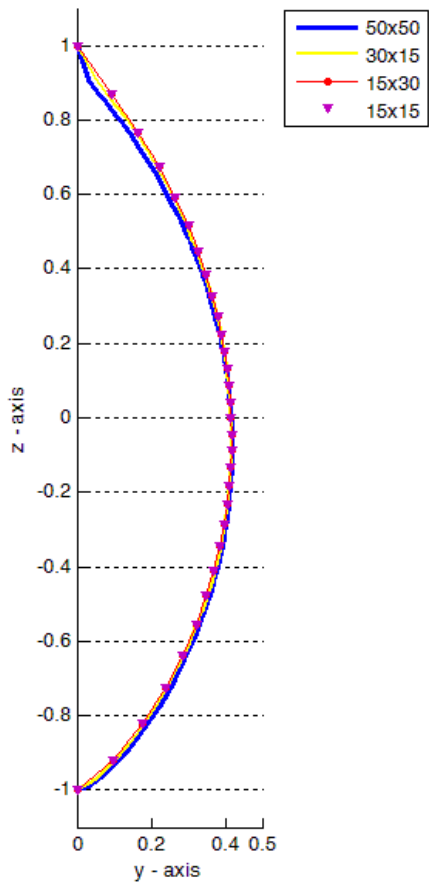
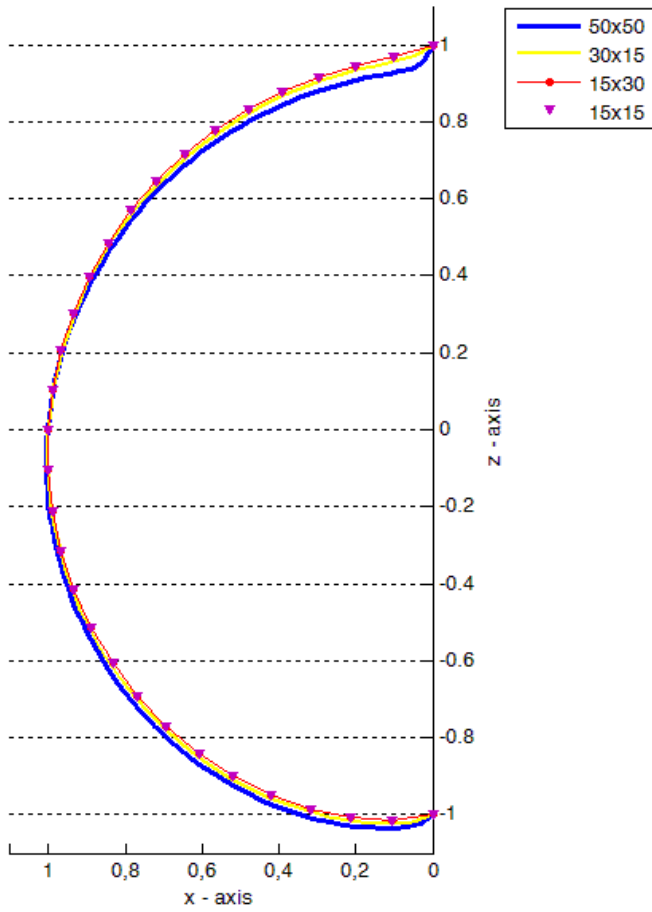
Σχήμα 18Α,Β,Γ. Τομή επιφάνειας σταγόνας για διαφορετικά πλέγματα μεγέθους  $10^3\text{m}$  για  $\theta_{ca}=45^\circ$  Α) με επίπεδο  $\phi=0$ , Β) με επίπεδο  $\phi=\pi/2$  και γ) με επίπεδο  $\theta=\pi/2$

Επόμενο βήμα ήταν η αύξηση της ακτίνας  $R_{st}$  σε  $R_{st}= 2 \cdot 10^{-3}$  m από την οποία ήδη παρατηρήθηκαν διαφορές. Σ' αυτήν την περίπτωση ο όγκος θα διαφοροποιηθεί σε απόλυτους αριθμούς μια και για να αντιστοιχεί η σταγόνα σε μερική σφαίρα πρέπει να αυξηθεί ο όγκος. Ο γενικός τύπος για το κάθε διαφορετικό πρόβλημα είναι:

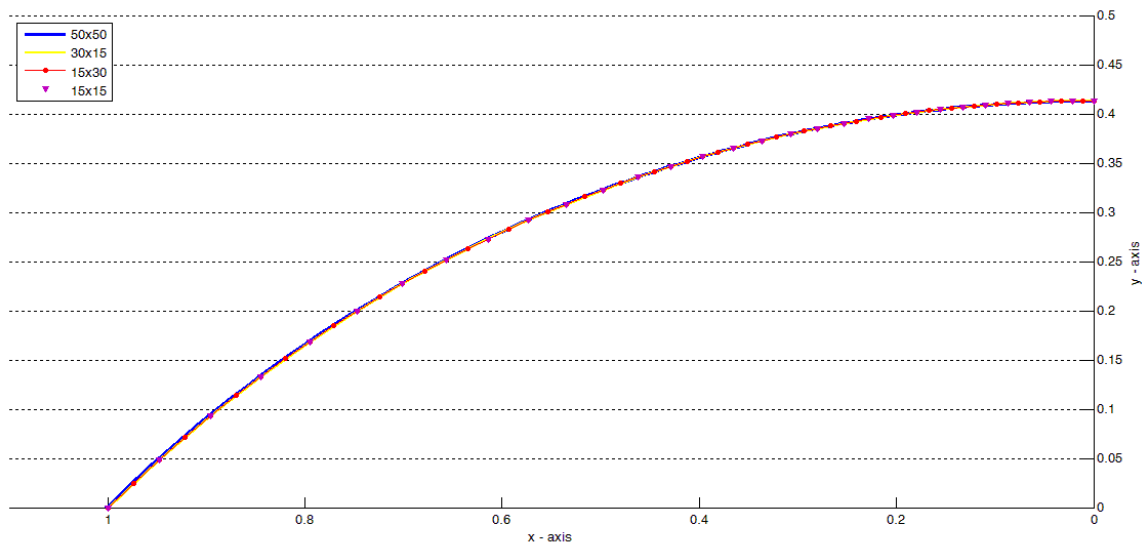
$$V = \frac{\pi R_{\sigma\phi}^3}{3} \left( 1 - \frac{3}{2} \cos \theta_{\epsilon\pi} + \frac{1}{2} \cos^3 \theta_{\epsilon\pi} \right)$$

που  $R_{\sigma\phi} = \frac{R_{st}}{\sin \theta_{\epsilon\pi}}$

με αποτέλεσμα να πρέπει να επιλυθεί το καινούριο πρόβλημα για μεγαλύτερο όγκο και συγκεκριμένα για  $V_{new} = V_{new} = \frac{R_{st\ new}^3}{R_{st\ old}^3} V_{old}$ . Ο υπολογισμός όμως του αδιάστατου όγκου γίνεται αυτόματα από το πρόγραμμα.





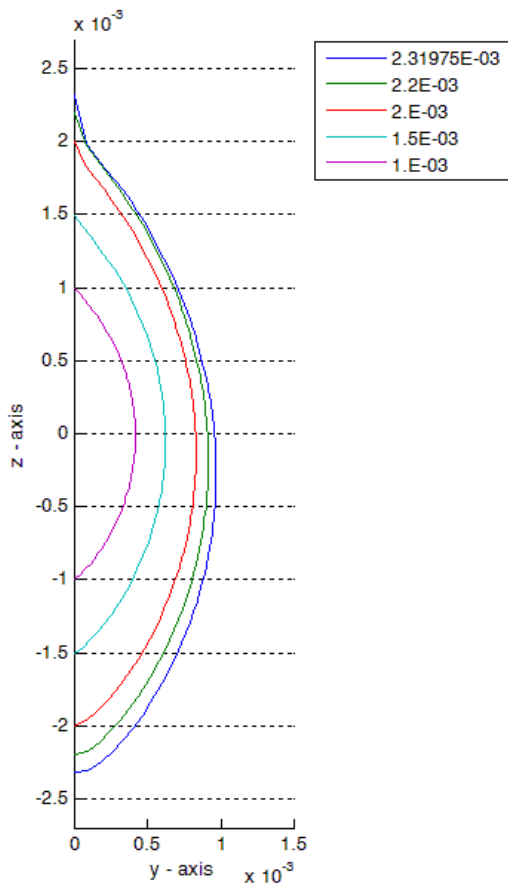
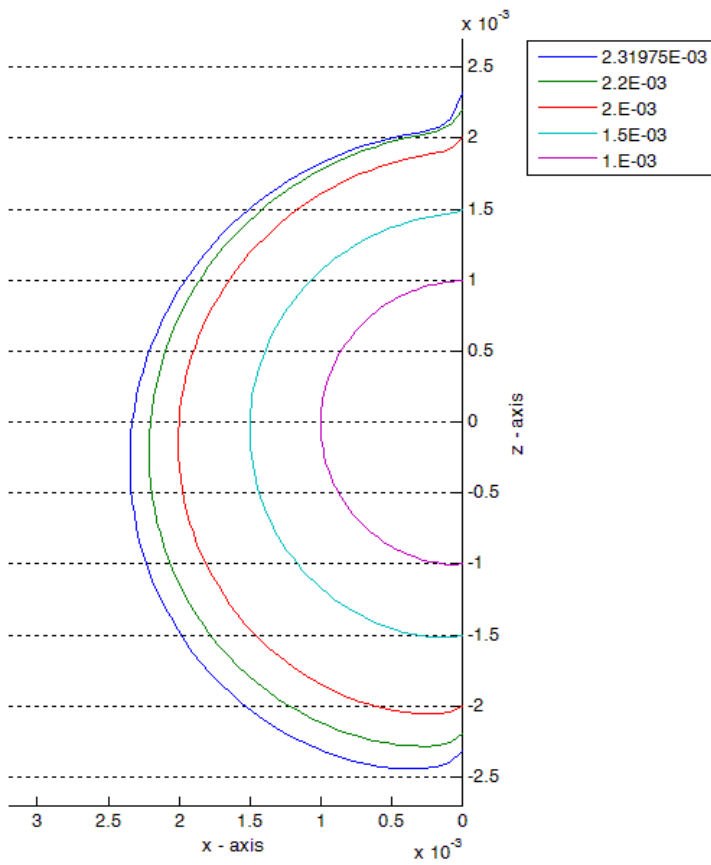


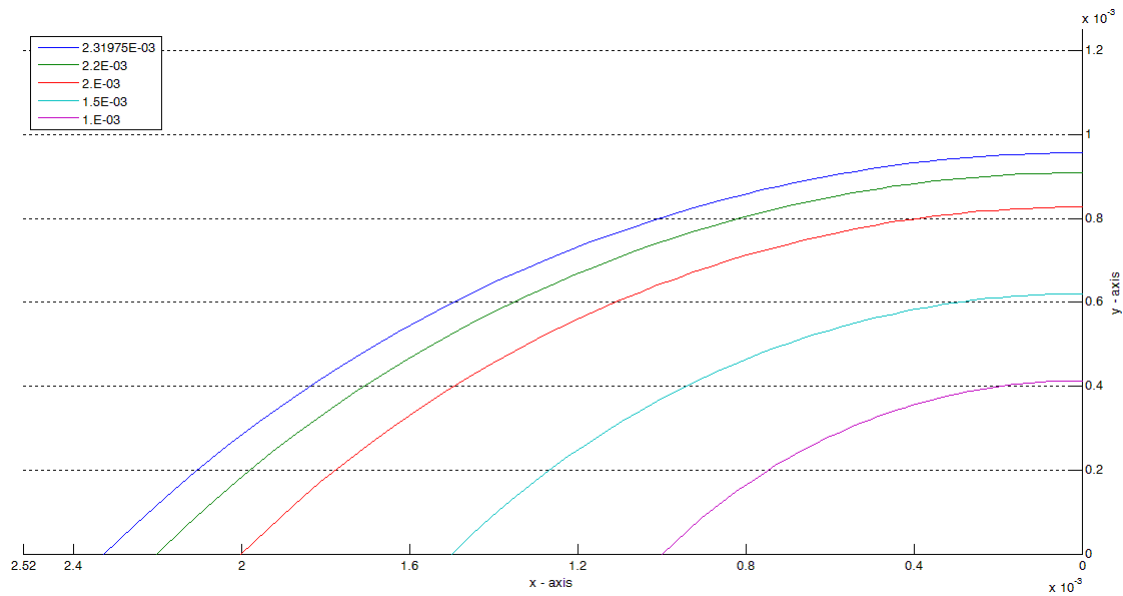
Σχήμα 19. Α,Β,Γ. Τομή επιφάνειας σταγόνας για διαφορετικά πλέγματα μεγέθους  $2 \cdot 10^{-3} \text{ m}$  για  $\theta_{ca}=45^\circ$  Α) με επίπεδο  $\phi=0$ , Β) με επίπεδο  $\phi=\pi/2$  και γ) με επίπεδο  $\theta=\pi/2$

Στο συγκεκριμένο μέγεθος παρατηρήθηκε απόκλιση των διαφορετικών πλεγμάτων γεγονός που αναδεικνύει ότι όσο πυκνώνει το πλέγμα παρουσιάζεται καλύτερη σύγκλιση στην πραγματική λύση, αν και στο οριζόντιο προφίλ δεν έγιναν εμφανής διαφορές. Αντιθέτως στην προηγούμενη εκτέλεση η σύγκλιση εμφανίσθηκε αρκετά πιο ομοιόμορφη ως προς το πλέγμα, αλλά και ως προς ένα σχήμα κοντινό σε μερική σφαίρα.

### 3.4.5 Σύγκλιση Κώδικα με Αρχική Τιμή Προηγούμενης Λύσης για Μικρότερη Σταγόνα ( $\theta_{\varepsilon\pi} = 45^\circ$ , $R_{st} = 1-2.32\mu\text{m}$ )

Η επόμενη περίπτωση που εξετάστηκε ήταν η σταδιακή αύξηση της ακτίνας της αρχικής σταγόνας  $R_{st}$  για πλέγμα που ορίσθηκε  $40 \times 25$ . Η γωνία επαφής παρέμεινε η ίδια με προηγουμένως  $\theta_{ca}=45^\circ$  ενώ για καλύτερη προσέγγιση στην τιμή που δεν συγκλίνει το πρόγραμμα χρησιμοποιήθηκε αρχική τιμή προηγούμενης εκτέλεσης για μικρότερο μέγεθος σταγόνας. Οι τιμές μήκους επαφής που εξετάστηκαν είναι  $R_{st}=1\text{mm}$ ,  $1.5\text{mm}$ ,  $2\text{mm}$ ,  $2.2\text{mm}$  και  $2.31975\text{mm}$ . Αυτές αντιστοιχούν σε αρχικές υπερπιέσεις  $P_0= 565.7\text{Pa}$ ,  $377.1\text{Pa}$ ,  $282.8\text{Pa}$ ,  $257.1\text{Pa}$  και  $243.9\text{Pa}$ .



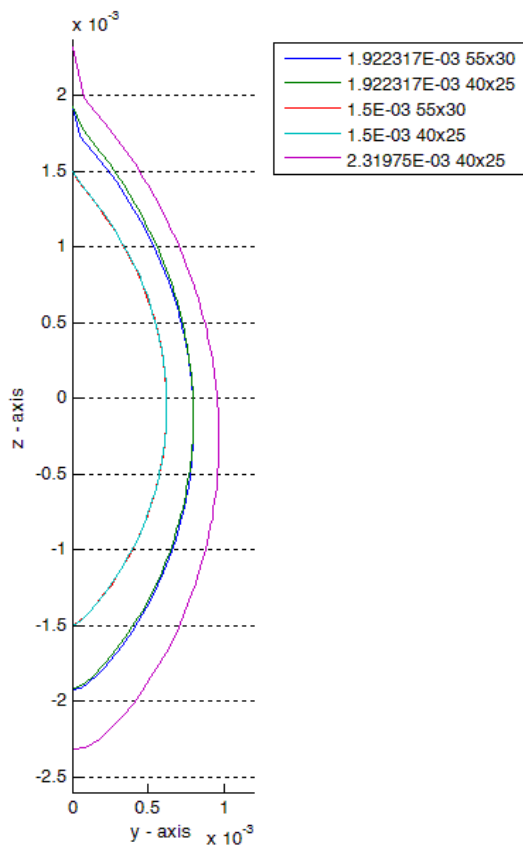
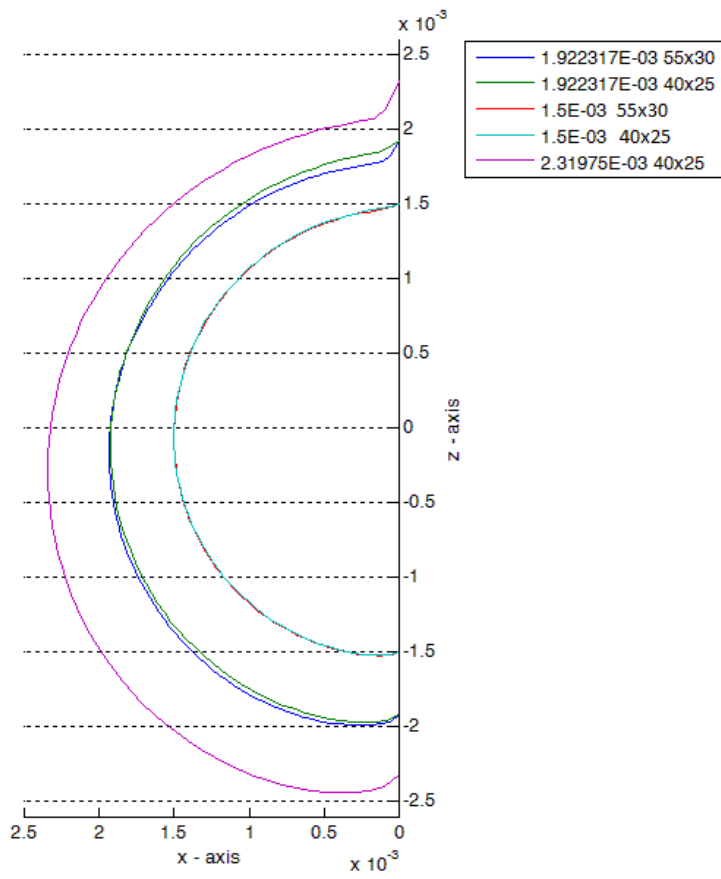


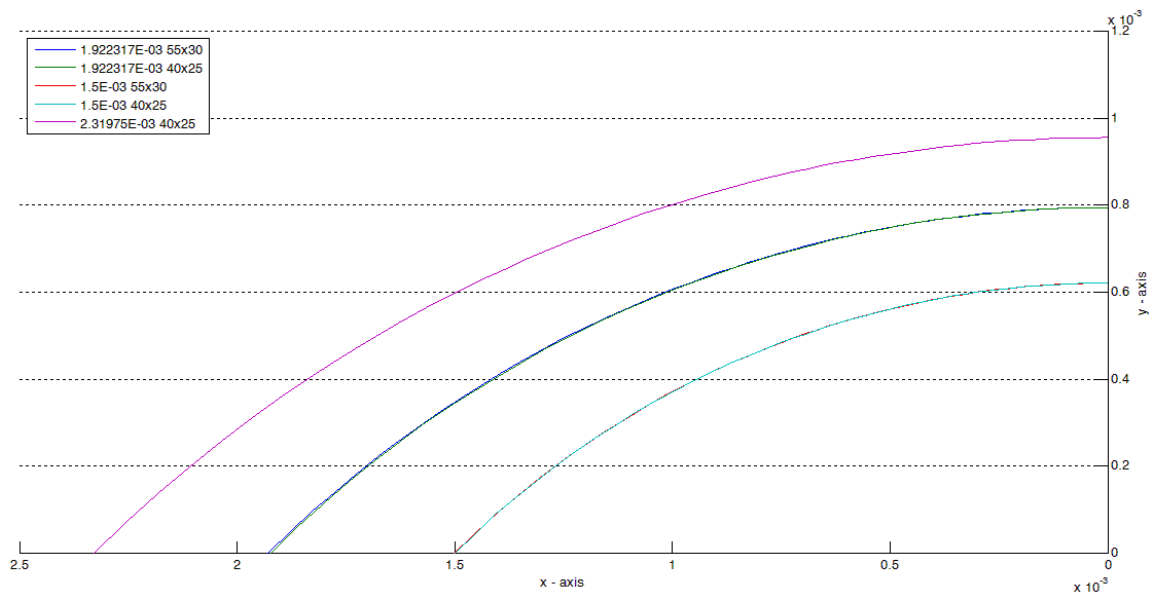
Σχήμα 20Α,Β,Γ. Τομές επιφανειών σταγόνας διαφορετικών μεγεθών σε πλέγμα 40x25 για  $\theta_{ca}=45^\circ$  Α) με επίπεδο  $\phi=0$ , Β) με επίπεδο  $\phi=\pi/2$  και γ) με επίπεδο  $\theta=\pi/2$

Τα δύο κατακόρυφα προφίλ εμφάνισαν παραμόρφωση με συγκέντρωση όγκου της σταγόνας προς τα κάτω της σταγόνας, όπως και τιμές απόστασης από κέντρο αξόνων μεγαλύτερες της ακτίνας των καρφίτσωμένων σημείων, ενώ το οριζόντιο προφίλ δεν παρουσίασε διαφορές ως προς το σχήμα των διαφορετικών σταγόνων.

### 3.4.6 Σύγκριση Διαφορετικών Πλεγμάτων για Μεγάλα Μεγέθη Σταγόνας ( $\theta_{επ} = 45^\circ$ , $R_{st} = 1-2.32\mu\text{m}$ )

Στην συνέχεια τα προηγούμενα αποτελέσματα συγκρίνονται με αποτελέσματα ενός μεγαλύτερου πλέγματος 55x30 για τα ίδια μεγέθη σταγόνας, σε ίδια γωνία επαφής πάντα, στα οποία μεγέθη το καινούριο πυκνότερο πλέγμα δεν συνέκλινε αναγκαστικά.





Σχήμα 21Α,Β,Γ. Τομές επιφανειών σταγόνας με τρία διαφορετικά μεγέθη για πλέγματα 40x25 και 55x30 για  $\theta_{ca}=45^\circ$  Α) με επίπεδο  $\phi=0$ , Β) με επίπεδο  $\phi=\pi/2$  και γ) με επίπεδο  $\theta=\pi/2$

Το πυκνότερο πλέγμα παρουσίασε μεγαλύτερη απόκλιση από ένα σφαιρικό σχήμα και κυρίως αρκετά διαφορετική με το αραιότερο στα κατακόρυφα προφίλ, εμφανίζοντας μεγαλύτερη ακτίνα στα σημεία κοντά στο κάτω «καρφισωμένο» σημείο και αρκετά μικρότερη στο πάνω σημείο. Οι συγκεκριμένες παρατηρήσεις έγιναν εν μέρει εμφανείς σε μέγεθος σταγόνας  $R_{st} = 1.5 \cdot 10^{-3}$  και φανήκαν ξεκάθαρα κοντά στο σημείο όπου το πλέγμα 55x30 σταμάτησε να συγκλίνει με  $R_{st} = 1.922317 \cdot 10^{-3}$ . Για την ακτίνα που παρουσίασε την τελευταία σύγκλιση το πλέγμα 40x25 με  $R_{st} = 2.31975 \cdot 10^{-3}$ , το πυκνότερο πλέγμα αδυνατούσε να συγκλίνει σε λύση. Τέλος να αναφερθεί πως αν και το προφίλ του οριζόντιου επιπέδου XY σπάνια εμφάνιζε μη αναμενόμενη συμπεριφορά ως προς σφαίρα, για το οριακό μέγεθος σταγόνας που συγκλίνει, το πλέγμα 55x30 δεν φαίνεται να συμπίπτει με το προφίλ του αραιότερου πλέγματος, αλλά είναι συγκριτικά μεγαλύτερο στο σημείο επαφής με το τοίχωμα, επομένως να περιβάλλει μεγαλύτερο όγκο σταγόνας στην συγκεκριμένη τομή. Η επιθυμητή σύγκλιση των αποτελεσμάτων για διαφορετικά πλέγματα δεν επήλθε. Αυτό σημαίνει ότι θα χρειαστεί πυκνότερο πλέγμα και μεγαλύτερη υπολογιστική ικανότητα για την ασφάλεια των αποτελεσμάτων πηγαίνοντας προς οριακές τιμές μήκους επαφής σταγόνας. Όπως και η μη-σύγκλιση του μεγαλύτερου πλέγματος δείχνει την ανάγκη για καλύτερη πρόβλεψη αρχικής τιμής

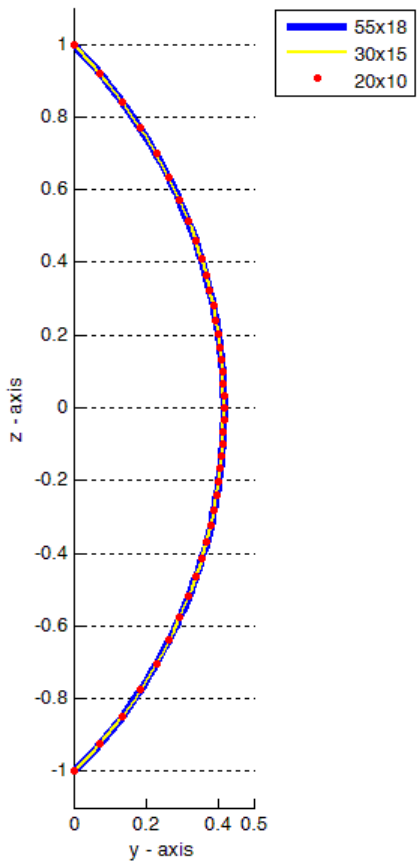
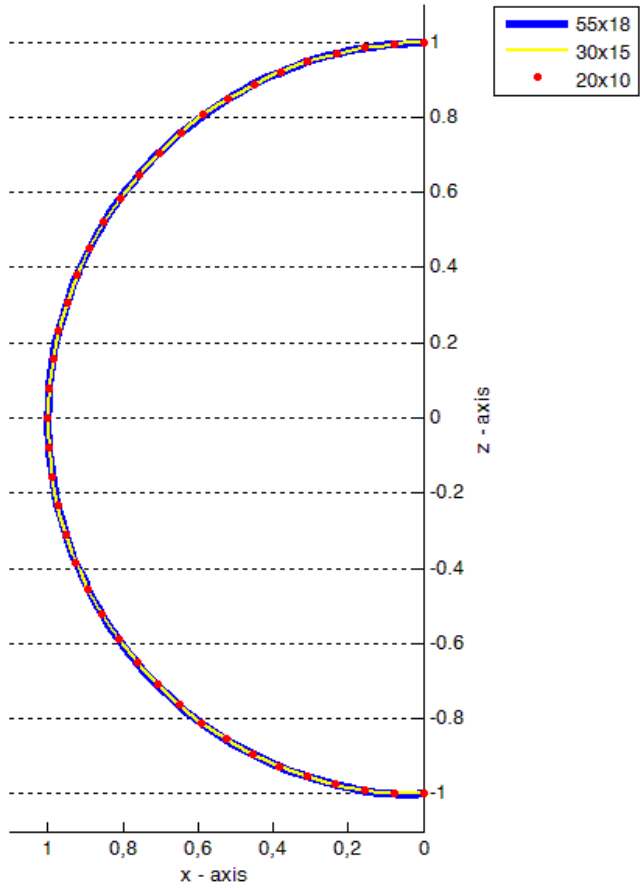
### 3.4.7 Αριθμητική Σύγκλιση για Αρχική Τιμή από Αξονοσυμμετρικό Πρόβλημα

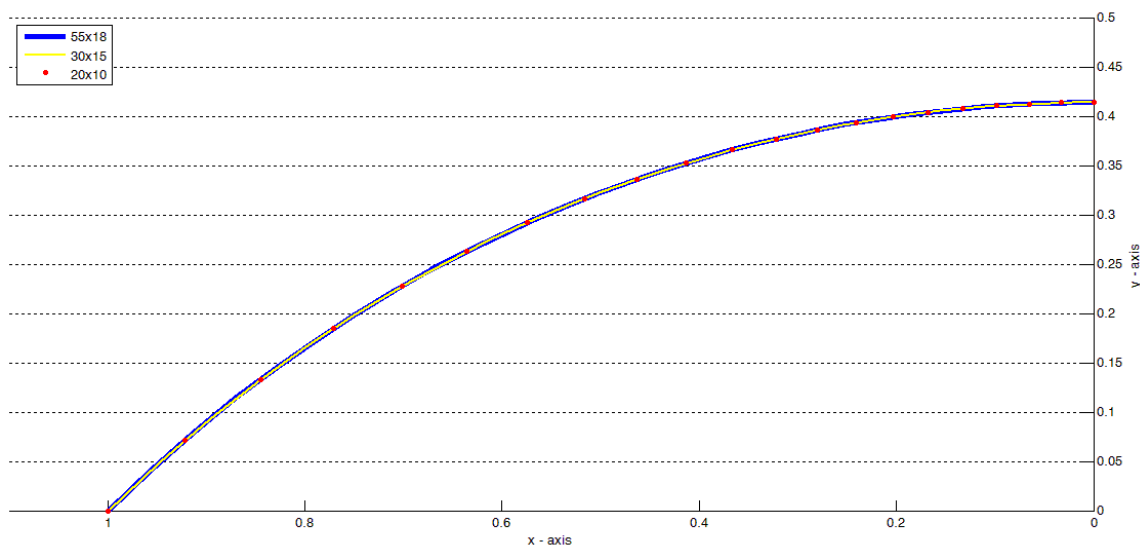
Η δεύτερη περίπτωση υπολογισμών που εξετάζεται για αριθμητικό έλεγχο προβλήματος με συνθήκες αξονοσυμμετρικού είναι αυτή για την οποία δίνεται το προφίλ για τα σημεία της επιφάνειας μιας σταγόνας που κάθετα σε οριζόντιο τοίχωμα και είναι συμμετρική ως προς τον κατακόρυφο άξονα. Οι τιμές του θα δίνονται για κάθετη απόσταση ( $r1$ ) ενός σημείου της επιφάνειας από το κέντρο κυμαίνονται από τιμή μηδενικής απόστασης (μέγιστο πάχος

σταγόνας) έως το σημείο επαφής της σταγόνας με το τοίχωμα (ακτίνα μεγέθους σταγόνας). Το προφίλ έχει υπολογιστεί για συγκεκριμένη γωνία επαφής, ομοίως με πριν στις  $45^\circ$  με το τοίχωμα, και οι παράμετροι που προκύπτουν από αυτό είναι ο όγκος της σταγόνας και η απόσταση των άνω και κάτω σημείων από το κέντρο της σταγόνας ( $R_{st}$ ). Τα σημεία ορίζουμε να απέχουν όσο απέχει το σημείο επαφής της σταγόνας του αξονοσυμμετρικού προβλήματος από το κέντρο της σταγόνας (στον κώδικα δίνεται ως  $r(\text{node})$ ). Ως σύνολο αρχικών τιμών αποστάσεων για τις επαναλήψεις Newton-Raphson των πεπερασμένων στοιχείων ορίζονται οι αποστάσεις από το κέντρο όλων των σημείων της σταγόνας του αξονοσυμμετρικού προβλήματος με την μετατροπή για σύστημα σφαιρικών συντεταγμένων που δείχθηκε στο κεφάλαιο 3.3.6 καθώς και η πίεση που έχει οριστεί από το αξονοσυμμετρικό πρόβλημα για το κέντρο της σταγόνας. Επίσης θα πρέπει να αναφερθεί πως η επιλογή της τιμής της πίεσης είναι επίσης σημαντική γιατί από αυτήν θα προκύψει το μέγεθος της σταγόνας, εκτελώντας τον αλγόριθμο της ισορροπίας της σταγόνας σε οριζόντιο επίπεδο.

Για την εξαγωγή των αναγκαίων τιμών από τον κώδικα, ορίστηκε μεγάλη πίεση στο κέντρο της σταγόνας κατά την εκτέλεση του αλγορίθμου του αξονοσυμμετρικού, ώστε να προκύπτει προφίλ αξονοσυμμετρικής οριζόντιας σταγόνας σε σχήμα μερικής σφαίρας, με γωνία επαφής την ήδη δοσμένη. Έτσι με την μετατροπή σε επιφάνεια για σφαιρικές συντεταγμένες οι αρχικές τιμές αποστάσεων των σημείων της επιφάνειας για τον κώδικα θα πρέπει να τείνουν και στην τελική λύση του προβλήματος. Αυτό συμβαίνει διότι η μεγάλη διαφορά πίεσης από μέσα προς την εξωτερική μεριά της επιφάνειας ισορροπείται μόνο για μικρές σταγόνες μεγέθους  $10^{-4}$  m και χαμηλότερα. Όπως αποδείχτηκε στα προηγούμενα στην συγκεκριμένη γωνία επαφής σε τιμές τάξεως  $10^{-3}$  m εμφανίζονται παραμορφώσεις από την επιφάνεια μορφής μερικής σφαίρας. Συγκεκριμένα για πίεση στο κέντρο  $P_0 = 1000$  Pa υπολογίζεται μέγεθος σταγόνας  $R_{st} = 5.6888405 \cdot 10^{-4}$  m. Γι' αυτές τις αρχικές τιμές, τον όγκο που δίνεται από την λύση του αξονοσυμμετρικού και αρχική πίεση αυτή που ορίστηκε, εκτελέστηκε το βασικό πρόγραμμα σε τρία διαφορετικά πλέγματα ώστε να εκτιμηθεί στο καινούριο η ανεξαρτησία πλέγματος, κατά την ύπαρξη αναμενόμενου αποτελέσματος. Τα πλέγματα που χρησιμοποιήθηκαν είναι i) 55x18, ii) 30x15, iii) 20x10.

Η επιλογή τους έγινε με διαφορετικό τρόπο γιατί, όπως θα αναφερθεί στα αποτελέσματα, αποδείχθηκε προηγουμένως η αλλοίωση συμπεριφοράς των αποτελεσμάτων κατά την πύκνωση του πλέγματος στην  $\theta$  γωνία. Παρακάτω δίνονται τα τρία προφίλ που εξετάστηκαν και στις προηγούμενες εκτελέσεις.





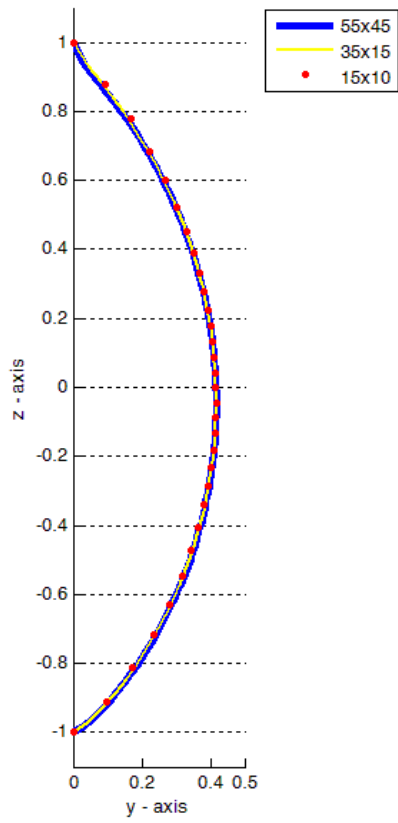
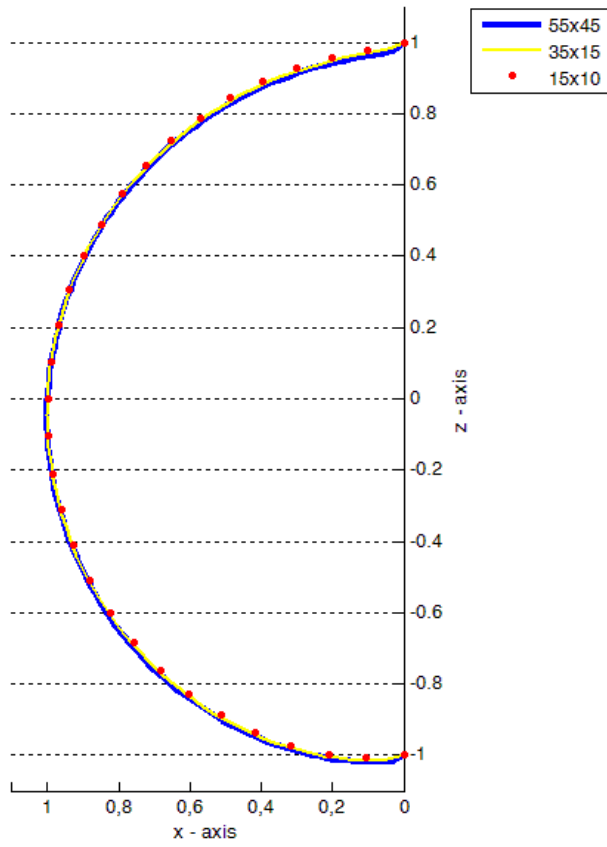
Σχήμα 22Α,Β,Γ. Τομή επιφάνειας σταγόνας σε διαφορετικά πλέγματα μεγέθους  $5.7 \cdot 10^{-4} \text{ m}$  πίεσης 1000Pa για  $\theta_{ca}=45^\circ$  Α) με επίπεδο  $\phi=0$ , Β) με επίπεδο  $\phi=\pi/2$  και γ) με επίπεδο  $\theta=\pi/2$

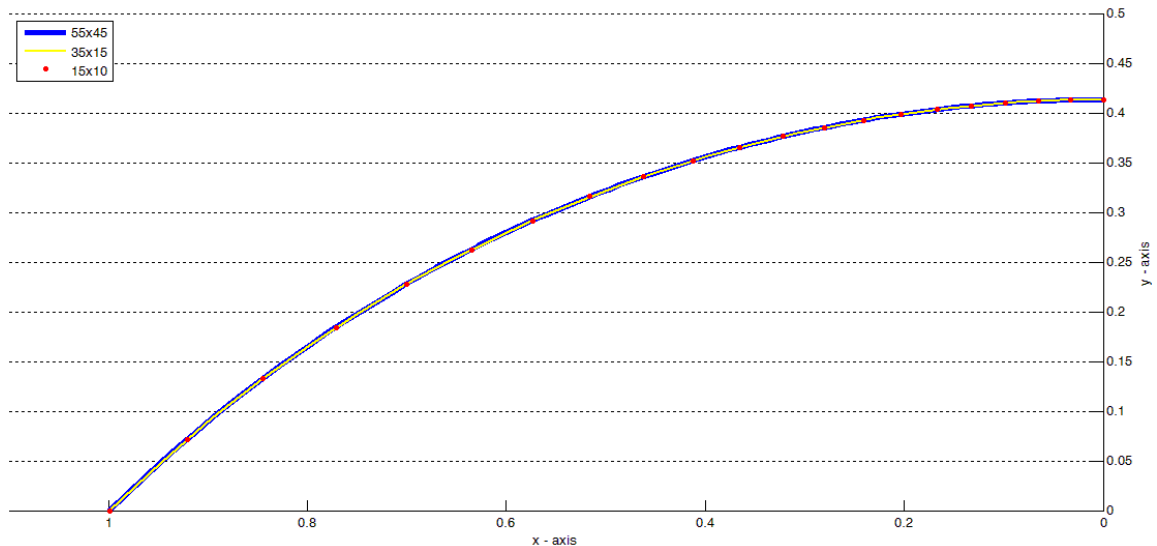
Στα οποία προφίλ παρουσιάζεται η σύγκλιση όλων των πλεγμάτων μεταξύ τους, παρουσιάζοντας συνολικά μια επιφάνεια μορφής μερικής σφαίρας.

### 3.4.8 Συμπεριφορά για Σταγόνα Μεγαλύτερου Μήκους Επαφής για Αξονοσυμμετρικό

Η αύξηση του μήκους επαφής προκύπτει από το αξονοσυμμετρικό με μείωση της υπερπίεσης. Επιλέγεται οπότε η μείωση της πίεσης από 1000Pa σε 345Pa, η οποία δίνει μέγεθος σταγόνας  $R_{st} = 1.64827038 \cdot \text{mm}$ . Όπως και προηγουμένως ο όγκος διαβάζεται από το αξονοσυμμετρικό και η αρχική πρόβλεψη προκύπτει από το προφίλ του αξονοσυμμετρικού με την μετατροπή σε σφαιρικές που εφαρμόζεται στον κώδικα του τρισδιάστατου προβλήματος.







Σχήμα 23Α,Β,Γ. Τομή επιφάνειας σταγόνας σε διαφορετικά πλέγματα μεγέθους  $1.65 \cdot 10^{-3}$  m πίεσης 345Pa για  $\theta_{ca}=45^\circ$  Α) με επίπεδο  $\phi=0$ , Β) με επίπεδο  $\phi=\pi/2$  και γ) με επίπεδο  $\theta=\pi/2$

Τα δύο πρώτα προφίλ των τελικών επιφανειών εμφάνισαν παραμόρφωση από την ομοιόμορφη κατανομή του όγκου της σταγόνας, όπως συμβαίνει στην περίπτωση του οριζόντιου προβλήματος αξονικής συμμετρίας, με τα μεγαλύτερα πλέγματα να δείχνουν μεγαλύτερη συσσώρευση μάζας στο κάτω μέρος της σταγόνας. Κατά την πύκνωση του πλέγματος καταδεικνύεται σύγκλιση της αριθμητικής λύσης. Όμως για σχετικά μεγάλες σταγόνες η παραμετρική μελέτη έδειξε ότι δεν έχουν επιτευχθεί ακόμη αποδεκτά πλέγματα που παρέχουν συγκλίνουσα λύση, πιθανώς λόγω έλλειψης υπολογιστικής δύναμης.

Για εκτέλεση του κώδικα με αρχικές τιμές σφαίρας σε ίδια γωνία  $\theta_{ca}=45^\circ$  και μήκος επαφής  $R_{st}=1.64827038\text{mm}$  ο όγκος που επιλυόταν ήταν  $V=1.5401144\text{mm}^3$  και η πίεση υπολογίστηκε  $P_0=343.4976\text{Pa}$ . Αντιθέτως η οριζόντια σταγόνα ίδιου μήκους επαφής έδωσε όγκο  $V=1.5368127\text{mm}^3$  και η εκτέλεση του κατακόρυφου με συνθήκες αξονοσυμμετρικού υπολόγισε την νέα κεντρική εσωτερική πίεση  $P_0=343.7193\text{Pa}$ .

## 4. Αποτελέσματα

Στο πλαίσιο των υπολογισμών που διεξήχθησαν ήταν επιθυμητό να βρεθεί το σχήμα που θα πάρει η σταγόνα μεγαλώνοντας το μέγεθος της για δεδομένη γωνία επαφής με το τοίχωμα σε όσο γίνεται πυκνότερο πλέγμα. Έτσι, έγιναν διαφορετικές εκτελέσεις του προγράμματος, για την αντιστοίχιση της σταγόνας του αξονοσυμμετρικού με αυτής της κατακόρυφης σταγόνας σε τρισδιάστατη γεωμετρία.

## 4.1 Εύρεση Παραμέτρων και Αρχικών Προβλέψεων από Αξονοσυμμετρικό Πρόβλημα

Το πρώτο κομμάτι των αποτελεσμάτων περιέχει την εύρεση των διαφορετικών τιμών παραμέτρων και αρχικών τιμών που δίνονται στον κώδικα. Κατά την σύνδεση του τρισδιάστατου προβλήματος με το αξονοσυμμετρικό χρειάζονται σαν παράμετροι το μήκος επαφής της σταγόνας και ο όγκος της σταγόνας, ενώ σαν αρχικές τιμές στο πρόβλημά μας δίνεται η απόσταση των σημείων της επιφάνειας από το κέντρο της σταγόνας και η πίεση στο κέντρο της. Ο κώδικας του αξονοσυμμετρικού επιδέχεται σαν μοναδική παράμετρο την πίεση και έπειτα υπολογίζει τις υπόλοιπες τιμές που επιθυμείται να εισαχθούν στον κώδικα του κατακόρυφου τρισδιάστατου και να επεξεργαστούν οι τιμές της απόστασης της επιφάνειας όπως έχει δειχθεί.

Για την περιγραφή των αποτελεσμάτων εκτελέστηκε ο αλγόριθμος για 4 διαφορετικές πιέσεις. Στο τέλος ωστόσο της ανάλυσης αποτελεσμάτων προστέθηκε μία ακόμα στην οποία ο κώδικας, για συγκεκριμένο πλέγμα, οριακά δίνει αποτελέσματα στο τρισδιάστατο και για μικρότερη αδυνατεί να συγκλίνει σε λύση. Αυτή η οριακή πίεση (284 Pa) υπολογίστηκε με δοκιμή διαφορετικών πιέσεων και εκτέλεση του κώδικα μέχρι να μην συγκλίνει. Ακολουθεί ο πίνακας με τις τιμές των παραμέτρων όπως υπολογίστηκαν.

| Υπερπίεση στο Κέντρο $P_0$ (Pa) | Μήκος Επαφής Σταγόνας $R_{st}$ (mm) | Πάχος Σταγόνας $z$ (mm) | Όγκος Σταγόνας $V$ ( $10^{-9} \text{ m}^3$ ) |
|---------------------------------|-------------------------------------|-------------------------|--|
| 284                             | 2.00733319                          | 0.827956135             | 5.54594574                                   |
| 320                             | 1.77856191                          | 0.734260901             | 3.86028973                                   |
| 350                             | 1.62448116                          | 0.671018767             | 1.62448116                                   |
| 450                             | 1.26094194                          | 0.521426459             | 1.37732612                                   |
| 800                             | 0.707792059                         | 0.293022458             | 0.243804893                                  |

Όπως αναμενόταν όσο αυξάνεται η πίεση στο κέντρο της σταγόνας τόσο μειώνεται το μέγεθος αυτής ώστε οι δυνάμεις επιφανειακής τάσης να εξισορροπούν την βαρύτητα και διαφορά πίεσης παράγοντας έτσι την στατική ισορροπία της σταγόνας. Η τάση αυτή καταγράφεται καλύτερα στην ακραία περίπτωση πολύ υψηλής πίεσης, αμελητέα επίδραση της βαρύτητας, με την εξίσωση για στατική ισορροπία στην διεπιφάνεια ημισφαιρικής σταγόνας όπου διαφορά πίεσης και ακτίνας είναι αντιστρόφως ανάλογες για δεδομένη επιφανειακή τάση:

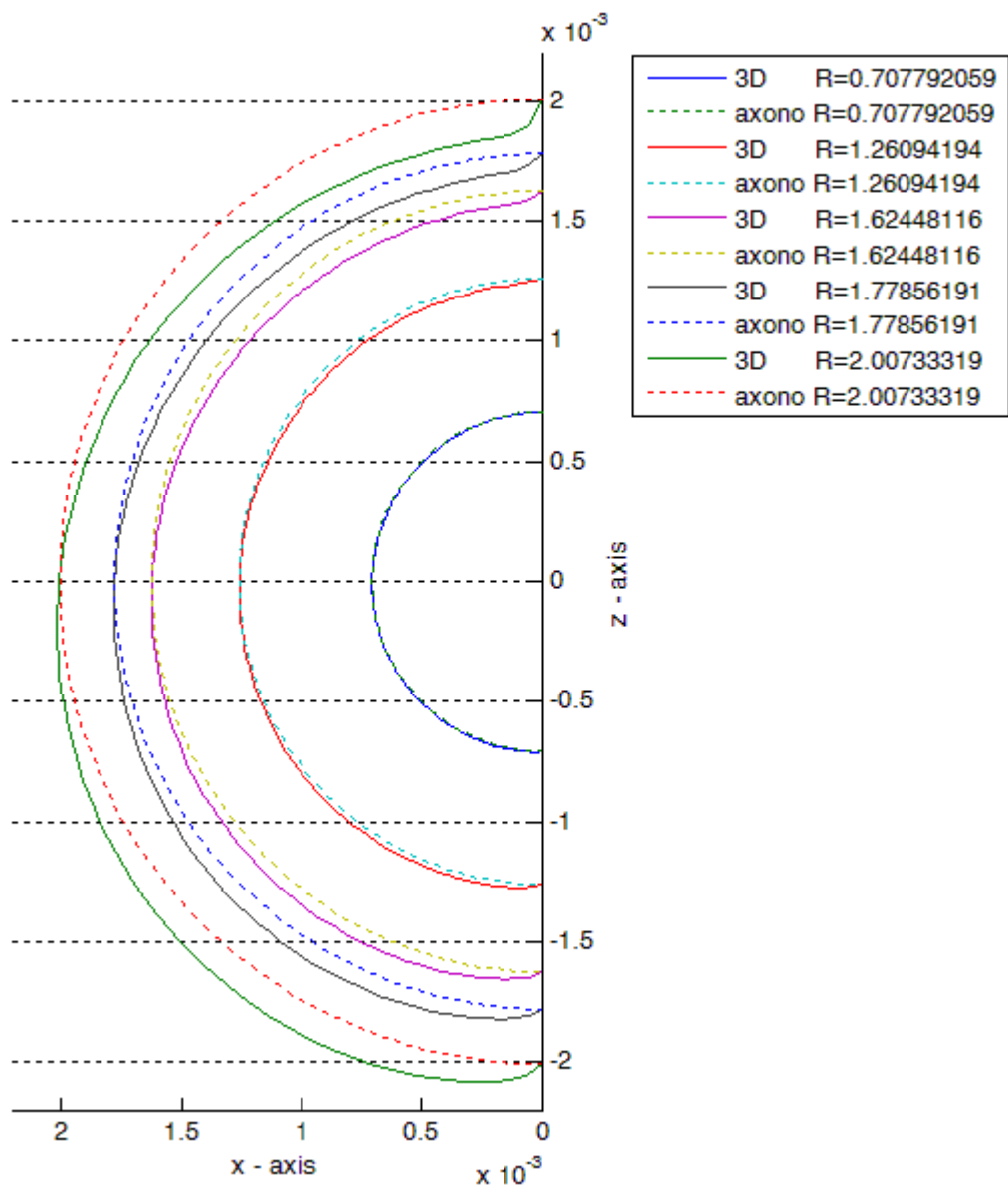
$$\Delta P = 2 \frac{\sigma}{R_{\sigma\phi}}$$

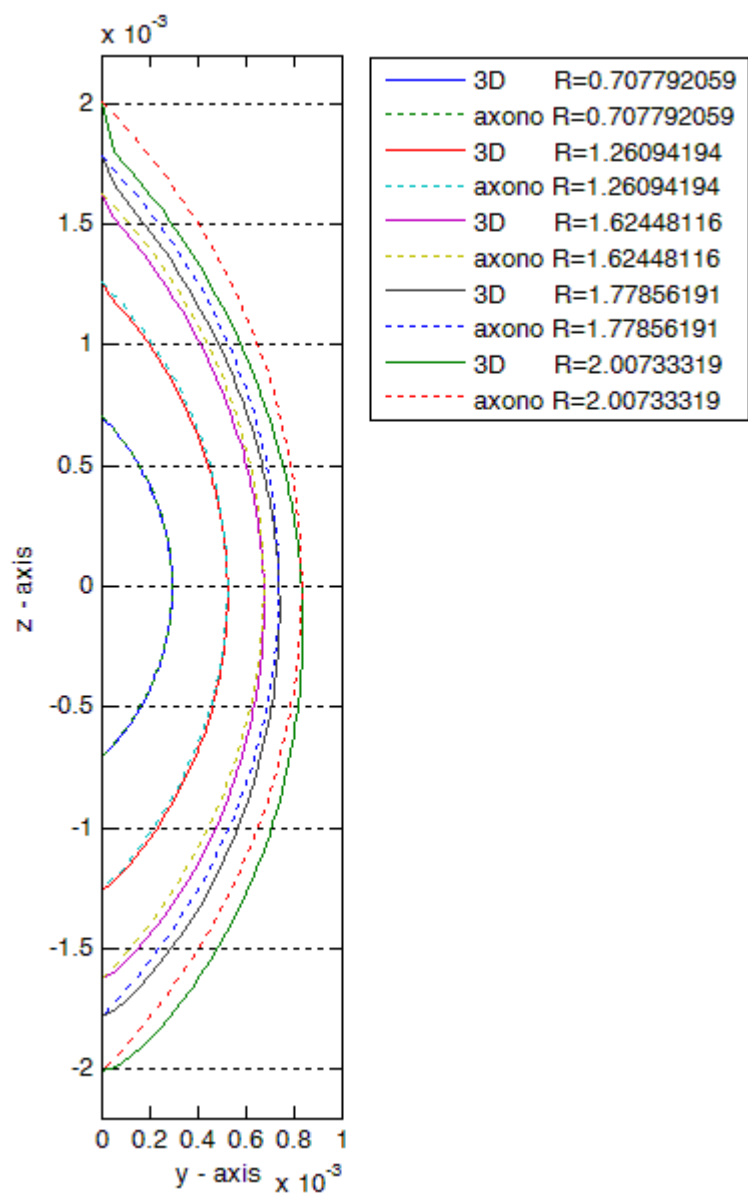
## 4.2 Αποτελέσματα Εκτέλεσης Κώδικα για Διαφορετικά Μεγέθη Σταγόνας

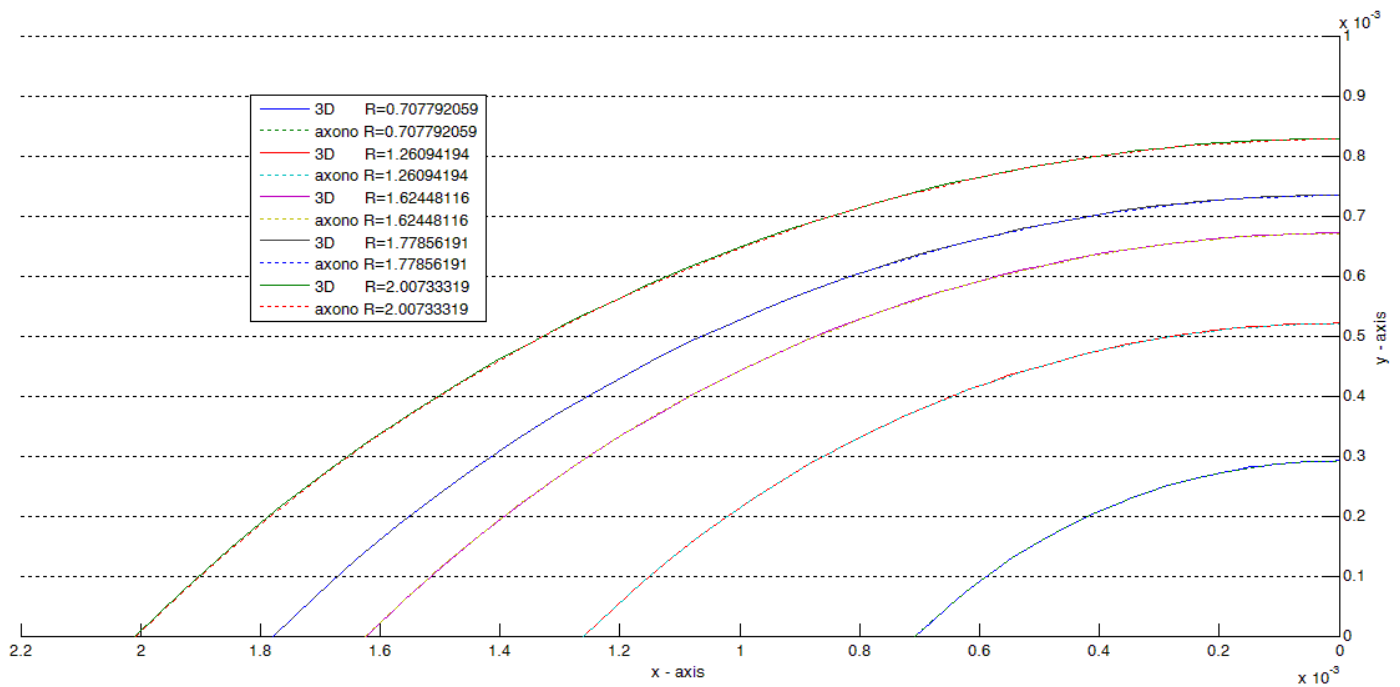
Το κύριο μέρος των αποτελεσμάτων δίνεται από την εκτέλεση του κώδικα για τις συγκεκριμένες τιμές της αξονοσυμμετρικής σταγόνας διαβάζοντας το προφίλ και μετατρέποντας το σε σφαιρικές συντεταγμένες, όπως ακριβώς έγινε και στον έλεγχο αριθμητικής σύγκλισης. Η γωνία επαφής παραμένει σταθερή στις  $45^\circ$  και εκτελείται ο αλγόριθμος με δεδομένες την απόσταση των δύο ακραίων σημείων και τον όγκο, όπως δίνονται από το αξονοσυμμετρικό. Στα διαγράμματα που εξήχθησαν εμφανίζονται τα προφίλ της σταγόνας όπως υπολογίστηκαν αρχικώς στο αξονοσυμμετρικό και εν συνέχεια στο τρισδιάστατο κατακόρυφο πρόβλημα με αρχική πρόβλεψη την λύση του αξονοσυμμετρικού.

Επιλέχθηκε πλέγμα σχετικά μεγάλης πυκνωσης, ειδικότερα δίνοντας βάρος στην πυκνωση για την κατεύθυνση  $\theta$  όπου χρησιμοποιήθηκε πλέγμα  $50 \times 20$  πεπερασμένων στοιχείων ( $\theta' \times \phi'$ ). Η τιμή της οριακής πίεσης βρέθηκε από δοκιμές εκτέλεσης του αλγόριθμου σε περιοχή τιμών που αντιστοιχούν σε σχετικά μεγάλη σταγόνα. Συγκεκριμένα εκτελείτο ο κώδικας για όλο και χαμηλότερη πίεση στο αξονοσυμμετρικό, δίνοντας μήκος επαφής της σταγόνας τάξης χιλιοστών και παρατηρείτε εάν συγκλίνει ο κώδικας του τρισδιάστατου για αυτές τις δεδομένες αρχικές προβλέψεις. Έτσι η χαμηλότερη οριακή για το πρόβλημα, για τιμές παραμέτρων  $\theta_{ca}=45^\circ$ ,  $\sigma=0.4\text{kg/s}^2$  και πλέγμα  $50 \times 20$ , προέκυψε της τάξης  $P_0 = 284 \text{ Pa}$  που αντιστοιχεί σε μήκος επαφής σταγόνας  $R_{st} = 2.00733319\text{mm}$ .

Οι πιέσεις που εξετάστηκαν κυμάνθηκαν από  $P_0= 800 \text{ Pa}$  έως την χαμηλότερη δυνατή  $284 \text{ Pa}$ , δίνοντας σταγόνες μεγέθους από  $R_{st}= 0.707792059 \cdot \text{mm}$  έως  $2.00733319 \cdot \text{mm}$ .





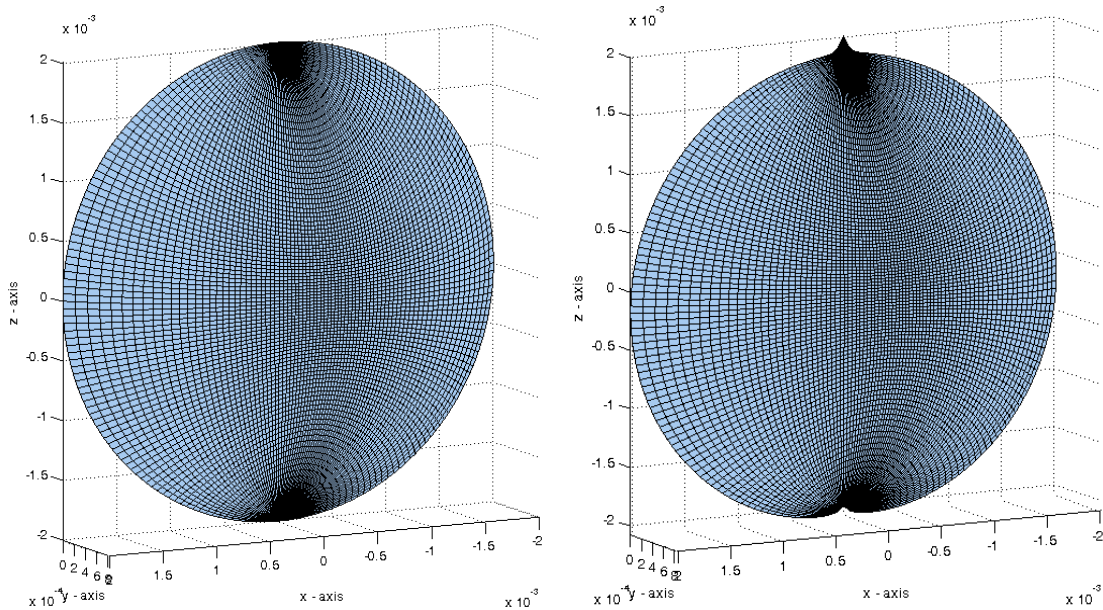


Σχήμα 24Α,Β,Γ. Τομές επιφανειών σταγόνων σε πλέγμα 50x20 διαφορετικών  $R_{st}$  για  $\theta_{ca}=45^\circ$  Α) με επίπεδο  $\phi=0$ , Β) με επίπεδο  $\phi=\pi/2$  και γ) με επίπεδο  $\theta=\pi/2$

Στα παραπάνω αποτελέσματα συστηματικά εμφανίζεται συσσώρευση μάζας στο κάτω σημείο για όλο και μεγαλύτερη σταγόνα, καθώς και απότομη κλίση της επιφάνειας στο ανώτατο σημείο, καταδεικνύοντας έτσι το οριακό σημείο στο οποίο έχει περιέλθει το σχήμα της επιφάνειας ώστε να συγκρατήσει σημαντική μάζα της σταγόνας για ισορροπία.

Επίσης πρέπει να αναφερθεί ότι η νέα πίεση  $P_0$  στο κέντρο της σταγόνας, όπως επαναυπολογίστηκε από τον κώδικά μας βρέθηκε ελάχιστα μικρότερη από την αρχική της τιμή η οποία υπολογίστηκε για αξονοσυμμετρική σταγόνα. Συγκεκριμένα:

| $P_0$ – Αρχικό (Pa) | $P_0$ – Τελικό (Pa) | Ποσοστό Μείωσης Κεντρικής Πίεσης (%) |
|---------------------|---------------------|--------------------------------------|
| 800                 | 799.32543           | 0.084312%                            |
| 450                 | 448.85557           | 0.254318%                            |
| 350                 | 348.64728           | 0.386491%                            |
| 320                 | 318.63938           | 0.435294%                            |
| 284                 | 283.26294           | 0.259528%                            |



Σχήμα 25 Α,Β Τρισδιάστατη απεικόνιση μορφής επιφάνειας σταγόνας που εφάπτεται σε τοίχωμα για Α) αρχική πρόβλεψη αξονοσυμμετρικού με υπερπίεση 284 Pa και Β) Τελική λύση 3D για την ίδια πίεση

## 5. Συμπεράσματα – Μελλοντική Εργασία

Τα συμπεράσματα για το συγκεκριμένο πρόβλημα θα χωριστούν σε δύο είδη. Αρχικώς θα γίνει ανάλυση της αριθμητικής ακολουθίας και σύγκλισης των αποτελεσμάτων σε διαφορετικά πλέγματα, κατά την εκτέλεση του κώδικα σε ίδιες σταθερές προβλήματος ( $\theta_{ca}=45^\circ$ ,  $R_{st}$ ,  $V$ ) και για ίδια αρχική πρόβλεψη ( $R(\theta, \phi)$ ,  $P_0$ ).

Παρατηρήθηκε ότι το σχήμα παρέμενε σφαιρικό για μικρά μεγέθη σταγόνας, χωρίς να διαφοροποιείται σημαντικά από την αρχική πρόβλεψη. Μάλιστα παρέμενε όμοιο για διαφορετικά πλέγματα σαν ένδειξη σύγκλισης. Καθώς μεγαλώνει το μήκος επαφής της σταγόνας μέχρι περίπου 1 mm ο κώδικας συγκλίνει και το σχήμα των αποτελεσμάτων της τρισδιάστατης σταγόνας συνεχίζει να είναι σε συμφωνία με αυτό του αξονοσυμμετρικού δίνοντας περίπου σφαιρικό σχήμα. Στα πλέγματα που εξετάστηκαν παρουσιάστηκαν από καθόλου διαφορές έως κάποιες μικρές διαφορές όπου αυτό με την μεγαλύτερη πλεγματοποίηση μετατοπίζεται λίγο προς τα κάτω. Για ένα μικρό παράθυρο ακόμη μεγαλύτερων τιμών του μήκους επαφής η βαρύτητα φαίνεται ότι προκαλεί μεγαλύτερη επιρροή στο σχήμα της σταγόνας σε σχέση με τις δυνάμεις επιφανειακής τάσης. Έτσι στα αποτελέσματα για μήκος επαφής 1.25mm και μεγαλύτερο η τελική μορφή της σταγόνας είναι διαφοροποιημένη από αυτή του αξονοσυμμετρικού, ενώ με την πύκνωση του πλέγματος τα σχήματα διαφέρουν αρκετά. Συγκεκριμένα όσο πύκνωνε το πλέγμα ο κώδικας παρουσίαζε διαφορετικό αποτέλεσμα για ίδιες σταθερές σε μήκος επαφής 1.5mm και έπειτα. Τέλος από μια οριακή τιμή μεγέθους γύρω στα 2.32mm και μετά (διαφορετική για διαφορετικό πλέγμα) ο κώδικας δεν συγκλίνει σε λύση.

Ειδικότερα προέκυψε το συμπέρασμα από την αριθμητική ανάλυση του κώδικα, ότι πρέπει να δοθεί σημασία κατά την πλεγματοποίηση στην διεύθυνση  $\theta$ . Συγκεκριμένα όσο



εκτελέστηκε πλέγμα με μεγαλύτερο αριθμό πεπερασμένων στοιχείων κατά αυτή την διεύθυνση τόσο μεγαλύτερη λεπτομέρεια της τελικής λύσης εμφανίστηκε σε σχέση με την επίλυση για πιο αραιό πλέγμα. Γι' αυτό η πλεγματοποίηση θέλει μεγάλη προσοχή όσο αυξάνεται το μέγεθος της σταγόνας ειδικά στην  $\theta$  διεύθυνση. Αντιθέτως δεν παρουσιάστηκε τέτοια συμπεριφορά κατά την ανάλυση της  $\phi$  διεύθυνσης.

Μια πιθανή αιτία αυτής της συμπεριφοράς θα μπορούσε να είναι η όλο και μεγαλύτερη προσέγγιση προς την πραγματική μορφή της επιφάνειας κατά την πύκνωση του πλέγματος, με αποτέλεσμα στα σημεία που «καρφιτσώνεται» η σταγόνα να παρατηρούνται απότομες κλίσεις. Η βαρύτητα αλλά και η μορφή των συνοριακών συνθηκών θα μπορούσαν να εξηγήσουν αυτήν την συμπεριφορά της αριθμητικής λύσης. Ο κώδικας για μεγάλα πλέγματα αδυνατεί να συγκλίνει όταν το σχήμα γίνεται πιο πεπλατυσμένο, σε αντίθεση με αραιότερα πλέγματα. Αυτό υποδηλώνει την προσέγγιση σε όλο και πιο παραμορφωμένα σχήματα τα οποία απαιτούν πολύ καλή διακριτοποίηση, ενδεχομένως λόγω και της εμφάνισης περιοχών με μικρή ακτίνα καμπυλότητας ιδιαίτερα κοντά στο κάτω πόλο.

Μία ακόμα δοκιμή που έγινε στον αριθμητικό έλεγχο είναι όταν δοκιμάστηκε αρχική πρόβλεψη μια προηγούμενη λύση ενός τρισδιάστατου προβλήματος για λίγο μικρότερο μήκος επαφής σταγόνα. Όταν οι παράμετροι δόθηκαν από αρχική τιμή μερικής σφαίρας η συγκεκριμένα μέθοδος σύγκλινε για τη μεγαλύτερη σταγόνα. Στην συνέχεια οι τιμές του όγκου, του μήκους επαφής και της πρόβλεψης για υπερπίεση δόθηκαν από λύση του αξονοσυμμετρικού για λίγο μικρότερη πίεση-μικρή αύξηση στο μήκος επαφής της σταγόνας. Ωστόσο η διαφοροποίηση που προκύπτει στον όγκο του αξονοσυμμετρικού καθώς  $\frac{V_1}{R_{st1}^3} \neq \frac{V_2}{R_{st2}^3}$  μεταξύ των δύο διαφορετικών σταγόνων που προέκυψαν κατά την αύξηση του μεγέθους της σταγόνας δημιούργησε πρόβλημα σύγκλισης.

Το δεύτερο είδος των συμπερασμάτων που εξήχθησαν έχει να κάνει με την σύγκριση της σταγόνας του αξονοσυμμετρικού με αντίστοιχη που προέκυψε για το τρισδιάστατο, χρησιμοποιώντας ως αρχική πρόβλεψη αυτή του αξονοσυμμετρικού για ίδιο μήκος επαφής και όγκο. Όσο αυξάνεται το μέγεθος της σταγόνας στο πρόβλημά μας από περίπου 0.7mm σε 2mm για υπερπίεσεις από 800Pa έως 284Pa (οριακή πίεση πέραν της οποίας αδυνατεί να δώσει λύση ο κώδικας) τόσο το σχήμα της επιφάνειας μετατοπίζεται σταδιακά προς τα κάτω σε σχέση με την σταγόνα αξονοσυμμετρικού σχήματος. Στα τελικά σχήματα φαίνεται η επιφάνεια να «κρεμιέται» από το άνω σταθερό σημείο όπου εμφανίζει απότομη κλίση, ενώ αντιθέτως στο κάτω σταθερό σημείο παρατηρείται η συσσώρευση της μάζας, μάλιστα προεξέχοντας από την αρχική μορφή της σταγόνας.

Επόμενο στοιχείο εξέτασης για το συγκεκριμένο θέμα θα πρέπει να είναι η σημαντική πύκνωση του πλέγματος, για το οποίο χρειάζεται σημαντική υπολογιστική δύναμη. Έτσι ευελπιστούμε ότι από μια μορφή πλέγματος και μετά τα αποτελέσματα θα συμφωνούν, ώστε να θεωρούνται αποδεκτά. Ωστόσο επειδή κατά την πύκνωση του πλέγματος παρατηρήθηκε μεγαλύτερη αδυναμία σύγκλισης για ίδιο μέγεθος σταγόνας, θεωρείται αναγκαίο να επανεξεταστεί η αρχική πρόβλεψη που θα δίνεται στον κώδικα για μεγέθη που βρίσκονται κοντά στην οριακή τιμή σύγκλισης. Μία λύση είναι να χρησιμοποιείται ο κώδικας με την λογική της απλής συνέχισης, simple continuation, για μικρές αυξήσεις στο

μήκος επαφής της σταγόνας με αρχική πρόβλεψη την λύση που προέκυψε για την ελάχιστα μεγαλύτερη σταγόνα.

Το επόμενο στάδιο έρευνας για την υπολογιστική προσομοίωση της μορφής του υγρού λιθίου πάνω σε ένα σύστημα τριχοειδών πόρων CPS, είναι η εξέταση της επίδρασης των διαμοριακών δυνάμεων κοντά στην διεπαφή με τα στερεά μέρη του CPS, και η διερεύνηση της συνολικής συνεισφοράς τους στο ισοζύγιο στατικής ισορροπίας στην επιφάνεια του υγρού.

## 6. Βιβλιογραφία

- [1] Mirnov, S. V., Azizov, E. A., Lazarev, V. B., Evtikhin, V. A., Lyublinski, I. E., & Vertkov, A. V. (2004). Experiments with lithium limiter on T-11M tokamak and perspectives of the lithium capillary-pore system application in fusion. *20th IAEA FEC, Vilamura, Portugal*, 1-6.
- [2] Lyublinski, I. E., & Vertkov, A. V. (2010). Experience and technical issues of liquid lithium application as plasma facing material in tokamaks. *Fusion Engineering and Design*, 85(6), 924-929.
- [3] Mirnov, S. V., Azizov, E. A., Alekseev, A. G., Lazarev, V. B., Khayrutdinov, R. R., Lyublinski, I. E., ... & Vershkov, V. A. (2011). Li experiments on T-11M and T-10 in support of a steady-state tokamak concept with Li closed loop circulation. *Nuclear Fusion*, 51(7), 073044.
- [4] Lyublinski, I., Vertkov, A., Evtikhin, V., Balakirev, V., Ionov, D., Zharkov, M., ... & Mazzitelli, G. (2012). Module of lithium divertor for KTM tokamak. *Fusion Engineering and Design*, 87(10), 1719-1723.
- [5] Mirnov, S. (2009). Plasma-wall interactions and plasma behaviour in fusion devices with liquid lithium plasma facing components. *Journal of Nuclear Materials*, 390, 876-885.
- [6] Mirnov, S. V., Azizov, E. A., Evtikhin, V. A., Lazarev, V. B., Lyublinski, I. E., Vertkov, A. V., & Prokhorov, D. Y. (2006). Experiments with lithium limiter on T-11M tokamak and applications of the lithium capillary-pore system in future fusion reactor devices. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 48(6), 821.
- [7] Vertkov, A., Lyublinski, I., Evtikhin, V., Mazzitelli, G., Apicella, M. L., Lazarev, V., ... & Khomyakov, S. (2007). Technological aspects of liquid lithium limiter experiment on FTU tokamak. *Fusion Engineering and Design*, 82(15), 1627-1633.
- [8] Apicella, M. L., Lazarev, V., Lyublinski, I., Mazzitelli, G., Mirnov, S., & Vertkov, A. (2009). Lithium capillary porous system behavior as PFM in FTU tokamak experiments. *Journal of Nuclear Materials*, 386, 821-823.
- [9] Pelekasis, N., & Benos, L. (2017). Static arrangement of a capillary porous system (CPS): Modelling. *Fusion Engineering and Design*, 117, 180-187.

# Παράρτημα

## Κώδικας σε Fortran

```
! THIS IS A FORTRAN ALGORITHM THAT FINDS THE RADIOUS OF EVERY POINT IN A
! DROPLET AND THE INNER PRESSURE
! IN A VERTICAL PLAIN WITH CERTAIN VOLUME AND LENGTH
! IN A RECTANGULAR DOMAIN OF ANGLES TH AND PH WITH QUADRATIC LAGRANGIAN BASIS
! FUNCTIONS
! IT SOLVES FOR THE UNKNOWN VECTOR IN A NONLINEAR FASHION VIA NEWTON'S
! ITERATIONS
! DUE TO THE NONLINEARITY OF THE EQUATION
! -----
!
! ORIGINAL PROGRAM WRITTEN BY A.N.B. AND J.A.T. LAST UPDATE 3/18/87
! BASED OF AN EARLIER VERSION WRITTEN BY H. ETTOUNNEY (MIT, 1980)
!
! EXTENSION WAS MADE BY PELEKASIS 24/04/2015
! ADJUSTED TO THE CERTAIN PROBLEM BY KONSTANTINIDIS 5/4/2017
!
! -----
PROGRAM FEM
IMPLICIT NONE
REAL(kind(2.D0)) THAXIS,PHAXIS,XFACT,YFACT
REAL(kind(2.D0))
SUM,ERROR,PI,HEAD(1,1),DETLOG,LPIV,pivmin,COSTHsumpl,COSTHep,SINTHep,VOLUME,ST,
SPH,Bo,Rst,P0,Pout,rho,g,sigma,CA
Real(kind(2.D0)) Radius,rax,constant
INTEGER
NNTH,NNPH,NTHEL,NPHEL,NELEM,NODTOL,NODTOL1,NRHS,NINT,IBAND,JDIM,NOPT,NITER,ISIG
N
INTEGER I,J,ITER,M,IERR1,IERR2,IERR3,INTOT,IA,ielem
REAL(kind(2.D0)), ALLOCATABLE, DIMENSION (:) :: DX,B,b1,R,TH,PH,GAPT,W0
REAL(kind(2.D0)), ALLOCATABLE, DIMENSION (:,) :: COLUMN,ROW
REAL(kind(2.D0)), ALLOCATABLE, DIMENSION (:,) ::
A,BFN1DQ,DF1QDC,DF1QDE,BFN2DL,BFN2DQ,DF2QDE,DF2QDC
INTEGER, ALLOCATABLE, DIMENSION (:) :: IN

real (kind(2.D0)), allocatable, dimension (:) :: Rxz,Z,Rstatic,PH1,TH1
real (kind(2.D0)), allocatable, dimension (:) :: DIF,PHn,Vec
integer nnode,pos,ith,iph,nelnode
real (kind(2.D0)) a20,c20,Rf
!
! *** OPEN INPUT/OUTPUT FILES ***
!
! ta stoixeia dinontai apo to arxeio infe.dat
! xreiazetai arithmo stoixeiwn,mhkos anaforas ths diepafhs me to kentro,
! puknothta, epifaneiakh tash, gwnia epafhs
!
OPEN(15,FILE='ERROR.DAT',status='unknown')
OPEN(11,FILE='INFE.DAT',status='old')
OPEN(12,FILE='OUTFE.DAT',status='unknown')
OPEN(13,FILE='IGUES.DAT')
OPEN(20,FILE='C:\programma fortran se laptop mamas\Static Old
3d\Console1\Console1\IGUESAXI.DAT',status='old')
OPEN(14,FILE='SOL.DAT',status='unknown')
! OPEN(25,FILE='IGUESNEW.DAT',status='unknown')
! *** READ INPUT DATA ***
!
READ(11,*)NTHEL,NPHEL,NOPT,nnode
READ(11,*)NINT,NITER,ERROR
```

```

READ(11,*)Rst,P0,Pout,rho,g,sigma,CA,Volume
READ(11,*)THAXIS,PHAXIS,XFACT,YFACT

PI=DACOS(-1.D+00)
THAXIS=PI           !gia megaluterh akriveia pi
PHAXIS=PI/2.
NNTH=2*NTHL+1      !arithmos komvwn ana kateuthunsh
NPNH=2*NPHEL+1
NELEM=NTHL*NPHEL
NODTOL=NNTH*NPNH   !sunolo kombwn apostashs
NODTOL1=NODTOL+1   !megethos pinaka tw n residuals mazi me thn
extra sunarthsh
  nelnode=(nnode-1)/2
  NRHS=1
  IBAND=4*NNTH+5    !to megethos diagwniopihshtou tou pinaka A
  !JDIM=IBAND+LPIV
  JDIM=IBAND+(IBAND-1)/2 !h diastash tou pinaka band wste na mhn
uperxeilhsei
  INTOT=NINT*NINT
  pivmin=0.0d+00
!
  CA=CA*Pi/180.d+00 !h gwnia epafhs
  COSTHsumpl=-DCOS(pi/2.-CA) !sunhmitono gwnias tou dianusmatos m me ey
  COSTHep=DCOS(CA)      !sunhmitono gwnias epafhs
  SINTEp=DSIN(CA)      !hmitono gwnias epafhs

  P0=p0/(sigma/Rst)    !piesh me adiastatopoihshtou ws pros Rst
  Pout=Pout/(sigma/Rst)
!
  volume=volume/Rst**3
  !VOLUME=Volume/2.d+00/Rst**3 !adiastatopoihmenos ogkos

  ! VOLUME=VOLUME+1.

! P0=P0/(sigma/Rst) ; Pout=pout/(sigma/Rst)
!Bo=rho*g*Rst**2/sigma ;rho=rho/(sigma/Rst)

! ALLOCATABLE ARRAYS
!
  ALLOCATE
  (TH(NODTOL),PH(NODTOL),B(NODTOL1),B1(NODTOL1),DX(NODTOL1),R(NODTOL),GAPT(NINT),
  WO(NINT),STAT = IERR1)
  IF(IERR1.NE.0) THEN
    WRITE(12,*)"WRONG MEMORY ALLOCATION"
    STOP
  ENDIF
!
  ALLOCATE
  (A(NODTOL,JDIM),BFN1DQ(3,NINT),DF1QDC(3,NINT),DF1QDE(9,NINT),BFN2DL(4,INTOT),CO
  LUMN(NODTOL,1),ROW(1,NODTOL), &
  BFN2DQ(9,INTOT),DF2QDE(9,INTOT),DF2QDC(9,INTOT),STAT = IERR2)
  IF(IERR2.NE.0) THEN
    WRITE(12,*)"WRONG MEMORY ALLOCATION"
    STOP
  ENDIF
!
!
  ALLOCATE (IN(NODTOL),STAT = IERR3)
  IF(IERR3.NE.0) THEN
    WRITE(12,*)"WRONG MEMORY ALLOCATION"
    STOP

```

```

ENDIF
!

!      ALLOCATE (PHn(NNPH),Vec(NNPH),DIF(NNPH))           !pinakes gia
dhmiourgia lushs me aksonosummetriko profil

      READ(11,*)(GAPT(I),WO(I),I=1,NINT)
! ***   CONSTRUCT INITIAL GUESS   ***
!

!
! ***   IMPOSE THE CORRECT ESSENTIAL BOUNDARY CONDITIONS
!
!
! ***   PRINT INPUT DATA AND INITIAL GUESS   ***
!
      WRITE(12,1)
      WRITE(12,101)
      WRITE(12,102)
NELEM,NODTOL,NTHEL,NPHEL,NNTH,NNPH,Rst,P0,Pout,rho,g,sigma,CA
      WRITE(12,2)NOPT,NRHS,NITER
      WRITE(12,201) ERROR
      WRITE(12,3)THAXIS,PHAXIS,IBAND,NINT
      WRITE(12,103)JDIM
!
! ***   INITIALIZE BILINEAR BASIS FUNCTIONS   ***
!
      CALL BASIS(NINT)
!
!
! ***   CALCULATE THE MESH POINTS   ***
!
      CALL MESH
!
!
! ***   CONSTRUCT INITIAL GUESS   ***
      SELECT CASE (NOPT)
      CASE (1)
!arxikh timh apostashs R( $\theta$ , $\phi$ ) gia kentro
sfairas
!
! ***   NOPT = 1: USE PROGRAM'S DEFAULT INITIAL GUESS
!
      !Rst=Rst*Radius

      Radius=1.d+00/sinthepp           !logos apostashs apo kentro sfairas, ws pros
apostash apo kentro suntetagmenwn,enos shmeiou diepafhs (ph=0)
      ! volume=4.d+00*Pi/3.d+00
      VOLUME=pi/3.D+00*(1-3./2.*COSTHep + 1./2.*COSTHep**3.) ! misos ogkos
adiastatopoiimenos os pros R
      volume=volume*Radius**3           !logkos me adiaastatopoiish ws pros
Rst
      p0=pout+2.d+00/Radius
      DO I=1,NNTH
      DO J=1,NNPH

          IA=NUM(I,J)
          ST=DSIN(TH(IA))
          SPH=DSIN(PH(IA))
!
          R(IA)=(COSTHep**2*ST**2*SPH**2+SINTHep**2)**(1.D+00/2.D+00)-
COSTHep*ST*SPH

```

```

R(IA)=(COSTHep**2*ST**2*SPH**2+SINTHep**2)**(1.D+00/2.D+00)-
COSTHep*ST*SPH
R(IA)=R(IA)*Radius
! R(IA)=(COSTHep**2*ST**2*SPH**2+SINTHep**2)**(1.D+00/2.D+00)-
COSTHep*ST*SPH

ENDDO
ENDDO

CASE (2) !arxikh timh me telikh timh apostashs kai pieshs
gia prohgomienh epilush, wstoso ogko sfairas kai mhkos anaforas epiloghhs mas
!
! *** NOPT = 2: USE INITIAL GUESS FROM FILE 'IGUESS.DAT'
!Rst=Rst*Radius

Radius=1.d+00/sinthep !logos apostashs apo kentro sfairas, ws pros
apostash apo kentro suntetagmenwn,enos shmeiou diepafhs (ph=0)
! volume=4.d+00*Pi/3.d+00
VOLUME=pi/3.D+00*(1-3./2.*COSTHep + 1./2.*COSTHep**3.) ! misos ogkos
adiastatopoiimenos os pros R
volume=volume*Radius**3 !logkos me adiaastatopoihsh ws pros
Rst
! p0=pout+2/Radius

DO J=1,NNPH
READ(13,*)(R(NNUM(I,J)),I=1,NNTH)
ENDDO
READ(13,*)P0
! P0=P0/(sigma/Rst)
!R=R/Rst

CASE (3) !Aksonosummetriko provlhma pou diavazei to profil
z(r) thn piesh P0-pgh0 kai ton ogko tou aksonosummetrikou

ALLOCATE (Rxz(nnode),Z(nnode),Rstatic(nnode))

do i=1,nnode
read(20,*) Rxz(i),Z(i)
enddo
read(20,*) a20,c20,P0,volume
Rst=Rxz(nnode) !orish mhkous anaforas thn apostash r
gia z=0 pou dinetai sto r(nnode)
volume=volume/Rst**3/2.D+00
P0=P0/(sigma/Rst)
rxz=rxz/Rst ; z=z/rst
Rstatic=DSQRT(Z**2+Rxz**2) !upologismos apostashs apo kentro
me to upsos kai thn provolh r sto epipedo gnwsta

do j=1,nnph
if(j.eq.1) then
do i=1,nnth
R(nnum(i,j))=1.d+00
enddo
else
R(nnum(1,j))=1.d+00 ; R(nnum(nnth,j))=1.d+00

rax=rxz(nnode-1) ; ielem=nelnode

```

```

do i=2,nnth-1
constant=dsin(Th(nnum(i,j))) *dsin(Ph(nnum(i,j)))
!   if(constant.lt.1.d-02) then
!       R(nnum(i,j))=1.d+00
!       cycle
!   endif
if(i==(nnth+1)/2 .and.j==nnph) then
    R(nnum(i,j))=z(1)
    !i=i+1
    rax=R(nnum(i-1,j))
else
    call inguess(rax,constant,ielem,R(nnum(i,j)))
endif

enddo

endif
enddo

case(4)

DO J=1,NNPH
READ(13,1010)(R(NNUM(I,J)),I=1,NNTH)
ENDDO
READ(13,*)P0

! read(20,*) nnode

    ALLOCATE (Z(nnode),Rxz(nnode))

do i=1,nnode
read(20,*) Rxz(i),Z(i)
enddo
read(20,*) a20,c20,z(5),volume

Rf=Rxz(nnode)
volume=volume/Rf**3/2
Rst=Rf
!P0=z(5); P0=P0/(sigma/Rf)

END SELECT

close(13)
OPEN(13,FILE='IGUES.DAT')

WRITE(12,4)
WRITE(12,1020)
DO J=1,NNPH
WRITE(12,1010) (TH(NNUM(I,J)),I=1,NNTH)
ENDDO
!
WRITE(12,1020)
DO J=1,NNPH
WRITE(12,1010) (PH(NNUM(I,J)),I=1,NNTH)
ENDDO
!
WRITE(12,1020)
DO J=1,NNPH
WRITE(12,1010) (R(NNUM(I,J)),I=1,NNTH)

```



```

        ENDDO
!
        WRITE(12,1011)P0,Volume
!
! ***   NEWTON ITERATION LOOP   ***
!
        ITER=0
        SUM=1.0D+00
        B1(:)=0.D+00
!
        DO
        IF(SUM.1T.1.d-08) EXIT
        ITER=ITER+1
        IF(ITER .GT. NITER) THEN
        WRITE(15,8) NITER

        WRITE(12,1020)
        WRITE(12,10)
        DO J=1,NNPH
        WRITE(14,1010) (R(NNUM(I,J)),I=1,NNTH)
        WRITE(12,1010) (R(NNUM(I,J)),I=1,NNTH)
        ENDDO
        WRITE(12,1010)P0
        WRITE(14,1010)P0
        WRITE(12,1010)SUM
        WRITE(14,1010)SUM

        STOP
        ENDIF

        WRITE(15,6) ITER
!
        CALL DOMI
!
! ***   MODIFY EQUATIONS FOR NATURAL BOUNDARY CONDITIONS (IF NECESSARY)   ***
        CALL BOUND

        !WRITE(12,1020)
        !DO J=1,JDIM
        !WRITE(12,1010) (A(I,J),I=1,NODTOL)
        ! ENDDO

        ! WRITE(12,1020)
        ! DO J=1,NODTOL1
        ! WRITE(12,1010) (B(J))
        ! ENDDO
!
        ! WRITE(12,1020)
        !DO J=1,NODTOL
        !WRITE(12,1010) (ROW(1,J))
        !ENDDO
        !WRITE(12,1020)
        !DO J=1,NODTOL
        !WRITE(12,1010) (COLUMN(J,1))
        !ENDDO
        ! WRITE(12,*) HEAD
!
!
! ***   SOLVE THE SYSTEM OF LINEAR EQUATIONS   ***
!

```

```

!      CALL BAND(NODTOL,1,LPIV,1,M,NODTOL,JDIM,A,DX,B,IN,DET,NEXP)

      CALL
ARROW(nodtol1,nodtol,IBAND,1,1,pivmin,DETLOG,ISIGN,B,HEAD,COLUMN,ROW,A)
!      CALL
ARROW(neqn,NODBAND,IBAND,IARROW,NRHS,PIVMIN,DETLOG,ISIGN,RHS,HEAD,COL,ROW,A)
! H ARROW EPISTREFEI STON B THN LUSH

!
! diafora metaksu twrinhs kai prohgoumenhs lushs tou DX
!
!      WRITE(12,1020)
!      DO J=1,NODTOL1
!      WRITE(12,1010) (B(J)-B1(J))
!      ENDDO
!
!      B1(:)=B(:)
! *** UPDATE THE SOLUTION VECTOR R AND CHECK CONVERGENCE ***
!

      SUM=0.D00
      ERROR=0.D00
      DO I=1,NODTOL
        R(I)=R(I)-B(I)
        SUM=SUM+B(I)*B(I)
        ERROR=DMAX1(DABS(B(I)),ERROR)
      ENDDO
      P0=P0-B(NODTOL1)
      SUM=SUM+B(NODTOL1)*B(NODTOL1)
      SUM=DSQRT(SUM)
      WRITE(15,7)SUM,ERROR,R(10),R(20)
      ENDDO

!
! *** PRINT RESULTS TO OUTPUT FILES ***
!
      WRITE(12,9)
      WRITE(12,1020)
      WRITE(12,10)
      DO J=1,NNPH
      WRITE(25,1010) (R(NNUM(I,J))*Rst,I=1,NNTH)
      WRITE(12,1010) (R(NNUM(I,J)),I=1,NNTH)
      WRITE(13,1010) (R(NNUM(I,J)),I=1,NNTH)
      ENDDO
!
      WRITE(12,1011)P0
      WRITE(13,1011)P0
      WRITE(25,1011)P0*sigma/Rst,volume*rst**3
      WRITE(12,1010)SUM
      WRITE(13,1010)SUM
      WRITE(25,1010)SUM

!ektupwsh se sol.dat gia oloklhrh epifaneia
write(14,1005)nnth
write(14,1005)2*nnph-1

      WRITE(14,1020)
      WRITE(14,1010) (TH(NNUM(I,1)),I=1,NNTH)
      DO J=2,NNPH
      WRITE(14,1010) (TH(NNUM(I,J)),I=1,NNTH)
      WRITE(14,1010) (TH(NNUM(I,J)),I=1,NNTH)
      ENDDO

```

```

WRITE(14,1020)
DO J=1,NNPH
WRITE(14,1010) (PH(NNUM(I,J)),I=1,NNTH)
ENDDO
DO J=2,NNPH
WRITE(14,1010) (PH(NNUM(I,J))+pi/2.D+00,I=1,NNTH)
ENDDO

WRITE(14,1020)
DO J=1,NNPH
!WRITE(14,1010) (R(NNUM(I,J)),I=1,NNTH)
WRITE(14,1010) (R(NNUM(I,J))*Rst,I=1,NNTH)

ENDDO
DO J=1,NNPH-1
!WRITE(14,1010) (R(NNUM(I,NNPH-J)),I=1,NNTH)
WRITE(14,1010) (R(NNUM(I,NNPH-J))*Rst,I=1,NNTH)
ENDDO

! DO I=1,NODTOL
! WRITE(14,1012)R(I),TH(I),PH(I)
! ENDDO

! ***   FORMAT STATEMENTS   ***
!
1   FORMAT(/,1X,'-----',//,1X,&
      'INPUT DATA ',/)
101  FORMAT(/,1X,'-----',/)
102  FORMAT(1X,'NELEM =',I5,5X,'NODTOL =',I5,/,1X,'NTHEL =',I5,5X,   &
      'NPHEL =',I5,/,1X,'NNTH =',I5,5X,'NNPH =',I5,/)
!
103  FORMAT(/,1X,' JDIM=',I5)
2   FORMAT(/,1X,' OPTION (NOPT) =',I5,' # OF RHS (NRHS) =',I5,/,   &
      11X,'TOTAL NUMBER OF ITERATIONS (NITER) =',I5,/)
201  FORMAT(/,1X,'ERROR BOUNDS (ERROR) =',D15.6,/,1X,'C1 =',   &
      ,D15.6,5X,'C2 =',D15.6,/,1X,'C3 =',D15.6,5X,'C4 =',D15.6,/)
!
3   FORMAT(/,1X,'THAXIS =',D15.6,5X,'PHAXIS =',D15.6,/,1X,   &
      'XFACT =',D15.6,5X,'YFACT =',D15.6,/,1X,   &
      'IBAND =',I5,5X,'NUMBER OF INTEGRATION POINTS =',I5,/)
!
4   FORMAT(/,1X,'-----',//,1X,   &
      '  INITIAL GUESS  ',//,1X,   &
      '-----',/)
!
5   FORMAT(/,5(1X,F12.6,2X))
6   FORMAT(/,1X,'NEWTON S ITERATION NUMBER (ITER) =',I5,/)
7   FORMAT(/,1X,'RMS ERROR =',D15.6,' MAXIMUM ERROR =',D15.6,   &
      /,/,2X,'R(10) =',D15.6,   &
      ' R(20) =',D15.6,/)
8   FORMAT(/,1X,'NEWTON S METHOD HAS NOT CONVERGED IN ',/,   &
      10X,I5,' ITERATIONS',/)
9   FORMAT(/,1X,' !!!!! ITERATIONS HAVE CONVERGED !!!!! ',/)
10  FORMAT(/,1X,'-----',//,10X   &
      , 'RESULTS',//,1X,'-----',/)
1005 FORMAT(1X,4I5)
1006 FORMAT(1X,2I5,5E12.5)
1007 FORMAT(1X,4E12.5)
1008 FORMAT(1X,E16.9,5X,E16.9)
1010 FORMAT(300(1X,E22.14))
1011 FORMAT((1X,E22.14))

```

```

1012 FORMAT(E13.6, ',', E13.6, ',', E13.6)
1020 FORMAT(//)
!
! *** REPORT I/O ERROR
!
CONTAINS

!-----
!-----
! SUBROUTINE DOMI
!-----
SUBROUTINE DOMI
IMPLICIT NONE
REAL(kind(2.D0))
DFDTH(9),DFDPH(9),THTH,PHPH,AJAC,DTHDC,DTHDE,DPHDE,DPHDC,CJAC,WET,DRDTH,DRDPH,R
_ELEM
REAL(kind(2.D0))
TEMP(9,9),TEMP1(9),TEMP2,TEMPRES1DPO(9),TEMPRES2DPO,TEMPRES2DRJ(9),BIFN,DBITH,D
BIPH,DBJTH,DBJPH,TERM,CPH,CT,SPH,ST,BI,BJ,TERM2,TERMRES1DPO,TERMRES2DPO,TERMRES
2DRJ
INTEGER IELEM,I,J,JTALLY,IFACT,NM(9),IW,KK,ICOL,IROW,JCOL,NOPT,JW
!
! *** INITIALIZE THE JACOBIAN MATRIX AND THE RESIDUALS VECTOR ***
!
DO I=1,NODTOL
B(I)=0.D00
COLUMN(I,1)=0.D00
ROW(1,I)=0.D00

DO J=1,JDIM
A(I,J)=0.D00
ENDDO
ENDDO
B(NODTOL1)=0.D00
HEAD(1,1)=0.D00
TEMP2=0.D00
TEMPRES2DPO=0.D00
!
! *** ITERATE OVER ELEMENTS IN DOMAIN ***
! *** JTALLY=COUNTER IN TH DIRECTION, IFACTOR=COUNTER IN PH DIRECTION
!
JTALLY=-1
IFACT=0
DO IELEM=1,NELEM
!
! *** FIND THE NODE NUMBERS OF NELEM ***
!
JTALLY=JTALLY+2
IF(JTALLY.EQ.NNTH) THEN
JTALLY=1
IFACT=IFACT+2
ENDIF
NM(1)=IFACT*NNTH+JTALLY
NM(2)=NM(1)+1
NM(3)=NM(2)+1
NM(4)=(IFACT+1)*NNTH+JTALLY
NM(5)=NM(4)+1
NM(6)=NM(5)+1
NM(7)=(IFACT+2)*NNTH+JTALLY
NM(8)=NM(7)+1
NM(9)=NM(8)+1
!
! *** INITIALIZE WORKING (TEMPORARY) AREAS FOR ELEMENT INTEGRATION ***

```

```

!   ***   BEFORE FORMING ELEMENTAL JACOBIAN AND RHS VECTOR
!
      DO IW=1,9
        TEMP1(IW)=0.D00
                TEMPRES1DPO(IW)=0.D00
                TEMPRES2DRJ(IW)=0.D00
          DO JW=1,9
            TEMP(IW,JW)=0.D00
          ENDDO
        ENDDO

!
!   ***   ITERATE OVER EACH GAUSS POINT IN AN ELEMENT   ***
!
      KK=0
      DO I=1,NINT
        DO J=1,NINT
          KK=KK+1

!
!   ***   CALCULATE DERIVATIVES OF BASIS FUNCTIONS AND TRANSFORMATION
!   ***   JACOBIAN AT THE GAUSS POINTS IN TH,PH COORDINATES
!

      THTH=0.D00
      PHPH=0.D00
      DTHDC=0.D00
      DTHDE=0.D00
      DPHDC=0.D00
      DPHDE=0.D00
      DO IW=1,9
        THTH=THTH+BFN2DQ(IW, KK)*TH(NM(IW))
        PHPH=PHPH+BFN2DQ(IW, KK)*PH(NM(IW))
        DTHDC=DTHDC+DF2QDC(IW, KK)*TH(NM(IW))
        DTHDE=DTHDE+DF2QDE(IW, KK)*TH(NM(IW))
        DPHDC=DPHDC+DF2QDC(IW, KK)*PH(NM(IW))
        DPHDE=DPHDE+DF2QDE(IW, KK)*PH(NM(IW))
      ENDDO

!
!   ***   CALCULATE COS AND SIN OF THETA AND PHI
ST=dsin(THTH)
SPH=dsin(PHPH)
CT=dcos(THTH)
CPH=dcos(PHPH)
!
!   ***   CALCULATE JACOBIAN OF THE TRANSFORMATION
!
      CJAC=DTHDE*DPHDC-DTHDC*DPHDE
      AJAC=DABS(CJAC)

!
!   ***   CALCULATE DERIVATIVES OF BASIS FUNCTIONS WRT TH,PH COORDINATES
!
      DO IW=1,9
        DFDTH(IW)=(DF2QDE(IW, KK)*DPHDC-DF2QDC(IW, KK)*DPHDE)/CJAC
        DFDPH(IW)=(DF2QDC(IW, KK)*DTHDE-DF2QDE(IW, KK)*DTHDC)/CJAC
      ENDDO

!
      WET=WO(I)*WO(J)*AJAC

!
!   ***   CALCULATE DEPENDENT VARIABLE AND PARTIAL DERIVATIVES AT
!   ***   THE GAUSSIAN INTEGRATION POINTS
!

```

```

DRDTH=0.D00
DRDPH=0.D00
R_ELEM=0.D00
DO IW=1,9
  R_ELEM=R_ELEM+R(NM(IW))*BFN2DQ(IW, KK)
  DRDTH=DRDTH+R(NM(IW))*DFDTH(IW)
  DRDPH=DRDPH+R(NM(IW))*DFDPH(IW)
ENDDO

!
  TERM2=R_ELEM**3./3.*ST
  TEMP2=TEMP2+TERM2*WET
!

DO IW=1,9
  !BIFN=BFN2DQ(IW, KK)
  DBITH=DFDTH(IW)
  DBIPH=DFDPH(IW)
  !TERM=BIFN ! Poisson
  !Laplace
  BI=BFN2DQ(IW, KK)
  TERM=BI*(P0-Rst**2/sigma*RHO*g*R_ELEM*CT-
Pout)*(R_ELEM**2*ST**2*SPH-R_ELEM*DRDTH*ST*CT*SPH-R_ELEM*DRDPH*CPH) &
-
(ST*SPH*(R_ELEM*DRDTH*ST*DBITH+R_ELEM*DRDPH/ST*DBIPH)+CT*SPH*((R_ELEM**2+DRDPH*
*2/ST**2)*ST*DBITH-DRDTH*DRDPH/ST*DBIPH)+CPH*(-
DRDTH*DRDPH*DBITH+(R_ELEM**2+DRDTH**2)*DBIPH)) &
/DSQRT(R_ELEM**2+DRDTH**2+DRDPH**2/ST**2)
!
! *** FORM THE WORKING RESIDUAL VECTOR IN ELEMENT NELEM ***
!
  TEMP1(IW)=TEMP1(IW)+TERM*WET
!
! *** FORM THE DERIVATIVE OF THE RESIDUAL WRT PARAMETER ***
!
  O ROS OLOKLHRWSHS STHN EPIFANEIA GIA TO RESIDUAL STO Z
!

  TERMRES1DPO=BI*(R_ELEM**2*ST**2*SPH-
R_ELEM*DRDTH*ST*CT*SPH-R_ELEM*DRDPH*CPH)
  TEMPRES1DPO(IW)=TEMPRES1DPO(IW)+TERMRES1DPO*WET
  DBJTH=DFDTH(IW)
  BJ=BI

TERMRES2DRJ=R_ELEM**2*ST*BJ
  TEMPRES2DRJ(IW)=TEMPRES2DRJ(IW)+TERMRES2DRJ*WET
! *** ITERATE OVER EACH NODE TO FORM JACOBIAN ***
!

DO JW=1,9
  DBJTH=DFDTH(JW)
  DBJPH=DFDPH(JW)
  BJ=BFN2DQ(JW, KK)
  TERM=(BI*(-Rst**2/sigma*RHO*g*BJ*CT)*(R_ELEM**2*ST**2*SPH-
R_ELEM*DRDTH*ST*CT*SPH-R_ELEM*DRDPH*CPH)) &
+ (BI*(P0-Rst**2/sigma*RHO*g*R_ELEM*CT-
Pout)*(2*R_ELEM*BJ*ST**2*SPH-(BJ*DRDTH+R_ELEM*DBJTH)*ST*CT*SPH-
(BJ*DRDPH+R_ELEM*DBJPH)*CPH)) &
-
(((ST*SPH*((BJ*DRDPH/ST+R_ELEM*DBJPH/ST)*DBIPH+(BJ*DRDTH+R_ELEM*DBJTH)*ST*DBITH)
) &
+CT*SPH*(-
(DBJTH*DRDPH+DRDTH*DBJPH)/ST*DBIPH+(2*R_ELEM*BJ+2*DRDPH*DBJPH/ST**2)*ST*DBITH)
&
+CPH*((2*R_ELEM*BJ+2*DRDTH*DBJTH)*DBIPH-
(DBJPH*DRDTH+DRDPH*DBJTH)*DBITH)) &
/DSQRT(R_ELEM**2+DRDTH**2+DRDPH**2/ST**2)) &

```

```

+((ST*SPH*(R_ELEM*DRDTH*ST*DBITH+R_ELEM*DRDPH/ST*DBIPH)+CT*SPH*((R_ELEM**2+DRDP
H**2/ST**2)*ST*DBITH-DRDTH*DRDPH/ST*DBIPH)+CPH*(-
DRDTH*DRDPH*DBITH+(R_ELEM**2+DRDTH**2)*DBIPH)) &
      *(-
(R_ELEM*BJ+DRDTH*DBJTH+DRDPH*DBJPH/ST**2)/(R_ELEM**2+DRDTH**2+DRDPH**2/ST**2)**
15.d-01)))
!   ***   FORM THE WORKING JACOBIAN MATRIX FOR ELEMENT NELEM   ***
!
      TEMP(IW, JW)=TEMP(IW, JW)+TERM*WET

      ENDDO
    ENDDO
  ENDDO
ENDDO

!
!   ***   STORE THE ELEMENT INTEGRATION MATRIX AND RESIDUAL VECTOR
!   ***   IN THE GLOBAL MATRIX A AND VECTOR B
!
DO I=1,9
  IROW=NM(I)
  B(IROW)=B(IROW)+TEMP1(I)
  COLUMN(IROW,1)=COLUMN(IROW,1)+TEMPRES1DPO(I)
  ROW(1,IROW)=ROW(1,IROW)+TEMPRES2DRJ(I)

  DO J=1,9
    ICOL=NM(J)
    JCOL=ICOL-IROW+IBAND/2+1
    A(IROW, JCOL)=A(IROW, JCOL)+TEMP(I, J)
  ENDDO
ENDDO
ENDDO
!   HEAD(1,1)=TEMPRES2DPO
!   !B(NODTOL+1)=TEMP2
B(NODTOL+1)=TEMP2-VOLUME
END SUBROUTINE

!-----
!
!   SUBROUTINE BOUND(NOPT)
!
!-----

SUBROUTINE BOUND
  IMPLICIT none
  real(kind(2.D0))
P(3,3),S(3),S2(3),AJACY,AJACX,FUNT,TERMres,TERMJres,TERMres2,TERMJres2,R_EL_TH,
DRDTH,DRDPH,CT,ST,THTH,DTHDC,DPHDE,DTHDE,DPHDC,DFDTH(3),CJAC,AJAC,DFDPH(9),BI,B
J
  INTEGER N(9),II,I,J,IG,IW,IROW,JCOL,NOPT

  TERMRES2=0.D+00
DO II=1,NTHEL
!
!   ***   FIND THE NODE NUMBERS OF ELEMENT II   ***
!
  N(1)=NNUM(2*II-1,1)
  N(2)=NNUM(2*II,1)
  N(3)=NNUM(2*II+1,1)

!
!   ***   FIND JACOBIAN OF THE TRANSFORMATION C - TH

```

```

!
      AJACX=0.5*(TH(N(3))-TH(N(1))) ! thelei allagh gia sfairikes kai
thelei df/dx df/dy upologismo
!
! *** INITIALIZE WORKING AREAS P AND R ***
!
      DO I=1,3
        S(I)=0.D00
        S2(I)=0.D00
        DO J=1,3
          P(I,J)=0.D00
        ENDDO
      ENDDO
!
! *** ITERATE OVER GAUSSIAN POINTS ***
!
      DO IG=1,NINT

          THTH=0.D00
          DTHDC=0.D+00
          DPHDE=0.D+00

          DTHDE=0.D+00
          DPHDC=0.D+00

! *** CALCULATE DERIVATIVES OF BASIS FUNCTIONS WRT TH,PH COORDINATES
!
!
!
          DO IW=1,3

            THTH=THTH+BFN1DQ(IW,IG)*TH(N(IW))
            DTHDC=DTHDC+DF1QDC(IW,IG)*TH(N(IW))

          ENDDO

          !DO IW=1,9
          ! DPHDE=DPHDE+DF1QDE(IW,IG)*PH(N(IW))
          !ENDDO

          DO IW=1,3

            DFDTH(IW)=DF1QDC(IW,IG)/DTHDC

          ENDDO

          R_EL_TH=0.D+00
          DRDTH=0.D+00

          DO IW=1,3

            R_EL_TH=R_EL_TH+R(N(IW))*BFN1DQ(IW,IG)
            ! DFDTH(IW)=DF1QDC(IW,IG)/DTHDC
            DRDTH=DRDTH+R(N(IW))*DFDTH(IW)

          ENDDO

!      CJAC=DTHDC*DPHDE-DTHDE*DPHDC
!      AJAC=DABS(CJAC)

!DO IW=1,9

```



```

! DFDPH(IW)=(DF1QDE(IW,IG)*DTHDC)/CJAC
! ENDDO

! DRDPH=0.D+00

! DO IW=1,9
! DRDPH=DRDPH+R(N(IW))*DFDPH(IW)
! ENDDO

!
!
! ST=dsin(THTH)
! CT=dcos(THTH)

! FUNT=R(N(1))*BFN1DQ(1,IG)+R(N(2))*BFN1DQ(2,IG)+R(N(3))*BFN1DQ(3,IG)
!
TERMres2=TERMres2+W0(IG)*AJACX*sigma*COSTHsump1*CT*(R_EL_TH**2+DRDTH**2)/R_EL_T
H
!
! *** ITERATE OVER EACH NODE ***
!
! DO I=1,3
! BI=BFN1DQ(I,IG)

! TERMres=BFN1DQ(I,IG)*sigma*COSTHsump1*ST*(R_EL_TH**2+DRDTH**2)/DRDPH
! TERMres=COSTHsump1*BI*DSQRT(R_EL_TH**2+DRDTH**2)
! R(I)=R(I)+W0(IG)*BFN1DQ(I,IG)*AJACX*C3*(FUNT**4-C4**4)
! S(I)=S(I)+W0(IG)*AJACX*TERMres

! TERMJres2=sigma*COSTHsump1*CT*((R_EL_TH*BFN1DQ(I,IG)+DRDTH*DFDTH(I))/R_
EL_TH-(R_EL_TH**2+DRDTH**2)*BFN1DQ(I,IG)/R_EL_TH**2)

! S2(I)=S2(I)+W0(IG)*AJACX*TERMJres2
! *** ITERATE OVER EACH WEIGHTING FUNCTION ***
! DO J=1,3
! BJ=BFN1DQ(J,IG)

! TERMJres=BI*sigma*COSTHsump1*ST*((R_EL_TH*BJ+DRDTH*DFDTH(J))/DRDPH-
(R_EL_TH**2+DRDTH**2)*DFDPH(J)/DRDPH**2)

TERMJRES=COSTHsump1*BI/DSQRT(R_EL_TH**2+DRDTH**2)*(R_EL_TH*BJ+DRDTH*DFDTH(J))
!

P(I,J)=P(I,J)+W0(IG)*AJACX*TERMJres

! ENDDO
! ENDDO

! *** STORE BOUNDARY CONDITIONS IN GLOBAL MATRIX ***
!
! DO I=1,3
! IROW=N(I)
! B(IROW)=B(IROW)+S(I)
! ROW(1,IROW)=ROW(1,IROW)+S2(I)
! DO J=1,3
! JCOL=N(J)-IROW+IBAND/2+1
! A(IROW,JCOL)=A(IROW,JCOL)+P(I,J)
! ENDDO
! ENDDO
! ENDDO
! B(NODTOL+1)=TERMres2

```

```

! *** INSERT BOUNDARY CONDITIONS AT THE BOUNDARY TH=0 ***
!
DO II=1,NNPH
IROW=NNUM(1,II)
B(IROW)=0.D+00 !EPEIDH THELOUME NA BGAINEI 0 TO DX GIA EKEINO TO
SHMEIO
A(IROW,1:JDIM)=0.0D+00
COLUMN(IROW,1)=0.D+00 !mhdenismos kai ston oro ths sthlhs
A(IROW,IBAND/2+1)=1.0D+00
ENDDO
!
!
! *** INSERT BOUNDARY CONDITIONS AT THE BOUNDARY TH=LX ***
!
DO II=1,NNPH
IROW=NNUM(NNTH,II)
B(IROW)=0.D+00
A(IROW,1:JDIM)=0.0D+00
COLUMN(IROW,1)=0.D+00
A(IROW,IBAND/2+1)=1.0D+00
ENDDO

END SUBROUTINE
!-----
!-----
! SUBROUTINE MESH
!-----
SUBROUTINE MESH
IMPLICIT none
integer jy,ix,k
!
DO Jy=1,NNPH
DO Ix=1,NNTH
K=(Jy-1)*NNTH+Ix
IF(Jy/2*2.NE.Jy)THEN
IF(k/2*2.NE.k)THEN
TH(K)=THAXIS*(DBLE(Ix-1)/2./NTHL)**xfact
if(TH(k).ne.0.0d+00) then
TH(K-1)=(TH(K)-TH(K-2))/2.+TH(K-2)
ENDIF
ENDIF
PH(K)=PHAXIS*(DBLE(jy-1)/2./NPHEL)**yfact
if(PH(k).ne.0.0d+00) then
PH(K-NNTH)=(PH(k)-PH(k-2*NNTH))/2.+PH(k-2*NNTH)
ENDIF
ELSE
IF(k/2*2.EQ.k)THEN
TH(K)=THAXIS*(DBLE(Ix-1)/2./NTHL)**xfact
IF(TH(K).NE.0.0d+00)THEN
TH(K-1)=(TH(K)-TH(K-2))/2.+TH(K-2)
ENDIF
ENDIF
endif
ENDDO
ENDDO
end subroutine

subroutine inguess(rax,con,ielem,radius)

```

```

implicit none
real(8) radius,rax,ek,hlen,sum,zax,raxo,dzaxdro,zaxo,radiuso,djac,res,con
integer iel,ielem,iw,iit
sum=1.d+00 ; iit=0
do while(sum.gt.1d-08.and.iit.lt.2000)
iit=iit+1
  raxo=rax
  if(raxo.le.rxz(1)) then
    ielem=1 ; hlen=rxz(3)-rxz(1) ; ek=-1.d+00
  elseif(raxo.ge.rxz(nnode)) then
    ielem=nnode ; hlen=rxz(nnode)-rxz(nnode-2) ; ek=1.d+00
  else
    do iel=1,nnode
      if(raxo.ge.rxz(2*iel-1).and.raxo.lt.rxz(2*iel+1)) then
        hlen=rxz(2*iel+1)-rxz(2*iel-1)
        ek=(raxo-rxz(2*iel-1))/hlen-(rxz(2*iel+1)-raxo)/hlen
        ielem=iel
        exit
      endif
    enddo
  endif
  zaxo=-ek*(1.d+00-ek)/2.d+00*z(2*ielem-1)+(1.+ek)*(1.-
ek)*z(2*ielem)+ek*(1.+ek)/2.d+00*z(2*ielem+1)
  dzaxdro=(-z(2*ielem-1)*(1.-2.*ek)/hlen/2.d+00-
z(2*ielem)*(2.*ek)/hlen+z(2*ielem+1)*(1.+2.*ek)/hlen/2.d+00)*2.d+00
  radiuso=dsqrt(raxo**2+zaxo**2)
  res=zaxo/radiuso-con ; djac=(dzaxdro*raxo**2-
zaxo*raxo)/(raxo**2+zaxo**2)**1.5d+00
  sum=res/djac ; rax=raxo-sum ; sum=dabs(sum)
enddo
if(iit.lt.2000) then
  radius=radiuso
else
  write(*,*) ' no convergence after iterations', iit
stop
endif
end subroutine inguess
!-----
!
!           FUNCTION  NNUM
!
!-----
INTEGER FUNCTION NNUM(I,J)
IMPLICIT none
integer i,j
!
! ***  CALCULATE THE GLOBAL NODE NUMBER OF NODE I,J IN ELEMENT NELEM
! ***  ENUMERATION BY ROWS IS USED
  NNUM=(J-1)*NNTH+I
  RETURN
END FUNCTION
!-----
!
!           SUBROUTINE BASIS
!
!-----
SUBROUTINE BASIS(nint)
IMPLICIT none
real(8) c,e,bfne(3),dfde(3),bfnc(3),dfdc(3)
integer nint,ig,jg,kg,ic,je,k
!
! ***  CALCULATE BASIS FUNCTIONS AND THEIR PARTIAL DERIVATIVES

```

```

! *** AT A GIVEN POINT C,E IN THE UNIT ELEMENT COORDINATES
!
!*****
!*
!* Calculate one-dimensional quadratic basis functions and their
!* derivative with respect to c at a given point c, the unit
!* element coordinate.
!*
!*****
      KG = 0
DO IG = 1,nint
      C = GAPT(IG)
      BFN1DQ(1,IG) = -C*(1.-C)/2.
      BFN1DQ(2,IG) = (1.+C)*(1.-C)
      BFN1DQ(3,IG) = C*(1.+C)/2.
      DF1QDC(1,IG) = -(1.-2.*C)/2.
      DF1QDC(2,IG) = -(2.*C)
      DF1QDC(3,IG) = (1.+2.*C)/2.

!*****
!*
!* Calculate the two-dimensional linear basis functions
!* at a given point (e,c). The elemental coordinate
!* e is the horizontal component corresponding to the X-direction
!* in the domain. The 'bilinear basis' potentially represents
!* the pressure.
!*
!*****

DO JG = 1,nint
      KG = KG+1
      E = GAPT(JG)
      BFN2DL(1,KG) = (1.-C)*(1.-E)/4.
      BFN2DL(2,KG) = (1.-C)*(1.+E)/4.
      BFN2DL(3,KG) = (1.+C)*(1.-E)/4.
      BFN2DL(4,KG) = (1.+C)*(1.+E)/4.

!*****
!*
!* Calculate one-dimensional quadratic basis functions in both the
!* e-direction and c-direction as well as their derivatives with
!* with respect to e and c, respectively at a given point (e,c).
!*
!*****

      BFNE(1) = -E*(1.-E)/2.
      BFNE(2) = (1.+E)*(1.-E)
      BFNE(3) = E*(1.+E)/2.
      DFDE(1) = -(1.-2.*E)/2.
      DFDE(2) = -2.*E
      DFDE(3) = (1.+2.*E)/2.
      BFNC(1) = -C*(1.-C)/2.
      BFNC(2) = (1.+C)*(1.-C)
      BFNC(3) = C*(1.+C)/2.
      DFDC(1) = -(1.-2.*C)/2.
      DFDC(2) = -2.*C
      DFDC(3) = (1.+2.*C)/2.

!*****
!*
!* Form the tensor dyadic product of the one-dimensional quadratic
!* basis functions calculated above to obtain the two-dimensional
!* quadratic basis functions and their derivatives at a given
!* point (e,c). The 'biquadratic basis' represents the velocities.
!*****

```

```

!*
!*****
      K = 0
      DO IC=1,3
        DO JE=1,3
          K=K+1
          BFN2DQ(K,KG) = BFNE(JE)*BFNC(IC)
          DF2QDE(K,KG) = DFDE(JE)*BFNC(IC)
          DF2QDC(K,KG) = BFNE(JE)*DFDC(IC)
        enddo
      enddo
      enddo
!dfde gia e=-1, c=Gauss Point pou isxuei gia DFDPH sto orio me oloklhrwsh se TH
      E=-1.d00
      DFDE(1) = -(1.-2.*E)/2.
      DFDE(2) = -2.*E
      DFDE(3) = (1.+2.*E)/2.
      K=0
      DO JE=1,3
        DO IC=1,3
          K=K+1

          DF1QDE(K,IG) = DFDE(JE)* BFN1DQ(IC,IG)

        enddo
      enddo

      enddo

end subroutine

      END PROGRAM

```