



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ

Επίλυση προβλημάτων μαγνητοστατικής με τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων στην υπολογιστική πλατφόρμα FEniCS

Μεταπτυχιακή εργασία
ΤΟΥ

Αλέξανδρου-Γεώργιου Σουραή

Επιβλέπων καθηγητής

Ανδρέας Μπουντουβής

Αθήνα, 2021

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον καθηγητή Ανδρέα Μπουντουβή για την ευκαιρία που μου έδωσε να ασχοληθώ με υπολογισμούς στο ερευνητικό πεδίο της μαγνητοστατικής, ως συνέχεια της άριστης συνεργασίας μας κατά την εκπόνηση της προπτυχιακής διπλωματικής μου εργασίας.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω επίσης τον Δρα Αντώνη Σπυρόπουλο για την αμέριστη στήριξη, τις διαρκείς και πολύ ενδιαφέρουσες συζητήσεις μας γύρω από θέματα υπολογισμών καθώς και τις προτάσεις του για μελλοντική έρευνα.

Τέλος, να ευχαριστήσω τον Dr. Reinhard Richter από το πανεπιστήμιο Bayreuth της Γερμανίας για την πρόταση ερευνητικής συνεργασίας καθώς και για την παροχή των πειραματικών δεδομένων σχετικά με τις καμπύλες μαγνητικής υστέρησης.

Περιεχόμενα

| | |
|--|----|
| Περίληψη..... | 5 |
| Abstract | 6 |
| Κεφάλαιο 1. Εισαγωγή | 7 |
| 1.1 Η Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων..... | 8 |
| 1.2 Η υπολογιστική πλατφόρμα FEniCS | 14 |
| Μερικά ιστορικά στοιχεία | 14 |
| Βιβλιοθήκες | 15 |
| DOLFIN..... | 15 |
| UFL..... | 16 |
| FFC | 17 |
| 1.3 Μαγνητοστατική | 18 |
| Συνοριακές συνθήκες..... | 18 |
| Προβλήματα συνοριακών τιμών στη μαγνητοστατική..... | 20 |
| Βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό..... | 20 |
| Αναλυτική λύση για το βαθμωτό δυναμικό στη περίπτωση ιδανικών σφαιρικών μαγνητών..... | 22 |
| Μοντελοποίηση μαγνητικής υστέρησης..... | 24 |
| Αναλυτική λύση για το βαθμωτό δυναμικό στη περίπτωση μη ιδανικών σφαιρικών μαγνητών..... | 26 |
| Υπολογισμός δυνάμεων μεταξύ ιδανικών σκληρών σφαιρικών μαγνητικών διπόλων . | 26 |
| 1.4 Επίλυση προβλημάτων μαγνητοστατικής με το λογισμικό FEniCS..... | 28 |
| Κεφάλαιο 2. Τρι-διάστατη προσομοίωση αλληλεπίδρασης σκληρών μαγνητικών σφαιρών χαμηλής μαγνητοαντίστασης με το λογισμικό FEniCS..... | 29 |
| 2.1 Μαθηματική μοντελοποίηση | 30 |
| Διατύπωση προβλήματος συνοριακών τιμών | 30 |
| Υπολογισμός μαγνητικής δύναμης | 35 |
| 2.2 Μεταβολικές διατυπώσεις..... | 37 |
| 2.3 Εφαρμογή στο FEniCS..... | 39 |
| Κατασκευή γεωμετρίας και υπολογιστικού πλέγματος με το λογισμικό Gmsh | 39 |
| Υπολογιστικός κώδικας | 41 |
| Κεφάλαιο 3. Αποτελέσματα προσομοιώσεων..... | 49 |
| 3.1 Καμπύλες μαγνητικής υστέρησης σφαιρών | 50 |
| 3.2 Επικύρωση υπολογιστικού μοντέλου | 52 |
| Α) Μία σφαίρα χωρίς επιδεκτικότητα στο πεδίο..... | 52 |

| | |
|---|----|
| Β) Μία σφαίρα με επιδεκτικότητα στο πεδίο | 54 |
| Γ) Δύο ιδανικές μαγνητικές σφαίρες που αλληλεπιδρούν με συμπεριφορά διπόλου-διπόλου | 54 |
| 3.3 Επιλογή κατάλληλων συναρτήσεων βάσης | 60 |
| Βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό..... | 60 |
| Μαγνητικό πεδίο..... | 61 |
| 3.4 Αποτελέσματα αριθμητικών υπολογισμών μαγνητικής δύναμης παρουσία μαγνητικής επιδεκτικότητας | 66 |
| Συμπεράσματα | 71 |
| Προτάσεις για περαιτέρω έρευνα..... | 72 |
| Βιβλιογραφία | 72 |
| Παράρτημα Α. Επίδραση υπολογιστικού πλέγματος στη λύση..... | 75 |
| Παράρτημα Β. Υπολογιστικό μοντέλο στο λογισμικό COMSOL® | 76 |
| Παράρτημα Γ. Αρχείο εισόδου για τη δημιουργία των υπολογιστικών πλεγμάτων με το λογισμικό Gmsh..... | 79 |
| Παράρτημα Δ. Διαθέσιμοι Επιλύτες/προσταθεροποιητές | 83 |
| Παράρτημα Ε. Άλλες βιβλιοθήκες του FEniCS | 84 |
| Ε.1 FIAT | 84 |
| Ε.2 UFC..... | 84 |
| Ε.3 INSTANT..... | 84 |
| Παράρτημα Ζ. Οδηγίες εγκατάστασης του FEniCS μέσω του Docker..... | 85 |

Περίληψη

Το FEniCS είναι μια δημοφιλής υπολογιστική πλατφόρμα ανοιχτού κώδικα για την επίλυση, με τη μέθοδο Πεπερασμένων Στοιχείων, πληθώρας φυσικών προβλημάτων που διέπονται από μερικές διαφορικές εξισώσεις. Το FEniCS είναι δομημένο ως μια συλλογή από βιβλιοθήκες σε γλώσσα C++/Python επιτρέποντας την εξατομίκευση των υπολογιστικών μοντέλων από το χρήστη. Στη παρούσα εργασία αναπτύχθηκε αναλυτικά ο μαθηματικός φορμαλισμός και η διαδικασία κατάστρωσης του υπολογιστικού κώδικα για την επίλυση προβλημάτων μαγνητοστατικής με το FEniCS. Συγκεκριμένα, αντικείμενο της έρευνας αποτέλεσε ο ακριβής υπολογισμός των μαγνητικών δυνάμεων που αναπτύσσονται μεταξύ δύο σκληρών μαγνητικών σφαιρών που παρουσιάζουν σταθερή επιδεκτικότητα στο μαγνητικό πεδίο. Το υπολογιστικό μοντέλο επικυρώθηκε ως προς τον ακριβή υπολογισμό του μαγνητικού πεδίου και των μαγνητικών δυνάμεων σε σχέση με αναλυτικές λύσεις για συμπεριφορά διπόλου-διπόλου αλλά και με αντίστοιχους υπολογισμούς στο εμπορικό λογισμικό COMSOL Multiphysics®. Η επιλογή των συναρτήσεων βάσης ήταν κρίσιμη για την ακρίβεια των υπολογισμών. Η συνέχεια του βαθμωτού μαγνητικού δυναμικού εκατέρωθεν διεπιφανειών εξασφαλίστηκε με ακρίβεια επιλέγοντας συνεχείς συναρτήσεις βάσης Lagrange δευτέρου βαθμού ενώ η ασυνέχεια του μαγνητικού πεδίου, λόγω της μεταβολής της μαγνήτισης στην επιφάνεια των σφαιρών, επιλέγοντας ασυνεχείς συναρτήσεις βάσης Lagrange πρώτου βαθμού. Τα αποτελέσματα των αριθμητικών υπολογισμών για τη μαγνητική δύναμη αποκαλύπτουν μια σημαντική απόκλιση σε σχέση με τη συμπεριφορά διπόλου-διπόλου. Οι μαγνητικές αλληλεπιδράσεις των σφαιρών είναι ασθενέστερες και με μικρότερο εύρος ενώ το μέτρο των απωστικών αλληλεπιδράσεων δε ταυτίζεται με αυτό των ελκτικών αλληλεπιδράσεων. Η προσαρμογή ενός δυναμικού νόμου στα αριθμητικά αποτελέσματα αποκαλύπτει μια επιπλέον ασθενέστερη συνεισφορά της διακεντρικής απόστασης, για όλες τις περιπτώσεις σχετικών προσανατολισμών, ανάλογη του $\sim \frac{1}{\delta^9}$.

Λέξεις-Κλειδιά: FEniCS, Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων, Gmsh, Μαγνητοστατική, μαγνητική υστέρηση, μαγνητική επιδεκτικότητα, μαγνητική δύναμη, συμπεριφορά διπόλου-διπόλου.

Solution of magnetostatics problems with the Finite Element method using FEniCS computational platform

Master thesis
Alexandros G. Sourais

Advisor
Andreas G. Boudouvis, Professor NTUA

Abstract

FEniCS is a popular open-source computational platform for the solution of a wide variety of physical problems that are described by partial differential equations, using Finite Element Method. FEniCS is built as a collection of C++/Python libraries allowing user customization of computational models. In this master thesis was developed in detail the mathematical formalism and the computational code implementation procedure for solving magnetostatics problems. Specifically, the scope of research was the accurate calculation of the magnetic forces between two susceptible hard magnetic spheres. The developed computational model was validated by comparing the magnetic field and the magnetic forces with known analytic solutions for dipole-dipole type of interactions, as well as, with similar computations using the commercial software package COMSOL Multiphysics®. The choice of the finite element basis functions was crucial for achieving computational accuracy. The continuity of the magnetic scalar potential across the interfaces was achieved by using second order continuous Lagrange elements while the discontinuity of the magnetic field due to the change of magnetization at the sphere surfaces was achieved by using first order discontinuous Lagrange elements. The numerical results for the magnetic forces revealed an important deviation from the dipole-dipole behavior. The magnetic interactions between the spheres are weaker and with a sharper cut-off, while the strength of the repulsive interactions are not the same with the strength of the attractive interactions. The fitting of a powerlaw to the numerical data reveals an additional, weaker dependency from the sphere's distance, proportional to $\sim \frac{1}{\delta^9}$.

Key-words: FEniCS, Finite Element Method, Gmsh, magnetostatics, magnetic hysteresis, magnetic susceptibility, magnetic force, dipole-dipole behavior.

Κεφάλαιο 1. Εισαγωγή

Το επόμενο κεφάλαιο επιχειρεί να εισάγει τον αναγνώστη στα προβλήματα που αντιμετωπίζονται στα επόμενα κεφάλαια και είναι χωρισμένο σε 4 βασικές ενότητες όπου αναπτύσσονται συνοπτικά: 1) η μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων, 2) η δομή του ανοιχτού λογισμικού FEniCS, 3) η μαγνητοστατική, 4) η θεωρία και η μοντελοποίηση της συμπεριφοράς μαγνητικών υλικών 5), γνωστές αναλυτικές λύσεις στη περίπτωση σφαιρικών μαγνητών, και τέλος, 6) η βιβλιογραφία όπου παρουσιάζεται ερευνητική χρήση του λογισμικού FEniCS για την επίλυση προβλημάτων μαγνητοστατικής.

1.1 Η Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων

Η μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων [1,2] ή FEM (Finite Element Method) είναι μια αριθμητική μέθοδος που χρησιμοποιείται για την επίλυση διαφορικών εξισώσεων με μερικές παραγώγους που υπεισέρχονται σε μεγάλο πλήθος φυσικών προβλημάτων. Τυπικά πεδία ενδιαφέροντος από όπου αναδύονται τέτοια προβλήματα είναι η δομική ανάλυση, η μεταφορά θερμότητας, η ροή των ρευστών, η μεταφορά μάζας και ο ηλεκτρομαγνητισμός. Η αναλυτική επίλυση τέτοιων προβλημάτων συνεπάγεται συνήθως την επίλυση προβλημάτων συνοριακών τιμών για μερικές διαφορικές εξισώσεις. Ωστόσο στις περισσότερες περιπτώσεις η επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων αναλυτικά απαιτεί την απλοποίηση των φυσικών μοντέλων κάτι που μπορεί να οδηγήσει σε μη ρεαλιστικά αποτελέσματα. Η σημαντική εξέλιξη των υπολογιστικών συστημάτων επιτρέπει την αριθμητική επίλυση περίπλοκων προβλημάτων συνοριακών τιμών με ικανοποιητική ακρίβεια.

Η μέθοδος αναπτύχθηκε αρχικά από την ανάγκη επίλυσης περίπλοκων προβλημάτων ελαστικότητας και δομικής ανάλυσης στις αρχές της δεκαετίας του 1940 από τους A. Hrennikoff και R. Courant. Αν και η προσέγγιση της μεθόδου μεταξύ των δύο πρωτοπόρων ήταν σαφώς διαφορετική, μοιράζονταν ένα κοινό χαρακτηριστικό: τη διακριτοποίηση ενός συνεχούς χωρίου Ω σε ένα σύνολο από μικρότερα διακριτά υποχωρία που συνήθως αποκαλούνται στοιχεία (elements). Μάλιστα η συνεισφορά του Courant βασίστηκε στην εξέλιξη αποτελεσμάτων από παλιότερες προσπάθειες στην επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων από τους Rayleigh, Ritz και Galerkin. Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων έλαβε την πραγματική της μορφή τις δεκαετίες του 1960-1970 από τον J. H. Argyris και τους συνεργάτες του στο Πανεπιστήμιο της Στουτγκάρδης, τον R. W. Clough και τους συνεργάτες του στο πανεπιστήμιο UC Berkeley και άλλους.

Η μεγάλη διεθνής αποδοχή και επιτυχία της μεθόδου στην επιστημονική κοινότητα οφείλεται κυρίως στη γενικότητα και τη κομψότητα της, επιτρέποντας ένα ευρύ φάσμα από διαφορικές εξισώσεις που προκύπτουν από όλες τις περιοχές της επιστήμης να αναλυθούν και να επιλυθούν υπό ένα κοινό υπόβαθρο. Επιπλέον ένας παράγοντας που συνεισφέρει στην επιτυχία της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων είναι η ευελιξία όσον αφορά τη διαμόρφωση των προβλημάτων, επιτρέποντας τον έλεγχο των ιδιοτήτων της διακριτοποίησης από την επιλογή του κατάλληλου προσεγγιστικού χώρου πεπερασμένων στοιχείων. Άλλο ένα πλεονέκτημα της μεθόδου είναι η στενή σχέση μεταξύ της μεταβολικής διαμόρφωσης των διαφορικών εξισώσεων (weak or variational formulation) και της διαμόρφωσης του αριθμητικού προβλήματος. Για παράδειγμα η θεωρία από μόνη της επιτρέπει την εκτίμηση του σφάλματος ή των ορίων μεταξύ των οποίων αυτό βρίσκεται όταν το αριθμητικό μοντέλο επιλύεται σε υπολογιστή. Επίσης η διαίρεση του χωρίου σε απλούστερα υποχωρία επιτρέπει:

- την ακριβή αναπαράσταση σύνθετων γεωμετριών
- τη συμπερίληψη μη ομοιογενών ιδιοτήτων του υλικού μέσου
- την εύκολη αναπαράσταση της λύσης
- την καταγραφή τοπικών φαινομένων

Στόχος της μεθόδου Πεπερασμένων Στοιχείων είναι η διακριτοποίηση του προβλήματος ώστε η λύση του να προκύψει από ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων. Τα τυπικά βήματα που περιλαμβάνει η μέθοδος είναι:

- Διαίρεση του χωρίου του προβλήματος σε ένα σύνολο από υποχωρία το καθένα από τα οποία συνοδεύονται από ένα σύνολο εξισώσεων που ανάγονται στο αρχικό πρόβλημα
- Συστηματικός μετασχηματισμός όλων των τοπικών εξισώσεων σε ένα ολικό σύνολο εξισώσεων για την τελική επίλυση. Αυτό το σύστημα εξισώσεων έχει γνωστές τεχνικές επίλυσης.

Οι τοπικές εξισώσεις που αντιστοιχούν στα υποχωρία είναι μια προσέγγιση των αρχικών διαφορικών εξισώσεων. Συνήθως η κατασκευή αυτών των εξισώσεων γίνεται με τη μέθοδο σταθμισμένων υπολοίπων Galerkin (Galerkin's method of weighted residuals). Η μαθηματική αυτή διαδικασία απαιτεί τη κατασκευή ενός ολοκληρώματος του εσωτερικού γινομένου της αρχικής εξίσωσης με μια συνάρτηση στάθμισης (ή συνάρτηση βάσης). Αυτό το ολοκλήρωμα πρέπει να ισούται με το μηδέν. Με άλλα λόγια αυτή η διαδικασία ελαχιστοποιεί το σφάλμα προσαρμόζοντας συναρτήσεις γνωστής μορφής στις διαφορικές εξισώσεις. Οι εξισώσεις αυτές οδηγούν:

- Σε ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων για προβλήματα σε μόνιμη κατάσταση
- Σε ένα σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων για χρονικά-μεταβαλλόμενα προβλήματα

Οι εξισώσεις είναι γραμμικές αν οι μερικές διαφορικές εξισώσεις είναι γραμμικές ή μη γραμμικές αν οι μερικές διαφορικές εξισώσεις είναι μη γραμμικές. Τα γραμμικά συστήματα αλγεβρικών εξισώσεων επιλύονται με αριθμητικές μεθόδους γραμμικής άλγεβρας ενώ οι σύνθετες διαφορικές εξισώσεις με μεθόδους όπως οι Euler και Runge-Kutta. Στη περίπτωση της μη γραμμικότητας απαιτείται επιπλέον η εφαρμογή κάποιας επαναληπτικής μεθόδου (Newton, Picard κλπ).

Στο δεύτερο βήμα που αναφέρθηκε παραπάνω το ολικό σύστημα εξισώσεων προκύπτει από τις τοπικές εξισώσεις με μετασχηματισμό των συντεταγμένων των κόμβων του υποχωρίου στις συντεταγμένες των κόμβων στο συνολικό χωρίο. Αυτή η διαδικασία ονομάζεται ισοπαραμετρική απεικόνιση.

Έστω

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u - f &= 0 \text{ στο } \Omega \\ u &= u_0 \text{ σε κάποιο υποσύνολο } \Gamma_D \subset \partial\Omega \\ \frac{\partial^m u}{\partial n^m} &= g \text{ σε κάποιο υποσύνολο } \Gamma_N \subset \partial\Omega \end{aligned} \quad (1.1)$$

ένα πρόβλημα συνοριακών τιμών του οποίου αναζητείται η λύση u στο χωρίο Ω με τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων. \mathcal{L} είναι ένας διαφορικός τελεστής (γραμμικός ή μη) που δρα στη συνάρτηση u και m η τάξη της παραγώγου που εμφανίζεται στη γενικευμένη συνοριακή συνθήκη Neumann.

Για τη διακριτοποίηση του προβλήματος (1.1) ολοκληρώνεται το εσωτερικό γινόμενο της διαφορικής εξίσωσης με μια γνωστή συνάρτηση (test function) έστω v :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (\mathcal{L}u - f)v \, dx &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \int_{\Omega} \mathcal{L}u v \, dx - \int_{\Omega} f v \, dx &= 0 \end{aligned} \quad (1.2)$$

Ας υποθέσουμε για λόγους απλότητας ότι ο διαφορικός τελεστής \mathcal{L} είναι γραμμικός και η μεγαλύτερη τάξη διαφορίσης που εμφανίζεται είναι $m+1$. Ορίζουμε \mathcal{L}_m τον διαφορικό τελεστή που περιέχει όλους τους διαφορικούς όρους του \mathcal{L} εκτός της διαφορίσης $m+1$ τάξης. Με ολοκλήρωση κατά παράγοντες του όρου $m+1$ τάξης προκύπτει για την (1.2):

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega} \frac{\partial^m u}{\partial n^m} v \, ds - \int_{\Omega} \nabla^m u \cdot \nabla v \, dx + \int_{\Omega} \mathcal{L}_m u v \, dx - \int_{\Omega} f v \, dx &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \int_{\partial\Omega} g v \, ds - \int_{\Omega} \nabla^m u \cdot \nabla v \, dx + \int_{\Omega} \mathcal{L}_m u v \, dx - \int_{\Omega} f v \, dx &= 0 \end{aligned}$$

Επομένως σε μεταβολική μορφή αναζητείται λύση $u \in V$ στο παρακάτω πρόβλημα:

$$\int_{\Gamma_N} g v \, ds - \int_{\Omega} \nabla^m u \cdot \nabla v \, dx + \int_{\Omega} \mathcal{L}_m u v \, dx - \int_{\Omega} f v \, dx = 0 \quad \forall v \in \hat{V} \quad (1.3)$$

Οι συναρτησιακοί χώροι V, \hat{V} ορίζονται ως εξής:

$$V = \{v \in H^1(\Omega) : v = u_0 \text{ στο } \Gamma_D\} \quad (1.4)$$

$$\hat{V} = \{v \in H^1(\Omega) : v = 0 \text{ στο } \Gamma_D\} \quad (1.5)$$

Για την επίλυση του διακριτού μεταβολικού προβλήματος θα πρέπει να γίνει κατάλληλη διακριτοποίηση των χώρων (1.4), (1.5). Εν συντομία ορίζουμε μια βάση $\{\varphi_j\}_{j=1}^N$ για το V και μια βάση $\{\hat{\varphi}_i\}_{i=1}^N$ για τον \hat{V} . N είναι η διάσταση των χώρων που ταυτίζεται με το πλήθος των βαθμών ελευθερίας (ή των κόμβων του πλέγματος).

Η λύση u προσεγγίζεται ως ένας γραμμικός συνδυασμός των συναρτήσεων βάσης :

$$u = \sum_{j=1}^N U_j \varphi_j(x) \quad (1.6)$$

όπου $U \in \mathbb{R}^N$ το διάνυσμα των βαθμών ελευθερίας ή διαφορετικά των διακριτών τιμών της λύσης στους κόμβους του πλέγματος.

Το πρόβλημα (1.3) μετά τη διακριτοποίηση και με βάση την εξίσωση (1.6) παίρνει τη μορφή:

$$\int_{\Gamma_N} g \hat{\varphi}_i ds - \sum_{j=1}^N U_j \int_{\Omega} \nabla^m \varphi_j \cdot \nabla \hat{\varphi}_i dx + \sum_{j=1}^N U_j \int_{\Omega} \mathcal{L}_m \varphi_j \hat{\varphi}_i dx - \int_{\Omega} f \hat{\varphi}_i dx = 0$$

$$i = 1, 2, \dots, N \quad (1.7)$$

Η προσεγγιστική λύση u της μορφής (1.6) μπορεί να υπολογιστεί με την επίλυση του γραμμικού συστήματος:

$$AU = b \quad (1.8)$$

όπου

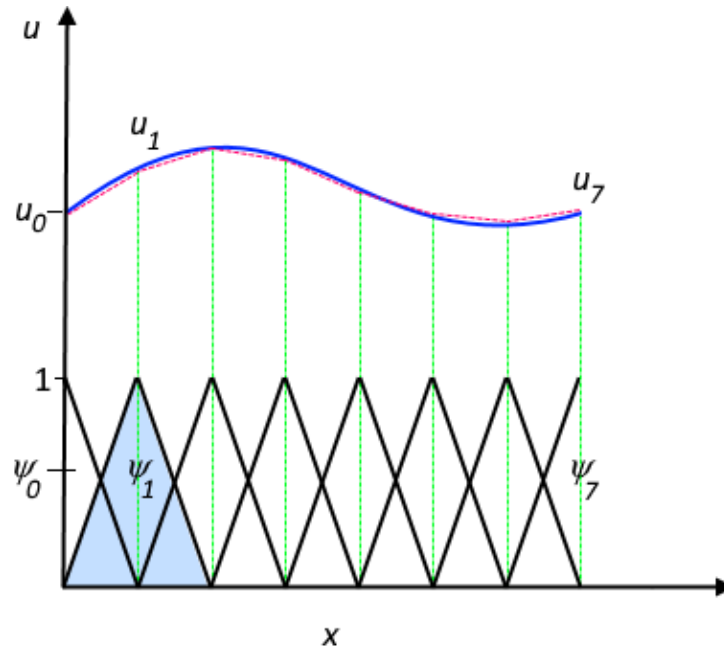
$$A_{ij} = - \int_{\Omega} \nabla^m \varphi_j \cdot \nabla \hat{\varphi}_i dx + \int_{\Omega} \mathcal{L}_m \varphi_j \hat{\varphi}_i dx \quad (1.9)$$

$$b_i = \int_{\Omega} f \hat{\varphi}_i dx - \int_{\Gamma_N} g \hat{\varphi}_i ds \quad (1.10)$$

Οι συναρτήσεις βάσης φ είναι πολυώνυμα (συνήθως 1^{ου} ή 2^{ου} βαθμού) των συντεταγμένων του διανύσματος θέσης. Κάθε μία από τις συναρτήσεις βάσης είναι μη μηδενική μόνο σε μια περιοχή του χωρίου Ω . Συγκεκριμένα μια συνάρτηση βάσης φ_j είναι ίση με τη μονάδα μόνο σε ένα κόμβο έστω k και μηδενική σε όλους τους άλλους κόμβους:

$$\varphi_j(x_k) = 1 \quad j = k \quad (1.11)$$

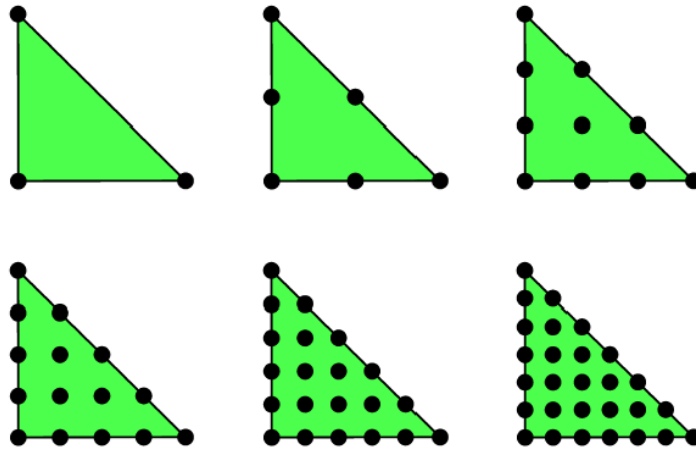
$$\varphi_j(x_k) = 0 \quad j \neq k \quad (1.12)$$



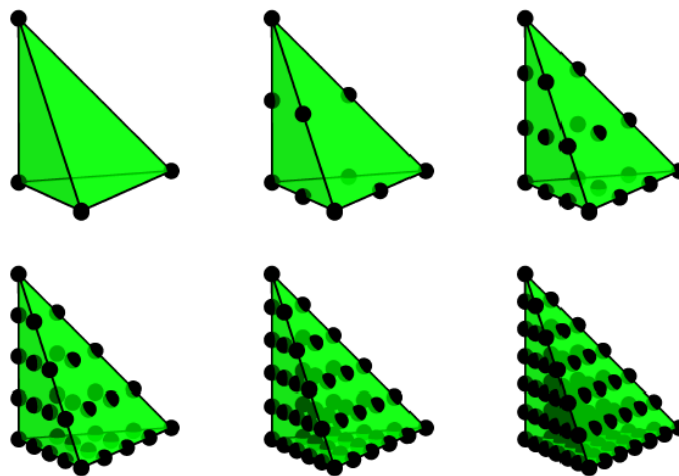
Σχήμα 1.1. Η συνάρτηση u (μπλε χρώμα) προσεγγίζεται (κόκκινο χρώμα) με ένα γραμμικό συνδυασμό από συναρτήσεις βάσης (μαύρο χρώμα).

Για μη δομημένα πλέγματα τριγωνικών στοιχείων σε 2 διαστάσεις ή τετραέδρων στοιχείων σε 3 διαστάσεις, ο πιο κοινός τύπος πεπερασμένων στοιχείων είναι τα Lagrange ή Continuous Galerkin (CG), όπου περιλαμβάνουν ως συναρτήσεις βάσης πολυώνυμα q βαθμού. Τα στοιχεία Lagrange (Σχήμα 1.2) εξασφαλίζουν ολική συνέχεια των συναρτήσεων βάσης (σε όλο το χωρίο) και επομένως, συνέχεια σε στοιχεία με επικαλυπτόμενες έδρες ή ακμές.

(α)



(β)

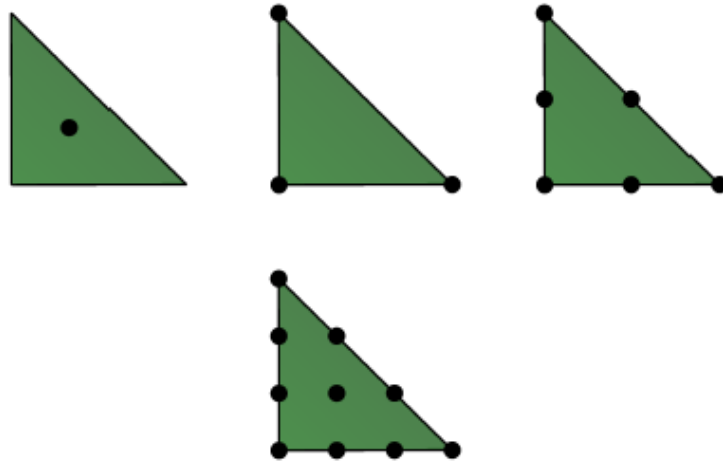


Σχήμα 1.2 Πεπερασμένα Στοιχεία Lagrange, $q=1,2,\dots,5,6$ πολυωνυμικού βαθμού (α) για 2 χωρικές διαστάσεις (τριγωνικά στοιχεία) και (β) για 3 χωρικές διαστάσεις (τετράεδρα στοιχεία).

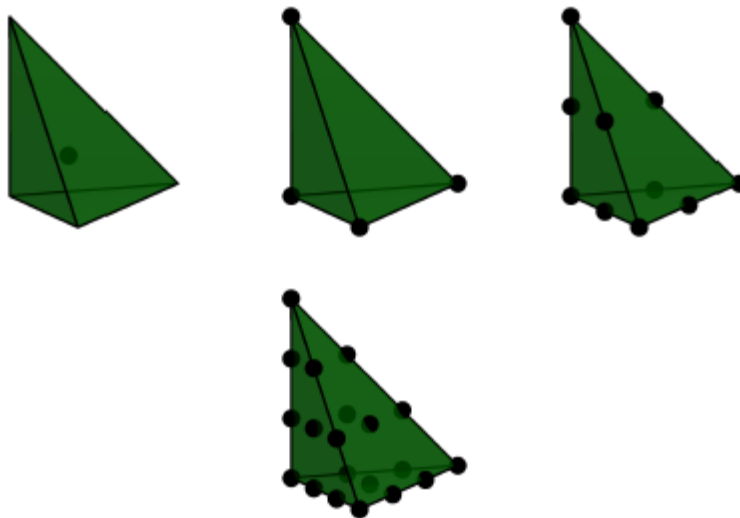
Μια εναλλακτική κατηγορία Πεπερασμένων Στοιχείων, στην οποία δεν εξασφαλίζεται άμεσα (directly) η συνέχεια αλλά ασθενώς (weakly), είναι τα Discontinuous Lagrange ή Discontinuous Galerkin (DG). Τέτοιου είδους στοιχεία χρησιμοποιούνται σε μεικτούς φορμαλισμούς (mixed formulations) προβλημάτων άτριβης ροής (Stokes flow), Poisson και ελαστικότητας. Σε αυτές τις περιπτώσεις, η αριθμητική εισροή ή εκροή (numerical flux) σε στοιχεία με επικαλυπτόμενες ακμές ή έδρες εισάγεται ως ένας επιπλέον όρος στη μεταβολική (ή ασθενή, weak) διατύπωση. Οι μέθοδοι DG [3] αρχικά αναπτύχθηκαν για εφαρμογή σε υπερβολικά προβλήματα αλλά έχουν επιτυχώς χρησιμοποιηθεί σε πολλά ελλειπτικά ή παραβολικά προβλήματα. Επιπλέον, η αποσύνδεση (decoupling) των στοιχείων

δίνει τη δυνατότητα υψηλής απόδοσης παράλληλης επεξεργασίας. Σχηματική αναπαράσταση των στοιχείων μπορεί να βρεθεί στο σχήμα 1.3 και 1.4.

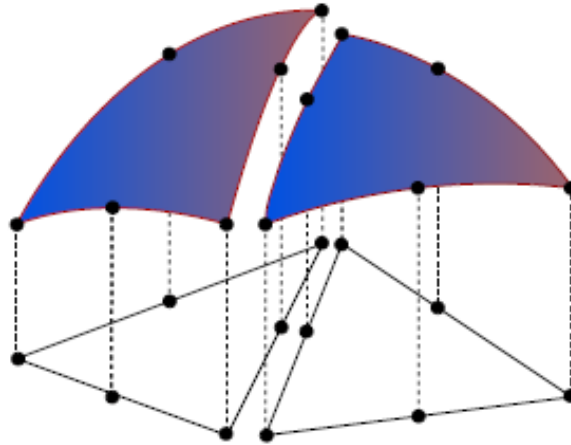
(α)



(β)



Σχήμα 1.3 Πεπερασμένα Στοιχεία *Discontinuous Lagrange (DG)*, $q=0,1,2,3$ πολυωνυμικού βαθμού (α) για 2 χωρικές διαστάσεις (τριγωνικά στοιχεία) και (β) για 3 χωρικές διαστάσεις (τετράεδρα στοιχεία). Εδώ οι βαθμοί ελευθερίας παρουσιάζονται ως ταυτόσημοι με τους αντίστοιχους βαθμούς ελευθερίας των συνεχών πεπερασμένων στοιχείων Lagrange, με τη διαφορά ότι οι βαθμοί ελευθερίας αντιμετωπίζονται ως εσωτερικοί σε κάθε στοιχείο.



Σχήμα 1.4. Όλοι οι βαθμοί ελευθερίας ενός Πεπερασμένου Στοιχείου DG είναι εσωτερικοί σε κάθε στοιχείο. Αυτό σημαίνει ότι δεν εξασφαλίζεται ολική συνέχεια από αυτού του τύπου τα Πεπερασμένα Στοιχεία. Κάτι τέτοιο παρουσιάζεται εδώ για ασυνεχή διωνυμικά ($q=2$) στοιχεία Lagrange.

1.2 Η υπολογιστική πλατφόρμα FEniCS

Το FEniCS [4–6] είναι μια δημοφιλής υπολογιστική πλατφόρμα ανοιχτού λογισμικού για την επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων (PDEs). Το FEniCS επιτρέπει στους χρήστες να μετατρέψουν γρήγορα και αποτελεσματικά επιστημονικά μοντέλα σε κώδικα πεπερασμένων στοιχείων. Οι υψηλού επιπέδου διεπαφές C++ και Python διευκολύνουν το χρήστη κατά τη γνωριμία του με το λογισμικό αλλά ταυτόχρονα παρέχουν πολύ ισχυρές δυνατότητες σε προχωρημένους προγραμματιστές. Το FEniCS μπορεί να εγκατασταθεί και να εκτελεστεί σε ένα πλήθος από πλατφόρμες: από προσωπικούς υπολογιστές μέχρι υψηλής απόδοσης υπολογιστικές συστοιχίες.



Σχήμα 1.5 Το λογότυπο του FEniCS.

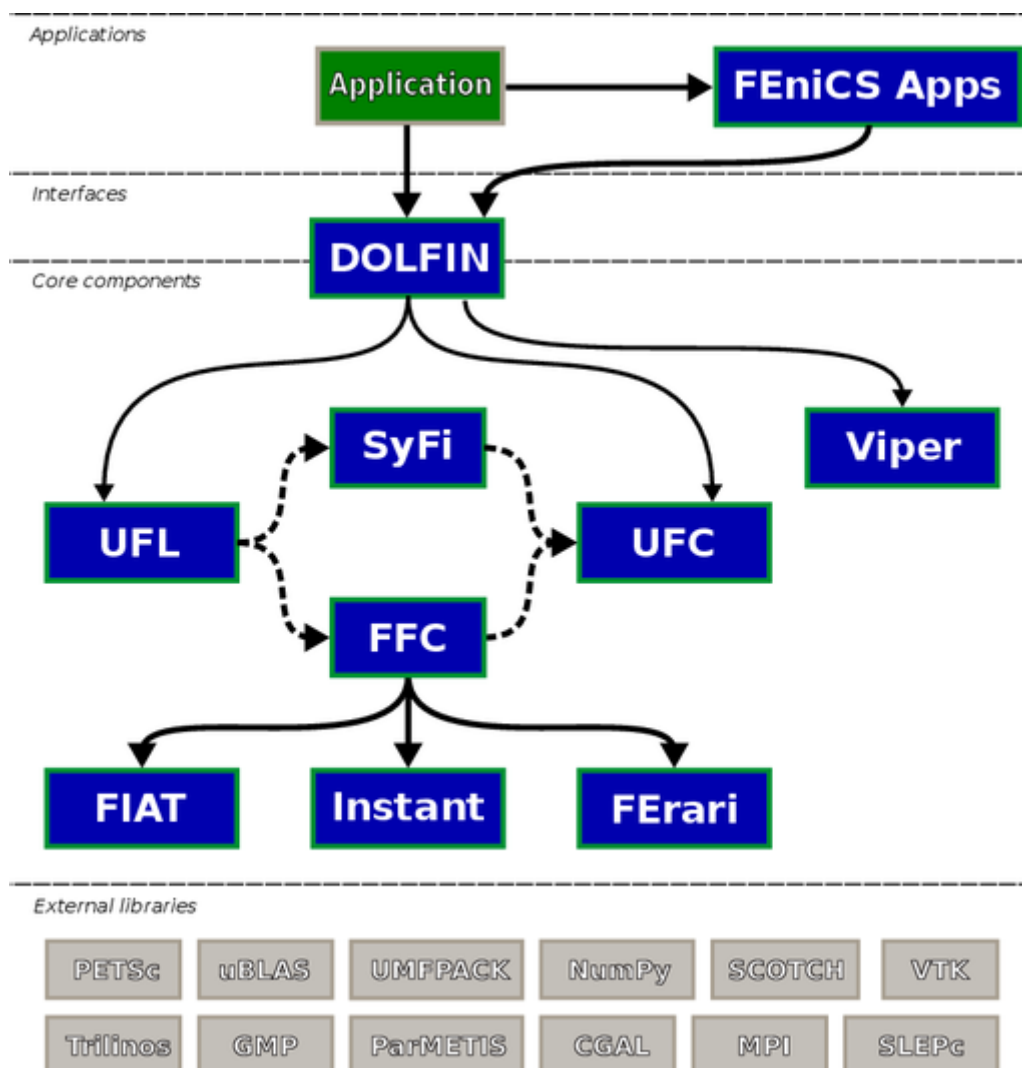
Μερικά ιστορικά στοιχεία

Το FEniCS project ξεκίνησε το 2013 ως μια προσπάθεια να αυτοματοποιηθεί η επίλυση μαθηματικών προβλημάτων που προκύπτουν από διαφορικές εξισώσεις με τη συνεργασία των Πανεπιστημίων του Σικάγο και του Τεχνολογικού Πανεπιστημίου Chalmers στη Σουηδία.

Η ονομασία του λογισμικού προκύπτει από τα ακρωνύμια FE (Finite Elements) και CS (Computational Software). Το λογισμικό αρχικά είχε 2 κύριες βιβλιοθήκες: τη DOLFIN και τη FIAT. Στη συνέχεια με την εξέλιξη του λογισμικού προστέθηκαν και άλλες βιβλιοθήκες όπως οι FFC, Instant, UFC and UFL.

Βιβλιοθήκες

Το λογισμικό FEniCS έχει σχεδιαστεί με πρότυπο τύπου “ομπρέλας” (umbrella project) για μια συλλογή από διαλειτουργικά στοιχεία ή βιβλιοθήκες. Η δομή και η λειτουργία των βασικότερων βιβλιοθηκών περιγράφεται στις παρακάτω παραγράφους. Άλλες βιβλιοθήκες που δεν αναφέρονται εδώ μπορούν να βρεθούν στο παράρτημα Ε ή με περισσότερες λεπτομέρειες στη βιβλιογραφία.

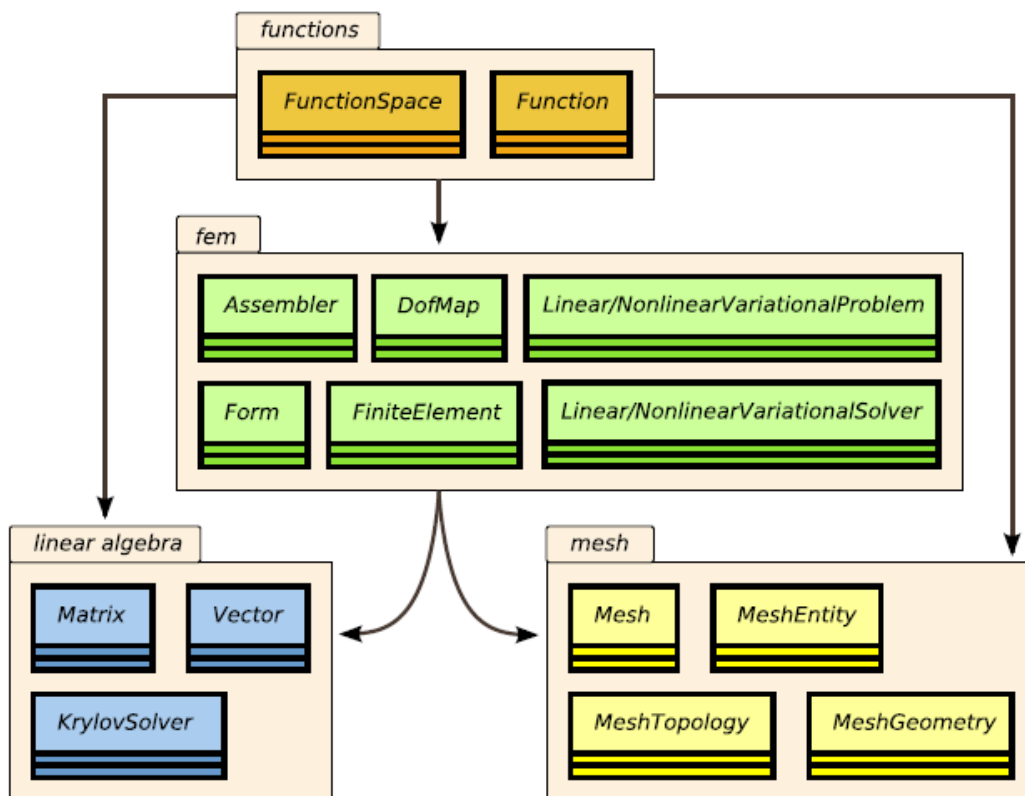


Σχήμα 1.6 Το DOLFIN αποτελεί τη κύρια διεπαφή FEniCS - χρήση και διαχειρίζεται την επικοινωνία μεταξύ των κυριότερων βιβλιοθηκών και εξωτερικού λογισμικού.

DOLFIN

Το DOLFIN [7] είναι μια βιβλιοθήκη C++/Python που αποτελεί τη κυρία διεπαφή χρήστη στο FEniCS. Ένα μεγάλο μέρος της λειτουργικότητας του FEniCS βασίζεται στο DOLFIN καθώς παρέχει ένα περιβάλλον επίλυσης για μοντέλα που βασίζονται σε μερικές διαφορετικές εξισώσεις και υλοποιεί βασικές λειτουργίες όπως διαχείριση δομών δεδομένων και

αλγορίθμων για υπολογιστικά πλέγματα και διακριτοποίηση πεπερασμένων στοιχείων. Το DOLFIN παρέχει κλάσεις για την αναπαράσταση πινάκων, διανυσμάτων, συναρτησιακών χώρων και πλεγμάτων. Επίσης περιλαμβάνει κάποιες ελεύθερες συναρτήσεις ως εναλλακτική επιλογή για τη κλήση επιλυτών. Άλλες λειτουργίες βασίζονται στην επικοινωνία με εξωτερικές βιβλιοθήκες όπως πακέτα γραμμικής άλγεβρας (PETSc, Trilinos κ.α) και επιμερισμού πλέγματος (ParMETIS, SCOTCH). Ολόκληρη η επικοινωνία μεταξύ ενός προγράμματος από το χρήστη, άλλες βιβλιοθήκες του FEniCS και εξωτερικό λογισμικό υλοποιείται μέσω συνδετικών στρωμάτων (wrapper layers) που αποτελούν μέρος του DOLFIN (Σχήμα 1.6).



Σχήμα 1.7 Σχηματική αναπαράσταση μερικών εκ των σημαντικότερων περιεχομένων και κλάσεων του DOLFIN. Τα βέλη υποδηλώνουν εξάρτηση.

UFL

Η γλώσσα ενοποιημένης μορφής UFL (Unified Form Language) [8] είναι μια γλώσσα ειδικής μορφής για διακριτοποίηση μεταβολικών και συναρτησιακών μορφών με τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων. Πιο συγκεκριμένα η γλώσσα παρέχει μια ευέλικτη διεπαφή στο χρήστη για τον ορισμό χώρων πεπερασμένων στοιχείων και εκφράσεων σε μεταβολική μορφή κοντά στο μαθηματικό συμβολισμό. Η UFL μοιάζει με μια γλώσσα συμβολικού προγραμματισμού αλλά οι στόχοι και οι προτεραιότητές της διαφέρουν από λογισμικά συμβολικού προγραμματισμού γενικής μορφής. Για παράδειγμα η UFL δεν είναι κατάλληλη για μεγάλης κλίμακας συμβολικό προγραμματισμό.

Η UFL παρέχει εργαλεία για:

- Την έκφραση σύνθετων γραμμικών ή μη γραμμικών μεταβολικών μορφών
- Την αυτόματη παραγωγή εκφράσεων και μεταβολικών μορφών
- Μαθηματικές συναρτήσεις
- Αλγεβρικούς τελεστές
- Δημιουργία τελεστών και συναρτήσεων ως *python functions* από το χρήστη

Η UFL είναι σχεδιασμένη να αναγνωρίζει εκφράσεις στη παρακάτω γενική μορφή:

$$a(v; w) = \sum_{k=1}^{n_c} \int_{\Omega_k} I_k^c(v; w) dx + \sum_{k=1}^{n_e} \int_{\partial\Omega_k} I_k^e(v; w) ds + \sum_{k=1}^{n_i} \int_{\Gamma_k} I_k^i(v; w) dS$$

όπου $v = [u_1, u_2, \dots, u_r]$ ένα διάνυσμα που περιέχει όλες τις άγνωστες συναρτήσεις ενώ

$w = [w_1, w_2, \dots, w_r]$ ένα διάνυσμα που περιέχει όλα τα Test Functions.

Τα ολοκληρώματα ορίζονται πολλαπλασιάζοντας μια έκφραση με ένα διαφορικό μέγεθος που αναφέρεται σε ολοκλήρωση :

- Στο εσωτερικό του χωρίου Ω_k (dx , cell integral)
- Στο σύνορο του χωρίου $\partial\Omega_k$ (ds , exterior facet integral)
- Στα εσωτερικά σύνορα των στοιχείων Γ_k (dS , interior facet integral)

FFC

Ο μεταγλωττιστής FFC (FEniCS Form Compiler) [9] έχει σχεδιαστεί να παράγει κώδικα από την συμβολική έκφραση των μεταβολικών μορφών της UFL. Η επίλυση μεταβολικών προβλημάτων πεπερασμένων στοιχείων βασίζεται σε 2 διαδικασίες: την εξαγωγή του αλγεβρικού συστήματος από τις διακριτοποιημένες εξισώσεις και την επίλυσή του. Ως αποτέλεσμα αυτού οι περισσότεροι κώδικες πεπερασμένων στοιχείων είναι παρόμοιοι στο σχεδιασμό τους. Ένα κεντρικό κομμάτι σε αυτούς τους κώδικες είναι η εξαγωγή πινάκων σε αραιή μορφή από τις μεταβολικές εξισώσεις. Η μορφή αυτών των πινάκων καθώς και η αντιστοίχιση από τοπικές σε ολικές συντεταγμένες διαφέρει ανάλογα με τις μεταβολικές μορφές και την επιλογή του είδους των πεπερασμένων στοιχείων. Προκειμένου αυτή η διαδικασία να είναι γενική και αυτοματοποιημένη χρησιμοποιείται ένας form compiler όπως ο FFC. Ο FFC λαμβάνει ως είσοδο μια μεταβολική έκφραση σε γλώσσα UFL και τη μετατρέπει σε κώδικα C++ σε UFC format. Περισσότερες πληροφορίες για τη βιβλιοθήκη UFC μπορούν να βρεθούν στο παράρτημα E .



Σχήμα 1.8 Ο FFC παράγει κώδικα C++ σε UFC format με είσοδο μια μεταβολική έκφραση σε γλώσσα UFL

1.3 Μαγνητοστατική

Η μαγνητοστατική [10–12] αποτελεί ερευνητικό υποπεδίο του Ηλεκτρομαγνητισμού και αφορά τη μελέτη μαγνητικών πεδίων σε συστήματα όπου τα ηλεκτρικά ρεύματα είναι στατικά (δεν μεταβάλλονται με το χρόνο). Η μαγνητοστατική είναι το μαγνητικό ανάλογο της ηλεκτροστατικής όπου τα ηλεκτρικά φορτία είναι στατικά. Η μαγνήτιση των υλικών, ωστόσο, δεν είναι απαραίτητο να είναι στατική: οι εξισώσεις της μαγνητοστατικής μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη μελέτη απότομα μεταβαλλόμενων μαγνητικών φαινομένων τα οποία εξελίσσονται σε κλίμακα χρόνου της τάξης των νανοδευτερολέπτων. Η μαγνητοστατική μπορεί να χρησιμοποιηθεί και ως μια καλή προσέγγιση σε προβλήματα όπου τα ηλεκτρικά ρεύματα δεν είναι στατικά αλλά μεταβάλλονται αργά. Οι κυριότερες εφαρμογές της μαγνητοστατικής είναι σε διατάξεις μικρομαγνητικής όπως οι συσκευές μαγνητικής αποθήκευσης δεδομένων (magnetic storage devices) στους σύγχρονους υπολογιστές [13].

Εφόσον είναι γνωστή η στατική πυκνότητα ρεύματος, \mathbf{J} , ξεκινώντας από τις εξισώσεις Maxwell, το μαγνητοστατικό πρόβλημα είναι ισοδύναμο με την εύρεση του μαγνητικού πεδίου \mathbf{H} και της μαγνητικής επαγωγής ή πυκνότητας μαγνητικής ροής \mathbf{B} που ικανοποιούν τις εξισώσεις των Gauss-Ampere σε διαφορική μορφή:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.14)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} \quad (1.15)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad (1.16)$$

όπου, $\mu = \mu(\mathbf{H})$ είναι η μαγνητική διαπερατότητα του υλικού. Η εξίσωση (1.16) ισχύει για παράλληλα \mathbf{B}, \mathbf{H} .

Ισοδύναμα, σε ολοκληρωτική μορφή:

$$\oint_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (1.17)$$

$$\oint_c \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = I_c, \quad (1.18)$$

όπου, $d\mathbf{S} \equiv \mathbf{n}dS$, S είναι μια επιφάνεια ενδιαφέροντος, \mathbf{n} , το κάθετο διάνυσμα στην επιφάνεια S , c ένας κλειστός βρόγχος και I_c , το ρεύμα που διαρρέει τον κλειστό βρόγχο.

Συνοριακές συνθήκες

Η ύπαρξη υλικών με διαφορετικές μαγνητικές ιδιότητες (για παράδειγμα ένα μαγνητικό υλικό τοποθετημένο στο κενό χώρο) έχει ως αποτέλεσμα το μαγνητικό πεδίο να είναι ασυνεχές εκατέρωθεν μιας επιφάνειας, σε αντιστοιχία με την ασυνέχεια που παρουσιάζεται στο ηλεκτρικό πεδίο λόγω μια επιφανειακής φόρτισης. Στην περίπτωση του μαγνητικού πεδίου \mathbf{H} μπορεί να μεταβάλλεται τόσο η κάθετη όσο και η εφαπτομενική συνιστώσα ενώ στη περίπτωση της πυκνότητας μαγνητικής ροής \mathbf{B} η εφαπτομενική συνιστώσα. Εφαρμόζοντας την εξίσωση Gauss σε ολοκληρωτική μορφή στην επιφάνεια ενός απειροστού όγκου που διαπερνά την επιφάνεια ενδιαφέροντος, εκατέρωθεν της οποίας μεταβάλλονται μαγνητικές ιδιότητες (Σχήμα 1.9) προκύπτει:

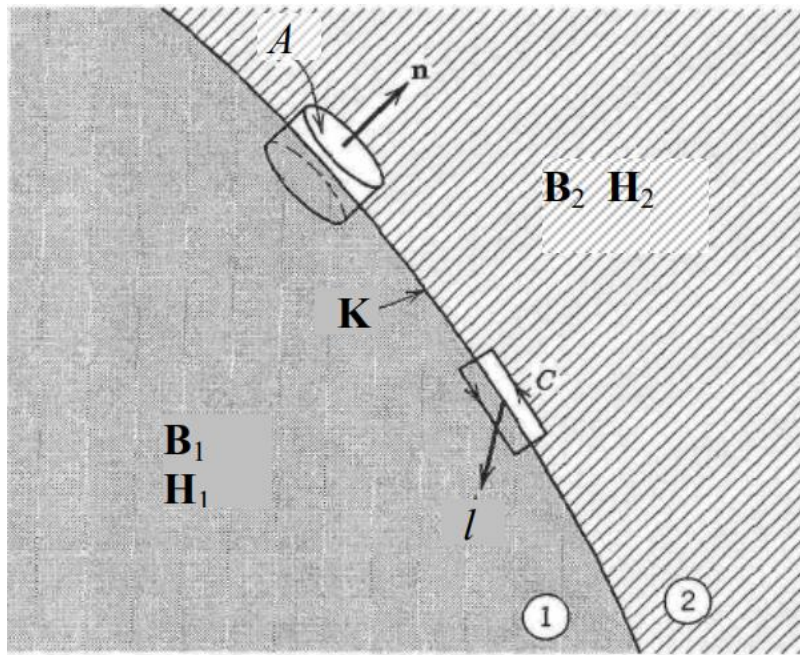
$$B_1^\perp - B_2^\perp = 0 \quad (1.19)$$

ή συμβολικά:

$$\mathbf{n} \cdot \llbracket \mathbf{B} \rrbracket = 0, \quad (1.20)$$

όπου B^\perp είναι η κάθετη συνιστώσα στην επιφάνεια. Η εξίσωση (1.19) ή (1.20) δηλώνει ότι η κάθετη συνιστώσα του \mathbf{B} είναι συνεχής στην επιφάνεια. Ωστόσο η κάθετη συνιστώσα του μαγνητικού πεδίου \mathbf{H} δεν είναι συνεχής αν η μαγνητική διαπερατότητα μεταβάλλεται εκατέρωθεν της επιφάνειας. Κάτι τέτοιο είναι εμφανές αν στην εξίσωση (1.20) αντικατασταθεί η έκφραση της εξίσωσης (1.16):

$$\mu_1 H_1^\perp - \mu_2 H_2^\perp = 0 \quad (1.21)$$



Σχήμα 1.9 Σχηματική αναπαράσταση επιφάνειας, εκατέρωθεν της οποίας μεταβάλλονται οι μαγνητικές ιδιότητες του υλικού.

Θεωρώντας ένα βρόγχο Ampere οποίος διαγράφει φορά κάθετη στο ρεύμα, προκύπτει από την εξίσωση (1.18):

$$\mathbf{H}_2^\parallel - \mathbf{H}_1^\parallel = \mathbf{K} \quad (1.22)$$

Επομένως η συνιστώσα του \mathbf{H} που είναι παράλληλη στην επιφάνεια αλλά κάθετη στο ρεύμα είναι ασυνεχής κατά μια ποσότητα, έστω \mathbf{K} . Με ανάλογο τρόπο, θεωρώντας ένα βρόγχο Ampere οποίος διαγράφει φορά παράλληλη στο ρεύμα, προκύπτει ότι η παράλληλη συνιστώσα είναι συνεχής. Τα παραπάνω συμπεράσματα μπορούν να συγκεντρωθούν στη παρακάτω έκφραση:

$$\mathbf{H}_2^\parallel - \mathbf{H}_1^\parallel = \mathbf{K} \times \mathbf{n}, \quad (1.23)$$

όπου, \mathbf{n} είναι το κάθετο διάνυσμα στην επιφάνεια, με κατεύθυνση προς το εξωτερικό.

Η εξίσωση (1.23) μπορεί να λάβει τη συμβολική μορφή:

$$\mathbf{n} \times \llbracket \mathbf{H} \rrbracket = \mathbf{J}_L, \quad (1.24)$$

όπου $\mathbf{J}_L \equiv \mathbf{K} \times \mathbf{n}$.

Προβλήματα συνοριακών τιμών στη μαγνητοστατική

Οι βασικές εξισώσεις της μαγνητοστατικής είναι οι (1.14), (1.15) σε συνδυασμό με κάποια καταστατική σχέση για τις μαγνητικές ιδιότητες του υλικού όπως η εξίσωση (1.16). Καθώς η απόκλιση του \mathbf{B} είναι πάντοτε μηδενική, μπορεί να οριστεί ένα διανυσματικό μαγνητικό δυναμικό, έστω \mathbf{A} , τέτοιο ώστε:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (1.25)$$

Στη γενική περίπτωση όπου η σχέση μεταξύ των \mathbf{B} , \mathbf{H} είναι μη γραμμική τότε η εξίσωση (1.15) γίνεται εξαιρετικά περίπλοκη ακόμα και αν η κατανομή της πυκνότητας ρεύματος είναι σχετικά απλή. Για γραμμικά υλικά ($\frac{\partial \mu}{\partial H} = 0$), η εξίσωση (1.25) λαμβάνει τη μορφή:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{A} \right) = \mathbf{J} \quad (1.26)$$

Αν $\mu = \text{const}$ σε μια πεπερασμένη περιοχή του χώρου τότε η εξίσωση (1.26) γράφεται:

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} = \mu \mathbf{J} \quad (1.27)$$

Επιλέγοντας βαθμίδα (gauge):

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (1.28)$$

η εξίσωση (1.27) παίρνει τη μορφή εξίσωσης τύπου Poisson:

$$\nabla^2 \mathbf{A} = -\mu \mathbf{J} \quad (1.29)$$

Λύσεις της εξίσωσης σε διαφορετικά γραμμικά μέσα θα πρέπει να συμφωνούν σε συνοριακές επιφάνειες μέσω των συνοριακών συνθηκών.

Βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό

Εφόσον η πυκνότητα ρεύματος μηδενίζεται σε κάποια πεπερασμένη περιοχή του χώρου $\mathbf{J} = \mathbf{0}$, η εξίσωση (1.15) γίνεται:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{0} \quad (1.30)$$

Η εξίσωση (1.30) υπαγορεύει ότι το μαγνητικό πεδίο είναι αστρόβιλο, επομένως μπορούμε να ορίσουμε ένα βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό, έστω u , τέτοιο ώστε:

$$\mathbf{H} = -\nabla u, \quad (1.31)$$

σε αναλογία με την εξίσωση $\mathbf{E} = -\nabla u$ για το ηλεκτρικό πεδίο στην ηλεκτροστατική.

Υποθέτοντας ότι το μέσο είναι γραμμικό και ομοιόμορφο (η μαγνητική διαπερατότητα είναι σταθερή στο χώρο) η εξίσωση (1.14) σε συνδυασμό με την (1.31) οδηγούν σε μια εξίσωση τύπου Laplace για το βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό:

$$\nabla^2 u = 0 \quad (1.32)$$

Επομένως, μπορούν να χρησιμοποιηθούν συμβατικές μέθοδοι επίλυσης μερικών διαφορικών εξισώσεων για την εύρεση του βαθμωτού μαγνητικού πεδίου, u και στη συνέχεια, των \mathbf{H} , \mathbf{B} .

Για ιδανικούς, συμπαγείς φερομαγνήτες το πρόβλημα απλοποιείται περαιτέρω. Σε αυτή τη περίπτωση, η μαγνήτιση, \mathbf{M} είναι ανεξάρτητη του μαγνητικού πεδίου και επομένως, είναι

απλή συνάρτηση των χωρικών συντεταγμένων $\mathbf{M} = \mathbf{M}(\mathbf{x})$. Τότε, η καταστατική έκφραση (1.16) λαμβάνει τη μορφή:

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{M} + \mathbf{H}), \quad (1.33)$$

όπου μ_0 , είναι η μαγνητική διαπερατότητα του κενού.

(1.14)⇒

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = -\nabla \cdot \mathbf{M} \quad (1.34)$$

Χρησιμοποιώντας το βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό η εξίσωση (1.34) μετατρέπεται σε μια μαγνητοστατική εξίσωση τύπου Poisson:

$$\nabla^2 u = -\rho_M, \quad (1.35)$$

όπου $\rho_M \equiv \nabla \cdot \mathbf{M}$ είναι η αποτελεσματική πυκνότητα μαγνητικού φορτίου (effective magnetic charge density).

Η λύση για το βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό στη περίπτωση απουσίας συνοριακών επιφανειών, είναι:

$$u(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int \frac{\rho_M(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\nabla' \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' \quad (1.36)$$

Εφόσον το \mathbf{M} είναι καλά ορισμένο και ομαλό στο χώρο τότε μετά από ολοκλήρωση κατά παράγοντες η εξίσωση (1.36) γίνεται:

$$u(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int \mathbf{M}(\mathbf{r}') \cdot \nabla' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' \quad (1.37)$$

και με κατάλληλη αλλαγή των μεταβλητών ολοκλήρωσης:

$$u(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \nabla \cdot \int \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' \quad (1.38)$$

Μακριά από τη περιοχή επίδρασης της μαγνήτισης \mathbf{M} το δυναμικό μπορεί να προσεγγιστεί ως:

$$u(\mathbf{r}) \approx -\frac{1}{4\pi} \nabla \left(\frac{1}{r} \right) \cdot \int \mathbf{M}(\mathbf{r}') d^3r' = \frac{\mathbf{m} \cdot \mathbf{r}}{4\pi r^3} \quad (1.39)$$

Στην εξίσωση (1.39), $\mathbf{m} = \int \mathbf{M}(\mathbf{r}') d^3r'$ είναι η συνολική μαγνητική ροπή. Η τελική έκφραση αντιστοιχεί στο βαθμωτό δυναμικό ενός μαγνητικού διπόλου.

Σε μαγνητοστατικά προβλήματα όπου η κατανομή της μαγνήτισης αλλάζει απότομα στα σύνορα ενός μέσου, είναι βολικό να χρησιμοποιηθεί η έννοια της επιφανειακής μαγνητικής πυκνότητας φορτίου σ_M . Σε ένα συμπαγή φερομαγνήτη με όγκο V και εξωτερική επιφάνεια S , η κατανομή $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ είναι γνωστή στο εσωτερικό του όγκου και μηδενίζεται ακαριαία στην επιφάνεια. Εφαρμόζοντας το θεώρημα της απόκλισης στο ρ_M σε ένα όγκο Gauss που διαπερνά την επιφάνεια (όπως και στην εξίσωση (1.19)) προκύπτει:

$$\sigma_M = \mathbf{n} \cdot \mathbf{M} \quad (1.40)$$

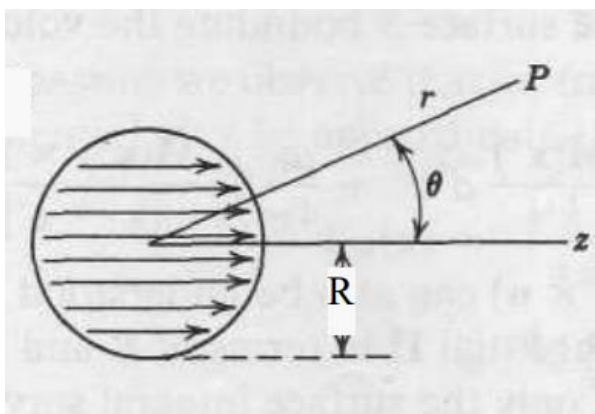
Σε αυτή τη περίπτωση το βαθμωτό δυναμικό υπολογίζεται ως:

$$u(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \nabla \cdot \int_V \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' + \frac{1}{4\pi} \oint_S \frac{\mathbf{n}' \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dS' \quad (1.41)$$

Μια σημαντική υποπερίπτωση της εξίσωσης (1.41) είναι αυτή της ομοιόμορφης μαγνήτισης σε όλο τον όγκο V . Τότε:

$$u(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \oint_S \frac{\mathbf{n}' \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dS' \quad (1.42)$$

Αναλυτική λύση για το βαθμωτό δυναμικό στη περίπτωση ιδανικών σφαιρικών μαγνητών
 Έστω μια σφαίρα ακτίνας R με ομοιόμορφη μόνιμη μαγνήτιση \mathbf{M} παράλληλη στον άξονα z . Ο πιο απλός τρόπος επίλυσης αυτού του προβλήματος είναι υιοθετώντας τα μεγέθη του βαθμωτού δυναμικού και του μαγνητικού φορτίου. Το πρόβλημα απλοποιείται στην εύρεση ενός μαγνητικού δυναμικού για μια δεδομένη επιφανειακή μαγνητική φόρτιση $\sigma_M = M \cos\theta$ η οποία εντοπίζεται στο σφαιρικό κέλυφος ακτίνας R .



Σχήμα 1.10 Σφαίρα ακτίνας R και μόνιμης μαγνήτισης \mathbf{M} , παράλληλης στον άξονα z [14].

Χρησιμοποιώντας τη γενική λύση και λαμβάνοντας υπόψη ότι το βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό είναι πεπερασμένο στο άπειρο και στο κέντρο της σφαίρας προκύπτει για το εσωτερικό της σφαίρας [14]:

$$u(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l r^l P_l(\cos\theta), \quad r \leq R \quad (1.43)$$

και για το εξωτερικό:

$$u(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{C_l}{r^{l+1}} P_l(\cos\theta), \quad r > R \quad (1.44)$$

όπου P_l , είναι τα πολυώνυμα Legendre και A_l, C_l οι αντίστοιχοι συντελεστές.

Οι συναρτήσεις (1.43), (1.44) θα πρέπει να συνδεθούν μέσω των κατάλληλων συνοριακών συνθηκών στην επιφάνεια της σφαίρας. Καθώς το δυναμικό είναι συνεχές στην επιφάνεια ($r = R$) προκύπτει:

$$\sum_{l=0}^{\infty} A_l r^l P_l(\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{C_l}{r^{l+1}} P_l(\cos\theta), \quad r = R \Rightarrow$$

$$C_l = A_l R^l \quad (1.45)$$

Η παράγωγος του δυναμικού κατά τη κάθετη κατεύθυνση στην επιφάνεια παρουσιάζει μια ασυνέχεια τέτοια ώστε:

$$\left(\frac{\partial u_{out}}{\partial r} - \frac{\partial u_{in}}{\partial r} \right)_{r=R} = -\sigma_M(\theta) \quad (1.46)$$

Επομένως:

$$\sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \frac{C_l}{R^{l+2}} P_l(\cos\theta) - \sum_{l=0}^{\infty} l A_l R^{l-1} P_l(\cos\theta) = -M \cos\theta, \quad (1.47)$$

ή χρησιμοποιώντας την εξίσωση (1.45):

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) A_l R^{l-1} P_l(\cos\theta) = M \cos\theta \quad (1.48)$$

Ο μόνος όρος που δε μηδενίζεται είναι αυτός για $l = 1$ τέτοιος ώστε:

$$A_1 = \frac{M}{3}, \quad (1.49)$$

και επομένως

$$C_1 = \frac{M}{3} R^3 \quad (1.50)$$

Σύμφωνα με την εξίσωση (1.43) η λύση στο εσωτερικό της σφαίρας είναι:

$$u(r, \theta) = \frac{M}{3} r \cos\theta = \frac{M}{3} z, \quad r \leq R \quad (1.51)$$

Το μαγνητικό πεδίο προκύπτει:

$$\mathbf{H} = -\nabla u = -\frac{M}{3} \hat{\mathbf{z}} = -\frac{\mathbf{M}}{3}, \quad (1.52)$$

και η πυκνότητα μαγνητικής ροής:

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{M} + \mathbf{H}) = \frac{2\mu_0 \mathbf{M}}{3} \quad (1.53)$$

Σημειώνεται ότι στο εσωτερικό της σφαίρας το \mathbf{B} είναι παράλληλο και το \mathbf{H} αντιπαράλληλο του \mathbf{M} .

Στο εξωτερικό της σφαίρας σύμφωνα με την εξίσωση (1.44) το δυναμικό είναι:

$$u(r, \theta) = \frac{M R^3}{3 r^2} \cos\theta, r > R \quad (1.54)$$

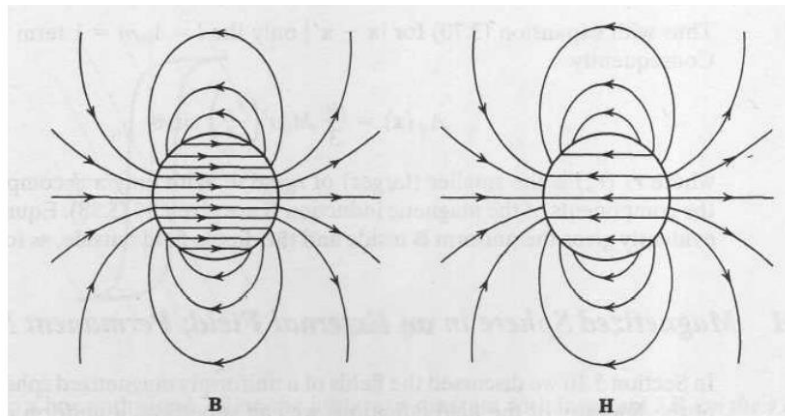
Αυτό είναι το βαθμωτό δυναμικό που παράγεται από ένα σημειακό μαγνητικό δίπολο:

$$u(r, \theta) = \frac{\mathbf{m} \cdot \mathbf{r}}{4\pi r^3} \quad (1.55)$$

με μαγνητική διπολική ροπή:

$$\mathbf{m} = \frac{4\pi R^3}{3} \mathbf{M} \quad (1.56)$$

Για τη σφαίρα με ομοιόμορφη μαγνήτιση τα πεδία είναι χαρακτήρα διπόλου, τόσο ασυμπτωτικά όσο και κοντά στη σφαίρα. Οι πεδιακές γραμμές για το \mathbf{B} είναι κλειστές και συνεχείς ενώ αντίθετα αυτές του \mathbf{H} τερματίζουν στην επιφάνεια λόγω της ύπαρξης της επιφανειακής μαγνητικής φόρτισης (Σχήμα 1.11).

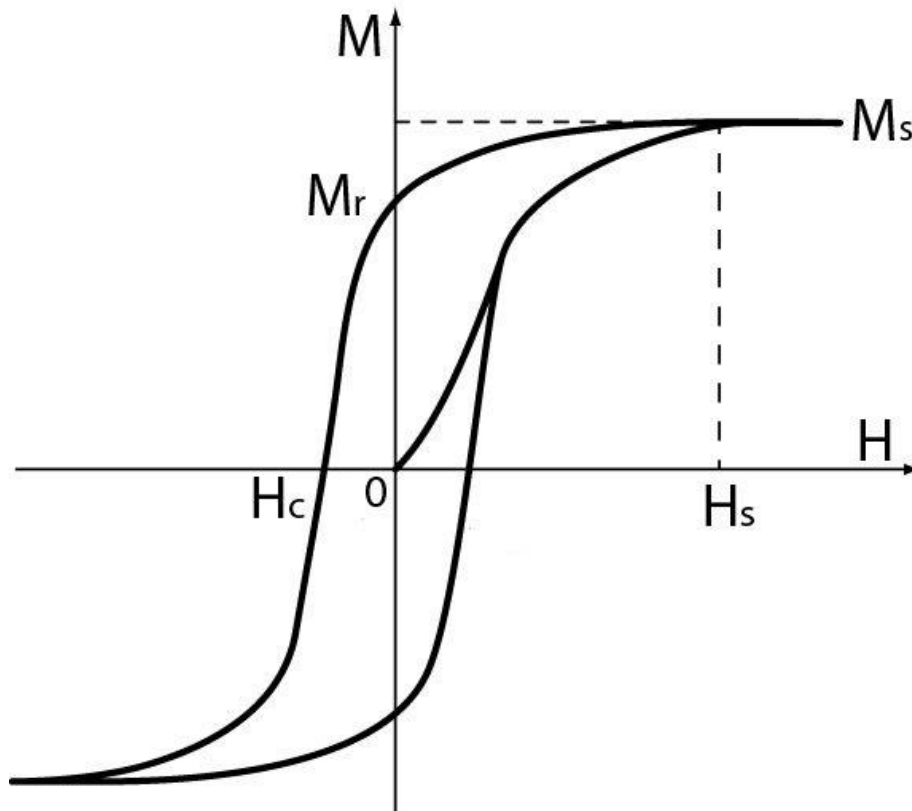


Σχήμα 1.11 Μαγνητικές γραμμές για τη σφαίρα ομοιόμορφης μαγνήτισης [14].

Μοντελοποίηση μαγνητικής υστέρησης

Η μαγνήτιση \mathbf{M} αποτελεί μαγνητική ιδιότητα των υλικών και επομένως απαιτεί εκτενή μοντελοποίηση [15]. Κατά την έκθεση φερομαγνητικών υλικών (όπως για παράδειγμα ο σίδηρος) σε εξωτερικά μαγνητικά πεδία παρουσιάζεται το φαινόμενο της μαγνητικής υστέρησης. Το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο επιβάλλει τον προσανατολισμό των ατομικών διπόλων μέσα στο υλικό. Ακόμα και μετά την απομάκρυνση του εξωτερικού πεδίου, ένα μέρος αυτού του προσανατολισμού παραμένει. Επομένως το υλικό διατηρεί μια μόνιμη μαγνήτιση που μπορεί να απομακρυνθεί μόνο με χρήση θερμότητας ή με την επιβολή ενός αντίθετου μαγνητικού πεδίου. Η σχέση $\mathbf{M} = \mathbf{M}(\mathbf{H})$ (ισοδύναμα η σχέση $\mathbf{B} = \mu\mathbf{H}$) σε αυτά τα υλικά είναι μη γραμμική. Αυτό σημαίνει ότι το \mathbf{M} ακολουθεί διαφορετική καμπύλη (ή διαδρομή) για αυξανόμενο μαγνητικό πεδίο \mathbf{H} (διαδικασία μαγνήτισης) από ότι για μειούμενο μαγνητικό πεδίο (διαδικασία απομαγνήτισης). Η πλήρης καμπύλη που εκφράζει τη σχέση $\mathbf{H} - \mathbf{M}$ ονομάζεται καμπύλη ή κύριος βρόγχος μαγνητικής υστέρησης. Η υστέρηση και επομένως, οι μαγνητικές ιδιότητες του υλικού συνήθως χαρακτηρίζονται από μεγέθη όπως ο κορεσμός (saturation), η μόνιμη μαγνήτιση ή μαγνητικό υπόλειμμα (remanence or remanent magnetization), η μαγνητική αντίσταση (coercivity) και η μαγνητική επιδεκτικότητα (susceptibility). Ο κορεσμός είναι το ανώτερο όριο μαγνήτισης του υλικού. Η μόνιμη

μαγνήτιση είναι η υπολειπόμενη μαγνήτιση του υλικού μετά την απομάκρυνση όλων των εξωτερικών πεδίων, δηλαδή η υπολειπόμενη μαγνήτιση του υλικού μετά από μαγνήτιση του έως τον κορεσμό. Μαγνητική αντίσταση είναι η ένταση ενός εξωτερικού πεδίου που απαιτείται για να μηδενίσει πλήρως την μαγνήτιση του υλικού. Η μαγνητική αντίσταση διάφορων φερομαγνητικών υλικών μπορεί να διαφέρει έως και 8 τάξεις μεγέθους. Τα μαγνητικά υλικά χαρακτηρίζονται με βάση την μαγνητική τους αντίσταση. Για παράδειγμα υλικά με μεγάλη αντίσταση χαρακτηρίζονται ως σκληρά (hard) μαγνητικά υλικά, ενώ αντίθετα, αυτά με μικρή αντίσταση μαλακά (soft) μαγνητικά υλικά.



Σχήμα 1.12 Τυπική καμπύλη μαγνητικής υστέρησης $M(H)$. M_s είναι η τιμή της μαγνήτισης στο κορεσμό, M_r , η μόνιμη μαγνήτιση και H_c , η μαγνητική αντίσταση.

Η μαγνητική επιδεικτικότητα, απουσία ελεύθερων ρευμάτων, συνήθως ορίζεται έπειτα από ανάπτυξη της μαγνήτισης M συναρτήσει του μαγνητικού πεδίου H [16]:

$$M(H) = M(H_0) + \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H_0} (H - H_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 M}{\partial H^2} \right|_{H_0} (H - H_0)^2 + \dots, \quad (1.57)$$

όπου H_0 το μαγνητικό πεδίο σε ένα σημείο λειτουργίας.

Η σχέση (1.57), ακόμα και στη περίπτωση όπου λαμβάνονται υπόψη μόνο οι πρώτοι 2-3 όροι, είναι αρκετά περίπλοκη καθώς η μαγνήτιση δεν είναι μονότιμη για μια τιμή του μαγνητικού πεδίου. Θεωρώντας ψευδογραμμική συμπεριφορά η εξίσωση (1.57) μπορεί να απλοποιηθεί:

$$M(H) \approx M(H_0) + \chi_0(H - H_0) \quad (1.58)$$

Η εξίσωση (1.58) μπορεί να απλοποιηθεί περαιτέρω εάν ως σημείο λειτουργίας επιλεγθεί η κατάσταση μετά την απομάκρυνση του πεδίου $H = 0$ όπου το υλικό έχει μια μόνιμη μαγνήτιση M_R :

$$M(H) \approx M_R + \chi_0 H \quad (1.59)$$

χ_0 είναι η σταθερή μαγνητική επιδεκτικότητα του υλικού.

Συνδυάζοντας τις εξισώσεις (1.33) και (1.59) σε διανυσματική μορφή προκύπτει:

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{M}_R + \mu_0 (1 + \chi_0) \mathbf{H}, \quad (1.60)$$

όπου το μέγεθος $\mu = \mu_0 (1 + \chi_0)$ είναι η σταθερή μαγνητική διαπερατότητα του υλικού.

Τα φερομαγνητικά υλικά τα οποία ακολουθούν ικανοποιητικά την συσχέτιση (1.59) έχουν χαμηλότερη μαγνητική αντίσταση από τα σκληρά μαγνητικά υλικά και μεγαλύτερη από αυτή των μαλακών μαγνητικών υλικών επομένως, μπορούν να χαρακτηριστούν ως μη ιδανικά σκληρά μαγνητικά υλικά (non ideal hard magnetic materials).

Αναλυτική λύση για το βαθμωτό δυναμικό στη περίπτωση μη ιδανικών σφαιρικών μαγνητών

Θεωρώντας ότι η σφαίρα έχει μόνιμη μαγνήτιση ομοιόμορφη και παράλληλη στον άξονα z όπως και στην ιδανική περίπτωση, η λύση για το βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό απουσία ρευμάτων και εξωτερικών μαγνητικών πεδίων προκύπτει για το εσωτερικό της σφαίρας:

$$u(r, \theta) = \frac{M_R}{2(1 + \chi_0) + 1} z, r \leq R \quad (1.61)$$

και για το εξωτερικό:

$$u(r, \theta) = \frac{M_R}{2(1 + \chi_0) + 1} \frac{R^3}{r^2} \cos \theta, r > R \quad (1.62)$$

ή

$$u(r, \theta) = \frac{\mathbf{m} \cdot \mathbf{r}}{4\pi r^3}, r > R \quad (1.63)$$

με μαγνητική διπολική ροπή:

$$\mathbf{m} = \frac{4\pi R^3}{3} \frac{1}{2(1 + \chi_0) + 1} \mathbf{M}_R \quad (1.64)$$

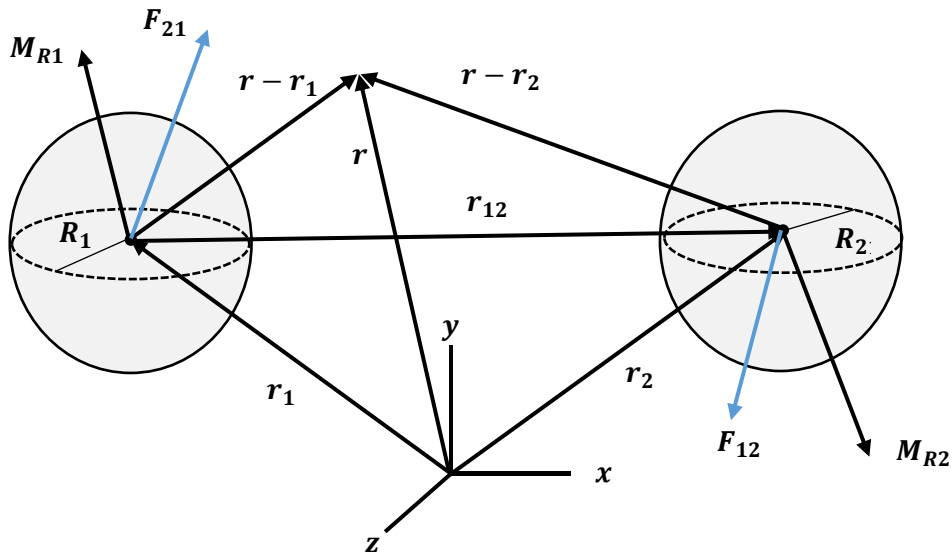
Υπολογισμός δυνάμεων μεταξύ ιδανικών σκληρών σφαιρικών μαγνητικών διπόλων

Ο υπολογισμός των δυνάμεων που αναπτύσσονται μεταξύ 2 σφαιρικών μαγνητικών διπόλων μπορεί να γίνει αναλυτικά αλλά μόνο για τη περίπτωση ιδανικών σκληρών μαγνητικών σφαιρών [17–19]. Θεωρούνται δύο δίπολα, τοποθετημένα στις θέσεις $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ του καρτεσιανού χώρου αντίστοιχα (σχήμα 1.13).

Το μαγνητικό πεδίο που παράγεται από τη σφαίρα i , υπολογισμένο στη θέση της σφαίρας j είναι:

$$\mathbf{B}_i(\mathbf{r}_j) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{3\mathbf{m}_{r,i} \cdot \mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^5} - \frac{\mathbf{m}_{r,i}}{r_{ij}^3} \right), \quad (1.65)$$

όπου $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ είναι η σχετική θέση της σφαίρας j . Να τονιστεί ότι το μαγνητικό πεδίο μπορεί να εκφραστεί ισοδύναμα είτε μέσω του \mathbf{B} είτε μέσω του \mathbf{H} καθώς στο εξωτερικό των σφαιρών η μαγνήτιση είναι μηδενική και τα πεδία κάθε σφαίρας υπολογίζονται ανεξάρτητα σύμφωνα με την αρχή της επαλληλίας.



Σχήμα 1.13 . Δύο μαγνητικές συμπαγείς σφαίρες με ακτίνες R_1, R_2 και μόνιμες μαγνητίσεις M_{R1}, M_{R2} τοποθετημένες στο τριδιάστατο χώρο σε απόσταση που καθορίζεται από το διακεντρικό τους διάνυσμα r_{12} . Οι σφαίρες αλληλεπιδρούν με αντίθετες δυνάμεις F_{21}, F_{12} .

Η ενέργεια αλληλεπίδρασης μεταξύ των σφαιρών δίνεται από την εξίσωση:

$$U_{ij} = -\mathbf{m}_{r,j} \cdot \mathbf{B}_i(\mathbf{r}_j), \quad (1.66)$$

η οποία μετατρέπεται με βάση την (1.65):

$$U_{ij} = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{\mathbf{m}_{r,i} \cdot \mathbf{m}_{r,j}}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\mathbf{m}_{r,i} \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{m}_{r,j} \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right] \quad (1.67)$$

Η δύναμη που ασκείται από τη σφαίρα i στη σφαίρα j είναι:

$$\mathbf{F}_{ij} = -\nabla_j U_{ij}, \quad (1.68)$$

όπου ∇_j είναι η κατά \mathbf{r}_j παραγωγή.

Συνδυάζοντας τις εξισώσεις (1.67) και (1.68) προκύπτει για τη μαγνητική δύναμη:

$$\mathbf{F}_{ij} = \frac{3\mu_0}{4\pi r_{ij}^5} \left[\begin{array}{c} (\mathbf{m}_{r,i} \cdot \mathbf{r}_{ij})\mathbf{m}_{r,j} + (\mathbf{m}_{r,j} \cdot \mathbf{r}_{ij})\mathbf{m}_{r,i} + (\mathbf{m}_{r,i} \cdot \mathbf{m}_{r,j})\mathbf{r}_{ij} \\ -5 \frac{(\mathbf{m}_{r,i} \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{m}_{r,j} \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \mathbf{r}_{ij} \end{array} \right] \quad (1.69)$$

Οι πρώτοι 2 όροι της (1.69) είναι παράλληλοι στα $\mathbf{m}_{r,j}$, $\mathbf{m}_{r,i}$ αντίστοιχα. Η δύναμη \mathbf{F}_{ij} , επομένως στη γενική περίπτωση δεν είναι κεντρική (μη παράλληλη στο διακεντρικό διάνυσμα \mathbf{r}_{ij}).

Εξαιτίας της συμμετρίας οι δυνάμεις που ασκούνται από την i στη j σφαίρα και αντίστροφα είναι αντίθετες, σύμφωνα και με τον 3^ο νόμο του Νεύτωνα:

$$\mathbf{F}_{21} = -\mathbf{F}_{12} \quad (1.70)$$

Στην ειδική περίπτωση όπου τα διανύσματα μαγνητικής διπολικής ροπής είναι ομόσημα και παράλληλα με τον άξονα x και τα κέντρα των σφαιρών βρίσκονται επίσης στον άξονα x τότε η εξίσωση (1.69) απλοποιείται στη μορφή:

$$\mathbf{F}_{ij} = (-1)^i \frac{6\mu_0 m_{r,i} m_{r,j}}{4\pi \delta^4} \mathbf{e}_x \quad (1.71)$$

1.4 Επίλυση προβλημάτων μαγνητοστατικής με το λογισμικό FEniCS

Το λογισμικό FEniCS είναι ιδιαίτερα εύρωστο και είναι δομημένο με τέτοιο τρόπο ώστε, να μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την επίλυση οποιουδήποτε απαιτητικού προβλήματος που διέπεται από μερικές διαφορικές εξισώσεις ανεξαρτήτως της φυσικής του προβλήματος. Ένα από σημαντικότερα πλεονεκτήματα του είναι ότι αναπτύσσεται και διατίθεται ως ανοιχτό λογισμικό. Η χρήση ανοιχτού λογισμικού για ερευνητικούς σκοπούς παρουσιάζει αυξανόμενη τάση τη τελευταία δεκαετία.

Ήδη από την ανάπτυξη του λογισμικού, αναφέρονται παραδείγματα επίλυσης προβλημάτων ηλεκτροστατικής στην επίσημη βιβλιογραφία [3]. Η πρώτη πολύ σημαντική βιβλιογραφική αναφορά χρήσης του FEniCS για την επίλυση προβλημάτων μαγνητοστατικής είναι αυτή των Abert et al [20,21]. Ανέπτυξαν ένα λογισμικό βασισμένο στο FEniCS για προσομοίωση προβλημάτων μικρομαγνητικής. Οι ίδιοι συγγραφείς [22,23] χρησιμοποίησαν αυτό το λογισμικό για την ανάπτυξη και επίλυση νέων μαθηματικών μοντέλων στο πεδίο της μικρομαγνητικής. Αντίστοιχα, οι Glane et al [16] χρησιμοποίησαν το FEniCS σε συνδυασμό με τη βιβλιοθήκη BEM++ (μέθοδος συντοκικών στοιχείων) για την μοντελοποίηση μη ιδανικών σκληρών μαγνητών διαφόρων γεωμετρικών σχημάτων. Πρόσφατα οι Bruckner et al [24,25] παρουσίασαν έναν αλγόριθμο επίλυσης μεγάλης κλίμακας προβλημάτων βελτιστοποίησης στη μαγνητοστατική εφαρμόζοντας τη συζυγή μέθοδο. Η εφαρμογή του αλγορίθμου έγινε εξ ολοκλήρου στο λογισμικό FEniCS. Αντίστοιχη προσπάθεια αναφέρεται από τους Ren et al [25] όπου εφαρμόζεται βελτιστοποίηση σχήματος σε μαλακά μαγνητικά υλικά με τη μέθοδο Level Set.

Κεφάλαιο 2. Τρι-διάστατη προσομοίωση αλληλεπίδρασης σκληρών μαγνητικών σφαιρών χαμηλής μαγνητοαντίστασης με το λογισμικό FEniCS

Σε αυτό το κεφάλαιο αναπτύσσεται αρχικά το απαραίτητο μαθηματικό υπόβαθρο που διέπει το εξεταζόμενο πρόβλημα αλληλεπίδρασης μαγνητικών σφαιρών, περιλαμβάνοντας τις πεδιακές εξισώσεις της μαγνητοστατικής καθώς και του υπολογισμού της μαγνητικής δύναμης μέσω του τανυστή Maxwell, εκφρασμένες σε διαφορική και μεταβολική μορφή. Στη συνέχεια παρουσιάζεται αναλυτικά η διαδικασία ανάπτυξης του υπολογιστικού μοντέλου σε γλώσσα python για την επίλυση του προβλήματος με το λογισμικό FEniCS.

2.1 Μαθηματική μοντελοποίηση

Το πρόβλημα που εξετάζεται υπολογιστικά στη παρούσα εργασία είναι η μαγνητική αλληλεπίδραση μη ιδανικών σκληρών μαγνητικών σφαιρών οι οποίες διαθέτουν μόνιμη μαγνήτιση αλλά ταυτόχρονα λόγω χαμηλής μαγνητοαντίστασης παρουσιάζουν επιδεκτικότητα στην ύπαρξη εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Στη συγκεκριμένη περίπτωση το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο παράγεται από την ύπαρξη της δεύτερης σφαίρας σε κάποια πεπερασμένη απόσταση η οποία συμβολίζεται με βάση το διακεντρικό διάνυσμα των σφαιρών r_{12} (Σχήμα 1.13). Θεωρείται ότι η μόνιμη μαγνήτιση των σφαιρών είναι ομογενής δηλαδή ανεξάρτητη των χωρικών συντεταγμένων. Ο περιβάλλον χώρος θεωρείται κενός ενώ δε λαμβάνονται υπόψη επιδράσεις άλλων πεδριακών δυνάμεων (βαρύτητα) ή ελεύθερων ρευμάτων.

Κυριότερος στόχος είναι ο υπολογισμός της δύναμης αλληλεπίδρασης μεταξύ των σφαιρών καθώς και οι αποκλίσεις από τις θεωρητικές προβλέψεις του μοντέλου διπόλου-διπόλου που δεν λαμβάνει υπόψη την ύπαρξη επιδεκτικότητας στο μαγνητικό πεδίο.

Διατύπωση προβλήματος συνοριακών τιμών

Οι βασικές εξισώσεις που διέπουν τα προβλήματα μαγνητοστατικής για γραμμικά υλικά (βλ. Κεφάλαιο 1) είναι :

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} \quad (2.2)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{M} + \mathbf{H}) \quad (2.3)$$

$$\mathbf{n} \cdot [\mathbf{B}] = 0 \quad (2.4)$$

$$\mathbf{n} \times [\mathbf{H}] = \mathbf{J}_L \quad (2.5)$$

όπου \mathbf{B} [T] η πυκνότητα μαγνητικής ροής, \mathbf{H} $\left[\frac{A}{m}\right]$ το μαγνητικό πεδίο, \mathbf{M} $\left[\frac{A}{m}\right]$ η μαγνήτιση του υλικού, \mathbf{J}, \mathbf{J}_L $\left[\frac{A}{m^2}\right]$ οι πυκνότητες ρεύματος στο χώρο ή στη διεπιφάνεια των υλικών και μ_0 $\left[\frac{H}{m}\right]$ η μαγνητική διαπερατότητα του κενού.

Στη περίπτωση απουσίας ελεύθερων ρευμάτων η πυκνότητα ρεύματος μηδενίζεται και το μαγνητικό πεδίο \mathbf{H} είναι αστρόβιλο:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{0} \quad (2.6)$$

Επομένως είναι εφικτό και ταυτόχρονα βολικό το μαγνητικό πεδίο \mathbf{H} να εκφραστεί με βάση ένα βαθμωτό δυναμικό έστω u :

$$\mathbf{H} = -\nabla u \quad (2.7)$$

Η μαγνήτιση \mathbf{M} των σφαιρών μπορεί να εκφραστεί σε όρους μόνιμης μαγνήτισης και γραμμικής εξάρτησης από το μαγνητικό πεδίο στη περίπτωση ύπαρξης μη μηδενικής επιδεκτικότητας:

$$\mathbf{M} = x_0 \mathbf{H} + \mathbf{M}_R \quad (2.8)$$

όπου $\mathbf{M}_R \left[\frac{A}{m} \right]$ η μόνιμη μαγνήτιση και x_0 η γραμμική επιδεκτικότητα (αδιάστατη).

Αντικαθιστώντας την έκφραση (2.8) για τη μαγνήτιση στην εξίσωση (2.1) προκύπτει άμεσα:

$$\nabla \cdot \mu_0 (x_0 \mathbf{H} + \mathbf{M}_R + \mathbf{H}) = 0 \quad (2.9)$$

Αντίστοιχα αντικαθιστώντας το μαγνητικό πεδίο \mathbf{H} από την εξίσωση (2.7) προκύπτει η βασική εξίσωση σε όρους βαθμωτού δυναμικού:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mu_0 (-(1 + x_0) \nabla u + \mathbf{M}_R) &= 0 \Rightarrow \\ \nabla \cdot \mu_0 ((1 + x_0) \nabla u) &= \nabla \cdot (\mu_0 \mathbf{M}_R) \end{aligned} \quad (2.10)$$

Σε αυτό το σημείο ορίζεται η έννοια της σχετικής διαπερατότητας ως εξής:

$$\mu_r^- = \frac{\mu_0 (1 + x_0)}{\mu_0} = 1 + x_0 \quad (2.11)$$

$$\mu_r^+ = 1 \quad (2.12)$$

Τα σύμβολα $-$, $+$ υποδηλώνουν τον προσανατολισμό εκατέρωθεν της διεπιφάνειας υλικού-κενού. Συγκεκριμένα συμβολίζουμε $-$ για τη περιοχή μέσα στο υλικό και $+$ εκτός αυτού. Για ομογενές υλικό η μόνιμη μαγνήτιση είναι σταθερή και ανεξάρτητη των χωρικών συντεταγμένων επομένως:

$$\nabla \cdot (\mu_0 \mathbf{M}_R) = 0 \quad (2.13)$$

Η τελική μορφή της εξίσωσης (2.10) για το υλικό είναι:

$$\nabla \cdot (\mu_r^- \nabla u) = 0 \quad (2.14)$$

ενώ για το κενό μέσο:

$$\nabla \cdot (\mu_r^+ \nabla u) = 0 \quad (2.15)$$

Οι εξισώσεις (2.14), (2.15) μπορούν να απλοποιηθούν περαιτέρω σε εξισώσεις Laplace ωστόσο επιλέγεται να διατηρηθούν σε συντηρητική μορφή.

Οι συνοριακές συνθήκες που πρέπει να ικανοποιούνται στις διεπιφάνειες των σφαιρών και του κενού μέσου είναι:

$$\mathbf{n} \cdot \llbracket \mathbf{B} \rrbracket = 0 \quad (2.16)$$

$$\mathbf{n} \times \llbracket \mathbf{H} \rrbracket = 0 \quad (2.17)$$

Η εξίσωση (2.14) υπαγορεύει την συνέχεια της κάθετης συνιστώσας του \mathbf{B} ενώ η εξίσωση (2.15) τη συνέχεια της εφαπτομενικής συνιστώσας του \mathbf{H} στη διεπιφάνεια. Οι δύο συνοριακές συνθήκες μπορούν να εκφραστούν σε όρους βαθμωτού δυναμικού:

$$(2.14) \Rightarrow$$

$$\mathbf{n} \cdot \llbracket \mathbf{H} + \mathbf{M} \rrbracket = 0 \Rightarrow$$

$$\mathbf{n} \cdot \llbracket -\nabla u + \mathbf{M} \rrbracket = 0 \Rightarrow$$

$$\mathbf{n} \cdot (-(1 + x_0)\nabla u^- + \nabla u^+ + \mathbf{M}_R) = 0 \Rightarrow$$

$$\mathbf{n} \cdot (-\mu_r^- \nabla u^- + \mu_r^+ \nabla u^+ + \mathbf{M}_R) = 0 \Rightarrow$$

$$\mathbf{n} \cdot \mu_r^- \nabla u^- - \mathbf{n} \cdot \mu_r^+ \nabla u^+ = \mathbf{n} \cdot \mathbf{M}_R \quad (2.18)$$

Η εξίσωση (2.18) υπαγορεύει ότι το μαγνητικό πεδίο \mathbf{H} παρουσιάζει μια ασυνέχεια στη διεπιφάνεια λόγω της ύπαρξης μόνιμης μαγνήτισης.

$$(2.17) \Rightarrow$$

$$\mathbf{n} \times \llbracket \nabla u \rrbracket = 0 \quad (2.19)$$

Η συνοριακή συνθήκη (2.19) μπορεί να ικανοποιηθεί απαιτώντας συνέχεια για το βαθμωτό δυναμικό στη διεπιφάνεια:

$$\llbracket u \rrbracket = 0 \quad (2.20)$$

Αυτό μπορεί να γίνει κατανοητό αναπτύσσοντας το βαθμωτό δυναμικό σε σειρά Taylor εκατέρωθεν μιας ιδιάζουσας διεπιφάνειας S , σε επιφανειακό σύστημα συντεταγμένων. Συμβατικά υιοθετείται ο συμβολισμός $\xi = (\xi, \eta, n)$ όπου ξ, η είναι οι εφαπτομενικές συνιστώσες και n η κάθετη συνιστώσα. Ένα τυχαίο σημείο $\xi_0 = (\xi_0, \eta_0, 0)$ επιλέγεται για την ανάπτυξη. Η προσέγγιση γράφεται:

$$u^\mp(\xi) \approx u^\mp(\xi_0) + \left. \frac{\partial u^\mp}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} (\xi - \xi_0) + \left. \frac{\partial u^\mp}{\partial \eta} \right|_{\xi=\xi_0} (\eta - \eta_0) + \left. \frac{\partial u^\mp}{\partial n} \right|_{\xi=\xi_0} n \quad (2.21)$$

Οι προσεγγίσεις μεγαλύτερης τάξης οδηγούν στο ίδιο αποτέλεσμα για τα παρακάτω μεγέθη καθώς $n = 0$ στην διεπιφάνεια. Για λόγους συντομίας οι τιμές των παραγώγων και του βαθμωτού δυναμικού στο σημείο ανάπτυξης συμβολίζονται ως εξής:

$$A^{\mp} = \left. \frac{\partial u^{\mp}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0}, B^{\mp} = \left. \frac{\partial u^{\mp}}{\partial \eta} \right|_{\xi=\xi_0}, C^{\mp} = \left. \frac{\partial u^{\mp}}{\partial n} \right|_{\xi=\xi_0}, D^{\mp} = u^{\mp}(\xi_0) \quad (2.22)$$

Χρησιμοποιώντας αυτές τις προσεγγίσεις προκύπτει:

$$\nabla u^{\mp}(\xi) \approx A^{\mp} \mathbf{e}_{\xi} + B^{\mp} \mathbf{e}_{\eta} + C^{\mp} \mathbf{n} \quad (2.23)$$

$$\mathbf{n} \times \nabla u^{\mp}(\xi) \approx A^{\mp} \mathbf{e}_{\eta} - B^{\mp} \mathbf{e}_{\xi} \quad (2.24)$$

Φαίνεται εύκολα ότι αν:

$$A^{-} = A^{+}, B^{-} = B^{+} \quad (2.25)$$

τότε η εξίσωση (2.20) ικανοποιείται. Κάτι τέτοιο υπαγορεύει ίση μεταβολή του βαθμωτού δυναμικού κατά τις εφαπτομενικές συνιστώσες.

Στη περίπτωση μη κλειστών επιφανειών η εξέταση μπορεί να γίνει σε οποιοδήποτε σημείο του κανονικού χωρίου (regular domain). Εδώ το δυναμικό είναι ίσο σε τιμή και από τις δύο πλευρές δηλαδή:

$$D^{-} = D^{+} \quad (2.26)$$

Καθώς η εφαπτομενική μεταβολή είναι ίση με βάση την εξίσωση (2.25) ανεξαρτήτως σημείου ανάπτυξης της σειράς Taylor προκύπτει $[[u]] = 0$ για ανοιχτές επιφάνειες.

Για κλειστές (ιδιάζουσες) επιφάνειες γεννάται το ερώτημα επιλογής της τιμής του βαθμωτού δυναμικού με βάση την εσωτερική ή την εξωτερική πλευρά (ανάλογα με το πρόβλημα). Χωρίς βλάβη της γενικότητας θα μπορούσε να απαιτηθεί $D^{-} = D^{+}$. Αυτό μπορεί να εφαρμοστεί χωρίς να επηρεαστεί η τιμή του ∇u σε οποιοδήποτε σημείο, και είναι μαθηματικά βολικό καθώς οδηγεί και πάλι στη συνθήκη συνέχειας του βαθμωτού δυναμικού $[[u]] = 0$.

Η επίδραση κάθε σφαίρας στο μαγνητικό πεδίο είναι τοπική επομένως το μαγνητικό πεδίο πρέπει να μηδενίζεται ασυμπτωτικά εφόσον δεν υπάρχει κάποιο άλλο εξωτερικό πεδίο:

$$\lim_{||\mathbf{x}|| \rightarrow \infty} \mathbf{H} = 0 \quad (2.27)$$

Η τιμή του βαθμωτού δυναμικού προσεγγίζοντας ασυμπτωτικά το άπειρο δεν επηρεάζει τη λύση του προβλήματος και θα μπορούσε να επιλεγεί:

$$\lim_{\|\mathbf{x}\| \rightarrow \infty} u = 0 \quad (2.28)$$

Σημειώνεται ότι:

$$\|\mathbf{x}\| = \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 = (x - x_0, y - y_0, z - z_0) \quad (2.29)$$

όπου:

$$\mathbf{x}_0 = (x_0, y_0, z_0) \quad (2.30)$$

οι συντεταγμένες του κέντρου μιας μαγνητικής σφαίρας (η θέση του κέντρου των σφαιρών δεν έχει επίδραση ασυμπτωτικά).

Όσotόο όπως θα συζητηθεί αναλυτικά παρακάτω χρειάζεται ιδιαίτερη προσοχή στην επιλογή της ασυμπτωτικής συνοριακής συνθήκης καθώς και της διάστασης του χωρίου που περικλύεται από το ασυμπτωτικό σύνορο στη περίπτωση της αριθμητικής επίλυσης του προβλήματος. Όπως γίνεται κατανοητό το χωρίο που περικλύεται από το εξωτερικό ασυμπτωτικό σύνορο κατά την αριθμητική επίλυση πρέπει να έχει πεπερασμένες διαστάσεις και να μην αυξάνει υπερβολικά το υπολογιστικό κόστος (λόγω αύξησης του πλήθους των βαθμών ελευθερίας).

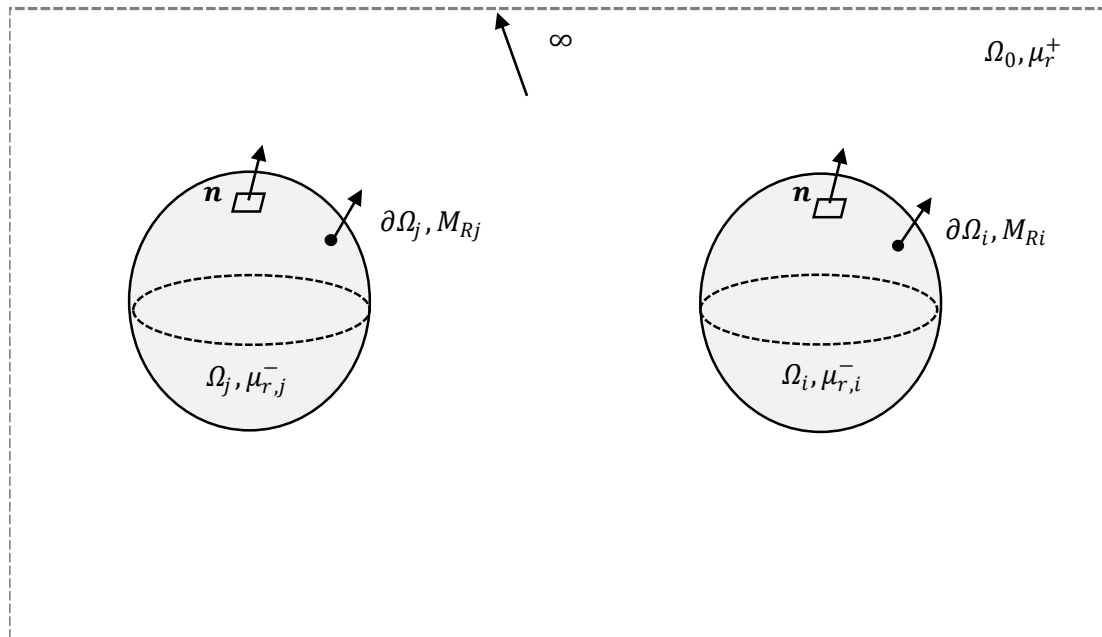
Σε αυτό το σημείο είμαστε σε θέση να διατυπώσουμε το πρόβλημα συνοριακών τιμών που διέπει την μαγνητική αλληλεπίδραση των δύο μαγνητικών σφαιρών απουσία κάποιου άλλου εξωτερικού πεδίου (σχήμα 2.1):

$$\left\{ \begin{array}{ll} \nabla \cdot (\mu_{r,i}^- \nabla u) = 0, & \mathbf{x} \in \Omega_i \\ \nabla \cdot (\mu_{r,j}^- \nabla u) = 0, & \mathbf{x} \in \Omega_j \\ \nabla \cdot (\mu_r^+ \nabla u) = 0, & \mathbf{x} \in \Omega_0 \\ \mathbf{n} \cdot \mu_{r,i}^- \nabla u^- - \mathbf{n} \cdot \mu_r^+ \nabla u^+ = \mathbf{n} \cdot \mathbf{M}_{Ri}, & \mathbf{x} \in \partial\Omega_i \\ \mathbf{n} \cdot \mu_{r,j}^- \nabla u^- - \mathbf{n} \cdot \mu_r^+ \nabla u^+ = \mathbf{n} \cdot \mathbf{M}_{Rj}, & \mathbf{x} \in \partial\Omega_j \\ u^- = u^+, & \mathbf{x} \in \partial\Omega_i \\ u^- = u^+, & \mathbf{x} \in \partial\Omega_j \\ u = 0 & \|\mathbf{x}\| \rightarrow \infty \end{array} \right. \quad (2.31)$$

Τα κέντρα των σφαιρών παραμετροποιούνται ως προς τη x συνιστώσα με βάση τη διακεντρική απόσταση δ :

$$\mathbf{x}_{0,1} = \left(-\frac{\delta}{2}, 0, 0\right), \quad \mathbf{x}_{0,2} = \left(\frac{\delta}{2}, 0, 0\right), \quad \delta > 0 \quad (2.32)$$

Όπως και στην αναλυτική λύση διπόλου-διπόλου η μαγνητική δύναμη αναμένεται να είναι ισχυρή συνάρτηση της απόστασης δ .



Σχήμα 2.1 Οι δύο συμπαγείς μαγνητικές σφαίρες τοποθετημένες στον άπειρο χώρο Ω_0 .

Υπολογισμός μαγνητικής δύναμης

Σε προβλήματα όπου εμφανίζονται ασυνέχειες στις ιδιότητες των υλικών, δηλαδή ύπαρξη επιφανειών εκατέρωθεν των οποίων μεταβάλλονται φυσικές ιδιότητες όπως η μαγνητική διαπερατότητα και η μόνιμη μαγνήτιση ενδείκνυται η χρήση του τανυστή Maxwell για τον αξιόπιστο υπολογισμό της μαγνητικής δύναμης που ασκείται σε αντικείμενο ενδιαφέροντος [26,27]. Στη περίπτωση μας το αντικείμενο ενδιαφέροντος είναι ολόκληρες οι σφαίρες όγκων Ω_i, Ω_j αντίστοιχα.

Για ένα υλικό σημείο του χώρου ο υπολογισμός της δύναμης με βάση τον τανυστή Maxwell γίνεται ως εξής:

$$\mathbf{f}_m = \nabla \cdot \mathbf{T} \quad (2.33)$$

Η συνολική δύναμη που θα ασκείται στη σφαίρα θα είναι:

$$\mathbf{F}_m = \int_{\Omega} \mathbf{f}_m dV = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{T} dV \quad (2.34)$$

Εφαρμόζοντας το θεώρημα της απόκλισης (ή Gauss) η εξίσωση (2.33) γίνεται:

$$\mathbf{F}_m = \oint_{\partial\Omega} \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} dS \quad (2.35)$$

Για το πρόβλημα αλληλεπίδρασης μαγνητικών σφαιρών (μαγνητοστατικό, απουσία ελεύθερων ρευμάτων) τα στοιχεία του τανυστή Maxwell είναι:

$$T_{ij} = \frac{B_i B_j}{\mu_0} - \delta_{ij} \frac{|B|^2}{2\mu_0} \quad (2.36)$$

όπου τα $i, j = 1, 2, 3$ αντιστοιχούν στις x, y, z συνιστώσες και δ_{ij} το Kronecker delta.

Ο ταυοστής Maxwell υπολογίζεται στην εξωτερική πλευρά της επιφάνειας δηλαδή στο κενό μέσο επομένως:

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \quad (2.37)$$

Με αντικατάσταση της (2.37) στην (2.36) προκύπτει:

$$T_{ij} = \mu_0 H_i H_j - \frac{1}{2} \mu_0 \delta_{ij} |H|^2 \quad (2.38)$$

Υιοθετώντας και πάλι το συμβολισμό α^-, α^+ για τον υπολογισμό μεγεθών εκατέρωθεν της επιφάνειας των σφαιρών υπολογίζονται οι συνιστώσες της συνολικής μαγνητικής δύναμης που ασκείται σε μια σφαίρα. Υπενθυμίζεται ότι λόγω δράσης-αντίδρασης οι δυνάμεις που ασκούνται σε κάθε σφαίρα είναι ίσες κατά μέτρο με αντίθετο αλγεβρικό πρόσημο.

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{m,x} &= \oint_{\partial\Omega} \mathbf{T}_x^+ \cdot \mathbf{n}^+ dS = \oint_{\partial\Omega} (T_{xx}^+ n_x^+ + T_{xy}^+ n_y^+ + T_{xz}^+ n_z^+) dS \Rightarrow \\ \mathbf{F}_{m,x} &= \oint_{\partial\Omega} \left(\left(\mu_0 H_x^+ H_x^+ - \frac{1}{2} \mu_0 |H^+|^2 \right) n_x^+ + \mu_0 H_x^+ H_y^+ n_y^+ + \mu_0 H_x^+ H_z^+ n_z^+ \right) dS \Rightarrow \\ \mathbf{F}_{m,x} &= \mu_0 \oint_{\partial\Omega} \left(\frac{1}{2} \left((H_x^+)^2 - (H_y^+)^2 - (H_z^+)^2 \right) n_x^+ + H_x^+ H_y^+ n_y^+ + H_x^+ H_z^+ n_z^+ \right) dS \quad (2.39) \end{aligned}$$

Με αντίστοιχο τρόπο προκύπτουν:

$$\mathbf{F}_{m,y} = \oint_{\partial\Omega} \mathbf{T}_y^+ \cdot \mathbf{n}^+ dS \Rightarrow$$

$$\mathbf{F}_{m,y} = \mu_0 \oint_{\partial\Omega} \left(H_y^+ H_x^+ n_x^+ + \frac{1}{2} \left((H_y^+)^2 - (H_x^+)^2 - (H_z^+)^2 \right) n_y^+ + H_y^+ H_z^+ n_z^+ \right) dS \quad (2.40)$$

$$\mathbf{F}_{m,z} = \oint_{\partial\Omega} \mathbf{T}_z^+ \cdot \mathbf{n}^+ dS \Rightarrow$$

$$\mathbf{F}_{m,z} = \mu_0 \oint_{\partial\Omega} \left(H_z^+ H_x^+ n_x^+ + H_z^+ H_y^+ n_y^+ + \frac{1}{2} \left((H_z^+)^2 - (H_x^+)^2 - (H_y^+)^2 \right) n_z^+ \right) dS \quad (2.41)$$

2.2 Μεταβολικές διατυπώσεις

Για την επίλυση του προβλήματος στο περιβάλλον του FEniCS απαιτείται η διατύπωση των πεδιακών εξισώσεων σε μεταβολική μορφή όπως ορίζει η μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων.

Έστω η βαθμωτή συναρτησιακή βάση (test function) $v \in V$ όπου V κάποιος χώρος Πεπερασμένων Στοιχείων (Finite Element Space) και u η άγνωστη συνάρτηση (trial function) του βαθμωτού μαγνητικού δυναμικού. Η μεταβολική μορφή των πεδιακών εξισώσεων του προβλήματος συνοριακών τιμών (2.31) είναι:

$$\int_{\Omega_i} \nabla \cdot (\mu_{r,i}^- \nabla u) v dx + \int_{\Omega_j} \nabla \cdot (\mu_{r,j}^- \nabla u) v dx + \int_{\Omega_0} \nabla \cdot (\mu_r^+ \nabla u) v dx = 0 \quad (2.42)$$

Εφαρμόζοντας το θεώρημα Gauss η εξίσωση (2.42) παίρνει τη μορφή:

$$\begin{aligned} & - \int_{\Omega_i} \mu_{r,i}^- (\nabla u \cdot \nabla v) dx - \int_{\Omega_j} \mu_{r,j}^- (\nabla u \cdot \nabla v) dx - \int_{\Omega_0} \mu_r^+ (\nabla u \cdot \nabla v) dx + \int_{\partial\Omega_i} \mu_{r,i}^- (\mathbf{n}^- \cdot \nabla u^-) v^- dS \\ & + \int_{\partial\Omega_j} \mu_{r,j}^- (\mathbf{n}^- \cdot \nabla u^-) v^- dS + \int_{\partial\Omega_i} \mu_r^+ (\mathbf{n}^+ \cdot \nabla u^+) v^+ dS + \int_{\partial\Omega_i} \mu_r^+ (\mathbf{n}^+ \cdot \nabla u^+) v^+ dS = 0 \end{aligned} \quad (2.43)$$

Για το κάθετο διάνυσμα προς το εξωτερικό της επιφάνειας των σφαιρών ισχύει:

$$\mathbf{n} \equiv \mathbf{n}^-, \mathbf{n}^+ = -\mathbf{n}^- \quad (2.44)$$

Ο συναρτησιακός χώρος V πρέπει να περιλαμβάνει συνεχείς συναρτήσεις προκειμένου να ικανοποιείται η συνθήκη της συνέχειας του βαθμωτού δυναμικού στην επιφάνεια των σφαιρών. Επομένως και οι συναρτήσεις βάσης θα είναι συνεχείς στην επιφάνεια:

$$v^- = v^+ \quad (2.45)$$

Η εξίσωση (2.42) μπορεί να λάβει τη μορφή:

$$\begin{aligned}
& - \int_{\Omega_i} \mu_{r,i}^- (\nabla u \cdot \nabla v) dx - \int_{\Omega_j} \mu_{r,j}^- (\nabla u \cdot \nabla v) dx - \int_{\Omega_0} \mu_r^+ (\nabla u \cdot \nabla v) dx \\
& + \int_{\partial\Omega_i} \left(\mu_{r,i}^- (\mathbf{n}^- \cdot \nabla u^-) - \mu_r^+ (\mathbf{n}^- \cdot \nabla u^+) \right) v^- dS \\
& + \int_{\partial\Omega_j} \left(\mu_{r,j}^- (\mathbf{n}^- \cdot \nabla u^-) - \mu_r^+ (\mathbf{n}^- \cdot \nabla u^+) \right) v^- dS = 0
\end{aligned} \tag{2.46}$$

Η τελική μεταβολική μορφή των πεδιακών εξισώσεων εισάγοντας τις συνοριακές συνθήκες του προβλήματος είναι:

$$\begin{aligned}
& - \int_{\Omega_i} \mu_{r,i}^- (\nabla u \cdot \nabla v) dx - \int_{\Omega_j} \mu_{r,j}^- (\nabla u \cdot \nabla v) dx - \int_{\Omega_0} \mu_r^+ (\nabla u \cdot \nabla v) dx \\
& + \int_{\partial\Omega_i} (\mathbf{n}^- \cdot \mathbf{M}_{Ri}) v^- dS + \int_{\partial\Omega_j} (\mathbf{n}^- \cdot \mathbf{M}_{Rj}) v^- dS = 0, \quad \forall v \in V
\end{aligned} \tag{2.47}$$

Μετά τον υπολογισμό του βαθμωτού δυναμικού u εφαρμόζεται η διαδικασία προβολής (projection) [1] για τον υπολογισμό των \mathbf{H}, \mathbf{B} .

Έστω \mathbf{Z} ένας διανυσματικός συναρτησιακός χώρος Πεπερασμένων Στοιχείων και $\mathbf{q} \in \mathbf{Z}$ μια διανυσματική συναρτησιακή βάση. Σε μεταβολική μορφή η διαδικασία προβολής για το \mathbf{H} γράφεται:

$$\langle \mathbf{H}, \mathbf{v} \rangle = \langle -\nabla u, \mathbf{v} \rangle, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{Z} \tag{2.48}$$

ή

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega_i} \mathbf{H} \cdot \mathbf{v} dx + \int_{\Omega_j} \mathbf{H} \cdot \mathbf{v} dx + \int_{\Omega_0} \mathbf{H} \cdot \mathbf{v} dx = \\
& \int_{\Omega_i} -\nabla u \cdot \mathbf{v} dx + \int_{\Omega_j} -\nabla u \cdot \mathbf{v} dx + \int_{\Omega_0} -\nabla u \cdot \mathbf{v} dx
\end{aligned} \tag{2.49}$$

Αντίστοιχα για το \mathbf{B} :

$$\langle \mathbf{B}, \mathbf{v} \rangle = \langle \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}), \mathbf{v} \rangle, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{Z} \quad (2.50)$$

ή

$$\int_{\Omega_i} \mathbf{B} \cdot \mathbf{v} \, dx + \int_{\Omega_j} \mathbf{B} \cdot \mathbf{v} \, dx + \int_{\Omega_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{v} \, dx =$$

$$\mu_0 \int_{\Omega_i} (-\mu_{r,i}^- \nabla u + \mathbf{M}_{Ri}) \cdot \mathbf{v} \, dx + \mu_0 \int_{\Omega_j} (-\mu_{r,j}^- \nabla u + \mathbf{M}_{Rj}) \cdot \mathbf{v} \, dx + \mu_0 \int_{\Omega_0} -\nabla u \cdot \mathbf{v} \, dx \quad (2.51)$$

Ο υπολογισμός της μαγνητικής δύναμης εφόσον είναι ήδη σε ολοκληρωτική μορφή μπορεί να γίνει απευθείας, χωρίς την απαίτηση για προβολή σε χώρο Πεπερασμένων Στοιχείων, με βάση τις εκφράσεις (2.39), (2.40), (2.41).

2.3 Εφαρμογή στο FEniCS

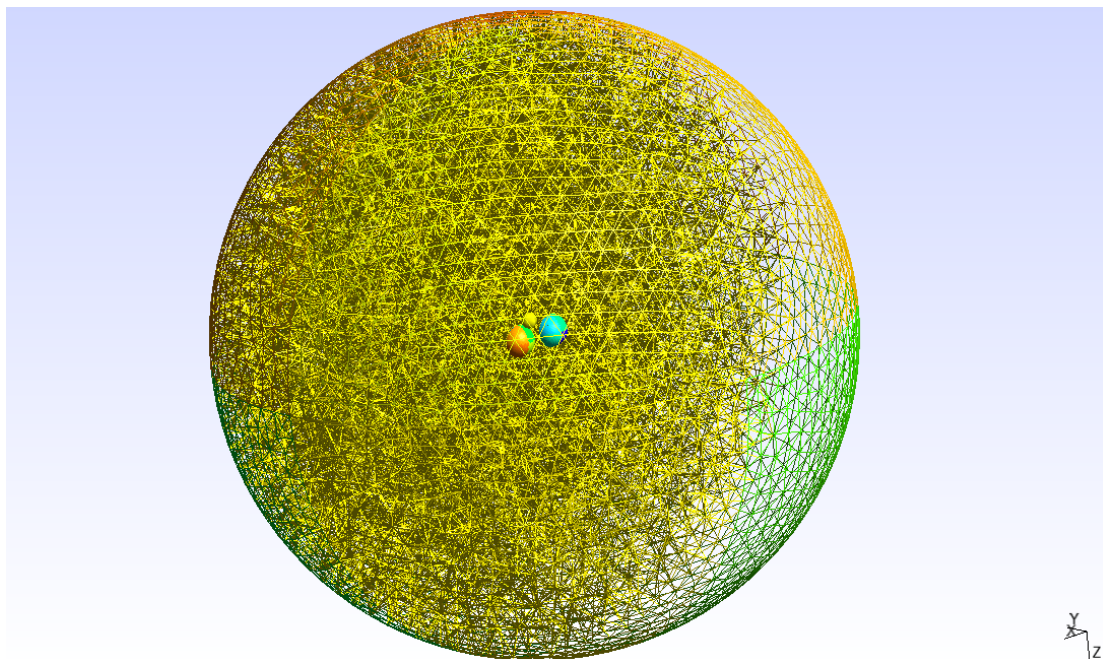
Σε αυτή τη παράγραφο περιγράφεται αναλυτικά η γέννηση του υπολογιστικού πλέγματος με εξωτερικό λογισμικό και η κατάστρωση του υπολογιστικού κώδικα σε γλώσσα python για την επίλυση του προβλήματος με το λογισμικό FEniCS. Το FEniCS έχει το πλεονέκτημα ότι ο υπολογιστικός κώδικας σε γλώσσα python/C++ παραμένει αρκετά συμπαγής, σύντομος και κοντά στο μαθηματικό πρόβλημα. Στη περίπτωση ενός γραμμικού προβλήματος ο χρήστης πρέπει να εισάγει το υπολογιστικό πλέγμα, τις συνοριακές συνθήκες Dirichlet, το πρόβλημα σε μεταβολική μορφή και να καλέσει ένα από τους διαθέσιμους γραμμικούς επιλύτες. Η κλήση του επιλύτη μπορεί να γίνει είτε με την ελεύθερη συνάρτηση solve που προσφέρει το DOLFIN είτε με τη κλάση LinearVariationalSolver. Στη δεύτερη περίπτωση παρέχονται περισσότερες δυνατότητες για τον έλεγχο των παραμέτρων της σύγκλισης και στην επιλογή των γραμμικών επιλυτών και προσταθεροποιητών (preconditioners). Ανάλογα με την επιλογή του πακέτου γραμμικής άλγεβρας που θα χρησιμοποιηθεί υπάρχει αντίστοιχα και ένα πλήθος από διαθέσιμους επιλύτες και προσταθεροποιητές. Περισσότερες πληροφορίες μπορούν να βρεθούν στο παράρτημα Δ.

Κατασκευή γεωμετρίας και υπολογιστικού πλέγματος με το λογισμικό Gmsh

Το FEniCS παρέχει στο χρήστη μεγάλο έλεγχο ως προς την κατάστρωση των μερικών διαφορικών εξισώσεων, την επιλογή προσταθεροποιητών, επιλυτών, υπολογισμό συναρτήσεων (function evaluations) καθώς και μεταεπεξεργασία (post-processing) της λύσης. Ωστόσο οι δυνατότητες του ως προς τη παραγωγή πλεγμάτων περιορίζονται προς το παρόν σε απλές δι-διάστατες και τρι-διάστατες γεωμετρίες (τετράπλευρα, κύβους) ενώ ο έλεγχος της πύκνωσης δεν είναι τόσο εύχρηστος. Γι' αυτό το λόγο όπως αναφέρεται και στην επίσημη βιβλιογραφία είναι προτιμότερο να χρησιμοποιηθεί ένα εξωτερικό λογισμικό για την παραγωγή και τον έλεγχο του πλέγματος. Στη παρούσα εργασία επιλέγεται το λογισμικό Gmsh.

Το Gmsh μπορεί να παράγει τρι-διάστατα πλέγματα πεπερασμένων στοιχείων παρέχοντας εσωτερικά σχεδιαστικά εργαλεία τύπου CAD διατηρώντας όσο το δυνατόν ένα φιλικό περιβάλλον προς το χρήστη [28]. Εκτός από το γραφικό περιβάλλον παρέχει τη δυνατότητα κατασκευής πλεγμάτων με προγραμματιστικά εργαλεία σε αρχεία εισόδου (input txt files). Ο χρήστης μπορεί να επεξεργαστεί αρχεία πλεγμάτων και να τροποποιήσει τη γεωμετρία ή τη διαδικασία κατασκευής του πλέγματος. Αυτή είναι μια εξαιρετικά χρήσιμη δυνατότητα για

σύνθετες γεωμετρίες ή επαναλαμβανόμενες γεωμετρικές δομές. Τα προγραμματιστικά εργαλεία του λογισμικού αξιοποιήθηκαν για τη γέννηση του τρι-διάστατου πλέγματος στη γεωμετρία του προβλήματος αλληλεπίδρασης σφαιρών.



Σχήμα 2.2. Το τρι-διάστατο υπολογιστικό πλέγμα όπως δημιουργήθηκε με το λογισμικό Gmsh.

Το αρχείο εισόδου για τη δημιουργία της γεωμετρίας, του πλέγματος καθώς και το μαρκάρισμα των φυσικών επιφανειών και όγκων των σφαιρών του υπολογιστικού προβλήματος μπορεί να βρεθεί στο παράρτημα Γ. Το τρι-διάστατο υπολογιστικό πλέγμα παρουσιάζεται στο σχήμα 2.2. Η κατάληξη του αρχείου πλέγματος είναι της μορφής *.msh* και θα πρέπει να γίνει κατάλληλη μετατροπή για την εισαγωγή του στο FEniCS. Η μετροτροπή γίνεται σε αρχείο μορφής *.xml* με τη βοήθεια του DOLFIN και της παρακάτω εντολής σε περιβάλλον Linux:

Bash command: dolfin-convert filename.msh filename.xml

Το DOLFIN δημιουργεί τρία διαφορετικά αρχεία: ένα με το υπολογιστικό πλέγμα, ένα με τις πληροφορίες για τα ορισμένα φυσικά υποχωρία (subdomains) και ένα με τις πληροφορίες για τα φυσικά σύνορα (boundaries) του προβλήματος.

Επειδή η γεωμετρία (και ως αποτέλεσμα το υπολογιστικό πλέγμα) μεταβάλλεται καθώς μεταβάλλεται η διακεντρική απόσταση δ πρέπει να κατασκευαστεί ένα αρκετά μεγάλο πλήθος αρχείων για τη παραμετρική μελέτη του προβλήματος. Προκειμένου να αυτοματοποιηθεί καλύτερα η διαδικασία και να επιτρέπεται η παράλληλη προσπέλαση των αρχείων ακολουθεί μια επαναληπτική σειριακή διαδικασία συμπίεσης. Τα αρχεία που αντιστοιχούν στην ίδια διακεντρική απόσταση των σφαιρών και περιέχουν τις πληροφορίες για το πλέγμα, τα υποχωρία και τα σύνορα συμπιέζονται σε ένα αρχείο μορφής *.hdf* (γραμμές 11-19):

```

1  from dolfin import*
2
3  num_steps=1
4  file_number=10
5  for n in range(num_steps):
6
7      filename="r_%s.xml" % file_number
8
9      mesh = Mesh(filename)
10
11     filename="r_%s_physical_region.xml" % file_number
12     subdomains = MeshFunction("size_t", mesh, filename)
13     filename="r_%s_facet_region.xml" % file_number
14     boundaries = MeshFunction("size_t", mesh, filename)
15     filename="r_%s.h5" % file_number
16     hdf = HDF5File(mesh.mpi_comm(), filename, "w")
17     hdf.write(mesh, "/mesh")
18     hdf.write(subdomains, "/subdomains")
19     hdf.write(boundaries, "/boundaries")
20
21     file_number+=1
22

```

Υπολογιστικός κώδικας

Ακολουθεί αναλυτική παρουσίαση του υπολογιστικού κώδικα για την επίλυση του προβλήματος με το FEniCS.

```

1  from dolfin import *
2  import numpy as np
3  import multiprocessing
4
5  #timings
6  timer1=Timer()
7  timer1.start()
8
9  def force_calculation(file_number,comm=mpi_comm_world()):
10
11     #share boundary facets for parallel processing
12     parameters["ghost_mode"] = "shared_facet"
13
14     #import mesh from hdf5 file for parallel processing
15     mesh = Mesh()
16
17     filename="r_%s.h5" % file_number
18     hdf = HDF5File(mesh.mpi_comm(), filename, "r")
19     hdf.read(mesh, "/mesh", False)
20
21     #import subdomains and boundaries
22     subdomains = MeshFunction("size_t", mesh, mesh.topology().dim())
23     hdf.read(subdomains, "/subdomains")
24     boundaries = MeshFunction("size_t", mesh, mesh.topology().dim()-1)
25     hdf.read(boundaries, "/boundaries")
26
27     vtkFile=File("subdomains.pvd")
28     vtkFile<<subdomains
29
30     vtkFile=File("boundaries.pvd")
31     vtkFile<<boundaries
32

```

Γραμμές 1-3: Κλήση απαραίτητων βιβλιοθηκών. Γραμμή 9: Ορισμός επιλύτη προβλήματος ως συνάρτηση python με εισόδους τον αριθμό του αρχείου hdf που αντιστοιχεί στη τρέχουσα γεωμετρία και του MPI communicator για παράλληλη επεξεργασία. Γραμμή 12: Ρύθμιση

παραμέτρου για επικοινωνία μεταξύ των επεξεργαστών όταν εφαρμόζεται ολοκλήρωση σε εσωτερικές ακμές. Γραμμές 14-25: Εισαγωγή αρχείου που περιέχει τις πληροφορίες του πλέγματος, των υποχωρίων και των συνόρων. Μετατροπή αυτών στα απαραίτητα αντικείμενα (κλάσεις). Γραμμές 27-31: Εξαγωγή των μαρκαρισμένων υποχωρίων και συνόρων σε μορφή αρχείου κατάληξης .vtk για οπτικοποίηση.

Python Code

```

33 ##### Geometric constants #####
34
35 #sphere radius
36 rs=0.0015 # [m]
37
38 # sphere 1 center point coordinates
39 x1s=-(file_number)*0.5*(1e-04) #[m]
40 y1s=0. #[m]
41 z1s=0. # [m]
42 # sphere 2 center point coordinates
43 x2s=-x1s #[m]
44 y2s=0. #[m]
45 z2s=0.
46
47 # sphere's volume
48 Vs=(4./3)*pi*rs**3 #[m^3]
49
50 ##### magnetic constants #####
51 a1=3.273056e-02 # [Am^2/T]
52 a2=3.250118e-02 # [Am^2/T]
53 mr_1=1.0576e-04 # [Am^2] magnetic moment of sphere 1
54 mr_2=1.4019e-04 # [Am^2] magnetic moment of sphere 2
55 m0=1.257e-06 # [H/m] permeability of empty space
56
57 # magnetic moment vector x,y,z component analysis
58 theta1=(0./360)*2*pi
59 theta2=(0./360)*2*pi
60
61 theta3=(0./360)*2*pi
62 theta4=(0./360)*2*pi
63
64 mr_1x=mr_1*cos(theta1)*cos(theta2) # [Am^2]
65 mr_1y=mr_1*sin(theta1) # [Am^2]
66 mr_1z=mr_1*cos(theta1)*sin(theta2) # [Am^2]
67 mr_2x=mr_2*cos(theta3)*cos(theta4) # [Am^2]
68 mr_2y=mr_2*sin(theta3) # [Am^2]
69 mr_2z=mr_2*cos(theta3)*sin(theta4) # [Am^2]
70
71 # susceptibility
72 x01=a1*m0/Vs
73 x02=a2*m0/Vs
74
75 #permanent magnetizations
76 M1=mr_1/Vs # [A/m]
77 M2=mr_2/Vs # [A/m]
78
79 #relative permeability of spheres
80 mr_minus1=1. +x01
81 mr_minus2=1. +x02
82
83 #relative permeability of air
84 mr_plus=1.
85

```

Γραμμές 33-84: Ορισμός απαραίτητων γεωμετρικών και φυσικών παραμέτρων.

```

86 #define scalar Function Space
87 V=FunctionSpace(mesh,"Lagrange",2)
88
89 # wrap remanent magnetizations into expressions
90 MR_1=Expression(("mr_1x/Vs","mr_1y/Vs","mr_1z/Vs")\
91 ,mr_1x=mr_1x,mr_1y=mr_1y,mr_1z=mr_1z,Vs=Vs,degree=2)
92 MR_2=Expression(("mr_2x/Vs","mr_2y/Vs","mr_2z/Vs")\
93 ,mr_2x=mr_2x,mr_2y=mr_2y,mr_2z=mr_2z,Vs=Vs,degree=2)
94
95 # magnetic dipole-dipole potential
96 expr=Expression(" (1/(4*pi))*((x[0]-x01)*mr_1x \
97 +x[1]*mr_1y+x[2]*mr_1z )/pow( (pow((x[0]-x01),2)\
98 +pow((x[1]),2)+pow((x[2]),2) ),1.5 ) ) \
99 +(1/(4*pi))*((x[0]-x01)*mr_2x +x[1]*mr_2y\
100 +x[2]*mr_2z )/pow( (pow((x[0]-x02),2)+pow((x[1]),2)\
101 +pow((x[2]),2) ),1.5 ) )" ,mr_1x=mr_1x,mr_1y=mr_1y,mr_1z=mr_1z,\
102 mr_2x=mr_2x,mr_2y=mr_2y,mr_2z=mr_2z,x02=x2s,x01=x1s,degree=2)
103
104 # expr=Expression("0.", degree=2)
105
106 #unitnormal vector
107 n=FacetNormal(mesh)
108
109 # Dirichlet boundary conditions far away from the spheres
110 bcs=DirichletBC(V,expr,boundaries,1)
111
112 # respect subdomains and interior interfaces using data from gmsh
113 dS = Measure('dS', domain=mesh, subdomain_data=boundaries)
114 dx=Measure('dx', domain=mesh, subdomain_data=subdomains)
115
116 #Test Function
117 v=TestFunction(V)
118
119 ##Trial Function
120 u=Function(V)
121

```

Γραμμές 86-87: Ορισμός βαθμωτής συναρτησιακής βάσης για το βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό τύπου Lagrange δευτέρου βαθμού (διεξοδική μελέτη για την επιλογή των συναρτήσεων βάσης γίνεται στο επόμενο κεφάλαιο). Γραμμές 89-93: Εκφράσεις για τα διανύσματα μόνιμης μαγνήτισης των σφαιρών. Γραμμές 96-104: Ορισμός εκφράσεων για το βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό που θα χρησιμοποιηθούν ως συνοριακές συνθήκες στο ασυμπτωτικό σύνορο (τύπου διπόλου-διπόλου ή μηδενική τιμή). Γραμμές 106-107: Ορισμός κάθετου διανύσματος. Γραμμές 109-110: Ορισμός συνοριακών συνθηκών Dirichlet στο εξωτερικό (ασυμπτωτικό) σύνορο. Ορισμός μέτρων ολοκλήρωσης για τις μεταβολικές διατυπώσεις με είσοδο τις πληροφορίες για τα φυσικά υποχωρία και σύνορα (εσωτερικές και εξωτερικές επιφάνειες). Τα φυσικά υποχωρία και σύνορα είναι μαρκαρισμένα με ακέραιους αριθμούς. Γραμμές 116-120: Ορισμός απαραίτητων συναρτήσεων (με βάση το συμβολισμό της παραγράφου 2.2).

```

122 #variational formulation
123 F= -Constant(mr_minus1)*inner(grad(u),grad(v))*dx(1)\
124 -Constant(mr_minus2)*inner(grad(u),grad(v))*dx(2) \
125 -Constant(mr_plus)*inner(grad(u),grad(v))*dx(3) \
126 +inner(n('+'),MR_1)*v('+')*dS(2) \
127 +inner(n('+'),MR_2)*v('+')*dS(3)
128
129
130 # get lhs, rhs
131 a, L=lhs(F), rhs(F)
132 u=Function(V)

```

Γραμμές 122-127: Μεταβολική διατύπωση (εξίσωση 2.47). Οι παράμετροι εισάγονται ως σταθερές (Constant) για την επιτάχυνση της μεταγλώττισης του κώδικα. Σε αυτό το σημείο γίνεται η εξής επισήμανση. Το πρόσημο που αντιστοιχεί στην επιλογή των ασυνεχών μεγεθών εκατέρωθεν της επιφάνειας των σφαιρών στους συνοριακούς όρους είναι αντίθετο σε σχέση με αυτό που παρουσιάστηκε στις παραγράφους 2.1, 2.2 (+ αντί -). Αυτό συμβαίνει διότι το FEniCS συμβολίζει με (+) το κάθετο διάνυσμα στην επιφάνεια που δείχνει προς το υποχωρίο μαρκαρισμένο με το μεγαλύτερο ακέραιο. Εδώ το υποχωρίο μαρκαρισμένο με το μεγαλύτερο ακέραιο είναι το κενό μέσο (id=3) επομένως το κάθετο διάνυσμα στο εξωτερικό της επιφάνειας συμβολίζεται με n^+ και όχι με n^- . Γραμμές 130-131: Αυτόματη εξαγωγή διγραμμικών και γραμμικών όρων της μεταβολικής διατύπωσης για τη κατασκευή του γραμμικού αλγεβρικού συστήματος. Γραμμή 132: Δημιουργία συνάρτησης για την αποθήκευση της λύσης για το βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό.

Python Code

```

135     prm = parameters.krylov_solver # short form
136     prm.absolute_tolerance = 1E-10
137     prm.relative_tolerance = 1E-9
138     prm.maximum_iterations = 1000
139
140     # solve linear variational problem
141     solve(a==L,u,bcs,solver_parameters={'linear_solver':'gmres',
142     'preconditioner':'hypr_euclid'})
143

```

Γραμμές 135-138: Ρύθμιση παραμέτρων επαληπτικού επιλύτη υποχώρων Krylov. Γραμμές 141-142: Κλήση συνάρτησης επίλυσης. Ως επαναληπτικός επιλύτης Krylov χρησιμοποιείται η μέθοδος GMRES (Generalized Minimal Residual) ενώ ως προσταθεροποιητής η παράλληλη υλοποίηση της μεθόδου μερικής παραγοντοποίησης (parallel incomplete factorization) hypr_euclid. Να τονιστεί ότι το μητρώο που προκύπτει από τη διακριτοποίηση θα είναι συμμετρικό επομένως μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως επαναληπτικός επιλύτης και ο Conjugate Gradient (CG).

Python Code

```

144     umax=norm(u.vector(),'linf')
145     # print max value of scalar potential
146     if MPI.rank(mpi_comm_world()) == 0:
147         print ("umax",umax)
148
149     # Save solution for scalar potential
150     filename="magn_potential_%s.pvd" % file_number
151
152     vtkFile=File(filename)
153     vtkFile<<u
154
155     filename="magn_potential_%s.h5" % file_number
156     output_file = HDF5File(mesh.mpi_comm(),filename,"w")
157     output_file.write(u, "potential")
158     output_file.close()
159

```

Γραμμή 144: Υπολογισμός μέγιστης τιμής βαθμωτού μαγνητικού δυναμικού. Γραμμές 152-158: Αποθήκευση λύσης.

```

160 #Krylov solver parameters
161 prm = parameters.krylov_solver # short form
162 prm.absolute_tolerance = 1E-12
163 prm.relative_tolerance = 1E-8
164 prm.maximum_iterations = 1000
165
166 #discontinuous function space for the vector fields H,B
167 Z=VectorFunctionSpace(mesh,"DG",1)
168
169 #H field projection
170 H=project(-grad(u),Z,solver_type="gmres",\
171 preconditioner_type="hypr_euclid")
172
173 # Save solution for H field
174 filename="H_field_%s.pvd" % file_number
175 vtkFile=File(filename)
176 vtkFile<<H
177
178 Hmax=norm(H.vector(),'linf')
179
180 #print max (abs) value of H field
181 if MPI.rank(mpi_comm_world()) == 0:
182     print ("Hmax",Hmax)
183

```

Γραμμές 160-164: Ρύθμιση παραμέτρων επαληπτικού επιλύτη υποχώρων Krylov για τον υπολογισμό του μαγνητικού πεδίου H . Γραμμές 166-167: Ορισμός διανυσματικής συναρτησιακής βάσης (ασυνεχείς συναρτήσεις βάσης 1^{ης} τάξης, πληροφορίες στο επόμενο κεφάλαιο). Γραμμές 169-170: Χρήση της αυτόματης μεθόδου προβολής για τον υπολογισμό του H .

```

184
185 # Dirichlet boundary conditions
186 bcs=[]
187
188 # respect subdomains and interior interfaces using data from gmsh
189 dS = Measure('dS', domain=mesh, subdomain_data=boundaries)
190 dx=Measure('dx', domain=mesh, subdomain_data=subdomains)
191
192 #Test Function
193 v=TestFunction(Z)
194
195 ##Trial Function
196 B=TrialFunction(Z)
197
198 #variational formulation
199 F= inner(B,v)*dx(1)+inner(B,v)*dx(2)+inner(B,v)*dx(3)\
200 -Constant(m0)*(inner((-mr_minus1*grad(u)+MR_1),v)*dx(1) \
201 + inner((-mr_minus2*grad(u)+MR_2),v)*dx(2)+inner(-grad(u),v)*dx(3))
202
203 # get lhs, rhs
204 a, L=lhs(F), rhs(F)
205 B=Function(Z)

```

Γραμμές 197-200: Ορισμός μεταβολικών διατυπώσεων για τον υπολογισμό του B με τη μέθοδο της προβολής. Αποφεύγεται η χρήση της αυτοματοποιημένης μεθόδου project καθώς θα έπρεπε οι εκφράσεις των διανυσμάτων της μόνιμης μαγνήτισης να μετατραπούν σε μορφή Function με παρεμβολή ή προβολή.

```

206 #Krylov solver parameters
207 prm = parameters.krylov_solver # short form
208 prm.absolute_tolerance = 1E-10
209 prm.relative_tolerance = 1E-9
210 prm.maximum_iterations = 1000
211
212 # solve linear variational problem
213 solve(a=L,B,bcs,solver_parameters={'linear_solver':'gmres',
214 'preconditioner':'hypr_euclid'})
215
216 # Save solution for B field
217 filename="B_field_%s.pvd" % file_number
218 vtkFile=File(filename)
219 vtkFile<<B
220
221 Bmax=norm(B.vector(),'linf')
222
223 #print max value of B field
224 if MPI.rank(mpi_comm_world()) == 0:
225     print ("Bmax",Bmax)

```

Γραμμές 212-214: Κλήση συνάρτησης επίλυσης για τη πυκνότητα μαγνητικής ροής B .

```

227 # [ex, ey, ez] cartesian vector base
228 ex=as_vector([1,0,0])
229 ey=as_vector([0,1,0])
230 ez=as_vector([0,0,1])
231
232 # H components
233 Hx=inner(H,ex)
234 Hy=inner(H,ey)
235 Hz=inner(H,ez)
236
237 # unitnormal vector
238 n=FacetNormal(mesh)
239

```

Γραμμές 227-230: Ορισμός καρτεσιανής διανυσματικής βάσης. Γραμμές 232-235: Εξαγωγή συνιστωσών διανυσματικού πεδίου H .

```

240 # Force components (force acting from sphere 1 to sphere 2)
241 F1= Constant(m0)*( Constant(0.0)*dx + Constant(0.5)*((Hx('+')**2)\
242 - (Hy('+')**2) - (Hz('+')**2))*n[0]('+')*dS(2) \
243 + Hx('+')*Hy('+')*n[1]('+')*dS(2) + Hx('+')*Hz('+')*n[2]('+')*dS(2) )
244
245 F2= Constant(m0)*( Constant(0.0)*dx + Constant(0.5)*((Hy('+')**2)\
246 - (Hx('+')**2) - (Hz('+')**2))*n[1]('+')*dS(2) \
247 + Hx('+')*Hy('+')*n[0]('+')*dS(2) \
248 + Hy('+')*Hz('+')*n[2]('+')*dS(2) )
249
250 F3= Constant(m0)*( Constant(0.0)*dx + Constant(0.5)*((Hz('+')**2)\
251 - (Hx('+')**2) - (Hy('+')**2))*n[2]('+')*dS(2) \
252 + Hx('+')*Hz('+')*n[0]('+')*dS(2) + Hy('+')*Hz('+')*n[1]('+')*dS(2) )
253
254 # assemble surface integrals
255 Fx=assemble(F1)
256 Fy=assemble(F2)
257 Fz=assemble(F3)

```

```

259 # Force components (force acting from sphere 2 to sphere 1)
260 F1= Constant(m0)*( Constant(0.0)*dx + Constant(0.5)*((Hx('+')**2)\
261 - (Hy('+')**2)-(Hz('+')**2))*n[0]('+')*dS(3) \
262 + Hx('+')*Hy('+')*n[1]('+')*dS(3) + Hx('+')*Hz('+')*n[2]('+')*dS(3) )
263
264 F2= Constant(m0)*( Constant(0.0)*dx + Constant(0.5)*((Hy('+')**2)\
265 - (Hx('+')**2)-(Hz('+')**2))*n[1]('+')*dS(3) \
266 + Hx('+')*Hy('+')*n[0]('+')*dS(3) + Hy('+')*Hz('+')*n[2]('+')*dS(3) )
267
268 F3= Constant(m0)*( Constant(0.0)*dx + Constant(0.5)*((Hz('+')**2)\
269 - (Hx('+')**2)-(Hy('+')**2))*n[2]('+')*dS(3) \
270 + Hx('+')*Hz('+')*n[0]('+')*dS(3) + Hy('+')*Hz('+')*n[1]('+')*dS(3) )
271
272 # assemble surface integrals
273 Fx=assemble(F1)
274 Fy=assemble(F2)
275 Fz=assemble(F3)
276
277 return [Fx,Fy,Fz]
278 #return [umax,Hmax,Bmax]

```

Γραμμές 240-252, 259-270: Μεταβολικές διατυπώσεις των συνιστωσών της μαγνητικής δύναμης στη πρώτη και στη δεύτερη σφαίρα. Ο μεταγλωττιστής των μεταβολικών διατυπώσεων αναμένει υποχρεωτικά ολοκληρωτικούς όρους στα εσωτερικά χωρία (ολοκληρώνονται μηδενικοί όροι) για να αναγνωρίσει τις μεταβολικές μορφές. Γραμμές 254-257, 272-275: Υπολογισμός συνιστωσών μαγνητικής δύναμης.

```

279 # list of mesh files numbering
280 file_number=list(range(30,40,1))
281
282
283 # parametic sweep using multiprocessing module
284 pool = multiprocessing.Pool(processes=len(file_number))
285 res=pool.map(force_calculation,file_number)
286
287 pool.close()
288
289 force_results = np.asarray(res)
290
291 print(force_results)
292
293 #save force results to csv
294 np.savetxt('force_results.csv', force_results,fmt='%1.8e', delimiter=',')
295
296 timer1.stop()
297 if MPI.rank(mpi_comm_world()) == 0:
298     print 'time', timer1.elapsed()[0]

```

Γραμμές 280-281: Δημιουργία λίστας ακεραίας αρίθμησης για την παραμετρική επίλυση του προβλήματος με βάση τα αρχεία που περιέχουν τις πληροφορίες του πλέγματος. Γραμμές 283-287: Κλήση της βιβλιοθήκης multiprocessing της γρήγορη για ανάθεση της παραμετρικής επίλυσης σε ίδιο πλήθος διεργασιών όσο και το πλήθος των παραμέτρων (μια υπολογιστική διεργασία για κάθε τιμή της διακεντρικής απόστασης). Με αυτό το τρόπο η επίλυση για κάθε τιμή της παραμέτρου μπορεί να τρέχει παράλληλα επιταχύνοντας τους υπολογισμούς. Κάθε διεργασία μπορεί με χρήση του MPI να κατανεμηθεί σε περισσότερους από έναν επεξεργαστές με σκοπό την παράλληλη επίλυση των γραμμικών αλγεβρικών συστημάτων και

περαιτέρω επιτάχυνση της επίλυσης. Γραμμές 293-294: Αποθήκευση αποτελεσμάτων μαγνητικής δύναμης για όλες τις τιμές της διακεντρικής απόστασης.

Η εκτέλεση του FEniCS στη παρούσα εργασία γίνεται ως Docker image. Το Docker είναι εγκατεστημένο σε υπολογιστικό σύστημα (server) με λειτουργικό Linux το οποίο παρέχεται από το υπολογιστικό κέντρο της Σχολής Χημικών Μηχανικών Ε.Μ.Π. Το υπολογιστικό σύστημα tyranistar έχει αρχιτεκτονική κοινής μνήμης μη ομοιόμορφης προσπέλασης με πολλαπλές μονάδες επεξεργαστών (non uniform memory access multiprocessor system). Συγκεκριμένα περιλαμβάνει 4 μονάδες επεξεργαστών (sockets) AMD Opteron (tm) 6380 (2.5 GHZ, 2 threads/core, 8 cores/socket), συνολικά 64 CPUs αρχιτεκτονικής x86-64 bit και συνολική μνήμη RAM 528 GB (517 GB διαθέσιμα). Η πρόσβαση στο tyranistar γίνεται απομακρυσμένα από προσωπικό υπολογιστή με την υπηρεσία SSH (Secure Shell Client) χρησιμοποιώντας VPN του Ε.Μ.Π.

Κεφάλαιο 3. Αποτελέσματα προσομοιώσεων

Σε αυτό το κεφάλαιο επικυρώνεται σε πρώτο στάδιο το υπολογιστικό μοντέλο που αναπτύχθηκε στο λογισμικό FEniCS συγκρίνοντας τα αποτελέσματα με γνωστές αναλυτικές λύσεις αλλά και με το εμπορικό λογισμικό πεπερασμένων στοιχείων COMSOL Multiphysics®. Σε δεύτερο στάδιο παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της επίλυσης για το πρόβλημα αλληλεπίδρασης συμπαγών μαγνητικών σφαιρών χαμηλής μαγνητοαντίστασης.

3.1 Καμπύλες μαγνητικής υστέρησης σφαιρών

Πρωτού προχωρήσουμε στην ανάλυση των αποτελεσμάτων παρουσιάζονται τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά και οι μαγνητικές ιδιότητες των σφαιρών. Οι σφαίρες που μοντελοποιήθηκαν είναι κατασκευασμένες από μέταλλο, έχουν διάμετρο $d_s = 0.003 \text{ m}$ και όγκο $V_s = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{d_s}{2}\right)^3 = 1.41 \cdot 10^{-8} \text{ m}^3$. Οι δύο σφαίρες διαφέρουν ελαφρώς εκ κατασκευής ως προς τις μαγνητικές τους ιδιότητες. Αυτό γίνεται εμφανές παρατηρώντας τις καμπύλες μαγνητικής υστέρησης $m(H)$ στα διαγράμματα 3.1. Οι καμπύλες υστέρησης (άνω και κάτω κλάδος) όπως αναπτύχθηκε στο κεφάλαιο 1 γραμμικοποιούνται ως προς το μαγνητικό πεδίο:

$$\mathbf{m}(\mathbf{B}) = a\mathbf{B} + \mathbf{m}_r \quad (3.1)$$

ή

$$\mathbf{m}(\mathbf{H}) = a\mu_0\mathbf{H} + \mathbf{m}_r \quad (3.2)$$

Η μαγνητική ροπή συνδέεται με τη μαγνήτιση με βάση τη σχέση:

$$\mathbf{m} = \frac{\mathbf{M}}{V_s} \quad (3.3)$$

Η εξίσωση προσαρμογής (3.2) μπορεί να γραφτεί επομένως σε όρους μαγνήτισης:

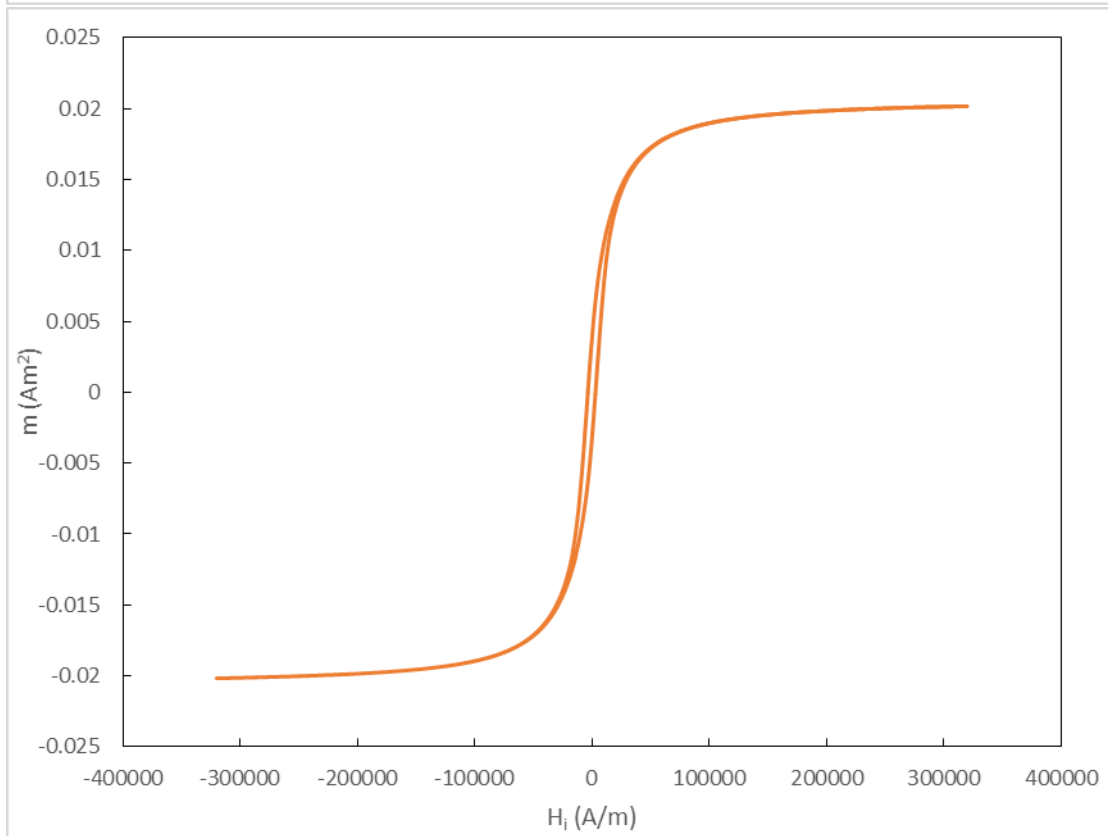
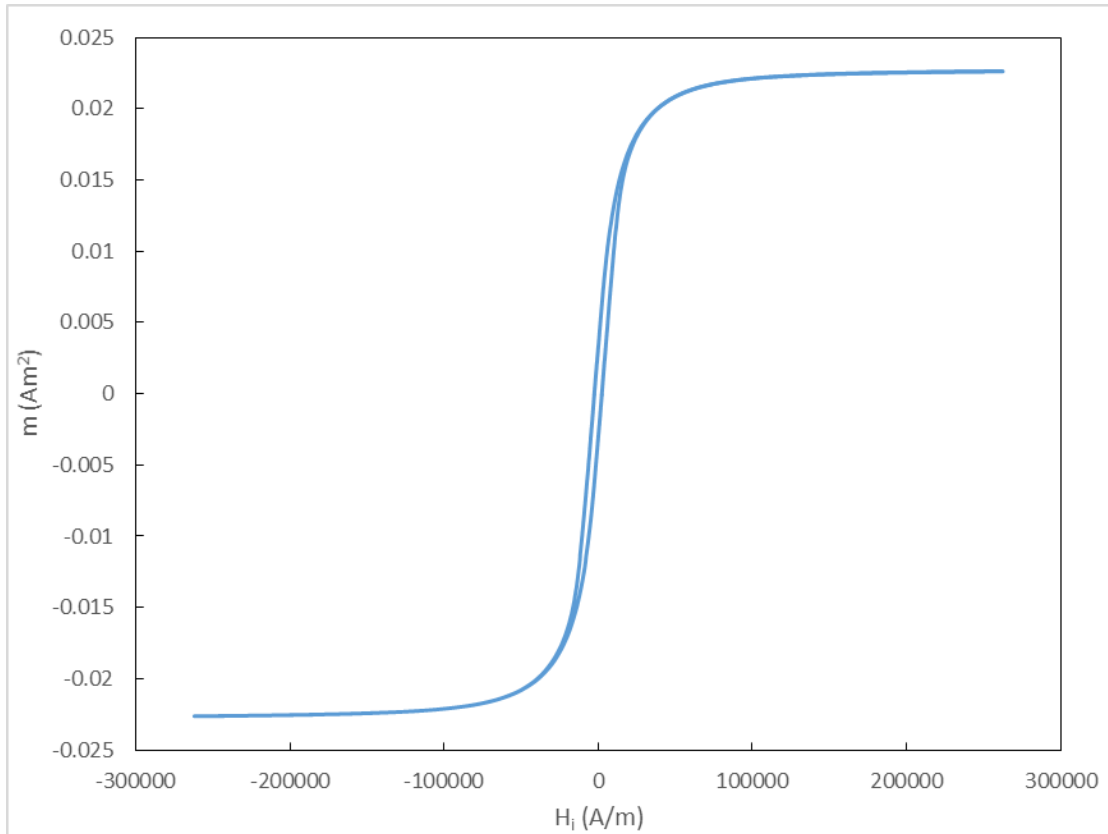
$$\mathbf{M}(\mathbf{H}) = \frac{a\mu_0}{V_s}\mathbf{H} + \frac{\mathbf{m}_r}{V_s} \quad (3.4)$$

ή

$$\mathbf{M}(\mathbf{H}) = x_0\mathbf{H} + \mathbf{M}_R \quad (3.5)$$

Επομένως για την επιδεκτικότητα και τη μόνιμη μαγνήτιση ισχύουν οι συσχετίσεις:

$$x_0 = \frac{a\mu_0}{V_s}, \quad \mathbf{M}_R = \frac{\mathbf{m}_r}{V_s} \quad (3.6)$$



Διάγραμμα 3.1. Καμπύλες μαγνητικής υστέρησης $m(H)$ για τη πρώτη (πάνω) και τη δεύτερη σφαίρα (κάτω). Διακρίνεται ότι υπάρχει μια διαφοροποίηση στις μαγνητικές ιδιότητες των σφαιρών. Σε μια στενή ζώνη γύρω από τη τιμή $H=0$ A/m μπορεί να γίνει η παραδοχή της γραμμικής εξάρτησης της μαγνητικής ροπής από το μαγνητικό πεδίο.

Οι σταθερές προσαρμογής για τη γραμμική συσχέτιση μαγνητικής ροπής και πεδίου για κάθε μία σφαίρα τόσο για τον πάνω όσο και για τον κάτω κλάδο της καμπύλης υστέρησης παρουσιάζονται στο πίνακα 3.1.

| | $\alpha \cdot (10^{-2}) \left[\frac{Am^2}{T} \right]$ | $ \mathbf{m}_r \cdot (10^{-4}) [Am^2]$ |
|-----------------------------------|--|---|
| Σφαίρα 1, κλάδος $+\rightarrow -$ | 3.2731 | 1.0576 |
| Σφαίρα 1, κλάδος $-\rightarrow +$ | 3.2709 | 0.9648 |
| Σφαίρα 2, κλάδος $+\rightarrow -$ | 3.2501 | 1.4019 |
| Σφαίρα 2, κλάδος $-\rightarrow +$ | 3.2501 | 1.2689 |

Πίνακας 3.1. Σταθερές γραμμικής προσαρμογής μεταξύ μαγνητικού πεδίου και μαγνητικής ροπής για τον πάνω και κάτω κλάδο της καμπύλης μαγνητικής υστέρησης για κάθε μία σφαίρα.

Οι αντίστοιχες τιμές για την επιδεκτικότητα και τη μόνιμη μαγνήτιση παρουσιάζονται στο πίνακα 3.2.

| | χ_0 | $ \mathbf{M}_R \left[\frac{A}{m} \right]$ |
|-----------------------------------|----------|---|
| Σφαίρα 1, κλάδος $+\rightarrow -$ | 2.9102 | 7480.9897 |
| Σφαίρα 1, κλάδος $-\rightarrow +$ | 2.9083 | 6824.5640 |
| Σφαίρα 2, κλάδος $+\rightarrow -$ | 2.8898 | 9916.4140 |
| Σφαίρα 2, κλάδος $-\rightarrow +$ | 2.8898 | 8975.6314 |

Πίνακας 3.2. Επιδεκτικότητα και μόνιμη μαγνήτιση όπως προκύπτει από την προσαρμογή του πάνω και του κάτω κλάδου για κάθε μία σφαίρα.

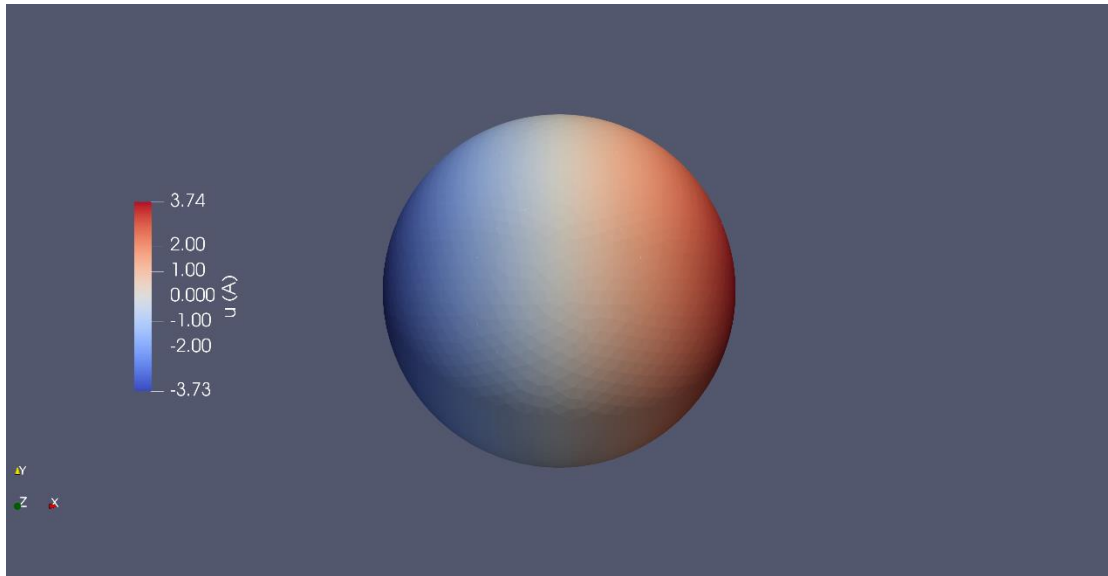
Η μέτρηση της μαγνητικής υστέρησης και η γραμμική προσαρμογή πραγματοποιήθηκε από τον Dr. Reinhard Richter και την ερευνητική του ομάδα στο πανεπιστήμιο Bayreuth της Γερμανίας, ως αδημοσίευτα αποτελέσματα στο πλαίσιο προσωπικής επικοινωνίας .

3.2 Επικύρωση υπολογιστικού μοντέλου

Για να αξιολογηθεί η αξιοπιστία του υπολογιστικού μοντέλου που αναπτύχθηκε συγκρίνονται αρχικά τα αποτελέσματα για μερικές απλούστερες περιπτώσεις όπου υπάρχει γνωστή αναλυτική λύση.

A) Μία σφαίρα χωρίς επιδεκτικότητα στο πεδίο

Στη πρώτη περίπτωση εξετάζεται μια σφαίρα που συμπεριφέρεται ως ιδανικό δίπολο, χωρίς μαγνητική επιδεκτικότητα στο πεδίο. Το κέντρο της σφαίρας είναι τοποθετημένο στην αρχή των αξόνων (0,0,0). Η τιμή του μέτρου της μόνιμης μαγνήτισης επιλέγεται από τον πίνακα 3.2 ίση με $|\mathbf{M}_R| \cong 7481 \frac{A}{m}$. Το διάνυσμα της μόνιμης μαγνήτισης επιλέγεται να είναι παράλληλο στον x άξονα $\mathbf{M}_R = (7481,0,0) \frac{A}{m}$.



Εικόνα 3.1 Βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό στην επιφάνεια της μαγνητικής σφαίρας.

Με βάση την αναλυτική λύση που δόθηκε στο κεφάλαιο 1 για την ιδανική περίπτωση συμπεριφοράς διπόλου χρησιμοποιείται ως κριτήριο σύγκρισης η μέγιστη τιμή του βαθμωτού δυναμικού :

$$u_{max} = \|u\|_{\infty} \quad (3.7)$$

καθώς και οι τιμές του μαγνητικού πεδίου \mathbf{H} και της πυκνότητας μαγνητικής ροής \mathbf{B} στο εσωτερικό της σφαίρας, έστω στο κέντρο της.

| Μέγεθος | Αναλυτική λύση | Αριθμητική λύση | Απόκλιση % |
|--|----------------|-----------------|------------|
| $u_{max} (A)$ | 3.7405 | 3.7368 | 0.1 % |
| $ \mathbf{H}(0,0,0) \left(\frac{A}{m}\right)$ | 2493.6632 | 2492.9440 | 0.03 % |
| $ \mathbf{B}(0,0,0) \cdot (10^{-3}) (T)$ | 6.2690 | 6.2699 | -0.01 % |

Πίνακας 3.3. Ενδεικτικές αποκλίσεις αριθμητικής λύσης από την αναλυτική λύση στη περίπτωση μίας ιδανικής μαγνητικής σφαίρας.

Οι αποκλίσεις για το βαθμωτό δυναμικό καθώς και για το μαγνητικό πεδίο είναι μικρότερες του 1 % από την αναλυτική λύση υποδεικνύοντας ότι η μαθηματική μοντελοποίηση είναι σωστή και η επίλυση έχει μεγάλη ακρίβεια.

Η μορφή της λύσης στην επιφάνεια της σφαίρας για το βαθμωτό δυναμικό παρουσιάζεται στην εικόνα 3.1 με χρήση του λογισμικού οπτικοποίησης Paraview [29]. Η διαφορική εξίσωση που επιλύεται είναι τύπου Laplace δηλαδή εκφράζει διάχυση για το βαθμωτό δυναμικό. Η λύση είναι αντισυμμετρική εκατέρωθεν του επιπέδου $x=0$. Οι μέγιστες και ελάχιστες τιμές του βαθμωτού δυναμικού παρουσιάζονται στους πόλους της σφαίρας $(\pm r_s, 0, 0)$.

Β) Μία σφαίρα με επιδεκτικότητα στο πεδίο

Στη δεύτερη περίπτωση εξετάζεται μια μαγνητική σφαίρα που εκτός από μόνιμη μαγνήτιση παρουσιάζει επιδεκτικότητα στο πεδίο. Η περίπτωση μόνο μιας μη ιδανικής σφαίρας επιδέχεται αναλυτική λύση όπως παρουσιάστηκε στο κεφάλαιο 1. Η μόνιμη μαγνήτιση και η επιδεκτικότητα επιλέγονται από το πίνακα 3.2 ίσες με $x_0 = 2.9102$, $|\mathbf{M}_R| \cong 7481 \frac{A}{m}$.

| Μέγεθος | Αναλυτική λύση | Αριθμητική λύση | Απόκλιση % |
|--|----------------|-----------------|------------|
| $u_{max} (A)$ | 1.8987 | 1.8979 | 0.04 % |
| $ \mathbf{H}(0,0,0) \left(\frac{A}{m}\right)$ | 1265.7761 | 1265.5747 | 0.02 % |
| $ \mathbf{B}(0,0,0) \cdot (10^{-3}) (T)$ | 3.1822 | 3.1831 | -0.03 % |

Πίνακας 3.4. Ενδεικτικές αποκλίσεις αριθμητικής λύσης από την αναλυτική λύση στη περίπτωση της μαγνητικής σφαίρας με επιδεκτικότητα.

Και σε αυτή τη περίπτωση το σφάλμα μεταξύ αναλυτικής και αριθμητικής λύσης, με βάση τα κριτήρια που επιλέχθηκαν, είναι αμελητέο.

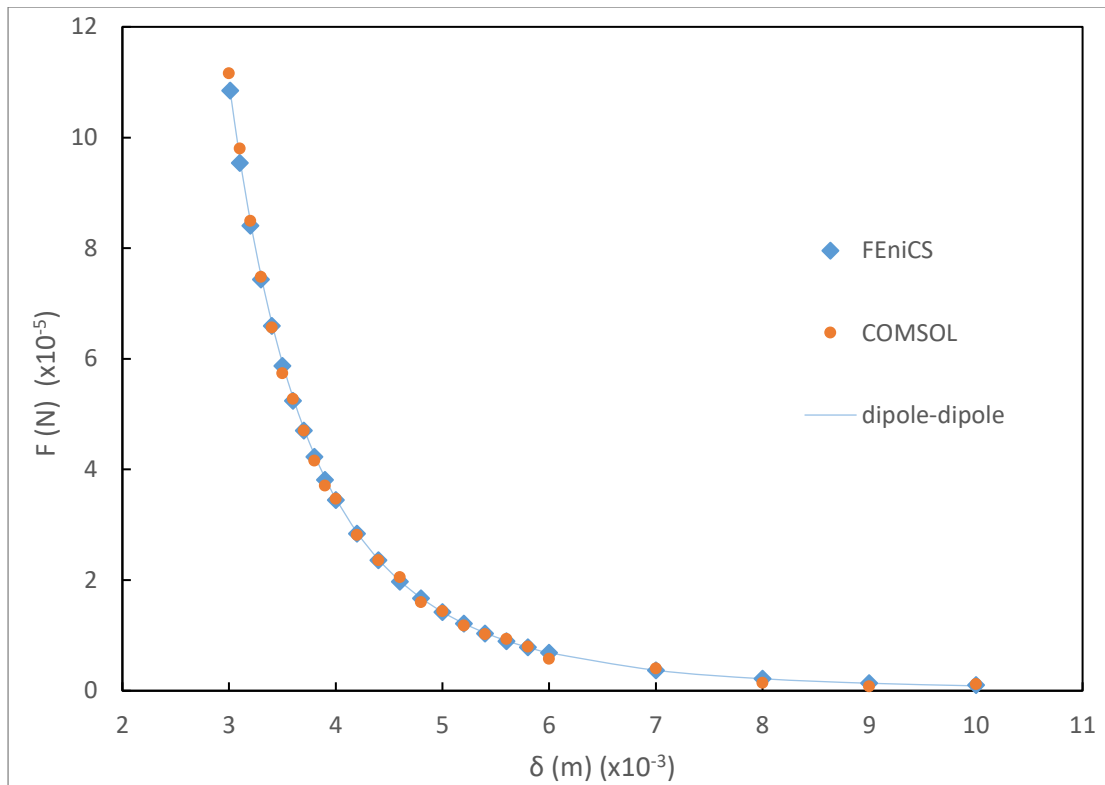
Γ) Δύο ιδανικές μαγνητικές σφαίρες που αλληλεπιδρούν με συμπεριφορά διπόλου-διπόλου

Η τελευταία περίπτωση που εξετάζεται είναι το βασικό πρόβλημα αλληλεπίδρασης μεταξύ σφαιρών που βρίσκονται σε κάποια πεπερασμένη απόσταση μεταξύ τους με τη διαφορά ότι δε λαμβάνεται υπόψη η ύπαρξη επιδεκτικότητας στο μαγνητικό πεδίο. Επομένως οι αλληλεπιδράσεις είναι τύπου διπόλου-διπόλου. Ως κριτήριο σύγκρισης αναλυτικής και αριθμητικής λύσης χρησιμοποιείται η μαγνητική δύναμη μεταξύ των σφαιρών ως συνάρτηση της διακεντρικής απόστασης μεταξύ τους. Οι ίδιοι υπολογισμοί πραγματοποιούνται επίσης με το εμπορικό λογισμικό πεπερασμένων στοιχείων COMSOL Multiphysics®.

Στα διαγράμματα που ακολουθούν διακρίνεται η εξάρτηση της μαγνητικής δύναμης που ασκείται από τη σφαίρα 2 στη σφαίρα 1 ως συνάρτηση της διακεντρικής απόστασης δ για ένα εύρος αποστάσεων $\delta \in [0.003, 0.01] m$. Η ελάχιστη απόσταση μεταξύ των σφαιρών είναι ίση με τη διάμετρο των σφαιρών (εφαπτόμενες σφαίρες). Ως μέγιστη απόσταση (0.01 m) επιλέγεται η απόσταση όπου το μέτρο της μαγνητικής δύναμης έχει μειωθεί τουλάχιστον 2 τάξεις μεγέθους σε σχέση με τη μέγιστη τιμή του. Το μέγιστο μέτρο της μαγνητικής δύναμης παρουσιάζεται στην ελάχιστη απόσταση δ .

Τα μέτρα για τη μόνιμη μαγνήτιση των σφαιρών επιλέγονται από τον πίνακα 3.2 ως οι αντίστοιχες τιμές κάθε σφαίρας για τον άνω κλάδο προσαρμογής στη καμπύλη υστέρησης, $|\mathbf{M}_{R1}| \cong 7481 \frac{A}{m}$, $|\mathbf{M}_{R2}| \cong 9916 \frac{A}{m}$. Το κέντρο της σφαίρας 1 είναι τοποθετημένο στη θέση $x_{0,1} = \left(-\frac{\delta}{2}, 0, 0\right)$ ενώ της σφαίρας 2 στη θέση $x_{0,2} = \left(\frac{\delta}{2}, 0, 0\right)$.

Στο διάγραμμα 3.2 παρουσιάζεται η μαγνητική δύναμη στη περίπτωση που τα διανύσματα μόνιμης μαγνήτισης και των δύο σφαιρών είναι παράλληλα στον x-άξονα, ομόσημα και θετικά, $\mathbf{M}_{R1} = (7481, 0, 0) \frac{A}{m}$, $\mathbf{M}_{R2} = (9916, 0, 0) \frac{A}{m}$.

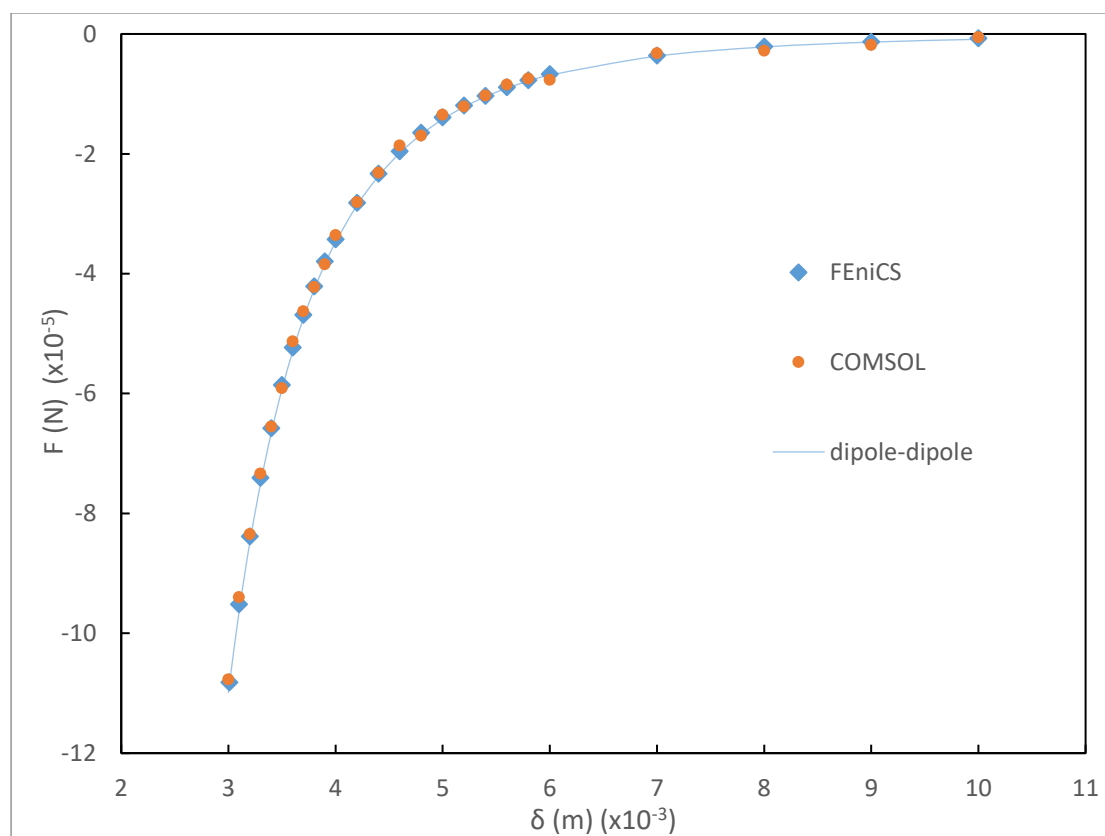


Διάγραμμα 3.2. Μαγνητική δύναμη (x -συνιστώσα) που ασκείται από τη σφαίρα 2 στη σφαίρα 1 ως συνάρτηση της διακεντρικής απόστασης απουσία μαγνητικής επιδεκτικότητας, στη περίπτωση παράλληλων, ομόσημων και θετικών διανυσμάτων μόνιμης μαγνήτισης στη x -διεύθυνση. Η μαγνητική δύναμη όπως προβλέπεται και από την αναλυτική λύση είναι μη μηδενική μόνο στη x -διεύθυνση. Η συνεχής γραμμή αντιπροσωπεύει την αναλυτική λύση διπόλου-διπόλου, ενώ τα σημεία την αριθμητική λύση με τα λογισμικά FEniCS (μπλε χρώμα) και COMSOL® (πορτοκαλί χρώμα).

Οι δυνάμεις που αναπτύσσονται είναι ελκτικές καθώς οι σφαίρες έχουν προσανατολιστεί με τέτοιο τρόπο ώστε ο θετικός πόλος της μίας σφαίρας να βρίσκεται κοντινότερα στον αρνητικό πόλο της άλλης. Σε αυτή τη διάταξη μπορεί να μετρηθεί ευκολότερα η μαγνητική δύναμη σε πειραματικές συνθήκες καθώς το σύστημα είναι ευσταθές. Οποιοσδήποτε άλλος σχετικός προσανατολισμός των διανυσμάτων μαγνήτισης, ειδικά στη περίπτωση μέγιστης άπωσης, είναι ασταθής και μπορεί να μεταβληθεί με ανάπτυξη ροπής. Όπως προκύπτει από την αναλυτική λύση η μαγνητική δύναμη είναι ισχυρή συνάρτηση της απόστασης μεταξύ των σφαιρών και συγκεκριμένα είναι αντιστρόφως ανάλογη της τέταρτης δύναμης της απόστασης $\sim \frac{1}{\delta^4}$. Η αριθμητική λύση με το λογισμικό FEniCS ακολουθεί σε ικανοποιητικό βαθμό την αναλυτική, προβλέποντας με ακρίβεια τόσο την ελάχιστη όσο και τη μέγιστη τιμή της μαγνητικής δύναμης. Η μέση απόκλιση κυμαίνεται στο 1 % ενώ η μέγιστη απόκλιση παρουσιάζεται στη μέγιστη απόσταση μεταξύ των σφαιρών $\delta = 0.01 \text{ m}$, ίση με 13 %. Αυτό μπορεί να οφείλεται στην επίδραση που προκαλεί η πεπερασμένη διάσταση του ασυμπτωτικού συνόρου που περικλύει τις σφαίρες. Καθώς η απόσταση των σφαιρών μεγαλώνει οι σφαίρες μετακινούνται, πλησιάζοντας το ασυμπτωτικό σύνορο. Επομένως η επιβολή της συνοριακής συνθήκης στο ασυμπτωτικό σύνορο μπορεί να επηρεάσει την λύση για το βαθμωτό δυναμικό και επακόλουθα το μαγνητικό πεδίο. Ωστόσο σε αυτή την απόσταση όπου το μέτρο της μαγνητικής δύναμης έχει μειωθεί τουλάχιστον 2 τάξεις μεγέθους σε σχέση με το μέγιστο η αλληλεπίδραση των σφαιρών μπορεί να κριθεί αμελητέα. Η μαγνητική δύναμη στη περίπτωση παράλληλων με τη x -διεύθυνση, ομόσημων και θετικών διανυσμάτων μόνιμης μαγνήτισης είναι και αυτή παράλληλη στη x -διεύθυνση.

Ο υπολογισμός της δύναμης με το λογισμικό FEniCS δε γίνεται για την ελάχιστη διακεντρική απόσταση όπου οι σφαίρες εφάπτονται, αλλά πρόστιθεται ένας μικρός αριθμητικός θόρυβος ($+10^{-5} \text{ m}$) προκειμένου να αποφευχθούν προβλήματα με τη ποιότητα του πλέγματος κοντά στη περιοχή όπου οι σφαίρες εφάπτονται (πολύ στενές και καμπύλες περιοχές που οδηγούν σε παραγωγή χαμηλής ποιότητας τετράεδρων στοιχείων). Η κακή ποιότητα πλέγματος στην επιφάνεια αλλά και στη περιοχή γύρω από την επιφάνεια των σφαιρών μπορεί να επηρεάσει σημαντικά τη λύση για τη μαγνητική δύναμη. Η μαγνητική δύναμη σε αυτή την απόσταση (0.00301 m) που προκύπτει από την αναλυτική επίλυση με το FEniCS παρουσιάζει μόλις 0.04 % απόκλιση σε σχέση με την αναλυτική λύση.

Η επίδραση της ποιότητας πλέγματος ειδικά στην περίπτωση των εφαπτόμενων σφαιρών μπορεί να γίνει πιο κατανοητή παρατηρώντας την αριθμητική λύση που προέκυψε με το λογισμικό COMSOL®. Συγκεκριμένα η αριθμητική λύση υπερκτιμά την αναλυτική κατά 2 % παρόλο που όπως εξηγήθηκε αναμένεται καλύτερη ακρίβεια όσο η απόσταση των σφαιρών μειώνεται. Να σημειωθεί ότι τα αποτελέσματα από το λογισμικό COMSOL® χρησιμοποιούνται για ποιοτική και όχι ποσοτική σύγκριση καθώς δεν έχουν χρησιμοποιηθεί τα πλέγματα που δημιουργήθηκαν με το λογισμικό Gmsh αλλά πλέγματα που έχουν δημιουργηθεί με τα εργαλεία του ίδιου του λογισμικού.

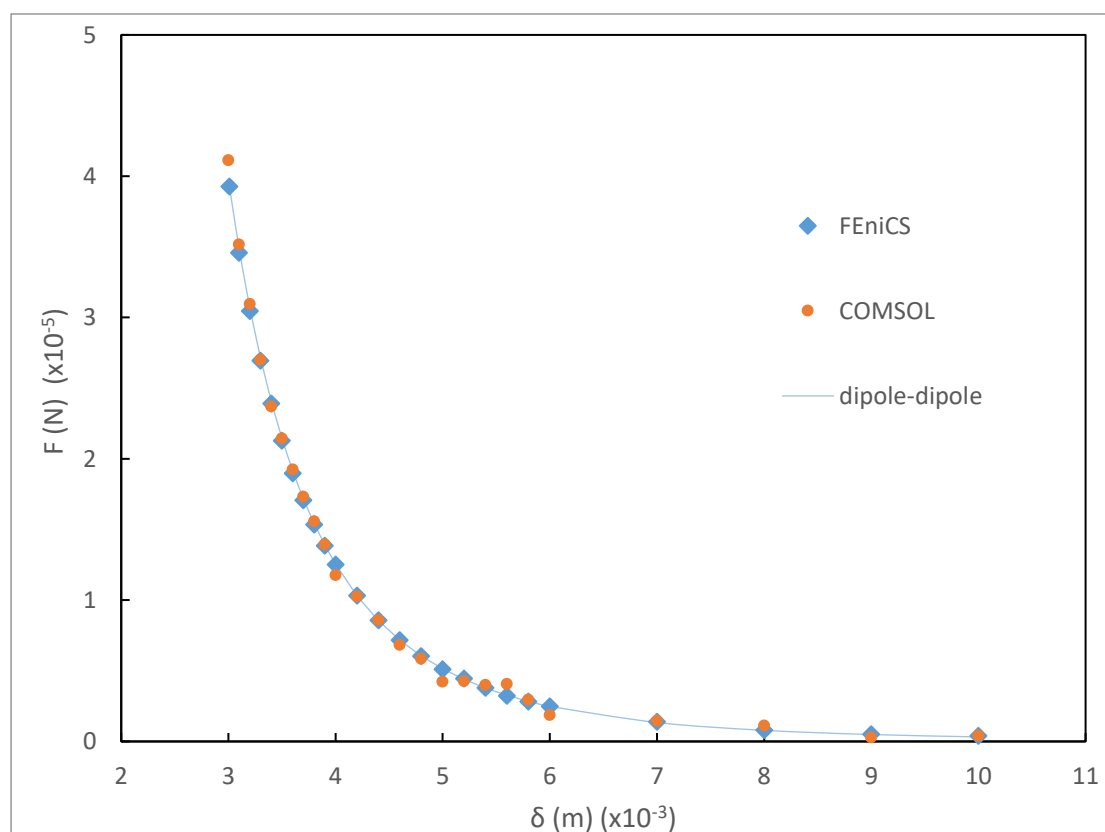


Διάγραμμα 3.3. Μαγνητική δύναμη (x-συνιστώσα) που ασκείται από τη σφαίρα 2 στη σφαίρα 1 ως συνάρτηση της διακεντρικής απόστασης απουσία μαγνητικής επιδεκτικότητας, στη περίπτωση παράλληλων και ετερόσημων διανυσμάτων μόνιμης μαγνήτισης στη x-διεύθυνση. Η μαγνητική δύναμη όπως προβλέπεται και από την αναλυτική λύση είναι μη μηδενική μόνο στη x-διεύθυνση. Η συνεχής γραμμή αντιπροσωπεύει την αναλυτική λύση διπόλου-διπόλου, ενώ τα σημεία την αριθμητική λύση με τα λογισμικά FEniCS (μπλε χρώμα) και COMSOL® (πορτοκαλί χρώμα). Η δύναμη είναι αντίθετη με αυτή που προκύπτει για ομόσημα διανύσματα μόνιμης μαγνήτισης.

Στο διάγραμμα 3.3 παρουσιάζεται η μαγνητική δύναμη στη περίπτωση που τα διανύσματα μόνιμης μαγνήτισης και των δύο σφαιρών είναι παράλληλα στον x-άξονα και ετερόσημα $\mathbf{M}_{R1} = (7481,0,0) \frac{A}{m}$, $\mathbf{M}_{R2} = (-9916,0,0) \frac{A}{m}$.

Οι δυνάμεις που αναπτύσσονται είναι απωστικές, καθώς οι σφαίρες έχουν προσανατολιστεί με τέτοιο τρόπο ώστε ο θετικός πόλος της μίας σφαίρας να βρίσκεται κοντινότερα στον θετικό πόλο της άλλης, ίδιου μέτρου με τις ελκτικές δυνάμεις του διαγράμματος 3.2.

Τα αποτελέσματα ως προς τις αποκλίσεις μεταξύ αριθμητικής λύσης στο FEniCS και αναλυτικής λύσης είναι αντίστοιχα με αυτά για τα ομόσημα διανύσματα μαγνήτισης, 2 % μέση απόκλιση και 15 % μέγιστη απόκλιση η οποία παρουσιάζεται στη μέγιστη διακεντρική απόσταση.



Διάγραμμα 3.4. Μαγνητική δύναμη (x-συνιστώσα) που ασκείται από τη σφαίρα 2 στη σφαίρα 1 ως συνάρτηση της διακεντρικής απόστασης απουσία μαγνητικής επιδεικτικότητας, στη περίπτωση ενός τυχαίου προσανατολισμού των διανυσμάτων μόνιμης μαγνήτισης. Η συνεχής γραμμή αντιπροσωπεύει την αναλυτική λύση διπόλου-διπόλου, ενώ τα σημεία την αριθμητική λύση με τα λογισμικά FEniCS (μπλε χρώμα) και COMSOL® (πορτοκαλί χρώμα). Η δύναμη είναι αντίθετη με αυτή που προκύπτει για ομόσημα διανύσματα μόνιμης μαγνήτισης.

Στα διαγράμματα 3.4, 3.5 και 3.6 παρουσιάζονται οι συνιστώσες της μαγνητικής δύναμης στη περίπτωση όπου επιλέγεται ένας τυχαίος προσανατολισμός για τα διανύσματα μόνιμης μαγνήτισης έστω:

$$\mathbf{M}_{R1} = M_{R1}(\cos\theta_1\cos\theta_2, \sin\theta_1, \cos\theta_1\sin\theta_2), \quad M_{R1} = |\mathbf{M}_{R1}| \cong 7481 \frac{A}{m}$$

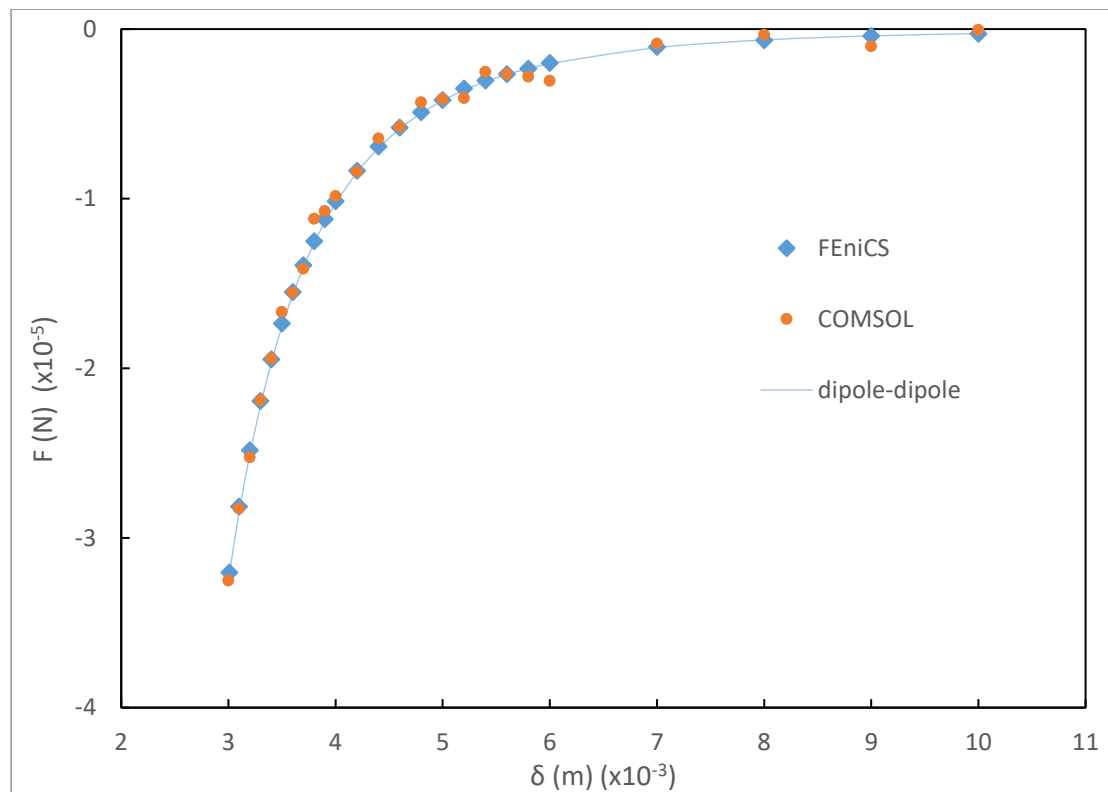
$$\mathbf{M}_{R2} = M_{R2}(\cos\theta_3\cos\theta_4, \sin\theta_3, \cos\theta_3\sin\theta_4), \quad M_{R2} = |\mathbf{M}_{R2}| \cong 9916 \frac{A}{m}$$

Με θ_1, θ_3 συμβολίζονται οι γωνίες που σχηματίζουν τα διανύσματα μόνιμης μαγνήτισης με το επίπεδο γ ενώ με θ_2, θ_4 οι γωνίες που σχηματίζουν οι συνιστώσες των διανυσμάτων μόνιμης μαγνήτισης στο επίπεδο γ με τους άξονες x, z .

Οι τιμές των γωνιών επιλέγονται αυθαίρετα ως:

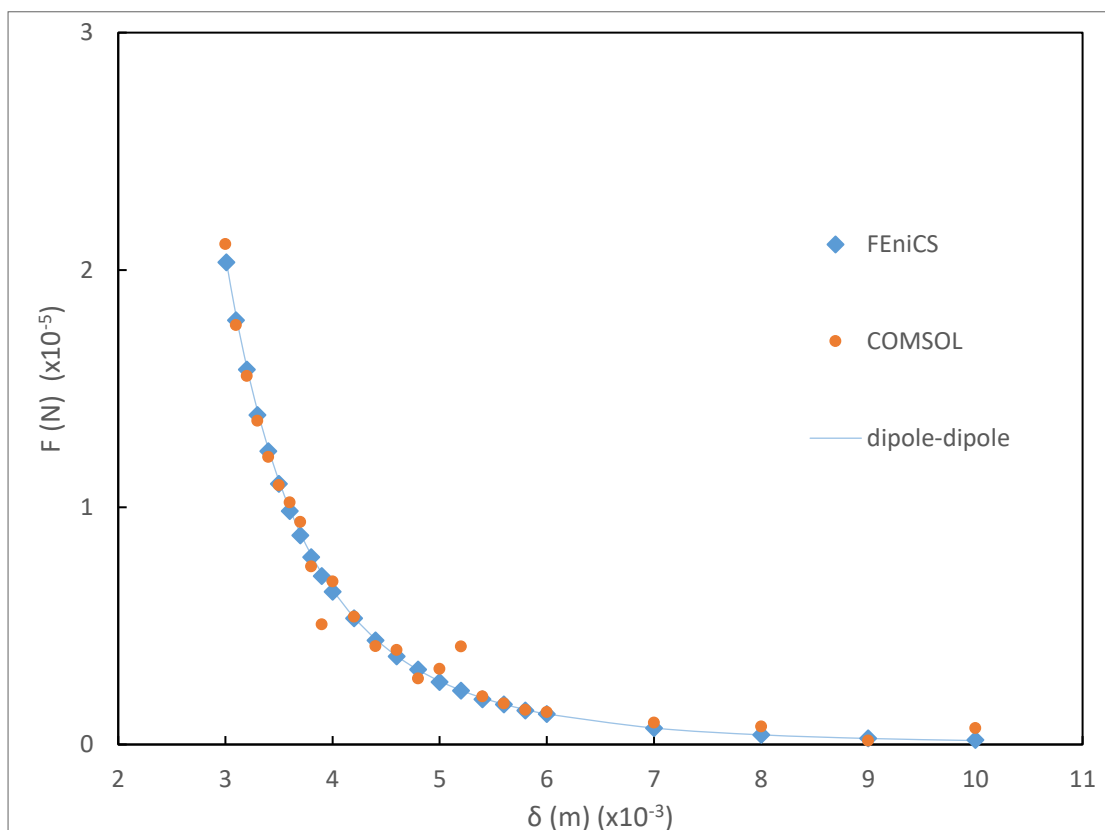
$$\theta_1 = \theta_2 = 30^\circ, \quad \theta_3 = 150^\circ, \theta_4 = 120^\circ$$

Το μέσο σφάλμα μεταξύ υπολογιστικής λύσης από το FEniCS και αναλυτικής λύσης είναι κατά σειρά για τις 3 συνιστώσες της μαγνητικής δύναμης 1.9%, 1.5% και 1.5% για τις x, y, z συνιστώσες ενώ το μέγιστο σφάλμα 21%, 6% και 13% αντίστοιχα, το οποίο παρουσιάζεται στη μέγιστη διακεντρική απόσταση ίση με 0.01 m. Τα αποτελέσματα αυτά υποδεικνύουν ότι η αξιοπιστία της λύσης του μοντέλου στο FEniCS είναι ανεξάρτητη του προσανατολισμού των διανυσμάτων της μόνιμης μαγνήτισης.



Διάγραμμα 3.4. Μαγνητική δύναμη (y -συνιστώσα) που ασκείται από τη σφαίρα 2 στη σφαίρα 1 ως συνάρτηση της διακεντρικής απόστασης απουσία μαγνητικής επιδεκτικότητας, στη περίπτωση ενός τυχαίου προσανατολισμού των διανυσμάτων μόνιμης μαγνήτισης. Η συνεχής γραμμή αντιπροσωπεύει την αναλυτική λύση διπόλου-διπόλου, ενώ τα σημεία την αριθμητική λύση με τα λογισμικά FEniCS (μπλε χρώμα) και COMSOL® (πορτοκαλί χρώμα). Η δύναμη είναι αντίθετη με αυτή που προκύπτει για ομόσημα διανύσματα μόνιμης μαγνήτισης.

Κάτι τέτοιο δεν είναι αυτονόητο όπως διακρίνεται στα διαγράμματα 3.4, 3.5 και κυριότερα στο 3.6 για τη λύση με το λογισμικό COMSOL®. Παρουσιάζονται έντονες αποκλίσεις και διασπορά των σημείων σε σχέση με την αναλυτική λύση που μπορεί να οφείλονται τόσο στην επίδραση του ασυμπτωτικού συνόρου καθώς και στη ποιότητα του πλέγματος αν αυτή δεν είναι ομοιόμορφη προς όλες τις διευθύνσεις.



Διάγραμμα 3.5. Μαγνητική δύναμη (z-συνιστώσα) που ασκείται από τη σφαίρα 2 στη σφαίρα 1 ως συνάρτηση της διακεντρικής απόστασης απουσία μαγνητικής επιδεκτικότητας, στη περίπτωση ενός τυχαίου προσανατολισμού των διανυσμάτων μόνιμης μαγνήτισης. Η συνεχής γραμμή αντιπροσωπεύει την αναλυτική λύση διπόλου-διπόλου, ενώ τα σημεία την αριθμητική λύση με τα λογισμικά FEniCS (μπλε χρώμα) και COMSOL® (πορτοκαλί χρώμα). Η δύναμη είναι αντίθετη με αυτή που προκύπτει για ομόσημα διανύσματα μόνιμης μαγνήτισης.

3.3 Επιλογή κατάλληλων συναρτήσεων βάσης

Η κατάλληλη επιλογή συναρτήσεων βάσης για τη διακριτοποίηση του προβλήματος με τη μέθοδο Πεπερασμένων Στοιχείων είναι καθοριστικής σημασίας ως προς την ακρίβεια των αποτελεσμάτων για τη μαγνητική δύναμη. Η κατάλληλη μορφή και τάξη των συναρτήσεων βάσης πρέπει να επιλεγεί προσεκτικά για την εύρεση του βαθμωτού μαγνητικού δυναμικού αλλά κυριότερα για την εύρεση του μαγνητικού πεδίου με τη μέθοδο της προβολής, καθώς ο υπολογισμός της δύναμης απαιτεί τον υπολογισμό του τανυστή Maxwell στην επιφάνεια των σφαιρών. Η ασυνέχεια του μαγνητικού πεδίου H στην επιφάνεια των σφαιρών δημιουργεί προβλήματα αριθμητικής φύσεως όπως παραμόρφωση του πεδίου ή αριθμητικό θόρυβο σε μια στενή περιοχή γύρω από τις επιφάνειες. Σε αυτή τη στενή περιοχή ωστόσο υπάρχει ενδιαφέρον για επίτευξη μεγάλης ακρίβειας υπολογισμών.

Προκειμένου να γίνει επιλογή της καταλληλότερης μορφής και τάξης των συναρτήσεων βάσης θα πρέπει να ληφθεί υπόψη η μαθηματική συμπεριφορά των άγνωστων μεγεθών καθώς και οι υπολογιστικές απαιτήσεις. Η τελική αξιολόγηση γίνεται με βάση τα αποτελέσματα για τη μαγνητική δύναμη δύο ιδανικών σφαιρών συγκρίνοντας τα με την αναλυτική λύση για αλληλεπίδραση διπόλου-διπόλου.

Βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό

Όπως περιγράφηκε και στο κεφάλαιο 2, το βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό u είναι συνεχής συνάρτηση, όχι μόνο μακριά από την επιφάνεια των σφαιρών αλλά και στην ίδια την επιφάνεια, λόγω της απαίτησης για ικανοποίηση της συνοριακής συνθήκης 2.17. Η απαίτηση για συνέχεια του βαθμωτού δυναμικού σε όλο το χώρο επίλυσης μπορεί να καλυφθεί φυσικά με την επιλογή συναρτήσεων βάσης που είναι συνεχείς από στοιχείο σε στοιχείο, δηλαδή τα τετράεδρα στοιχεία να μοιράζονται τους ίδιους βαθμούς ελευθερίας (κόμβους) σε αλληλοεπικαλυπτόμενες έδρες (ή ακμές στη περίπτωση του επιφανειακού πλέγματος με τριγωνικά στοιχεία στις επιφάνειες). Η πιο συνηθισμένη επιλογή είναι τα πεπερασμένα στοιχεία Lagrange με πολυωνυμικές συναρτήσεις βάσης πρώτου ή δεύτερου βαθμού (βλ. ενότητα 1.1). Επειδή η διαφορική εξίσωση για την εύρεση του βαθμωτού μαγνητικού δυναμικού είναι τύπου Laplace δε κρίνεται απαραίτητη η χρήση μεγαλύτερης τάξης πολυωνύμων για τη προσέγγιση της λύσης. Άλλωστε η χρήση μεγαλύτερης τάξης πολυωνυμικών συναρτήσεων βάσης για μια συγκεκριμένη χωρική διακριτοποίηση (υπολογιστικό πλέγμα) αυξάνει τις υπολογιστικές απαιτήσεις καθώς προστίθενται επιπλέον βαθμοί ελευθερίας. Επιπλέον η χρήση μεγάλης πολυωνυμικής τάξης μπορεί να οδηγήσει σε ανακρίβειες παρεμβολής στα εσωτερικά των στοιχείων λόγω απώλειας ομαλότητας (smoothness).

Στο πίνακα 3.5 παρουσιάζεται η επίδραση της πολυωνυμικής τάξης των συναρτήσεων βάσης Lagrange στην αριθμητική λύση για το βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό, συγκεκριμένα στη μέγιστη τιμή του, για μία ιδανική σφαίρα όπως στην παράγραφο 3.2 Α). Όπως προκύπτει από την % απόκλιση σε σχέση με την αναλυτική λύση μπορούν να χρησιμοποιηθούν τόσο γραμμικές όσο και διωνυμικές συναρτήσεις βάσης με σφάλμα μικρότερο του 1% για το δεδομένο υπολογιστικό πλέγμα. Σε όλα τα αποτελέσματα (εκτός αναφερόμενων εξαιρέσεων) που έχουν προηγηθεί αλλά και ακολουθούν χρησιμοποιούνται διωνυμικές συναρτήσεις βάσης καθώς παρουσιάζουν ελαφρώς καλύτερη ακρίβεια.

| Τύπος συναρτήσεων βάσης | Πολυωνυμική τάξη | $u_{max} (A)$ | Απόκλιση % |
|-------------------------|------------------|---------------|------------|
| Lagrange | 1 | 3.7085 | 0.9 % |
| Lagrange | 2 | 3.7368 | 0.1 % |

Πίνακας 3.5. Μέγιστη τιμή και απόκλιση αυτής από την αναλυτική λύση του βαθμωτού μαγνητικού δυναμικού όπως προκύπτει από την αριθμητική επίλυση μιας ιδανικής σφαίρας για διαφορετικές πολυωνυμικές τάξεις συναρτήσεων βάσης.

Μαγνητικό πεδίο

Το μαγνητικό πεδίο \mathbf{H} είναι διανυσματική συνάρτηση και επομένως οι συναρτήσεις βάσης για κάθε συνιστώσα θα πρέπει να ικανοποιούν τις απαραίτητες ιδιότητες. Σύμφωνα με τη συνοριακή συνθήκη 2.16 το μαγνητικό πεδίο \mathbf{H} είναι ασυνεχές στις επιφάνειες των σφαιρών (η συνέχεια εξασφαλίζεται μόνο για τη κάθετη συνιστώσα της πυκνότητας μαγνητικής ροής \mathbf{B}) όπου εμφανίζεται η μόνιμη μαγνήτιση. Θα πρέπει επομένως να εξασφαλιστεί ότι οι συναρτήσεις βάσης δεν είναι συνεχείς στα στοιχεία του πλέγματος τα οποία βρίσκονται εκατέρωθεν της επιφάνειας των σφαιρών, μάλιστα για όλες τις συνιστώσες του μαγνητικού πεδίου. Κάτι τέτοιο δεν είναι δυνατό με τις συνεχείς συναρτήσεις βάσης Lagrange. Εναλλακτικά μπορούν να χρησιμοποιηθούν συναρτήσεις βάσης στις οποίες δεν επιβάλλεται καμία συνθήκη ολικής συνέχειας (global continuity) οι οποίες είναι γνωστές ως ασυνεχείς συναρτήσεις Lagrange (discontinuous Lagrange ή discontinuous Galerkin). Σε αυτή τη περίπτωση οι βαθμοί ελευθερίας δεν ταυτίζονται ακριβώς με κόμβους σε έδρες ή ακμές των στοιχείων του πλέγματος, αλλά τοποθετούνται αυθαίρετα κοντά σε αυτούς τους κόμβους. Επομένως δε προκύπτουν αλληλοεπικαλυπτόμενοι βαθμοί ελευθερίας κάτι που επιτρέπει στις συναρτήσεις βάσης να είναι ασυνεχείς μεταξύ κάθε στοιχείου με αλληλοεπικαλυπτόμενες έδρες. Περισσότερες πληροφορίες για τη μορφή αυτών των στοιχείων μπορούν να βρεθούν στην ενότητα 1.1.

| Τύπος συναρτήσεων βάσης | Πολυωνυμική τάξη | $ \mathbf{H}(0,0,0) \left(\frac{A}{m}\right)$ | Απόκλιση % | $ \mathbf{B}(0,0,0) \cdot (10^{-3}) (T)$ | Απόκλιση % |
|-------------------------|------------------|--|------------|---|------------|
| Discontinuous Lagrange | 0 | 2492.8998 | 0.03 % | 6.2700 | -0.02% |
| Discontinuous Lagrange | 1 | 2492.9440 | 0.03 % | 6.2699 | -0.01 % |

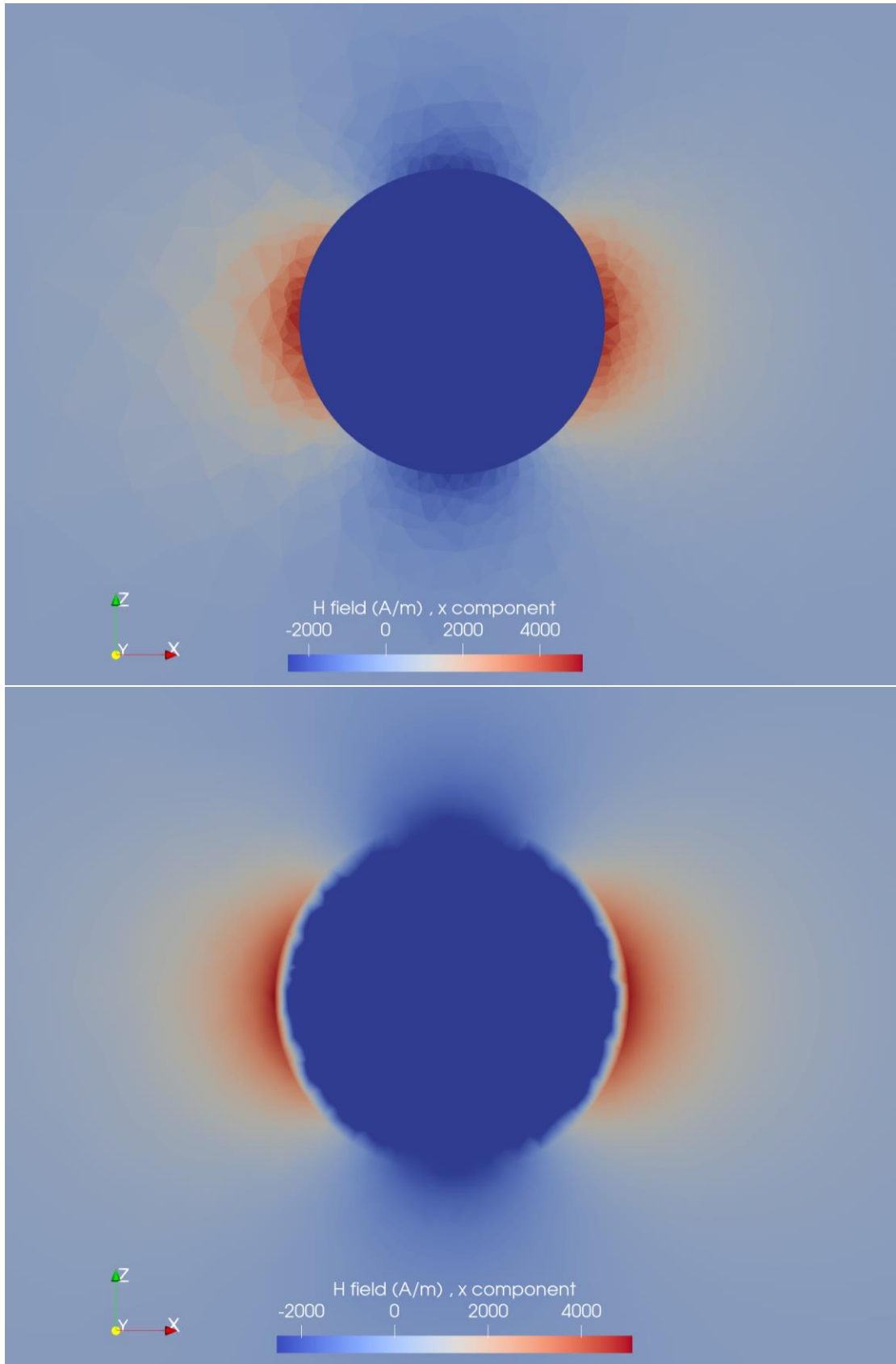
Πίνακας 3.6. Σύγκριση των τιμών του μέτρου για τα μεγέθη \mathbf{H}, \mathbf{B} στο κέντρο των σφαιρών σε σχέση με την αναλυτική λύση για διαφορετικές τιμές της πολυωνυμικής τάξης των ασυνεχών συναρτήσεων βάσης Lagrange.

Η τάξη για τις ασυνεχείς συναρτήσεις βάσης επιλέγεται μεταξύ των τιμών 0 και 1. Η μηδενική τάξη αντιστοιχεί σε ένα βαθμό ελευθερίας, δηλαδή η συνάρτηση βάσης έχει σταθερή τιμή στο εσωτερικό κάθε στοιχείου. Παρατηρώντας τις τιμές στο πίνακα 3.6 ενδεικτικά για τα μέτρα των μεγεθών \mathbf{H}, \mathbf{B} στο εσωτερικό μιας ιδανικής σφαίρας μπορεί να ειπωθεί ότι δε προκύπτει διαφοροποίηση στην ακρίβεια των αποτελεσμάτων. Ωστόσο κρίνεται απαραίτητη

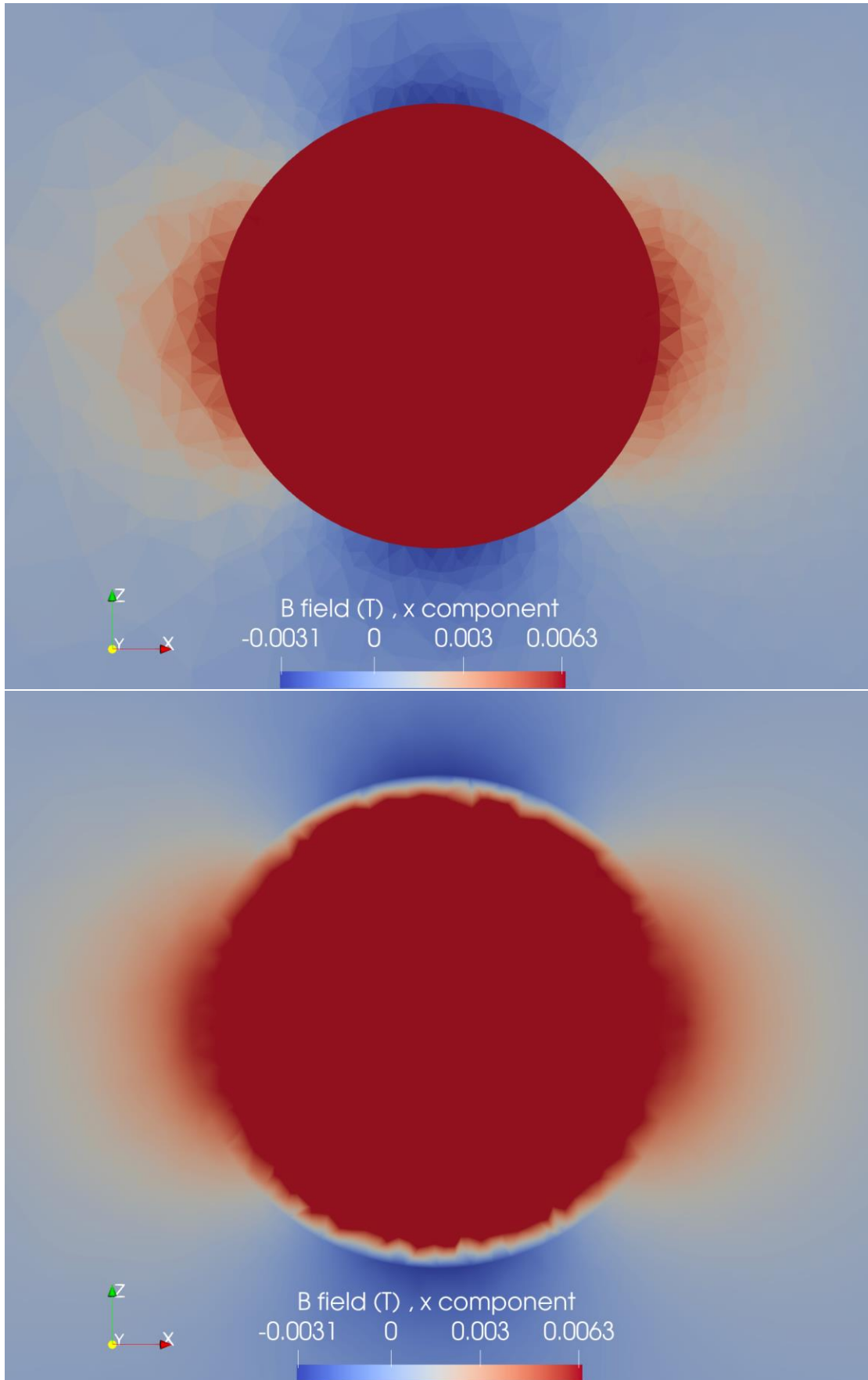
η επιθεώρηση της μορφής των \mathbf{H}, \mathbf{B} στις επιφάνειες και γύρω από τις επιφάνειες των σφαιρών.

Στην εικόνα 3.2 απεικονίζεται η x -συνιστώσα του μαγνητικού πεδίου \mathbf{H} γύρω από μια ιδανική σφαίρα σε μια τομή της (τομή στο y επίπεδο). Στη περίπτωση της χρήσης ασυνεχών συναρτήσεων βάσης μηδενικής πολυωνυμικής τάξης το μαγνητικό πεδίο, όπως προβλέπεται και από την αναλυτική λύση διατηρεί σταθερή τιμή στο εσωτερικό της σφαίρας με αντίθετο πρόσημο σε σχέση με τη x συνιστώσα της μόνιμης μαγνήτισης. Μάλιστα η αναπαραγωγή της επιφάνειας μέσω της απεικόνισης του άλματος στη τιμή του μαγνητικού πεδίου είναι απόλυτα ακριβής (ταυτίζεται ακριβώς με την επιφάνεια που ορίζεται από το επιφανειακό υπολογιστικό πλέγμα). Λόγω ασυνέχειας το μαγνητικό πεδίο αλλάζει πρόσημο γύρω από τον άξονα συμμετρίας που είναι παράλληλος στον x άξονα, καθώς και το διάνυσμα μόνιμης μαγνήτισης έχει οριστεί παράλληλο με αυτόν τον άξονα. Ένα αριθμητικό πρόβλημα που παρουσιάζεται στη περίπτωση χρήσης μηδενικής τάξης είναι το γεγονός ότι πρέπει να χρησιμοποιηθεί αρκετά πυκνότερο πλέγμα για τον ακριβή υπολογισμό του πεδίου (είναι μάλιστα εμφανές και στην εικόνα 3.2). Η τιμή που χρησιμοποιήθηκε ως κριτήριο αξιολόγησης της ακρίβειας στο πίνακα 3.6 είναι στο εσωτερικό της σφαίρας όπου η λύση είναι σταθερή. Ωστόσο καθώς αυξάνεται η απόσταση από τις σφαίρες αυτό το κριτήριο δεν είναι απόλυτα αντιπροσωπευτικό. Αντίθετη συμπεριφορά της λύσης για το μαγνητικό πεδίο παρουσιάζεται στη περίπτωση χρήσης πρώτης τάξης ασυνεχών συναρτήσεων βάσης. Παρατηρείται διαχυτότητα στην επιφάνεια λόγω αριθμητικού θορύβου, δηλαδή η θέση της δε προσδιορίζεται ακριβώς με βάση την μεταβολή της μαγνήτισης και δε ταυτίζεται με τη γεωμετρική επιφάνεια. Αυτό έχει επίδραση στον υπολογισμό του μαγνητικού πεδίου σε μια στενή περιοχή γύρω από την επιφάνεια. Στον εξωτερικό χώρο από τη σφαίρα η λύση για το μαγνητικό πεδίο είναι αρκετά πιο ομαλή και με μεγαλύτερη ανάλυση σε σχέση με τη χρήση μηδενικής τάξης. Παρόμοια συμπεράσματα (βλ. εικόνα 3.3) μπορούν να εξαχθούν και για τον υπολογισμό της πυκνότητας μαγνητικής ροής \mathbf{B} .

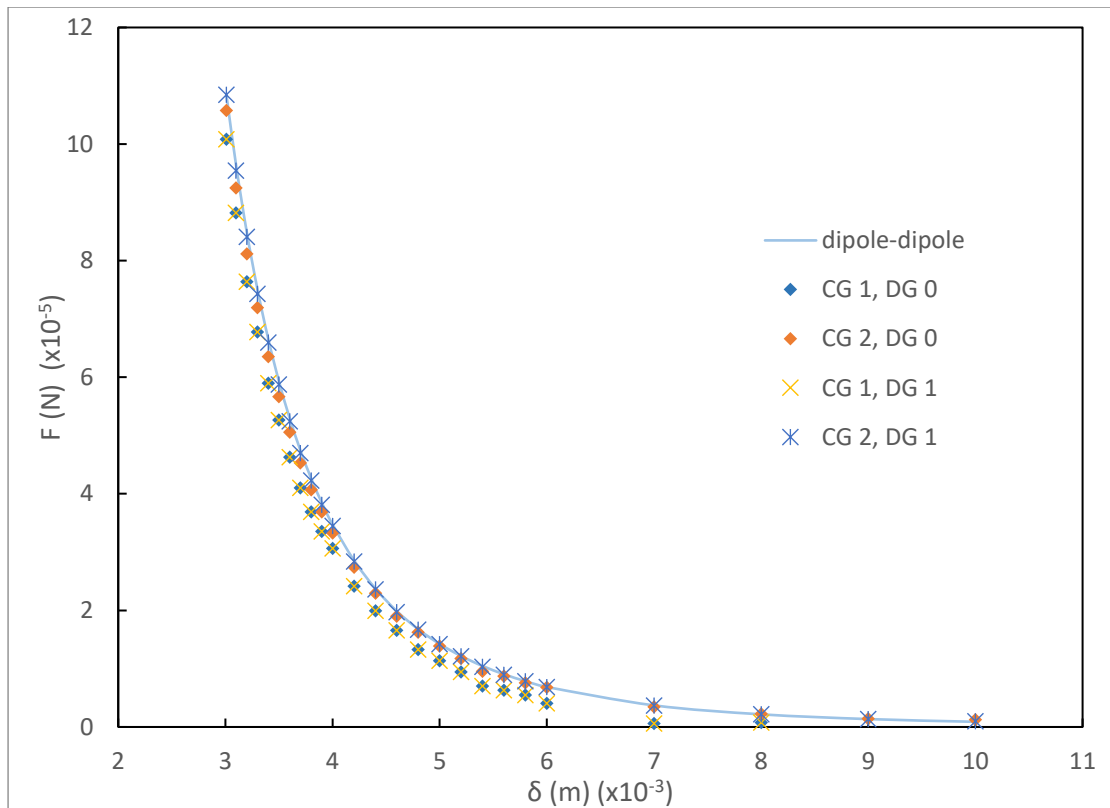
Επομένως από τα παραπάνω κάποιος θα μπορούσε να αποφανθεί ότι οι κατάλληλες συναρτήσεις βάσης για το μαγνητικό πεδίο είναι οι ασυνεχείς μηδενικής τάξης σε συνδυασμό με ένα αρκετά πυκνό υπολογιστικό πλέγμα, ειδικά γύρω από την περιοχή της επιφάνειας των σφαιρών. Ωστόσο απομένει η αξιολόγηση της επίδρασης των συναρτήσεων βάσης στην ακρίβεια υπολογισμού της μαγνητικής δύναμης που είναι το κρισιμότερο μέγεθος. Για τους σκοπούς της ανάλυσης υπολογίζεται η μαγνητική δύναμη ως συνάρτηση της διακεντρικής απόστασης για δύο ιδανικές μαγνητικές σφαίρες που συμπεριφέρονται ως ένα σύστημα διπόλων, για διαφορετικούς συνδυασμούς τάξης συναρτήσεων βάσης. Ο προσανατολισμός των διανυσμάτων μόνιμης μαγνήτισης επιλέγεται με τον ίδιο τρόπο όπως και στη περίπτωση του διαγράμματος 3.2. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο διάγραμμα 3.6.



Εικόνα 3.2 Αναπαράσταση x -συστιώσας μαγνητικού πεδίου \mathbf{H} γύρω από μια ιδανική σφαίρα σε μια τομή της (yz επίπεδο), για ασυνεχείς συναρτήσεις βάσης με μηδενική (πάνω) ή πρώτη (κάτω) πολυωνυμική τάξη.



Εικόνα 3.3. Αναπαράσταση. x - συνιστώσας πυκνότητας μαγνητικής ροής \mathbf{B} γύρω από μια ιδανική σφαίρα σε μια τομή της (y επίπεδο), για ασυνεχείς συναρτήσεις βάσης με μηδενική (πάνω) ή πρώτη (κάτω) πολυωνυμική τάξη.



Διάγραμμα 3.6. Επίδραση συναρτήσεων βάσης στον υπολογισμό της μαγνητικής δύναμης συναρτήσει της διακεντρικής απόστασης για δύο ιδανικές μαγνητικές σφαίρες που αλληλεπιδρούν ως δίπολα. Οι συνεχείς συναρτήσεις βάσης (CG) αναφέρονται στο βαθμωτό δυναμικό ενώ οι ασυνεχείς (DG) στο μαγνητικό πεδίο.

Παρατηρείται ότι η βέλτιστη επιλογή συναρτήσεων βάσης για την ελαχιστοποίηση του σφάλματος μεταξύ αναλυτικής και αριθμητικής λύσης είναι η περίπτωση διωνυμικών συνεχών συναρτήσεων βάσης για το βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό και γραμμικών ασυνεχών συναρτήσεων βάσης για το μαγνητικό πεδίο. Τα αποτελέσματα για το σφάλμα, σε αυτή τη περίπτωση έχουν παρουσιαστεί και στην ενότητα 3.2, είναι 1% μέσο σφάλμα και μέγιστο σφάλμα 13 % στη μέγιστη απόσταση των σφαιρών όπου η δύναμη μπορεί να θεωρηθεί αμελητέα. Στη περίπτωση χρήσης μηδενικής τάξης ασυνεχών συναρτήσεων βάσης για το μαγνητικό πεδίο (σταθερή τιμή πεδίου σε κάθε πεπερασμένο στοιχείο) το σφάλμα είναι σαφώς μεγαλύτερο με 5 % μέση τιμή και 39% μέγιστη. Επομένως παρόλο που η μηδενική τάξη δίνει καλύτερα αποτελέσματα για το πεδίο στην επιφάνεια των σφαιρών οδηγεί σε μεγαλύτερες αποκλίσεις στον υπολογισμό της δύναμης καθώς απαιτείται αρκετά πυκνότερο υπολογιστικό πλέγμα σε μια διευρυμένη απόσταση γύρω από τις σφαίρες. Το μεγαλύτερο σφάλμα προκύπτει στη περίπτωση χρήσης συνεχών γραμμικών συναρτήσεων βάσης για το βαθμωτό μαγνητικό δυναμικό ανεξάρτητα από την επιλογή συναρτήσεων βάσης για το μαγνητικό πεδίο (31 % μέσο και 135 % μέγιστο σφάλμα). Η αναισθησία στην επιλογή των συναρτήσεων βάσης για το μαγνητικό πεδίο οφείλεται στο γεγονός ότι η 1^η τάξης παραγωγή των γραμμικών συναρτήσεων βάσης του βαθμωτού δυναμικού οδηγούν σε σταθερή τιμή μαγνητικού πεδίου σε κάθε πεπερασμένο στοιχείο. Η προσθήκη παραπάνω βαθμών ελευθερίας δεν έχει επίδραση στην ακρίβεια της λύσης.

3.4 Αποτελέσματα αριθμητικών υπολογισμών μαγνητικής δύναμης παρουσία μαγνητικής επιδεκτικότητας

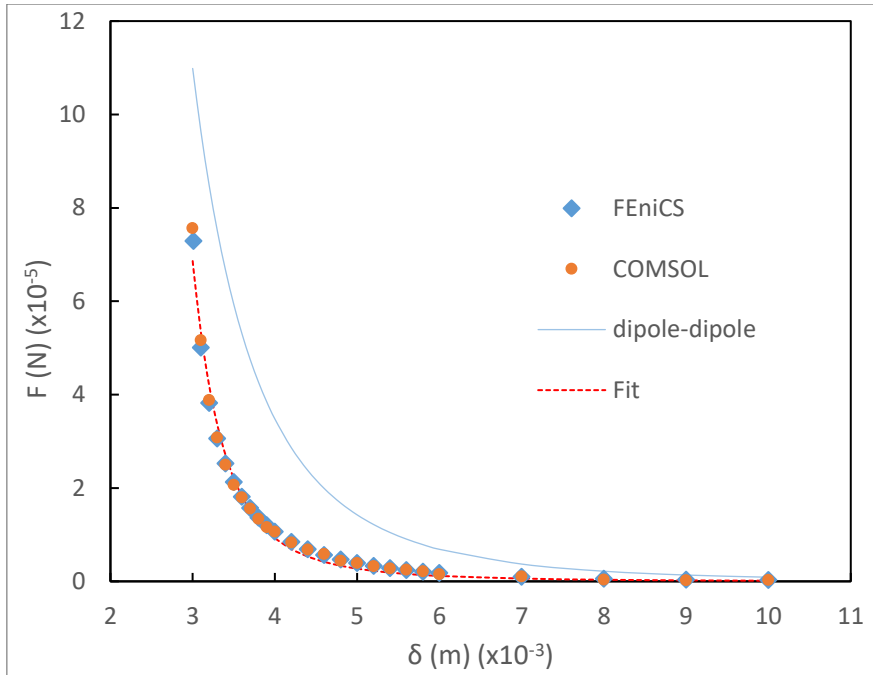
Έχοντας ολοκληρώσει την αξιολόγηση του υπολογιστικού μοντέλου στο FEniCS συγκρίνοντας με τις γνωστές αναλυτικές λύσεις είμαστε σε θέση να υπολογίσουμε με ακρίβεια την μαγνητική δύναμη που ασκείται μεταξύ δύο μη ιδανικών σφαιρών με επιδεκτικότητα στο μαγνητικό πεδίο, για μια σειρά από σχετικούς προσανατολισμούς των διανυσμάτων μόνιμης μαγνήτισης. Οι περιπτώσεις που επιλέγονται για τους σχετικούς προσανατολισμούς είναι ίδιοι για λόγους συμφωνίας με αυτούς της ενότητας 3.2Γ.

Στα διαγράμματα 3.7-3.9 παρατηρείται ότι η ισχύς των αλληλεπιδράσεων παρουσία μαγνητικής επιδεκτικότητας είναι σημαντικά μικρότερη σε σχέση με αυτή της συμπεριφοράς διπόλου-διπόλου. Μάλιστα, μεγαλύτερη απόκλιση εμφανίζεται στη περίπτωση όπου οι αλληλεπιδράσεις των σφαιρών είναι απωστικές (διαγράμματα 3.8, 3.9(β)). Μια ποσοτικοποίηση της απόκλισης παρουσιάζεται στο πίνακα 3.7 όπου υπολογίζεται η % απόκλιση $\Delta F \% = \frac{F_{dipole} - F_{suscept}}{F_{dipole}} 100\%$ μεταξύ της κάθε συνιστώσας και του μέτρου της μαγνητικής δύναμης, για ύπαρξη ή μη μαγνητικής επιδεκτικότητας, για όλες τις περιπτώσεις προσανατολισμών μαγνητικής ροπής με διακεντρική απόσταση σφαιρών ίση με $\delta = 3.01 \text{ mm}$. Το μέτρο της δύναμης είναι κατά 33% μικρότερο στη περίπτωση παράλληλων και ομόσημων μαγνητικών ροπών, κατά 86% μικρότερο στη περίπτωση παράλληλων και ετερόσημων μαγνητικών ροπών και κατά 42% μικρότερο στη περίπτωση τυχαίων σχετικών προσανατολισμών μαγνητικών ροπών.

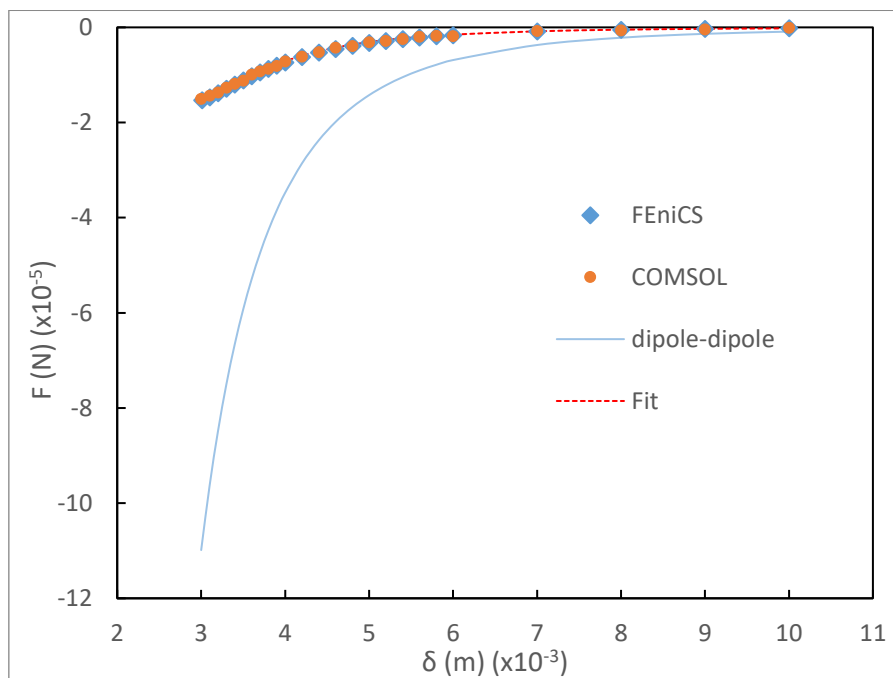
| $\mathbf{M}_{R1} = M_{R1} \mathbf{e}_x, \quad \mathbf{M}_{R2} = M_{R2} \mathbf{e}_x$ | | | | |
|--|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| Απόκλιση | $\Delta F_x \%$ | $\Delta F_y \%$ | $\Delta F_z \%$ | $\Delta F \%$ |
| | 33% | - | - | 33% |
| $\mathbf{M}_{R1} = M_{R1} \mathbf{e}_x, \quad \mathbf{M}_{R2} = -M_{R2} \mathbf{e}_x$ | | | | |
| Απόκλιση | $\Delta F_x \%$ | $\Delta F_y \%$ | $\Delta F_z \%$ | $\Delta F \%$ |
| | -86% | - | - | 86% |
| $\mathbf{M}_{R1} = M_{R1,x} \mathbf{e}_x + M_{R1,y} \mathbf{e}_y + M_{R1,z} \mathbf{e}_z, \quad \mathbf{M}_{R2} = M_{R2,x} \mathbf{e}_x + M_{R2,y} \mathbf{e}_y + M_{R2,z} \mathbf{e}_z$ | | | | |
| Απόκλιση | $\Delta F_x \%$ | $\Delta F_y \%$ | $\Delta F_z \%$ | $\Delta F \%$ |
| | 25% | -69% | 71% | 42% |

Πίνακας 3.7 Απόκλιση % μαγνητικών δυνάμεων, για αλληλεπιδράσεις με παρουσία ή μη μαγνητικής επιδεκτικότητας, για τις 3 περιπτώσεις σχετικών προσανατολισμών.

Εκτός από τη διαφορά στα μέτρα των μαγνητικών δυνάμεων παρατηρείται ότι η ισχύς των αλληλεπιδράσεων περιορίζεται σε μικρότερη διακεντρική απόσταση σε σχέση με τις αλληλεπιδράσεις διπόλου-διπόλου. Ενδεικτικά, για παράλληλες και ομόσημες μαγνητικές ροπές, το μέτρο της μαγνητικής δύναμης με ύπαρξη μαγνητικής επιδεκτικότητας λαμβάνει τιμή 10 % της μέγιστης σε διακεντρική απόσταση $\sim 19 \%$ μικρότερη από την αντίστοιχη για συμπεριφορά διπόλου-διπόλου.

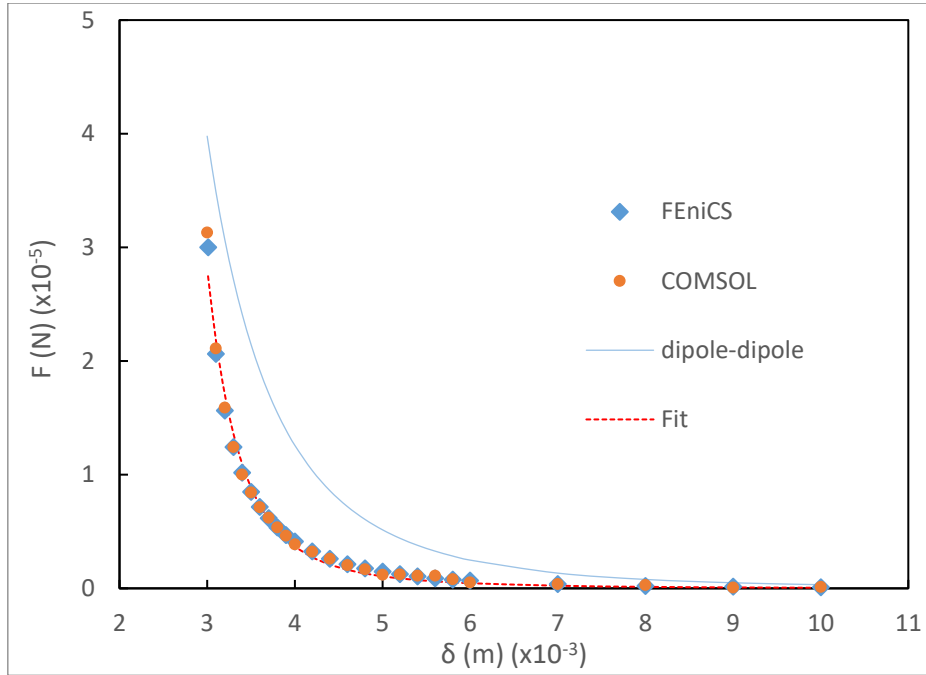


Διάγραμμα 3.7. Μαγνητική δύναμη (x-συνιστώσα) που ασκείται από τη σφαίρα 2 στη σφαίρα 1 ως συνάρτηση της διακεντρικής απόστασης παρουσία μαγνητικής επιδεκτικότητας, στη περίπτωση παράλληλων, ομόσημων και θετικών διανυσμάτων μόνιμης μαγνήτισης στη x-διεύθυνση. Η μαγνητική είναι μη μηδενική μόνο στη x-διεύθυνση. Τα σημεία αναπαριστούν τα αποτελέσματα της αριθμητικής επίλυσης με τα λογισμικά FEniCS (μπλε) και COMSOL® (πορτοκαλί), με κόκκινη διακεκομμένη γραμμή αναπαριστάται η προσαρμογή τύπου νόμου δύναμης (power law) στα αριθμητικά αποτελέσματα από το FEniCS ενώ με συνεχή μπλε γραμμή η αντίστοιχη αναλυτική λύση για αλληλεπίδραση διπόλου-διπόλου απουσία μαγνητικής επιδεκτικότητας.

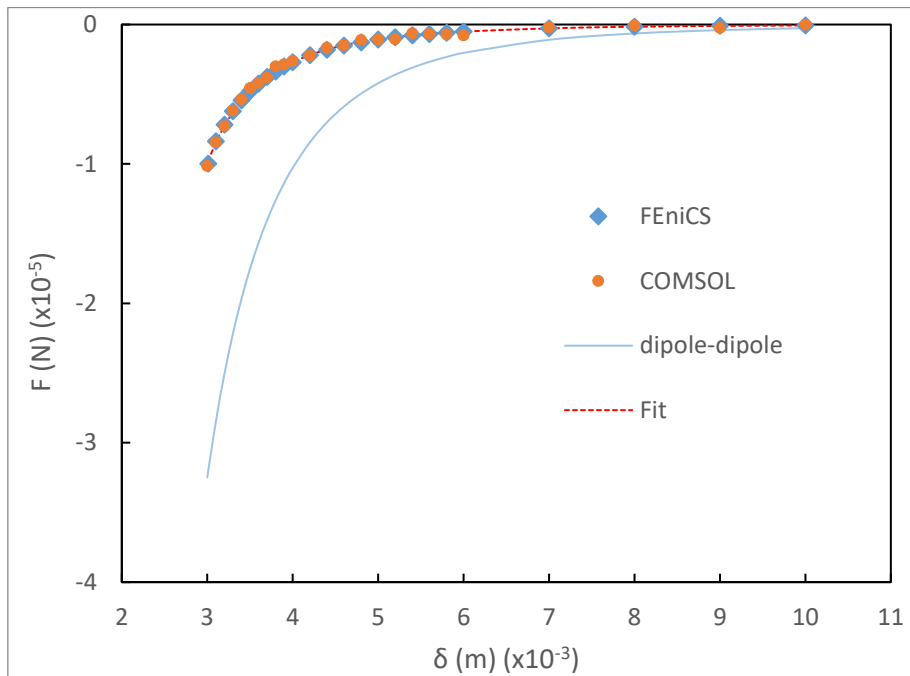


Διάγραμμα 3.8. Μαγνητική δύναμη (x-συνιστώσα) που ασκείται από τη σφαίρα 2 στη σφαίρα 1 ως συνάρτηση της διακεντρικής απόστασης παρουσία μαγνητικής επιδεκτικότητας, στη περίπτωση παράλληλων και ετερόσημων διανυσμάτων μόνιμης μαγνήτισης στη x-διεύθυνση. Η μαγνητική είναι μη μηδενική μόνο στη x-διεύθυνση. Τα σημεία αναπαριστούν τα αποτελέσματα της αριθμητικής επίλυσης με τα λογισμικά FEniCS (μπλε) και COMSOL® (πορτοκαλί), με κόκκινη διακεκομμένη γραμμή αναπαριστάται η προσαρμογή τύπου νόμου δύναμης (power law) στα αριθμητικά αποτελέσματα από το FEniCS ενώ με συνεχή μπλε γραμμή η αντίστοιχη αναλυτική λύση για αλληλεπίδραση διπόλου-διπόλου απουσία μαγνητικής επιδεκτικότητας.

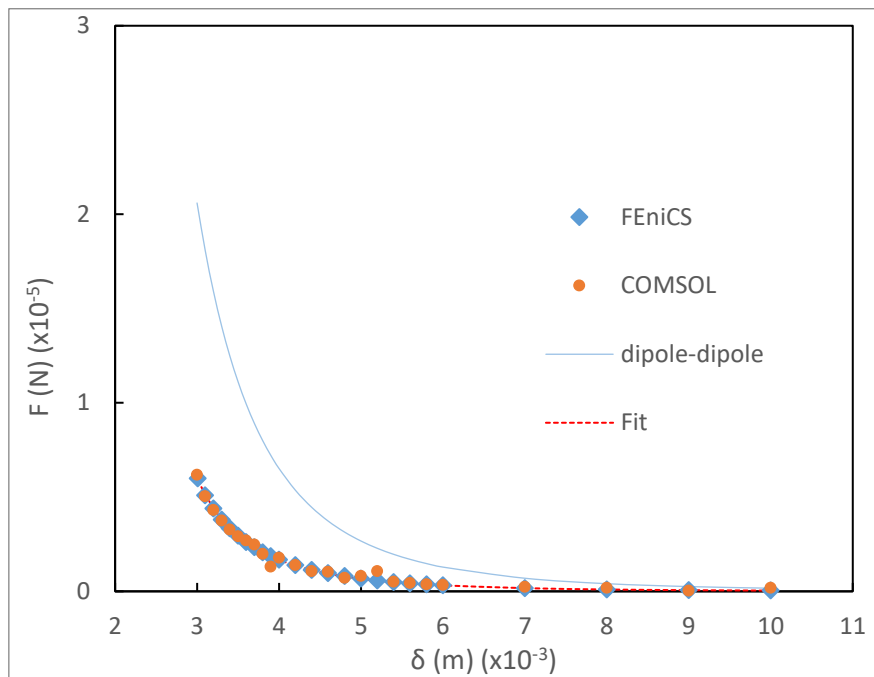
(α)



(β)



(γ)



Διάγραμμα 3.9. Συνιστώσες μαγνητικής δύναμης που ασκείται από τη σφαίρα 2 στη σφαίρα 1 ως συνάρτηση της διακεντρικής απόστασης παρουσία μαγνητικής επιδεκτικότητας, στη περίπτωση ενός τυχαίου προσανατολισμού των διανυσμάτων μόνιμης μαγνήτισης. (α) x-συνιστώσα, (β) y-συνιστώσα, (γ) z-συνιστώσα. Τα σημεία αναπαριστούν τα αποτελέσματα της αριθμητικής επίλυσης με τα λογισμικά FEniCS (μπλε) και COMSOL® (πορτοκαλί), με κόκκινη διακεκομμένη γραμμή αναπαριστάται η προσαρμογή τύπου νόμου δύναμης (power law) στα αριθμητικά αποτελέσματα από το FEniCS ενώ με συνεχή μπλε γραμμή η αντίστοιχη αναλυτική λύση για αλληλεπίδραση διπόλου-διπόλου απουσία μαγνητικής επιδεκτικότητας.

Συγκρίνοντας τα διαγράμματα 3.7, 3.8 παρατηρείται ότι, σε αντίθεση με τη συμπεριφορά διπόλου-διπόλου, η αλλαγή προσανατολισμού από ομόσημα σε ετερόσημα διανύσματα μαγνητικής ροπής δεν οδηγεί σε ίσου μέτρου ελκτικές και απωστικές δυνάμεις αντίστοιχα. Συγκεκριμένα, οι ελκτικές δυνάμεις έχουν μέγιστο μέτρο $|F_{attractive}|_{max} = 0.076 \text{ mN}$ ενώ οι απωστικές $|F_{repulsive}|_{max} = 0.015 \text{ mN}$. Η ύπαρξη μαγνητικής επιδεκτικότητας επιφέρει αμοιβαία παραμόρφωση των μαγνητικών πεδίων που παράγονται από κάθε σφαίρα. Αυτή η παραμόρφωση εξαρτάται από τον σχετικό προσανατολισμό των σφαιρών.

Στα διαγράμματα 3.7-3.9, όπως και στη παράγραφο 3.2, παρουσιάζονται επίσης τα αποτελέσματα από την επίλυση του ίδιου προβλήματος με το λογισμικό COMSOL®. Στο πίνακα 3.8 μπορούν να βρεθούν οι σχετικές αποκλίσεις μεταξύ των υπολογισμών της μαγνητικής δύναμης με τα δύο λογισμικά, για τους 3 διαφορετικούς σχετικούς προσανατολισμούς των διανυσμάτων μαγνητικής ροπής. Η μέση σχετική απόκλιση για το μέτρο της μαγνητικής δύναμης κυμαίνεται μεταξύ 6 – 9 %, ενώ η μέγιστη μεταξύ 43 – 53 %. Ωστόσο, όπως και στη περίπτωση της ιδανικής συμπεριφοράς τύπου διπόλου-διπόλου, η μέγιστη απόκλιση παρουσιάζεται στη μέγιστη θεωρούμενη διακεντρική απόσταση μεταξύ των σφαιρών όπου η δύναμη μπορεί να θεωρηθεί αμελητέα. Στη περίπτωση του τυχαίου σχετικού προσανατολισμού, μεγάλες αποκλίσεις παρουσιάζονται στις y και z συνιστώσες της δύναμης. Αυτό αποδίδεται στην επίδραση του ασυμπτωτικού συνόρου και του υπολογιστικού πλέγματος στις μη κύριες κατευθύνσεις (ως κύρια θεωρείται η κατεύθυνση x όπου ανήκουν τα κέντρα των σφαιρών). Υπενθυμίζεται ότι η επίλυση στο

λογισμικό COMSOL® έγινε για ποιοτική σύγκριση των αποτελεσμάτων. Η σχετική συμφωνία των αποτελεσμάτων επιβεβαιώνει τη σωστή εφαρμογή του μοντέλου στο λογισμικό FEniCS.

| $M_{R1} = M_{R1}e_x, \quad M_{R2} = M_{R2}e_x$ | | | | |
|--|----------------|----------------|----------------|---------------|
| Απόκλιση | ΔF_x % | ΔF_y % | ΔF_z % | $\Delta F $ % |
| Μέση τιμή | 6% | - | - | 6% |
| Μέγιστη τιμή | 43% | - | - | 43% |
| Ελάχιστη τιμή | 0% | - | - | 0% |
| $M_{R1} = M_{R1}e_x, \quad M_{R2} = -M_{R2}e_x$ | | | | |
| Απόκλιση | ΔF_x % | ΔF_y % | ΔF_z % | $\Delta F $ % |
| Μέση τιμή | 7% | - | - | 7% |
| Μέγιστη τιμή | 43% | - | - | 43% |
| Ελάχιστη τιμή | 0% | - | - | 0% |
| $M_{R1} = M_{R1,x}e_x + M_{R1,y}e_y + M_{R1,z}e_z, \quad M_{R2} = M_{R2,x}e_x + M_{R2,y}e_y + M_{R2,z}e_z$ | | | | |
| Απόκλιση | ΔF_x % | ΔF_y % | ΔF_z % | $\Delta F $ % |
| Μέση τιμή | 8% | 19% | 27% | 9% |
| Μέγιστη τιμή | 53% | 155% | 274% | 57% |
| Ελάχιστη τιμή | 0% | 0% | 0% | 0% |

Πίνακας 3.8 Απόκλιση % υπολογισμών για τη μαγνητική δύναμη, μεταξύ των λογισμικών FEniCS και COMSOL®, για τους 3 σχετικούς προσανατολισμούς διανυσμάτων μαγνητικής ροπής.

Στα υπολογιστικά αποτελέσματα για την μαγνητική δύναμη χρησιμοποιώντας το λογισμικό FEniCS πραγματοποιείται προσαρμογή τύπου νόμου δύναμης (powerlaw):

$$F = A\delta^{-4} + B\delta^c \quad (3.7)$$

Η εξίσωση προσαρμογής (3.7) αντιστοιχεί σε μια τροποποίηση του νόμου αλληλεπίδρασης τύπου διπόλου-διπόλου, θεωρώντας ότι υπάρχει μια επιπλέον εξάρτηση από τη διακεντρική απόσταση (δεύτερος όρος εξίσωσης). Οι συντελεστές προσαρμογής A, B, c και για τις 3 περιπτώσεις σχετικών προσανατολισμών διανυσμάτων μαγνητικής ροπής, μπορούν να βρεθούν στο πίνακα 3.9.

| $M_{R1} = M_{R1}e_x, \quad M_{R2} = M_{R2}e_x$ | | | |
|---|-------------|-------|-------|
| Παράμετροι προσαρμογής | F_x | F_y | F_z |
| A | 1.3829e-15 | - | - |
| B | 9.1647e-28 | - | - |
| c | -9.0175 | - | - |
| R^2 | 0.9879 | | |
| $M_{R1} = M_{R1}e_x, \quad M_{R2} = -M_{R2}e_x$ | | | |
| Παράμετροι προσαρμογής | F_x | F_y | F_z |
| A | -1.9900e-15 | - | - |
| B | 1.3984e-28 | - | - |
| c | -9.01412 | - | - |
| R^2 | 0.9984 | | |

| $\mathbf{M}_{R1} = M_{R1,x}\mathbf{e}_x + M_{R1,y}\mathbf{e}_y + M_{R1,z}\mathbf{e}_z$ $\mathbf{M}_{R2} = M_{R2,x}\mathbf{e}_x + M_{R2,y}\mathbf{e}_y + M_{R2,z}\mathbf{e}_z$ | | | |
|---|------------|-------------|------------|
| Παράμετροι προσαρμογής | F_x | F_y | F_z |
| A | 5.3620e-16 | -6.5086e-16 | 4.0960e-16 |
| B | 2.6378e-28 | -3.4721e-29 | 1.8670e-29 |
| c | -9.0820 | -9.0156 | -9.0000 |
| R^2 | 0.9888 | 0.9996 | 0.9997 |

Πίνακας 3.9 Παράμετροι προσαρμογής τύπου νόμου δύναμης (powerlaw) στα υπολογιστικά αποτελέσματα για τη μαγνητική δύναμη από το λογισμικό FEniCS, για τις 3 περιπτώσεις σχετικών προσανατολισμών διανυσμάτων μαγνητικής ροής.

Για όλες τις περιπτώσεις προκύπτει $R^2 \sim 0.99$ επομένως, η ακρίβεια προσαρμογής είναι ικανοποιητική. Το σημαντικότερο ίσως αποτέλεσμα είναι ότι, για όλες τις περιπτώσεις σχετικών προσανατολισμών, προκύπτει μια ασθενέστερη εξάρτηση από τη διακεντρική απόσταση ανάλογη του $\sim \frac{1}{\delta^9}$. Αυτό το αποτέλεσμα συμφωνεί και με το συμπέρασμα ότι οι αλληλεπιδράσεις στη περίπτωση της ύπαρξης μαγνητικής επιδεκτικότητας είναι ασθενέστερες (αποσβένονται σε μικρότερη διακεντρική απόσταση σε σχέση με τη συμπεριφορά διπόλου-διπόλου).

Συμπεράσματα

Οι κυριότεροι στόχοι της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας ήταν: α) η ολοκληρωμένη παρουσίαση της ανάπτυξης υπολογιστικού κώδικα στο περιβάλλον του ανοιχτού λογισμικού πεπερασμένων στοιχείων FEniCS για την επίλυση τρι-διάστατων προβλημάτων αλληλεπίδρασης μαγνητικών σφαιρών, β) η αριθμητική διερεύνηση και η επικύρωση του μοντέλου που αναπτύχθηκε και γ) η παρουσίαση αποτελεσμάτων επίλυσης για το σύστημα σφαιρών που εμφανίζει αμοιβαία μαγνητική επιδεκτικότητα στο μαγνητικό πεδίο και αποκλίνει από την ιδανική περίπτωση διπόλου-διπόλου.

Τα συμπεράσματα που προκύπτουν από τους 2 βασικούς άξονες μελέτης σχετικά με το λογισμικό FEniCS συνοψίζονται στα παρακάτω:

- Για την κατάστρωση υπολογιστικών μοντέλων στο περιβάλλον του λογισμικού FEniCS απαιτούνται στοιχειώδεις γνώσεις αντικειμενοστραφούς προγραμματισμού με τις γλώσσες Python ή C++.
- Για την επίλυση, με το λογισμικό FEniCS, των προβλημάτων μαγνητοστατικής που παρουσιάστηκαν αλλά και άλλου είδους προβλημάτων που διέπονται από μερικές διαφορικές εξισώσεις κρίνεται απαραίτητη η καλή γνώση της μεθόδου Πεπερασμένων Στοιχείων και του φυσικού προβλήματος για τη κατάστρωση των εξισώσεων σε μεταβολική μορφή και των συνοριακών συνθηκών. Όπως παρουσιάστηκε εκτενώς στη παράγραφο 3.3, η αριθμητική ακρίβεια του υπολογισμού της μαγνητικής δύναμης εξαρτάται άμεσα από την επιλογή συναρτήσεων βάσης, τόσο για το βαθμωτό δυναμικό όσο και για το μαγνητικό πεδίο. Η κατάλληλη επιλογή συναρτήσεων βάσης απαιτεί τη γνώση της συμπεριφοράς των άγνωστων μεγεθών εκατέρωθεν των επιφανειών των σφαιρών, η οποία εκφράζεται μαθηματικά από την συνέχεια ή μη των άγνωστων συναρτήσεων. Το λογισμικό FEniCS δε παρέχει αυτοματοποιημένα modules, εξειδικευμένα στην επίλυση προβλημάτων μαγνητοστατικής όπως ένα εμπορικό λογισμικό σαν το COMSOL®.

- Με βάση την εμπειρία στη διαχείριση υπολογιστικών πλεγμάτων και γεωμετριών, προτείνεται η χρήση του ανοιχτού λογισμικού δημιουργίας τρι-διάστατων μη δομημένων πλεγμάτων Gmsh σε συνδυασμό με το λογισμικό FEniCS. Το Gmsh παρέχει πολύ ισχυρές δυνατότητες, είτε σε μορφή γραφικού περιβάλλοντος είτε σε μορφή προγραμματιστικών εργαλείων, για τη γέννηση πλεγμάτων σε σύνθετες γεωμετρίες. Η επικοινωνία των 2 λογισμικών, σε σειριακή ή παράλληλη επεξεργασία, είναι βελτιστοποιημένη.
- Ο τρόπος δόμησης του λογισμικού FEniCS σε μορφή βιβλιοθηκών Python/C++ επιτρέπει την άμεση επικοινωνία και με άλλες εξωτερικές βιβλιοθήκες που ο χρήστης επιθυμεί να εισάγει. Στη παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε η εξωτερική βιβλιοθήκη multiprocessing για την επιτάχυνση της παραμετρικής επίλυσης (για διαφορετικές αποστάσεις μεταξύ των μαγνητικών σφαιρών).

Τα αποτελέσματα της επίλυσης για τις αλληλεπιδράσεις στο σύστημα σφαιρών με μαγνητική επιδεκτικότητα οδηγούν συνοπτικά στα παρακάτω συμπεράσματα:

- Η ισχύς και το εύρος των αλληλεπιδράσεων (με βάση το μέτρο της μαγνητικής δύναμης) είναι σημαντικά ασθενέστερα σε σχέση με την ιδανική περίπτωση διπόλου-διπόλου.
- Σε αντίθεση με την συμπεριφορά διπόλου-διπόλου, το μέτρο της ελκτικής δύναμης δεν είναι ίσο με το μέτρο της αντίστοιχης απωστικής δύναμης, έπειτα από κατάλληλο μετασχηματισμό των σχετικών προσανατολισμών των διανυσμάτων μαγνητικής ροπής των σφαιρών, λόγω της ασύμμετρης παραμόρφωσης του μαγνητικού πεδίου.
- Η προσαρμογή τύπου νόμου δύναμης (powerlaw) στα αποτελέσματα της μαγνητικής δύναμης αποκαλύπτει μια επιπλέον ασθενέστερη συνεισφορά της διακεντρικής απόστασης, για όλες τις περιπτώσεις σχετικών προσανατολισμών, ανάλογη του $\sim \frac{1}{\delta^9}$.

Προτάσεις για περαιτέρω έρευνα

Το αντικείμενο μελέτης στη παρούσα μεταπτυχιακή εργασία θα μπορούσε να επεκταθεί σε πολλαπλά συστήματα μαγνητικών σφαιρών, σε μόνιμες ή μη μόνιμες συνθήκες, για τη μελέτη δημιουργίας δικτύων και τον υπολογισμό της ελάχιστης ενέργειας αυτών των συστημάτων [30–34]. Αυτοί οι υπολογισμοί μπορούν να είναι χρήσιμοι στη μελέτη διεργασιών διαχωρισμού μαγνητικών σωματιδίων όπου παρουσιάζονται φαινόμενα συσσώρευσης και συσσωμάτωσης (agglomeration). Επίσης άλλη μια σχετική κατηγορία προβλημάτων για τα οποία θα μπορούσε να επεκταθεί το υπολογιστικό μοντέλο είναι τα προβλήματα μαγνητο-υδροστατικής, τα οποία είναι μη γραμμικά και παρουσιάζουν πολλαπλότητα λύσεων ως προς γεωμετρικές και φυσικές παραμέτρους [35–38]. Αριθμητικές μέθοδοι για την αντιμετώπιση πολλαπλότητας λύσεων με το λογισμικό FEniCS έχουν ήδη παρουσιαστεί σε πρόσφατη διπλωματική εργασία [39]. Για τη περαιτέρω βελτίωση της δομής του υπολογιστικού κώδικα και την ελαχιστοποίηση της ανάγκης επικοινωνίας με το λογισμικό Gmsh θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί η έκδοση pygmsh η οποία είναι δομημένη σε μορφή βιβλιοθήκης Python.

Βιβλιογραφία

1. Larson, M.G.; Bengzon, F. *The Finite Element Method: Theory, Implementation, and Applications*; Springer Science & Business Media, 2013; ISBN 978-3-642-33287-6.
2. Μπουντουβής, Α.Γ. *Υπολογιστική Ανάλυση Με Τη Μέθοδο Των Πεπερασμένων Στοιχείων, Εισαγωγικές Σημειώσεις*; ΕΜΠ: Αθήνα, 1992;

3. Cockburn, B.; Karniadakis, G.E.; Shu, C.-W. *Discontinuous Galerkin Methods: Theory, Computation and Applications*; Springer Science & Business Media, 2012; ISBN 978-3-642-59721-3.
4. Logg, A.; Mardal, K.-A.; Wells, G. *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method: The FEniCS Book*; Springer Science & Business Media, 2012; ISBN 978-3-642-23099-8.
5. Langtangen, H.P.; Logg, A. *Solving PDEs in Python : The FEniCS Tutorial I*; Springer Nature, 2016; ISBN 978-3-319-52462-7.
6. Alnæs, M.; Blechta, J.; Hake, J.; Johansson, A.; Kehlet, B.; Logg, A.; Richardson, C.; Ring, J.; Rognes, M.E.; Wells, G.N. The FEniCS Project Version 1.5. *Arch. Numer. Softw.* **2015**, *3*, doi:10.11588/ans.2015.100.20553.
7. Logg, A.; Wells, G.N. DOLFIN: Automated Finite Element Computing. *ACM Trans. Math. Softw.* **2010**, *37*, 20:1-20:28, doi:10.1145/1731022.1731030.
8. Alnæs, M.S.; Logg, A.; Ølgaard, K.B.; Rognes, M.E.; Wells, G.N. Unified Form Language: A Domain-Specific Language for Weak Formulations of Partial Differential Equations. *ACM Trans. Math. Softw.* **2014**, *40*, 9:1-9:37, doi:10.1145/2566630.
9. Kirby, R.C.; Logg, A. A Compiler for Variational Forms. *ACM Trans. Math. Softw.* **2006**, *32*, 417–444, doi:10.1145/1163641.1163644.
10. Aharoni, A.; Aharoni, R.K.P. of T.M.A. *Introduction to the Theory of Ferromagnetism*; Oxford University Press, 2000; ISBN 978-0-19-850808-3.
11. Fernow, R.C. *Principles of Magnetostatics*; Cambridge University Press, 2016; ISBN 978-1-107-16112-2.
12. Castro, A.B. de; Gomez, D.; Salgado, P. *Mathematical Models and Numerical Simulation in Electromagnetism*; Springer, 2014; ISBN 978-3-319-02949-8.
13. Developments in Data Storage : Materials Perspective | S N Piramanayagam; Chong Tow Chong; Wiley InterScience (Online Service) | Download Available online: <https://gr1lib.org/book/2049979/e4cac0> (accessed on 9 June 2021).
14. Jackson, J.D. *Classical Electrodynamics, 2nd Edition*; 2nd edition.; Wiley: New York, 1975; ISBN 978-0-471-43132-9.
15. Liorzou, F.; Phelps, B.; Atherton, D.L. Macroscopic Models of Magnetization. *IEEE Trans. Magn.* **2000**, *36*, 418–428, doi:10.1109/20.825802.
16. Glane, S.; Reich, F.A.; Müller, W.H. Modeling of Non-Ideal Hard Permanent Magnets with an Affine-Linear Model, Illustrated for a Bar and a Horseshoe Magnet. *Contin. Mech. Thermodyn.* **2017**, *29*, 1313–1333, doi:10.1007/s00161-017-0578-6.
17. Mehdizadeh, A.; Mei, R.; Klausner, J.F.; Rahmatian, N. Interaction Forces between Soft Magnetic Particles in Uniform and Non-Uniform Magnetic Fields. *Acta Mech. Sin.* **2010**, *26*, 921–929, doi:10.1007/s10409-010-0383-y.
18. Edwards, B.F.; Edwards, J.M. Dynamical Interactions between Two Uniformly Magnetized Spheres. *Eur. J. Phys.* **2016**, *38*, 015205, doi:10.1088/0143-0807/38/1/015205.
19. Edwards, B.F.; Riffe, D.M.; Ji, J.-Y.; Booth, W.A. Interactions between Uniformly Magnetized Spheres. *Am. J. Phys.* **2017**, *85*, 130–134, doi:10.1119/1.4973409.
20. Abert, C.; Exl, L.; Selke, G.; Drews, A.; Schrefl, T. Numerical Methods for the Stray-Field Calculation: A Comparison of Recently Developed Algorithms. *J. Magn. Magn. Mater.* **2013**, *326*, 176–185, doi:10.1016/j.jmmm.2012.08.041.
21. Abert, C.; Exl, L.; Bruckner, F.; Drews, A.; Suess, D. Magnum.Fe: A Micromagnetic Finite-Element Simulation Code Based on FEniCS. *J. Magn. Magn. Mater.* **2013**, *345*, 29–35, doi:10.1016/j.jmmm.2013.05.051.
22. Abert, C.; Ruggeri, M.; Bruckner, F.; Vogler, C.; Hrkac, G.; Praetorius, D.; Suess, D. A Three-Dimensional Spin-Diffusion Model for Micromagnetics. *Sci. Rep.* **2015**, *5*, 14855, doi:10.1038/srep14855.

23. Abert, C. Micromagnetics and Spintronics: Models and Numerical Methods. *Eur. Phys. J. B* **2019**, *92*, 120, doi:10.1140/epjb/e2019-90599-6.
24. Bruckner, F.; Abert, C.; Wautischer, G.; Huber, C.; Vogler, C.; Hinze, M.; Suess, D. Solving Large-Scale Inverse Magnetostatic Problems Using the Adjoint Method. *Sci. Rep.* **2017**, *7*, 40816, doi:10.1038/srep40816.
25. Ren, X.; Thabuis, A.; Hannukainen, A.; Perriard, Y. Shape Optimization of Soft Magnetic Composites Using Level-Set Method. *IEEE Trans. Magn.* **2021**, *57*, 1–8, doi:10.1109/TMAG.2021.3064185.
26. Ren, Z.; Razek, A. Force Calculation by Maxwell Stress Tensor in 3D Hybrid Finite Element-Boundary Integral Formulation. *IEEE Trans. Magn.* **1990**, *26*, 2774–2776, doi:10.1109/20.104869.
27. Schwarz, S. Electromagnetic Forces and the Energy-Momentum Tensor in the Presence of Electric Polarization and Magnetization. *Int. J. Eng. Sci.* **1992**, *30*, 963–982, doi:10.1016/0020-7225(92)90023-A.
28. Geuzaine, C.; Remacle, J.-F. Gmsh: A 3-D Finite Element Mesh Generator with Built-in Pre- and Post-Processing Facilities. *Int. J. Numer. Methods Eng.* **2009**, *79*, 1309–1331, doi:https://doi.org/10.1002/nme.2579.
29. Ahrens, J.; Geveci, B.; Law, C. ParaView: An End-User Tool for Large-Data Visualization. *undefined* **2005**.
30. Stevens, null; Grest, null Structure of Soft-Sphere Dipolar Fluids. *Phys. Rev. E Stat. Phys. Plasmas Fluids Relat. Interdiscip. Top.* **1995**, *51*, 5962–5975, doi:10.1103/physreve.51.5962.
31. Wen, W.; Kun, F.; Pál, K.F.; Zheng, D.W.; Tu, K.N. Aggregation Kinetics and Stability of Structures Formed by Magnetic Microspheres. *Phys. Rev. E Stat. Phys. Plasmas Fluids Relat. Interdiscip. Top.* **1999**, *59*, R4758-4761, doi:10.1103/physreve.59.r4758.
32. Hynninen, A.-P.; Dijkstra, M. Phase Diagram of Dipolar Hard and Soft Spheres: Manipulation of Colloidal Crystal Structures by an External Field. *Phys. Rev. Lett.* **2005**, *94*, 138303, doi:10.1103/PhysRevLett.94.138303.
33. Hynninen, A.-P.; Dijkstra, M. Phase Behavior of Dipolar Hard and Soft Spheres. *Phys. Rev. E* **2005**, *72*, 051402, doi:10.1103/PhysRevE.72.051402.
34. Kögel, A.; Sánchez, P.A.; Maretzki, R.; Dumont, T.; Pyanzina, E.S.; Kantorovich, S.S.; Richter, R. Coarsening Dynamics of Ferromagnetic Granular Networks—Experimental Results and Simulations. *Soft Matter* **2018**, *14*, 1001–1015, doi:10.1039/C7SM00796E.
35. Gollwitzer, C.; Matthies, G.; Richter, R.; Rehberg, I.; Tobiska, L. The Surface Topography of a Magnetic Fluid: A Quantitative Comparison between Experiment and Numerical Simulation. *J. Fluid Mech.* **2007**, *571*, 455–474, doi:10.1017/S0022112006003466.
36. Gollwitzer, C.; Spyropoulos, A.N.; Papathanasiou, A.G.; Boudouvis, A.G.; Richter, R. The Normal Field Instability under Side-Wall Effects: Comparison of Experiments and Computations. *New J. Phys.* **2009**, *11*, 053016, doi:10.1088/1367-2630/11/5/053016.
37. Habera, M.; Hron, J. Modelling of a Free-Surface Ferrofluid Flow. *J. Magn. Magn. Mater.* **2017**, *431*, 157–160, doi:10.1016/j.jmmm.2016.10.045.
38. Spyropoulos, A.N.; Papathanasiou, A.G.; Boudouvis, A.G. The 2-3-4 Spike Competition in the Rosensweig Instability. *J. Fluid Mech.* **2019**, *870*, 389–404, doi:10.1017/jfm.2019.277.
39. Σουραής, Α.Γ. Επίλυση μη γραμμικών προβλημάτων και εφαρμογή μεθόδων παραμετρικού βηματισμού με τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων στην υπολογιστική πλατφόρμα FEniCS. Διπλωματική Εργασία, ΕΜΠ: Αθήνα, 2019.

Παράρτημα Α. Επίδραση υπολογιστικού πλέγματος στη λύση

Η μελέτη επίδρασης του υπολογιστικού πλέγματος πραγματοποιήθηκε για τη περίπτωση των ιδανικών σφαιρών με συμπεριφορά διπόλου-διπόλου όπου είναι γνωστή η αναλυτική λύση για τη μαγνητική δύναμη. Για τη πραγματοποίηση της μελέτης παρέμεινε σταθερός ο σχετικός προσανατολισμός των διανυσμάτων μαγνητικής ροπής των σφαιρών, η τάξη των συναρτήσεων βάσης καθώς και οι διαστάσεις του χωρίου που περικλύεται από το ασυμπτωτικό σύνορο. Τα χαρακτηριστικά των ενδεικτικών πλεγμάτων που χρησιμοποιήθηκαν παρουσιάζονται στο πίνακα Α.1 και Α.2. Εξετάζονται 2 ενδεικτικές περιπτώσεις διακεντρικών αποστάσεων $\delta \approx 0.003 \text{ m}$ και $\delta = 0.004 \text{ m}$. Τα αντίστοιχα χαρακτηριστικά των πλεγμάτων μεταξύ των 2 περιπτώσεων παρουσιάζουν κάποιες ελάχιστες διαφοροποιήσεις καθώς αλλάζει η γεωμετρία. Ο σχετικός προσανατολισμός των διανυσμάτων μαγνητικής ροπής ταυτίζεται με τη πρώτη περίπτωση της ενότητας 3.3Γ).

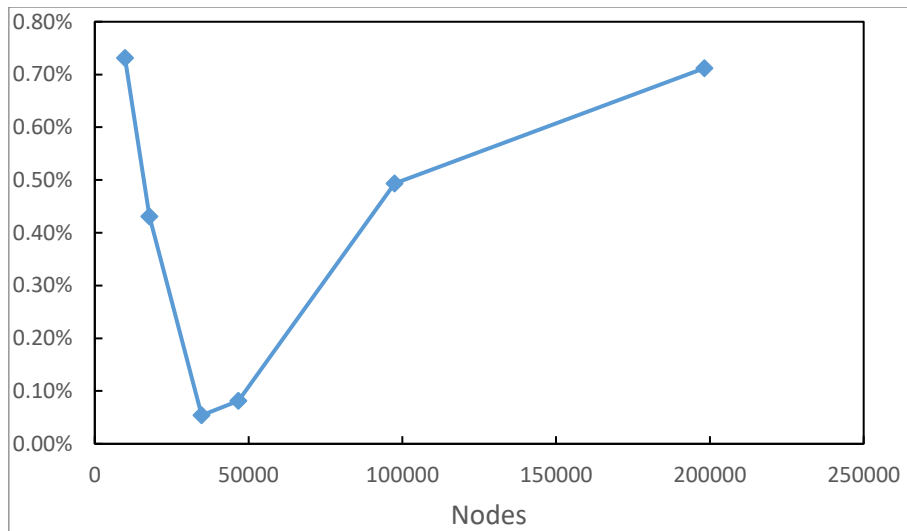
| | Πλήθος τετραέδρων | Πλήθος κόμβων |
|----------|-------------------|---------------|
| Πλέγμα 1 | 64409 | 9816 |
| Πλέγμα 2 | 114975 | 17789 |
| Πλέγμα 3 | 233580 | 34724 |
| Πλέγμα 4 | 299856 | 46676 |
| Πλέγμα 5 | 623253 | 97454 |
| Πλέγμα 6 | 1263946 | 198195 |

Πίνακας Α.1 Χαρακτηριστικά υπολογιστικών πλεγμάτων που χρησιμοποιήθηκαν στη μελέτη ανεξαρτησίας της λύσης από το υπολογιστικό πλέγμα, για την ελάχιστη διακεντρική απόσταση $\delta \approx 0.003 \text{ m}$ μεταξύ των σφαιρών.

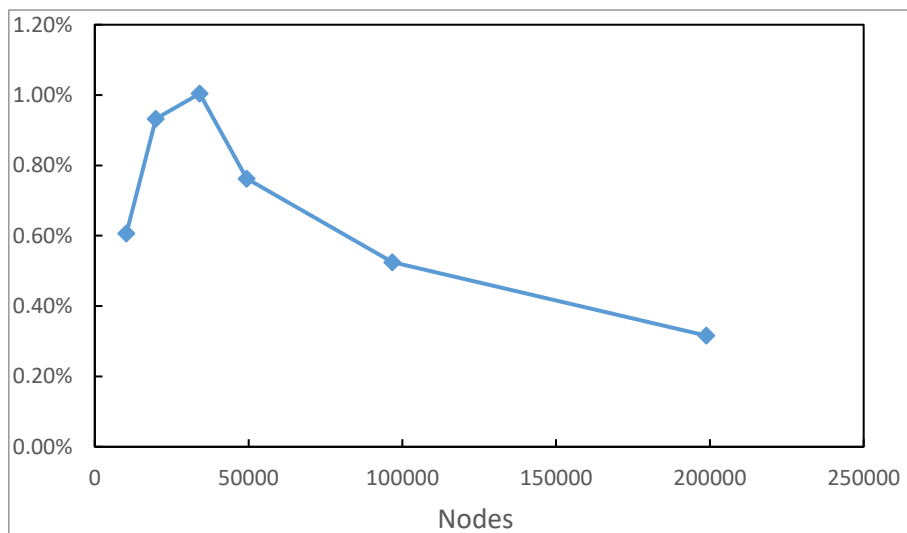
| | Πλήθος τετραέδρων | Πλήθος κόμβων |
|----------|-------------------|---------------|
| Πλέγμα 1 | 68746 | 10281 |
| Πλέγμα 2 | 130051 | 19885 |
| Πλέγμα 3 | 235255 | 34149 |
| Πλέγμα 4 | 327397 | 49397 |
| Πλέγμα 5 | 683464 | 96791 |
| Πλέγμα 6 | 1361774 | 198823 |

Πίνακας Α.2 Χαρακτηριστικά υπολογιστικών πλεγμάτων που χρησιμοποιήθηκαν στη μελέτη ανεξαρτησίας της λύσης από το υπολογιστικό πλέγμα, για διακεντρική απόσταση $\delta = 0.004 \text{ m}$ μεταξύ των σφαιρών.

Στα διαγράμματα Α.1 και Α.2 παρουσιάζονται οι σχετικές % αποκλίσεις μεταξύ αναλυτικής και υπολογιστικής λύσης με το λογισμικό FEniCS για το μέτρο της μαγνητικής δύναμης. Παρατηρείται ότι και στις 2 περιπτώσεις το σχετικό σφάλμα γίνεται μικρότερο του 1% όταν το πλέγμα έχει ~ 50000 υπολογιστικούς κόμβους. Λαμβάνοντας υπόψη και το υπολογιστικό κόστος για τη διαχείριση και επίλυση σε πυκνότερο υπολογιστικό πλέγμα, επιλέγεται ως ικανοποιητικής πυκνότητας το πλέγμα 4.



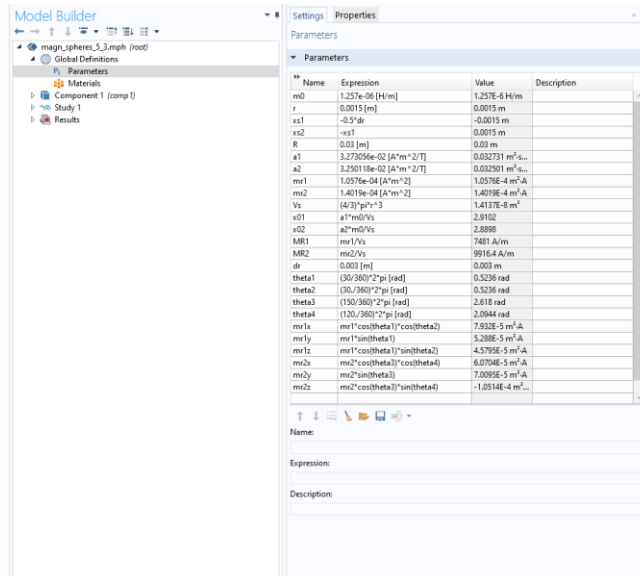
Διάγραμμα A.1 Σχετική % απόκλιση μέτρου μαγνητικής δύναμης υπολογισμένου αναλυτικά με το μοντέλο διπόλου-διπόλου και υπολογιστικά με το λογισμικό FEniCS, συναρτήσει του πλήθους των κόμβων του πλέγματος, για διακεντρική απόσταση $\delta \approx 0.003 \text{ m}$.



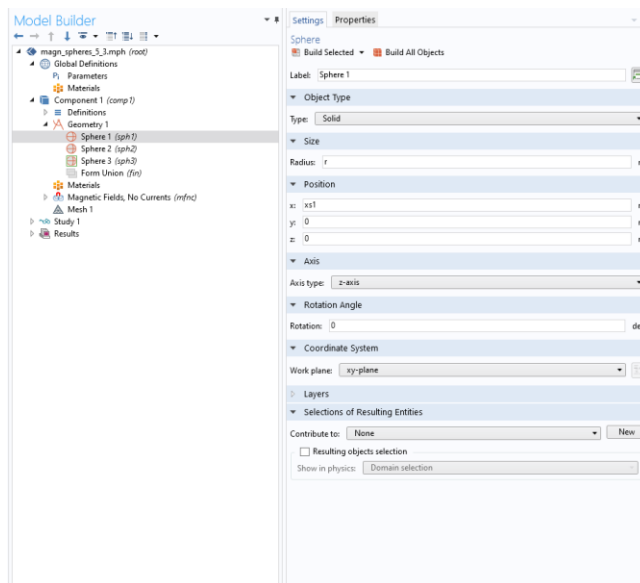
Διάγραμμα A.2 Σχετική % απόκλιση μέτρου μαγνητικής δύναμης υπολογισμένου αναλυτικά με το μοντέλο διπόλου-διπόλου και υπολογιστικά με το λογισμικό FEniCS, συναρτήσει του πλήθους των κόμβων του πλέγματος, για διακεντρική απόσταση $\delta = 0.004 \text{ m}$.

Παράρτημα Β. Υπολογιστικό μοντέλο στο λογισμικό COMSOL®

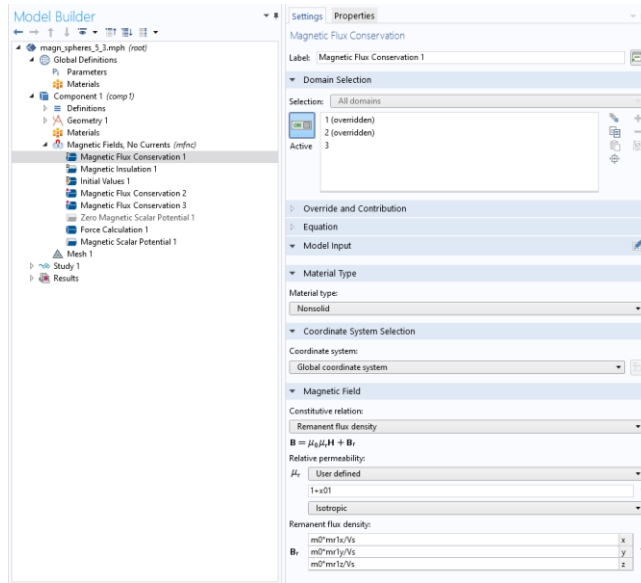
Η επίλυση του προβλήματος πραγματοποιείται με την έκδοση του λογισμικού COMSOL® 5.3a. Ως physics module επιλέγεται στις 3 διαστάσεις (3D) το ACDC/Magnetic fields, No Currents(mfnc) με επιλύτη Stationary Solver. Στις παρακάτω εικόνες παρουσιάζεται ο σκελετός του μοντέλου.



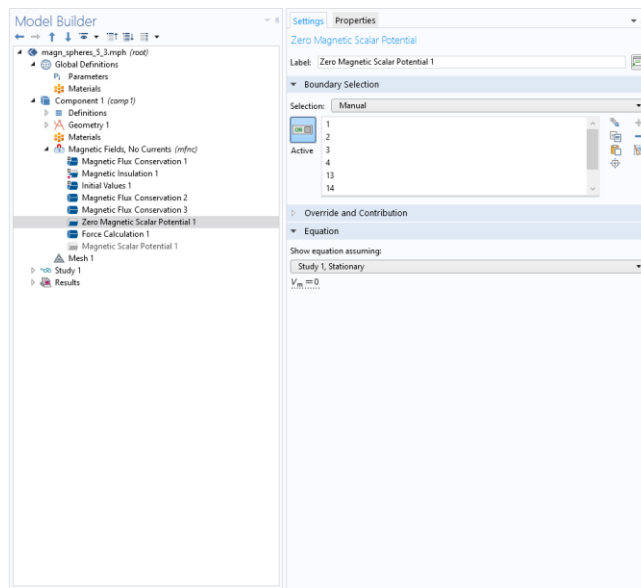
Εικόνα Β.1 Παράμετροι



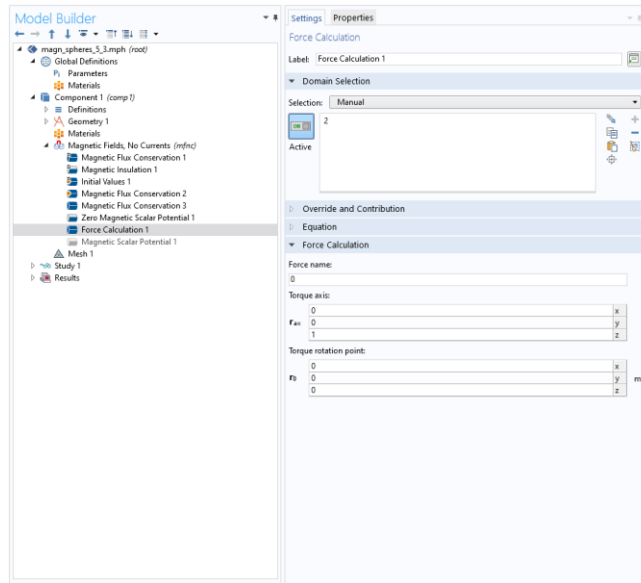
Εικόνα Β.2 Κατασκευή γεωμετρίας



Εικόνα Β.3 Διατήρηση βαθμωτού μαγνητικού δυναμικού



Εικόνα Β.4 Συνοριακή συνθήκη μηδενικού μαγνητικού δυναμικού στο ασυμπτωτικό σύνορο



Εικόνα Β.5 Υπολογισμός μαγνητικής δύναμης

Παράρτημα Γ. Αρχείο εισόδου για τη δημιουργία των υπολογιστικών πλεγμάτων με το λογισμικό Gmsh

$x_{s1} = -0.000;$

$x_{s2} = 0.004;$

$r_s = 0.0015;$

$R_s = 20 * 0.5 * (x_{s2} - x_{s1});$

$R_s = 0.03;$

$Point(1) = \{0.0, 0.0, 0.0\};$

$Point(2) = \{R_s, 0.0, 0.0\};$

$Point(3) = \{0, R_s, 0.0\};$

$Circle(1) = \{2, 1, 3\};$

$Point(4) = \{-R_s, 0.0, 0.0\};$

$Point(5) = \{0, -R_s, 0.0\};$

$Circle(2) = \{3, 1, 4\};$

$Circle(3) = \{4, 1, 5\};$

$Circle(4) = \{5, 1, 2\};$

$Point(6) = \{0, 0, -R_s\};$

$Point(7) = \{0, 0, R_s\};$

$Circle(5) = \{3, 1, 6\};$

$Circle(6) = \{6, 1, 5\};$

Circle(7) = {5,1,7};
 Circle(8) = {7,1,3};
 Circle(9) = {2,1,7};
 Circle(10) = {7,1,4};
 Circle(11) = {4,1,6};
 Circle(12) = {6,1,2};
 Curve Loop(13) = {2,8,-10};
 Surface(14) = {13};
 Curve Loop(15) = {10,3,7};
 Surface(16) = {15};
 Curve Loop(17) = {-8,-9,1};
 Surface(18) = {17};
 Curve Loop(19) = {-11,-2,5};
 Surface(20) = {19};
 Curve Loop(21) = {-5,-12,-1};
 Surface(22) = {21};
 Curve Loop(23) = {-3,11,6};
 Surface(24) = {23};
 Curve Loop(25) = {-7,4,9};
 Surface(26) = {25};
 Curve Loop(27) = {-4,12,-6};
 Surface(28) = {27};
 Surface Loop(29) = {28,26,16,14,20,24,22,18};
 p_n=7 ;
 circle_n=12 ;
 i_n=17 ;
 Point(1+p_n) = {xs1,0.0,0.0};
 Point(2+p_n) = {xs1+rs,0.0,0.0};
 Point(3+p_n) = {xs1,rs,0.0};
 Circle(1+circle_n) = {2+p_n,1+p_n,3+p_n};
 Point(4+p_n) = {xs1-rs,0.0,0.0};
 Point(5+p_n) = {xs1,-rs,0.0};
 Circle(2+circle_n) = {3+p_n,1+p_n,4+p_n};
 Circle(3+circle_n) = {4+p_n,1+p_n,5+p_n};
 Circle(4+circle_n) = {5+p_n,1+p_n,2+p_n};

```

Point(6+p_n) = {xs1,0.0,-rs};
Point(7+p_n) = {xs1,0.0,rs};
Circle(5+circle_n) = {3+p_n,1+p_n,6+p_n};
Circle(6+circle_n) = {6+p_n,1+p_n,5+p_n};
Circle(7+circle_n) = {5+p_n,1+p_n,7+p_n};
Circle(8+circle_n) = {7+p_n,1+p_n,3+p_n};
Circle(9+circle_n) = {2+p_n,1+p_n,7+p_n};
Circle(10+circle_n) = {7+p_n,1+p_n,4+p_n};
Circle(11+circle_n) = {4+p_n,1+p_n,6+p_n};
Circle(12+circle_n) = {6+p_n,1+p_n,2+p_n};
Curve Loop(13+i_n) = {2+circle_n,8+circle_n,-10-circle_n};
Surface(14+i_n) = {13+i_n};
Curve Loop(15+i_n) = {10+circle_n,3+circle_n,7+circle_n};
Surface(16+i_n) = {15+i_n};
Curve Loop(17+i_n) = {-8-circle_n,-9-circle_n,1+circle_n};
Surface(18+i_n) = {17+i_n};
Curve Loop(19+i_n) = {-11-circle_n,-2-circle_n,5+circle_n};
Surface(20+i_n) = {19+i_n};
Curve Loop(21+i_n) = {-5-circle_n,-12-circle_n,-1-circle_n};
Surface(22+i_n) = {21+i_n};
Curve Loop(23+i_n) = {-3-circle_n,11+circle_n,6+circle_n};
Surface(24+i_n) = {23+i_n};
Curve Loop(25+i_n) = {-7-circle_n,4+circle_n,9+circle_n};
Surface(26+i_n) = {25+i_n};
Curve Loop(27+i_n) = {-4-circle_n,12+circle_n,-6-circle_n};
Surface(28+i_n) = {27+i_n};
Surface Loop(29+i_n) = {28+i_n,26+i_n,16+i_n,14+i_n,20+i_n,24+i_n,22+i_n,18+i_n};
p_n2=14 ;
circle_n2=24 ;
i_n2=34 ;
Point(1+p_n2) = {xs2,0.0,0.0};
Point(2+p_n2) = {xs2+rs,0.0,0.0};
Point(3+p_n2) = {xs2,rs,0.0};
Circle(1+circle_n2) = {2+p_n2,1+p_n2,3+p_n2};
Point(4+p_n2) = {xs2-rs,0.0,0.0};

```

Point(5+p_n2) = {xs2,-rs,0.0};
 Circle(2+circle_n2) = {3+p_n2,1+p_n2,4+p_n2};
 Circle(3+circle_n2) = {4+p_n2,1+p_n2,5+p_n2};
 Circle(4+circle_n2) = {5+p_n2,1+p_n2,2+p_n2};
 Point(6+p_n2) = {xs2,0.0,-rs};
 Point(7+p_n2) = {xs2,0.0,rs};
 Circle(5+circle_n2) = {3+p_n2,1+p_n2,6+p_n2};
 Circle(6+circle_n2) = {6+p_n2,1+p_n2,5+p_n2};
 Circle(7+circle_n2) = {5+p_n2,1+p_n2,7+p_n2};
 Circle(8+circle_n2) = {7+p_n2,1+p_n2,3+p_n2};
 Circle(9+circle_n2) = {2+p_n2,1+p_n2,7+p_n2};
 Circle(10+circle_n2) = {7+p_n2,1+p_n2,4+p_n2};
 Circle(11+circle_n2) = {4+p_n2,1+p_n2,6+p_n2};
 Circle(12+circle_n2) = {6+p_n2,1+p_n2,2+p_n2};
 Curve Loop(13+i_n2) = {2+circle_n2,8+circle_n2,-10-circle_n2};
 Surface(14+i_n2) = {13+i_n2};
 Curve Loop(15+i_n2) = {10+circle_n2,3+circle_n2,7+circle_n2};
 Surface(16+i_n2) = {15+i_n2};
 Curve Loop(17+i_n2) = {-8-circle_n2,-9-circle_n2,1+circle_n2};
 Surface(18+i_n2) = {17+i_n2};
 Curve Loop(19+i_n2) = {-11-circle_n2,-2-circle_n2,5+circle_n2};
 Surface(20+i_n2) = {19+i_n2};
 Curve Loop(21+i_n2) = {-5-circle_n2,-12-circle_n2,-1-circle_n2};
 Surface(22+i_n2) = {21+i_n2};
 Curve Loop(23+i_n2) = {-3-circle_n2,11+circle_n2,6+circle_n2};
 Surface(24+i_n2) = {23+i_n2};
 Curve Loop(25+i_n2) = {-7-circle_n2,4+circle_n2,9+circle_n2};
 Surface(26+i_n2) = {25+i_n2};
 Curve Loop(27+i_n2) = {-4-circle_n2,12+circle_n2,-6-circle_n2};
 Surface(28+i_n2) = {27+i_n2};
 Surface Loop(29+i_n2) = {28+i_n2,26+i_n2,16+i_n2,14+i_n2,20+i_n2,24+i_n2,22+i_n2,18+i_n2};
 Volume(30+i_n2)={29+i_n} ;
 Volume(31+i_n2)={29+i_n2} ;
 Volume(32+i_n2)={29,29+i_n,29+i_n2} ;
 Physical Surface(1) = {28,26,16,14,20,24,22,18};

```

Physical Surface(2) = {28+i_n,26+i_n,16+i_n,14+i_n,20+i_n,24+i_n,22+i_n,18+i_n};
Physical Surface(3) = {28+i_n,26+i_n,16+i_n,14+i_n,20+i_n,24+i_n,22+i_n,18+i_n};
Physical Volume(1)=30+i_n2 ;
Physical Volume(2)=31+i_n2 ;
Physical Volume(3)=32+i_n2 ;

//+
Transfinite Curve {33, 36, 28, 28, 25, 29, 30, 31, 32, 26, 34, 35, 27} =22 Using Progression 1;
Transfinite Curve {13, 16, 24, 21, 19, 22, 20, 14, 21, 17, 16, 18, 23, 15} = 22 Using Progression 1;
Transfinite Curve {5, 7, 8, 2, 1, 9, 12, 4, 11, 6, 3, 10} =22 Using Progression 1;

```

Παράρτημα Δ. Διαθέσιμοι Επιλύτες/προσταθεροποιητές

Για την επίλυση των γραμμικών αλγεβρικών συστημάτων που προέκυψαν από την εφαρμογή της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων χρησιμοποιήθηκε ο επαναληπτικός επιλύτης GMRES σε συνδυασμό με ένα προσταθεροποιητή μερικής αποικοδόμησης (incomplete lu decomposition). Το FEniCS διαθέτει ένα μεγάλο πλήθος άμεσων ή επαναληπτικών επιλυτών και προσταθεροποιητών το οποίο επεκτείνεται διαρκώς σε σχέση με τις αρχικές εκδόσεις. Με τις παρακάτω 2 εντολές είναι δυνατή η εκτύπωση των διαθέσιμων μεθόδων. Το output παρουσιάζεται στην εικόνα Δ.1.

Python Code

```

list_linear_solver_methods()
list_krylov_solver_preconditioners()

```

| Solver method | Description |
|-----------------|--|
| bicgstab | Biconjugate gradient stabilized method |
| cg | Conjugate gradient method |
| default | default linear solver |
| gmres | Generalized minimal residual method |
| minres | Minimal residual method |
| mumps | MUMPS (MULTifrontal Massively Parallel Sparse direct Solver) |
| petsc | PETSc built in LU solver |
| richardson | Richardson method |
| superlu | SuperLU |
| tfqmr | Transpose-free quasi-minimal residual method |
| umfpack | UMFPACK (Unsymmetric MultiFrontal sparse LU factorization) |
| Preconditioner | Description |
| amg | Algebraic multigrid |
| default | default preconditioner |
| hypre_amg | Hypr algebraic multigrid (BoomerAMG) |
| hypre_euclid | Hypr parallel incomplete LU factorization |
| hypre_parasails | Hypr parallel sparse approximate inverse |
| icc | Incomplete Cholesky factorization |
| ilu | Incomplete LU factorization |
| jacobi | Jacobi iteration |
| none | No preconditioner |
| petsc_amg | PETSc algebraic multigrid |
| sor | Successive over-relaxation |

Εικόνα Δ.1 Διαθέσιμοι solvers και preconditioners στην έκδοση 2017.2.0

Η εφαρμογή των παρακάτω μεθόδων εξαρτάται από το πακέτο γραμμικής άλγεβρας που χρησιμοποιείται (PETSc, uBLAS, Epetra, MTL4), η επιλογή του οποίου μπορεί να γίνει ως εξής:

Python Code

```
parameters['linear_algebra_backend']=backendname
```

Παράρτημα Ε. Άλλες βιβλιοθήκες του FEniCS

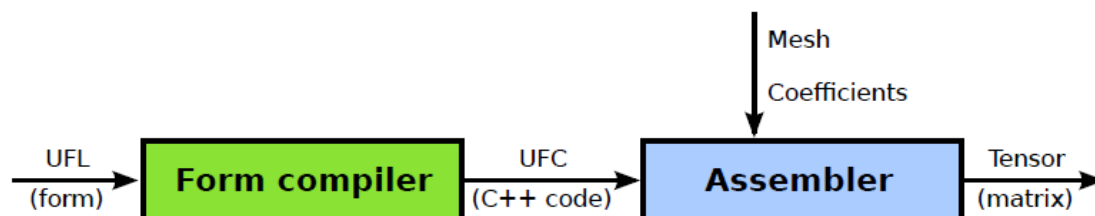
E.1 FIAT

Το FIAT (Finite Element Automatic Tabulator) είναι ένα προγραμματιστικό πακέτο Python το οποίο εξυπηρετεί την αυτόματη κατασκευή συναρτήσεων βάσης της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων. Το FIAT έχει τη δυνατότητα κατασκευής συναρτήσεων βάσης για ένα μεγάλο εύρος από κατηγορίες πεπερασμένων στοιχείων (γραμμές, τρίγωνα και τετράεδρα) όπως τα στοιχεία Lagrange, Raviart-Thomas, Brezzi-Douglas-Marini και Nedelec. Είναι επίσης ικανό να παράγει στοιχεία τανυστικών γινομένων (tensor-product elements) και έναν αριθμό από άλλα εξωτικά στοιχεία όπως τα Argyris, Hermite και Morley.

E.2 UFC

Ένα κεντρικό κομμάτι του FEniCS είναι η βιβλιοθήκη UFC (Unified Form-assembly Code). Το UFC είναι μια διεπαφή μεταξύ του συγκεκριμένου προβλήματος που επιλύεται και του γενικού περιεχομένου διαδικασιών που εφαρμόζονται σε όλα τα προγράμματα πεπερασμένων στοιχείων. Ειδικότερα ορίζει τη δομή και τη ταυτότητα του κώδικα που παράγεται από τους μεταγλωττιστές μορφών (form compilers) FFC και SFC για το DOLFIN. Η διεπαφή UFC εφαρμόζεται σε ένα μεγάλο εύρος προβλημάτων πεπερασμένων στοιχείων (περιλαμβάνοντας μεικτά πεπερασμένα στοιχεία ή μεθόδους discontinuous Galerkin) και μπορεί να χρησιμοποιείται σε συνδυασμό με βιβλιοθήκες όπου διαφέρουν κατά πολύ στο σχεδιασμό τους. Για αυτό το λόγο η διεπαφή δεν εξαρτάται από άλλα τμήματα ή βιβλιοθήκες του FEniCS και αποτελείται μόνο από μια συλλογή κλάσεων C++.

Από το Φεβρουάριο του 2014 το UFC ενσωματώθηκε στο FFC.



Εικόνα E.1 Διάγραμμα ροής της διαδικασίας εξαγωγής του αλγεβρικού συστήματος μετά τη διακριτοποίηση

E.3 INSTANT

Το instant είναι ένα μικρό python module για άμεση μεταγλώττιση (JIT-just in time compilation) κώδικα C++/C και μπορεί να συνδυαστεί αποδοτικά με τα εργαλεία παραγωγής κώδικα των DOLFIN, FFC και SCF.

Το Instant δεν είναι πλέον απαραίτητο μετά την έκδοση 2017.2.0 του FEniCS.

Παράρτημα Ζ. Οδηγίες εγκατάστασης του FEniCS μέσω του Docker

Μια από τις πιο σύγχρονες λύσεις για την εγκατάσταση λογισμικού σε διαφορετικού τύπου πλατφόρμες και λειτουργικά συστήματα είναι τα αποκαλούμενα Docker containers. Το FEniCS Project παρέχει containers υψηλής απόδοσης τα οποία λειτουργούν καλά σε όλα τα λειτουργικά συστήματα όπως τα Linux, Mac και Windows. Για να μπορούν να χρησιμοποιηθούν τα FEniCS containers θα πρέπει να εγκατασταθεί πρώτα το Docker. Η εγκατάσταση του Docker είναι απλή και οδηγίες περιλαμβάνονται στη διαδικτυακή σελίδα του Docker. Μετά την εγκατάσταση του Docker εκτελείται η παρακάτω εντολή στο τερματικό παράθυρο του Docker για την εγκατάσταση του FEniCS:

```
Terminal  
Terminal> curl -s https://get.fenicsproject.org | bash
```

Για την εκτέλεση του FEniCS χρησιμοποιείται η εντολή:

```
Terminal  
Terminal> fenicsproject run
```

Άλλες δυνατότητες και περιεχόμενα του FEniCS μπορούν να βρεθούν εκτελώντας την εντολή *FEniCSproject help*.