

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΤΟΜΕΑΣ ΙΙ: ΑΝΑΛΥΣΗΣ, ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ & ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΚΑΙ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

# ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ του **ΝΤΜΗΤΡΙΙ ΠΟΖΑΡΣΚΙΙ**

## ΜΗ ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ

## ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΩΝ ΧΗΜΙΚΗΣ ΑΠΟΘΕΣΗΣ ΑΠΟ ΑΤΜΟ

## ΜΕ ΔΙΑΣΥΝΔΕΣΗ ΕΜΠΟΡΙΚΟΥ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ ΡΕΥΣΤΟΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

## KAI ΠΗΓΑΙΟΥ ΚΩΔΙΚΑ ΥΠΟΒΟΗΘΟΥΜΕΝΗΣ ΣΥΓΚΛΙΣΗΣ

## ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ

## ΑΝΔΡΕΑΣ Γ. ΜΠΟΥΝΤΟΥΒΗΣ

Αθήνα

Ιούνιος 2012

## Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα Καθηγητή Ανδρέα Γ. Μπουντουβή για την ευκαιρία που μου έδωσε να πραγματοποιήσω τη διπλωματική μου εργασία σε συνεργασία με τον ίδιο και την ερευνητική του ομάδα. Τον ευχαριστώ για το χρόνο που διέθεσε αλλά και για τις πολύτιμες συμβουλές και διορθώσεις κατά τη συγγραφή της εργασίας, οι οποίες με καθοδήγησαν στην εξαγωγή των επιθυμητών αποτελεσμάτων.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Δρα Νικόλαο Χειμαριό για την συνεχή βοήθεια που μου παρείχε τόσο στην κατανόηση των διεργασιών CVD όσο και στην εκμάθηση της γλώσσας προγραμματισμού C και των βασικών αρχών προγραμματισμού.

Ευχαριστώ την Δρα Ελένη Κορωνάκη για την πολύτιμη βοήθεια που μου προσέφερε στα προβλήματα που αντιμετώπισα σχετιζόμενα με τον αλγόριθμο της RPM. Οι συζητήσεις μαζί της διευκόλυναν σημαντικά την εκπόνηση της εργασίας αυτής.

Ευχαριστώ τους Πέτρο Βασιλάκο και Μιχάλη Βλυσίδη για τις ενδιαφέρουσες συζητήσεις που είχαμε κατά την εκπόνηση της εργασίας αυτής και για την συμπαράστασή τους στις δυσκολίες που συνάντησα όσο εντός τόσο και εκτός σχολής.

Τέλος, ευχαριστώ την οικογένειά μου, τους γονείς μου Ελένη και Αλέξανδρο καθώς και την αδερφή μου Άννα-Μαρία για τη συμπαράστασή τους και την εμπιστοσύνη που έδειξαν στο πρόσωπό μου και στις δυνάμεις μου.

1

Περίληψη	4
Abstract	6
1. Εισαγωγή	8
1.1 Η διεργασία Χημικής Απόθεσης από Ατμό	8
1.2 Κινητική της ΧΑΑ	12
1.3 Οι εξισώσεις της ΧΑΑ	14
1.4 Η μέθοδος των πεπερασμένων όγκων	16
1.5 Διερεύνηση του χώρου των λύσεων	19
2. Κώδικας υποβοηθούμενης σύγκλισης	22
2.1 Μέθοδος αναδρομικής προβολής	22
2.1.1 Η διαδικασία σταθεροποίησης	24
2.1.2 Προσδιορισμός των <b>Ρ</b> και <b>Q</b>	27
2.1.3 Αύξηση της διάστασης της βάσης	28
2.1.4 Διατήρηση της ακρίβειας της βάσης	30
2.1.5 Μείωση της διάστασης της βάσης	31
2.1.6 Ο αριθμητικός αλγόριθμος: RPM	
2.2 Μέθοδος βηματισμού μήκους τόξου	
2.3 Τεχνικές λεπτομέρειες εφαρμογής	
2.4 Εφαρμογή στο διδιάστατο πρόβλημα του Bratu	44
3. 2D αντιδραστήρας ΧΑΑ	47

4. 3D αντιδραστήρας ΧΑΑ	53
5. Συμπεράσματα – Προοπτικές	66
6. Βιβλιογραφία	68

#### Περίληψη

Τα εμπορικά λογισμικά υπολογιστικών φαινομένων μεταφοράς (Fluent, Comsol κλπ), παρόλη την ευελιξία και τις δυνατότητές τους για ανάλυση πολύπλοκων προβλημάτων, αδυνατούν να αντιμετωπίσουν αποτελεσματικά συγκεκριμένα υπολογιστικά προβλήματα που οφείλονται στη μη γραμμικότητα των εξισώσεων που επιλύουν. Συγκεκριμένα, όταν υπάρχουν πολλαπλές λύσεις, δε συγκλίνουν με συστηματικό τρόπο στις ευσταθείς λύσεις και αποτυγχάνουν τελείως να συγκλίνουν στις ασταθείς. Συνέπεια αυτής της αδυναμίας είναι η ελλιπής «χαρτογράφηση» του χώρου των λύσεων των προβλημάτων, δηλαδή της αποτύπωσης της εξάρτησης των λύσεων από τις παραμέτρους: σε τιμές παραμέτρων όπου οι λύσεις είναι πολλαπλές και με εναλλασσόμενη ευστάθεια, κάποιες από αυτές «χάνονται» ως μη υπολογιζόμενες. Είναι απαραίτητο να χρησιμοποιηθούν, σε συνδυασμό με το εμπορικό λογισμικό, εξωτερικοί κώδικες υποβοηθούμενης σύγκλισης οι οποίοι «καθοδηγούν» τον εμπορικό ώστε να βαδίσει συστηματικά στο χώρο των λύσεων χωρίς να χάσει καμία από τις ενδιαφέρουσες.

Στη διπλωματική εργασία θα γίνει σύζευξη του κώδικα Fluent με ανοιχτό κώδικα που συνδυάζει τη μέθοδο αναδρομικής προβολής (recursive projection method) με τη μέθοδο παραμετρικού βηματισμού μήκους-τόξου (arc-length continuation) για την επίλυση προβλημάτων που προέρχονται από διεργασίες χημικής απόθεσης από ατμό. Σκοπός των υπολογισμών είναι ο εντοπισμός βέλτιστων «παραθύρων» λειτουργίας των αντιδραστήρων απόθεσης, δηλαδή τιμών παραμέτρων λειτουργίας του αντιδραστήρα όπου προκύπτουν λύσεις των εξισώσεων που υπερέχουν έναντι των άλλων. Τα κριτήρια υπεροχής αφορούν σε συγκεκριμένα

4

χαρακτηριστικά της ροής μέσα στον αντιδραστήρα καθώς αυτή επηρεάζει άμεσα τα χαρακτηριστικά του αναπτυσσόμενου από την απόθεση υμενίου, όπως ρυθμός ανάπτυξης και ομοιομορφία πάχους.

Τα αποτελέσματα που προέκυψαν επιβεβαίωσαν την ύπαρξη σε 2D γεωμετρίες δύο διαφορετικών κλάδων ευσταθών λύσεων καθώς και ενός ασταθούς κλάδου που τους συνδέει. Εντοπίστηκε το εύρος παραμέτρων όπου μπορούν να συνυπάρξουν οι δύο διαφορετικές λύσεις. Αντίστοιχα σε 3D γεωμετρίες βρέθηκαν δύο διαφορετικοί κλάδοι ευσταθών λύσεων και επιβεβαιώθηκε η ρήξη της συμμετρίας σε αξονοσυμμετρικούς αντιδραστήρες. Επόμενο βήμα είναι να προσδιοριστεί πώς συνδέονται οι ευσταθείς κλάδοι στους 3D αντιδραστήρες.

#### Abstract

Computational fluid dynamics (CFD) codes (e.g. Fluent, Comsol), despite their overall flexibility and ability to solve complex problems in many fields of science and engineering, are practically unable to solve efficiently particular computational problems, which are caused by the non-linearity of the equations being solved. Specifically, when there are multiple solutions, they are unable to converge in a systematic way at stable solutions and they fail completely to converge at unstable solutions. The result of this weakness is the incomplete "mapping" of the solution space of those problems. In other words it is not possible to illustrate entirely the dependencies between the problem parameters and the solutions of the problem. At parameter values, where there are multiple solutions, some of them are "lost" as noncalculated. It is necessary that alongside with commercial CFD codes, external source codes are used. Those source codes assist and "guide" the commercial ones, in order to step systematically through the solution space, without losing any interesting solution.

This work presents a framework that couples the CFD code Fluent with an open source code, which is a combination of the recursive projection method (RPM) and the arc-length continuation method. The framework is used for the solution of chemical vapor deposition (CVD) problems. The purpose of the calculations is to find optimal operating conditions for the CVD reactors, namely parameter values that provide solutions better comparing to other solutions. The criteria that determine if one solution is better than another one have to do with specific characteristics of the

flow field inside the reactor and how it influences the properties of the deposited film. Such properties include the growth rate and uniformity of the deposited film.

The obtained results confirmed the existence of two different branches of stable solutions and one unstable branch in 2D geometries. The parameter range where the two different solutions can co-exist was found. In 3D geometries, two different branches of stable solutions were found and symmetry breaking in axisymmetric reactors was confirmed. The next step is determining in which way the stable branches are connected in 3D reactors.

# 1. Εισαγωγή

#### 1.1 Η διεργασία Χημικής Απόθεσης από Ατμό

Η διεργασία της χημικής απόθεσης από ατμό (ΧΑΑ) χρησιμοποιεί αντιδρώντα αέρια προς σχηματισμό λεπτών στερεών υμενίων (films). Σήμερα, η διεργασία αυτή εφαρμόζεται ευρέως στην παραγωγή μικρο – ηλεκτρονικών συσκευών εξαιτίας της εύκολης μεταβολής και προσαρμογής των συνθηκών παραγωγής των υμενίων στις εκάστοτε απαιτήσεις της βιομηχανίας. Λεπτά υμένια μετάλλων, ημιαγωγών, μονωτών και επιστρώσεων αποτίθενται σε στερεά δισκία (wafers) τα οποία στηρίζονται σε ειδικές επιφάνειες (substrates). Τα χημικά στοιχεία από τα οποία αποτελείται το υμένιο μεταφέρονται από την αέρια φάση στην στερεή επιφάνεια, στην οποία σχηματίζεται το υμένιο μέσω χημικών αντιδράσεων. Αντιδράσεις μπορεί να πραγματοποιούνται εκτός από την επιφάνεια του δισκίου και στην αέρια φάση (Χειμαριός 2012). Η συνολική διεργασία μπορεί να περιλαμβάνει περίπλοκους μηχανισμούς χημικής κινητικής σε συνδυασμό με περίπλοκα φαινόμενα μεταφοράς – ορμής, μάζας, θερμότητας – και μπορεί να περιγραφεί από τα ακόλουθα βήματα (Ohring 2002).

- Μεταφορά μάζας των αερίων αντιδρώντων
- Αντιδράσεις στην αέρια φάση
- Διάχυση των αντιδρώντων αερίων στην επιφάνεια απόθεσης
- Ρόφηση στην επιφάνεια
- Επιφανειακή διάχυση και αντιδράσεις
- Σχηματισμός του υμενίου
- Εκρόφηση από την επιφάνεια

- Διάχυση στην αέρια φάση
- Επιπλέον αντιδράσεις στην αέρια φάση

Η διεργασία χημικής απόθεσης από ατμό με τα επιμέρους στάδιά της παρουσιάζεται στην Εικόνα 1.



Εικόνα 1: Μηχανισμός της διεργασίας χημικής απόθεσης από ατμό

Η διεργασία παραγωγής του υμενίου κατηγοριοποιείται από τον τύπο του αναπτυσσόμενου υμενίου και τις συνθήκες της διεργασίας απόθεσης. Μερικά παραδείγματα είναι η ανάπτυξη υμενίου Si από Si<sub>4 - x</sub>Cl<sub>x</sub> ή SiH<sub>4</sub>, η ανάπτυξη GaAs από Ga(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> και AsH<sub>3</sub> και η ανάπτυξη InP από In(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> και PH<sub>3</sub>. Η ενέργεια ενεργοποίησης της αντίδρασης παρέχεται από άμεση θέρμανση του δισκίου ή από φωτόνια μέσω laser ή από υπεριώδεις ακτινοβολίες ή από ενεργά ηλεκτρόνια σε πλάσμα. Οι παραπάνω διεργασίες – ανάλογα με τον τρόπο θέρμανσης του υποστρώματος – καλούνται XAA (CVD), φωτονιακά (laser) βοηθούμενη XAA (photon (laser) assisted CVD – LCVD) και XAA υποβοηθούμενη από πλάσμα (plasma enhanced CVD – PECVD). Επιπλέον, αν η διεργασία πραγματοποιείται σε χαμηλή πίεση – περίπου 0.001 atm – ονομάζεται χαμηλής πίεσης XAA (low pressure CVD – LPCVD) ενώ εάν πραγματοποιείται σε ατμοσφαιρική πίεση, ατμοσφαιρικής πίεσης XAA (atmospheric pressure CVD – APCVD) (Ohring 2002).

Η διεργασία της ΧΑΑ πραγματοποιείται σε ειδικά διαμορφωμένους αντιδραστήρες ενώ η απόθεση και ανάπτυξη του υμενίου πραγματοποιείται σε δισκία που συχνά είναι κρυσταλλικές επιφάνειες όπως χαλαζίας. Τα υμένια που παράγονται κάτω από συγκεκριμένες συνθήκες πρέπει να μπορούν να αναπαραχθούν και να έχουν ελεγχόμενες ιδιότητες. Οι βασικότερες ιδιότητες είναι το πάχος, η ομοιομορφία, η μορφολογία της επιφάνειας και η σύσταση. Το εύρος των αποδεκτών ορίων των παραπάνω ιδιοτήτων ποικίλει ανάλογα με το είδος της διεργασίας και το υλικό, καθώς και από την θέση - και άρα την λειτουργία - που πρόκειται να εκτελέσει στην υπό κατασκευή συσκευή το υμένιο.

Οι αντιδραστήρες που χρησιμοποιούνται στη διεργασία ΧΑΑ αποτελούνται από τέσσερα κύρια μέρη: από τον κεντρικό αντιδραστήρα, από το σύστημα εισόδου του αντιδραστήρα, από την πηγή θέρμανσης και το σύστημα εξαγωγής αερίων. Ένα πλήθος αντιδραστήρων έχει αναπτυχθεί για την παραγωγή διαφορετικών ιδιοτήτων υμενίων. Στην Εικόνα 2 απεικονίζεται ένας από τους κυριότερους τύπους αντιδραστήρων ΧΑΑ, ο αξονοσυμμετρικός κατακόρυφος αντιδραστήρας. Ο αντιδραστήρας αυτός χρησιμοποιείται ευρέως στις έρευνες των διεργασιών ΧΑΑ και κυρίως για την παραγωγή σύνθετων ημιαγωγών και μικρο – ηλεκτρονικών που η

10

βάση τους είναι το πυρίτιο (Si). Σε συγκεκριμένες περιπτώσεις η περιστροφή του υποστρώματος απόθεσης ευνοεί την ομοιομορφία του πάχους του υμενίου.



Εικόνα 2: Αξονοσυμμετρικός κατακόρυφος αντιδραστήρας ΧΑΑ

Σε όλες τις περιπτώσεις αντιδραστήρων τα εξωτερικά τοιχώματα των αντιδραστήρων είναι υπό ψύξη ή θέρμανση. Η ψύξη αποτρέπει την απόθεση στα τοιχώματα του αντιδραστήρα ενώ η θέρμανση τη δημιουργία θερμοκρασιακών βαθμίδων που έχει σαν αποτέλεσμα δευτερεύουσες ροές, αναπτυσσόμενες από δυνάμεις άνωσης. Οι παραπάνω αντιδραστήρες λειτουργούν υπό χαμηλή έως ατμοσφαιρική πίεση. Χαμηλής πίεσης αντιδραστήρες έχουν το πλεονέκτημα μεγάλων συντελεστών διάχυσης και απλών πεδίων ροής (Fotiadis 1990), (Choy 2003).

### 1.2 Κινητική της ΧΑΑ

Το κύριο ζητούμενο μιας διεργασίας ΧΑΑ είναι η βέλτιστη απόθεση του υμενίου και για να κατανοήσουμε καλύτερα πώς οι συνθήκες λειτουργίας επιδρούν στην απόθεση, θα εξετάσουμε τα ελέγχοντα στάδια που εμφανίζονται στην διεργασία. Το ελέγχον στάδιο καθορίζεται είτε από την κινητική της αντίδρασης είτε από τα φαινόμενα μεταφοράς είτε από συνδυασμό τους (Pierson 1999), (Yan and Xu 2010).

Στην περίπτωση που το ελέγχον στάδιο καθορίζεται από την κινητική της αντίδρασης ο ρυθμός ανάπτυξης (growth rate) του πάχους ενός υμενίου εξαρτάται έντονα από τις θερμοκρασιακές συνθήκες στο υπόστρωμα απόθεσης και από το ποσοστό του προδρόμου υλικού το οποίο είναι διαθέσιμο. Στην περίπτωση που σε ένα σύστημα ΧΑΑ η θερμοκρασία αλλά και η πίεση είναι χαμηλή, η αντίδραση προχωράει αργά (λόγω της χαμηλής θερμοκρασίας) και συνάμα υπάρχει περίσσεια αντιδραστηρίου στην επιφάνεια απόθεσης. Λόγω της χαμηλής πίεσης η διάχυση ευνοείται και τα αντιδραστήρια φτάνουν γρήγορα την επιφάνεια απόθεσης. Σε περίπτωση που η θερμοκρασία είναι υψηλή η αντίδραση αποσύνθεσης προχωράει γρηγορότερα δεδομένου ότι η θερμοκρασία είναι υψηλή και οποιοδήποτε μόριο φτάσει στην επιφάνεια απόθεσης αντιδρά αμέσως. Ο ρυθμός διάχυσης μέσω του οριακού στρώματος τότε ελέγχει τη διεργασία (Pierson 1999).

Συνοψίζοντας, η απόθεση του υμενίου ελέγχεται από την κινητική στις χαμηλές θερμοκρασίες ενώ στις υψηλότερες από τη διάχυση της πρόδρομης ένωσης στο υπόστρωμα απόθεσης. Αυτό αποτυπώνεται στο διάγραμμα Arrhenius το οποίο παρουσιάζεται στην Εικόνα 3. Επιπλέον, είναι δυνατό να γίνει μετάβαση από το ένα ελέγχον στάδιο στο άλλο μεταβάλλοντας την θερμοκρασία. Αυτό φαίνεται καθαρά στο διάγραμμα Arrhenius (λογάριθμος του ρυθμού απόθεσης προς το

12

κλάσμα 10<sup>3</sup>/Τ όπου η θερμοκρασία Τ σε Kelvin), το οποίο παρουσιάζεται για διάφορες αντιδράσεις που οδηγούν στην απόθεση του πυριτίου, χρησιμοποιώντας είτε SiH<sub>4</sub>, SiH<sub>2</sub>CI<sub>2</sub>, SiHCI<sub>3</sub>, είτε SiCI<sub>4</sub> ως πηγές πυριτίου σε περιβάλλον υδρογόνου H<sub>2</sub>.



Εικόνα 3: Διάγραμμα Arrhenius για απόθεση πυριτίου χρησιμοποιώντας διάφορες πρόδρομες ενώσεις (Pierson 1999)

Στο τμήμα A (Εικόνα 3 – κάτω δεξιά) η απόθεση του υμενίου ελέγχεται από την κινητική, ενώ στο τμήμα B (Εικόνα 3 – πάνω αριστερά) η απόθεση ελέγχεται από την διάχυση. Η μετάβαση από τον έναν ελέγχοντα μηχανισμό (αντίδραση) στον άλλον (φαινόμενα μεταφοράς/διάχυση) δεν παρουσιάζει ασυνέχεια – εικόνα 3 – αλλά πραγματοποιείται ομαλά. Στην ενδιάμεση περιοχή και οι δύο μηχανισμοί συνυπάρχουν και κανένας δεν μπορεί να αμεληθεί. Η παρουσία μεγίστου στις καμπύλες στο τμήμα B υποδηλώνει την αρχή της μείωσης της συγκέντρωσης στην αέρια φάση με αποτέλεσμα την μείωση του ρυθμού απόθεσης.

## 1.3 Οι εξισώσεις της ΧΑΑ

Στη συνέχεια θα παρουσιαστεί το μαθηματικό μοντέλο το οποίο περιγράφει τα φαινόμενα που εξελίσσονται κατά τη διάρκεια μιας διεργασίας ΧΑΑ και τα οποία αποτελούνται από τα φαινόμενα μεταφοράς σε συνδυασμό με τους μηχανισμούς που περιγράφουν τις χημικές αντιδράσεις που λαμβάνουν χώρα στην αέρια φάση και στην επιφάνεια του δισκίου. Οι θεμελιώδεις εξισώσεις που περιγράφουν τα φυσικά φαινόμενα στη μακρο-κλίμακα είναι οι εξισώσεις διατήρησης της μάζας, ορμής, ενέργειας και χημικών συστατικών (Deen 1998), (Bird, Stewart et al. 2002). Σε μόνιμη κατάσταση και σε διανυσματική μορφή το σύστημα εξισώσεων διατυπώνεται ως εξής (Cheimarios, Kokkoris et al. 2010).

#### <u>Εξίσωση συνέχειας</u>

$$\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = 0 \tag{1.1}$$

όπου  $\rho$ είναι η πυκνότητα του μίγματος και  $\boldsymbol{u}$  το διάνυσμα της ταχύτητας.

#### <u>Εξίσωση ορμής</u>

$$\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u} \boldsymbol{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot \left[ \mu (\nabla \boldsymbol{u} + \nabla \boldsymbol{u}^T) - \mu \frac{2}{3} (\nabla \cdot \boldsymbol{u}) \boldsymbol{I} \right] + \rho \boldsymbol{g}$$
(1.2)

όπου P είναι η πίεση,  $\mu$  το δυναμικό ιξώδες, I ο μοναδιαίος τανυστής και g η επιτάχυνση της βαρύτητας.

#### Εξίσωση ενέργειας

$$C_p \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u} T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \sum_{i=1}^{N_g} \boldsymbol{j}_i \cdot \frac{\nabla H_i}{M_i} - \sum_{i=1}^{N_g} \sum_{k=1}^{N_r} H_i r_k^g$$
(1.3)

όπου C<sub>p</sub> είναι η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση του μίγματος, T η θερμοκρασία, λ η θερμική αγωγιμότητα, **j**<sub>i</sub> ο ρυθμός διάχυσης του χημικού συστατικού i,  $H_i$  η ενθαλπία σχηματισμού του χημικού συστατικού i,  $M_i$  το μοριακό βάρος του χημικού συστατικού i,  $N_g$  το πλήθος των χημικών συστατικών στην αέρια φάση,  $N_r$  το πλήθος των ομογενών (ογκομετρικών) αντιδράσεων,  $r_k^g$  ο καθαρός ρυθμός της ογκομετρικής αντίδρασης k.

#### Εξισώσεις των χημικών συστατικών

$$\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}\omega_i) = -\nabla \cdot \boldsymbol{j}_i + M_i \sum_{k=1}^{N_r} r_k^g, \quad i = 1, \dots, N-1$$
(1.4)

όπου ω<sub>i</sub> είναι το κλάσμα μάζας του χημικού συστατικού *i*. Καθώς το άθροισμα των κλασμάτων μάζας είναι ίσο με μονάδα, η εξίσωση επιλύεται για όλα τα συστατικά εκτός του φέροντος αερίου. Ο ρυθμός διάχυσης **j**<sub>i</sub> υπολογίζεται από το μοντέλο πλήρους πολυσυστατικής διάχυσης (Ansys 13.0 Documentation, 2011).

Το σύστημα των εξισώσεων κλείνει με το νόμο των ιδανικών αερίων για το μίγμα. Η πυκνότητα προσδιορίζεται από το νόμο των ιδανικών αερίων για ασυμπίεστη ροή

$$\rho = \frac{P_{op}M_i}{RT} \tag{1.5}$$

όπου  $P_{op}$ είναι η πίεση λειτουργίας του αντιδραστήρα.

Οι άγνωστες μεταβλητές για τις οποίες επιλύονται οι εξισώσεις είναι οι:

- Συνιστώσες της ταχύτητας:  $u_x$ ,  $u_y$ ,  $u_z$
- Θερμοκρασία: Τ
- Πίεση: P
- Κλάσματα μάζας των χημικών συστατικών: ω<sub>i</sub>

#### 1.4 Η μέθοδος των πεπερασμένων όγκων

Το παραπάνω σύστημα εξισώσεων επιλύεται υπολογιστικά με τον κώδικα υπολογιστικής ρευστοδυναμικής Fluent (Ansys 13), με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων ελέγχου (*finite volume method*) (Versteeg and Malalasekera 2007).

Η μέθοδος των πεπερασμένων όγκων είναι μια αριθμητική μέθοδος επίλυσης προβλημάτων κατά την οποία το υπολογιστικό χωρίο διακριτοποιείται σε όγκους ελέγχου και οι προς επίλυση εξισώσεις διακριτοποιούνται και επιλύονται στους συγκεκριμένους όγκους ελέγχου. Θεωρούμε ορθογώνια γεωμετρία η οποία διακριτοποιείται σε ορθογώνιους όγκους ελέγχου (Εικόνα 4). Ο υπολογιστικός κώδικας Fluent χρησιμοποιεί ταξιθετημένα σχήματα (*co-located schemes*), και η διακριτοποίηση των εξισώσεων συνέχειας και ορμής βασίζεται σε ταξιθετημένα σχήματα. Ο όρος *co-located* αναφέρεται σε πλέγματα στα οποία όλα τα μεγέθη αποθηκεύονται στα κέντρα των υπολογιστικών κελιών P, τα οποία είναι τα κέντρα των όγκων ελέγχου, ενώ οι τιμές των ταχυτήτων στα μέτωπα των κελιών (*cell faces*), που χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της διάχυσης, υπολογίζονται με γραμμική παρεμβολή.



Εικόνα 4: Τυπική αναπαράσταση κελιού στη μέθοδο των Π. Ο.

Για την διακριτοποίηση των εξισώσεων που περιγράφουν τα φαινόμενα μεταφοράς, είναι αναγκαία η έκφρασή τους από μία ενιαία εξίσωση μεταφοράς που να εκπροσωπεί τις προς επίλυση εξισώσεις.

Η γενική εξίσωση διατήρησης (ενιαία εξίσωση μεταφοράς) ενός μεγέθους *φ*, διατυπώνεται ως εξής:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi) + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}\varphi) = \nabla \cdot \Gamma_{\varphi} \nabla \varphi + S_{\varphi}$$
(1.6)

όπου  $\Gamma_{\varphi}$  είναι ο συντελεστής διάχυσης και  $S_{\varphi}$  ο όρος πηγής.

Οι όροι της εξίσωσης (2.6) με τη σειρά είναι: ο μεταβατικός όρος, ο όρος συναγωγής, ο όρος διάχυσης και ο όρος πηγής.

- Για την εξίσωση ορμής το μέγεθος  $\varphi$  είναι η ταχύτητα  $\boldsymbol{u}$
- Για την εξίσωση ενέργειας το μέγεθος φ είναι η θερμοκρασία Τ
- Για τις εξισώσεις των χημικών συστατικών το μέγεθος φ είναι το κλάσμα μάζας ω
- Για την εξίσωση συνέχειας  $\varphi = 1$

Ολοκληρώνοντας την παραπάνω εξίσωση στον όγκο ΔV του κελιού P, εξάγεται η διακριτοποιημένη μορφή της ενιαίας εξίσωσης μεταφοράς:

$$\frac{(\rho\varphi)_{P}-(\rho\varphi)_{P}^{0}}{\Delta t}\Delta V = +\left(\rho\boldsymbol{u}\varphi-\Gamma\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)_{e}A_{e}-\left(\rho\boldsymbol{u}\varphi-\Gamma\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)_{w}A_{w}$$
$$+\left(\rho\boldsymbol{u}\varphi-\Gamma\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)_{n}A_{n}-\left(\rho\boldsymbol{u}\varphi-\Gamma\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)_{s}A_{s}=S_{\varphi}\Delta V \qquad(1.7)$$

όπου  $A_e, A_w, A_n, A_s$  είναι οι επιφάνειες των μετώπων του κελιού.

Διακριτοποιώντας υπολογιστικό χωρίο N κελιών δημιουργείται σύστημα  $N \times N$  αλγεβρικών εξισώσεων που σχετίζουν τις τιμές του μεταφερόμενου μεγέθους στο κέντρο κάθε κελιού  $\varphi_P$  με τις αντίστοιχες των γειτονικών κελιών. Σε γραμμικοποιημένη μορφή είναι:

$$a_P \varphi_P = \sum_{nb=E,W,N,S} a_{nb} \varphi_{nb} + b_P \tag{1.8}$$

όπου  $a_P$  ο γραμμικοποιημένος συντελεστής του  $\varphi_P$  και  $a_{nb}$  ο γραμμικοποιημένος συντελεστής του  $\varphi_{nb}$ .

Για την επίλυση της παραπάνω εξίσωσης, αρχικά υπολογίζονται οι τιμές του μεγέθους στα μέτωπα του κελιού  $\varphi_f$  όπου f = e, w, n, s.

Στην παρούσα εργασία επελέγη σχήμα διακριτοποίησης δεύτερης τάξης *upwind*, ενώ για τον υπολογισμό της βαθμίδας των βαθμωτών μεγεθών το θεώρημα *Green-Gauss node based* (Ansys 13.0 Documentation, 2011).

### 1.5 Διερεύνηση του χώρου των λύσεων

Οι αξονοσυμμετρικοί αντιδραστήρες χρησιμοποιούνται για να εξασφαλίσουν, κάθετη στο δισκίο, αξονοσυμμετρική ροή, η οποία με τη σειρά της οδηγεί στην ομοιόμορφη απόθεση στην περιμετρική διεύθυνση. Έχει δειχθεί ωστόσο πειραματικά (Keijser, Opdorp et al. 1988) ότι ακόμα και σε γεωμετρίες με αξονοσυμμετρικές συνοριακές και λειτουργικές συνθήκες είναι πιθανόν να υπάρξει ρήξη της συμμετρίας (symmetry breaking). Στη συνέχεια αποδείχθηκε και αριθμητικά (Fotiadis, Kieda et al. 1990) ότι μη-συμμετρικές λύσεις μπορούν να υπάρξουν σε αξονοσυμμετρικές γεωμετρίες, συνυπάρχοντας μάλιστα με συμμετρικές λύσεις στις ίδιες συνθήκες λειτουργίας.

Η επίπτωση της ταυτόχρονης ύπαρξης δύο διαφορετικών λύσεων στον σχεδιασμό νέων αντιδραστήρων ΧΑΑ είναι ότι είναι αναγκαίο να γίνει διερεύνηση της ύπαρξης ή μη των μη-συμμετρικών λύσεων. Η διερεύνηση αυτή είναι χρονοβόρα, ακριβή υπολογιστικά και μπορεί να μην αποκαλύψει όλες τις υπάρχουσες λύσεις, ιδίως όταν χρησιμοποιούνται εμπορικά λογισμικά.

Τα εμπορικά λογισμικά υπολογιστικής ρευστοδυναμικής έχουν διαδοθεί ευρέως σε πολλά πεδία φυσικών επιστημών και μηχανικών λόγω της δυνατότητάς τους να προσομοιώσουν ένα μεγάλο εύρος διεργασιών χάρη στην ποικιλία των μοντέλων που περιέχουν και λόγω του εύκολου στη χρήση περιβάλλοντος εργασίας που διαθέτουν. Ωστόσο, παρά την συνεχή εξέλιξή τους, τα λογισμικά αυτά δεν έχουν την δυνατότητα να πραγματοποιήσουν συστηματική αναζήτηση και εύρεση πολλαπλών λύσεων, οι οποίες προκύπτουν από το μη γραμμικό χαρακτήρα των εξισώσεων που περιγράφουν τα φαινόμενα μεταφοράς. Οι λύσεις αυτές είναι

19

σημαντικές, καθώς, μπορεί να κρύβουν πληροφορία για τη συμπεριφορά του συστήματος συναρτήσει των λειτουργικών του παραμέτρων.

Ο συνδυασμός της αναγκαιότητας για εντοπισμό όλων των πολλαπλών λύσεων και της αδυναμίας των εμπορικών λογισμικών να το πραγματοποιήσουν, καθιστά επιτακτική την ανάγκη χρήσης πηγαίων κωδίκων υποβοηθούμενης σύγκλισης. Οι κώδικες αυτοί συνδυαζόμενοι με τα εμπορικά λογισμικά, κάνουν εφικτό τον πλήρη προσδιορισμό του χώρου των λύσεων συμπεριλαμβανομένου ασταθών λύσεων και σημείων στροφής (*bifurcation points*).

Πρότερη διερεύνηση του χώρου των λύσεων ενός τρισδιάστατου αζονοσυμμετρικού αντιδραστήρα (Van Santen, Kleijn et al. 2000) είχε πραγματοποιηθεί χρησιμοποιώντας πηγαίο κώδικα βασιζόμενο στη μέθοδο πεπερασμένων όγκων ελέγχου, χωρίς χρήση κώδικα υποβοηθούμενης σύγκλισης και αφορά στη μελέτη της εξάρτησης της λύσης από χαρακτηριστικούς αδιάστατους αριθμούς, μεταβάλλοντας διάφορες παραμέτρους λειτουργίας όπως η ταχύτητα εισόδου στον αντιδραστήρα, η θερμοκρασία του δισκίου και η ταχύτητα περιστροφής του δισκίου. Σχετικά με το χώρο των λύσεων προτάθηκε ότι ένας σταθερός κλάδος μη-συμμετρικών λύσεων συνυπάρχει πάντοτε με έναν σταθερό κλάδο συμμετρικών λύσεων, ενώ το αντίθετο δεν ισχύει πάντα. Επίσης ο κλάδος των μη-συμμετρικών λύσεων αναμένεται να συνδέεται, μέσω δύο σημείων στροφής, με έναν ασταθή κλάδο μη-συμμετρικών λύσεων. Το διάγραμμα που περιγράφει τον χώρο των λύσεων φαίνεται στην Εικόνα 5.

20



Εικόνα 5: Πιθανολογούμενος χώρος λύσεων ενός 3D αντιδραστήρα XAA (Van Santen, Kleijn et al. 2000)

Στη συνέχεια της παρούσας εργασίας θα επιχειρηθεί να γίνει πλήρης διερεύνηση του χώρου των λύσεων αντιδραστήρων ΧΑΑ τόσο σε 2D γεωμετρία με αζονοσυμμετρία, όσο και σε 3D γεωμετρία. Οι εξισώσεις που θα επιλυθούν στην αέρια φάση περιλαμβάνουν τις εξισώσεις διατήρησης της μάζας, ορμής και ενέργειας (1.1 – 1.3). Η εξισώσεις χημικών συστατικών (1.4) παραλείπονται χάριν απλοποίησης των υπολογισμών καθώς έχουν αμελητέα επίδραση στη διαμόρφωση της ροής μέσα στον αντιδραστήρα. Το απλοποιημένο μαθηματικό μοντέλο το οποίο περιγράφει τα φυσικά φαινόμενα μεταφοράς είναι το εξής:

$$\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = 0$$

$$\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot \left[ \mu (\nabla \boldsymbol{u} + \nabla \boldsymbol{u}^T) - \mu \frac{2}{3} (\nabla \cdot \boldsymbol{u}) \boldsymbol{I} \right] + \rho \boldsymbol{g} \qquad (1.9)$$

$$C_p \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{u}T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T)$$

Με κόκκινο χρώμα τονίζονται οι δύο κύριοι μη γραμμικοί όροι, υπεύθυνοι για την πολλαπλότητα λύσεων. Στην περίπτωση αυτή οι άγνωστες μεταβλητές είναι οι ίδιες με την γενική περίπτωση, εξαιρουμένων των κλασμάτων μάζας των συστατικών.

## 2. Κώδικας υποβοηθούμενης σύγκλισης

#### 2.1 Μέθοδος αναδρομικής προβολής

Στο κεφάλαιο αυτό εστιαζόμαστε στην μέθοδο αναδρομικής προβολής (recursive projection method – RPM) (Shroff and Keller 1993), (Κορωνάκη 2004), η οποία χρησιμοποιείται για την σταθεροποίηση και επιτάχυνση επαναληπτικών μεθόδων τύπου Picard που χρησιμοποιούνται για την εύρεση της λύσης,  $U^k$ , ενός συστήματος διακριτοποιημένων εξισώσεων στο χώρο της μορφής:

$$\boldsymbol{G}(\boldsymbol{U},\boldsymbol{\lambda}) = \boldsymbol{0} \tag{2.1}$$

όπου  $\boldsymbol{U} \in \mathbb{R}^N$  είναι το διάνυσμα που περιέχει τις τιμές της άγνωστης μεταβλητής στους N κόμβους της διακριτοποίησης,  $\lambda$  είναι μια φυσική παράμετρος του προβλήματος και **G** ένας μη γραμμικός τελεστής.

Μία τέτοια επαναληπτική διαδικασία επίλυσης έχει τη γενική μορφή  $U^{n+1} = F(U^n, \lambda)$ , όπου *n* ο μετρητής της επανάληψης, και συγκλίνει σε μια μόνιμη κατάσταση  $U^*$  όταν όλες οι ιδιοτιμές του Ιακωβιανού πίνακα  $\frac{\partial F}{\partial U}(U^*) \equiv F_U^* \equiv$   $F_U(U^*(\lambda), \lambda)$  βρίσκονται μέσα σε κύκλο με ακτίνα 1, {|z| < 1}. Παράδειγμα τέτοιου φάσματος δίνεται στην Εικόνα 6, περίπτωση (a), όπου με λευκούς κύκλους απεικονίζονται οι ιδιοτιμές του πίνακα  $F_U^*$ , που είναι μέσα στο μοναδιαίο κύκλο. Στην περίπτωση όπου λίγες μόνο ιδιοτιμές, οι λεγόμενες «επικίνδυνες», βρίσκονται κοντά στα όρια του μοναδιαίου κύκλου η επαναληπτική διαδικασία αργεί να συγκλίνει ή αποκλίνει. Η περίπτωση αυτή είναι η (b) όπου με μαύρους κύκλους δίνονται οι ιδιοτιμές που πλησιάζουν το όριο της ευστάθειας. Αντίθετα στην περίπτωση (c) απεικονίζεται το φάσμα μιας επανάληψης που αποκλίνει αφού, όπως φαίνεται μια ιδιοτιμή έχει ξεπεράσει το μοναδιαίο κύκλο.



Εικόνα 6: Τυπικά φάσματα Ιακωβιανής επανάληψης,  $F_U^*$ , που (a) συγκλίνει (b) συγκλίνει αλλά καθυστερεί (c) αποκλίνει (Κορωνάκη 2004)

Η βασική ιδέα πίσω από τη μέθοδο αναδρομικής προβολής (για συντομία από εδώ και πέρα θα αναφέρεται στο κείμενο ως RPM) είναι η εύρεση του ιδιοχώρου που αντιστοιχεί σε αυτές τις «επικίνδυνες» ιδιοτιμές του προβλήματος. Αυτό γίνεται αναδρομικό (recursive) αποτελεσματικά με τρόπο, χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα κάθε βήματος της επαναληπτικής μεθόδου απλού βήματος. Ο χώρος  $\mathbb{R}^{N}$  γράφεται ως άθροισμα του «επικίνδυνου» ιδιοχώρου  $\mathbb{P}$  και του ορθογώνιου συμπληρώματός του  $\mathbb{Q}$ . Οι υπόχωροι **P** και **Q** αντιστοιχούν στις «επικίνδυνες» και μη ιδιοτιμές και ορίζονται στη συνέχεια. Τροποποιούμε την επαναληπτική μέθοδο εφαρμόζοντας τη μέθοδο Newton στον υπόχωρο P και συνεχίζοντας να χρησιμοποιούμε τη μέθοδο Picard στον υπόχωρο Q, όπου αυτή συγκλίνει. Τελικά η επαναληπτική διαδικασία Picard αντικαθίσταται από ένα ζεύγος Newton-Picard επαναλήψεων με βελτιωμένες ιδιότητες σύγκλισης σε σχέση με την  $U^{n+1}$  =  $F(U^n, \lambda)$ . Βασική προϋπόθεση για την επιτυχία της μεθόδου είναι ο καλός διαχωρισμός των επικίνδυνων ιδιοτιμών από τις υπόλοιπες. Ο λόγος θα γίνει ξεκάθαρος στη συνέχεια και προς το παρόν επισημαίνεται ότι μια επανάληψη με φάσμα όπως αυτό της Εικόνας 6(b) δεν είναι καλή υποψήφια για εφαρμογή της RPM γιατί οι επικίνδυνες ιδιοτιμές (μαύροι κύκλοι) δεν έχουν ξεχωρίσει αρκετά από τις υπόλοιπες (λευκοί κύκλοι).

#### 2.1.1 Η διαδικασία σταθεροποίησης

Έστω ότι το πρόβλημα  $G(U, \lambda) = 0$  που μας ενδιαφέρει, έχει ένα ομαλό τόξο λύσεων  $\Gamma: U = U^*(\lambda)$ , όπου  $\lambda$  η παράμετρος που παίρνει τιμές  $\lambda \in [\lambda_a, \lambda_b]$ . Για την εύρεση, ή προσέγγιση, των λύσεων χρησιμοποιείται μια μέθοδος πρόβλεψηςεπίλυσης (predictor-solver). Με δεδομένα δύο σημεία στο  $\Gamma$ ,  $(U_{-1}, \lambda_{-1})$  και  $(U_0, \lambda_0)$ , με  $\lambda_{-1} < \lambda_0 \in [\lambda_a, \lambda_b]$ , γίνεται πρόβλεψη μιας νέας λύσης ως εξής:

$$\lambda = \lambda_0 + \delta \lambda \tag{2.2a}$$

$$\boldsymbol{U}^{(0)}(\lambda) = \boldsymbol{U}_0^* + \frac{\delta\lambda}{\lambda_0 - \lambda_{-1}} (\boldsymbol{U}_0^* - \boldsymbol{U}_{-1}^*)$$
(2.2b)

Εδώ δλ είναι το βήμα και ο επιλύτης είναι το επαναληπτικό σχήμα σταθερού σημείου  $U^{n+1} = F(U^n, \lambda)$ . Ένα τέτοιο σχήμα συγκλίνει όταν οι ιδιοτιμές  $\{\mu_k\}_1^N$  του Ιακωβιανού πίνακα  $F_U^* \equiv F_U(U^*(\lambda), \lambda)$ βρίσκονται μέσα στο μοναδιαίο κύκλο και η αρχική προσέγγιση  $U^{(0)}(\lambda)$  είναι αρκετά κοντά στη λύση  $U^*(\lambda)$ .

Η σύγκλιση επιβραδύνεται όταν κάποια από τις ιδιοτιμές αυτές πλησιάζει στο όριο του μοναδιαίου κύκλου και αποκλίνει όταν το ξεπερνάνε. Έστω ότι ένας μικρός αριθμός ιδιοτιμών, *m*, πλησιάζει το όριο του μοναδιαίου κύκλου:

$$K_{\delta} = \{|z| \le 1 - \delta\}$$
 για κάποιο  $\delta > 0$ , αλλά αρκετά μικρό (2.3)

δηλαδή ισχύει:

$$|\mu_1| \ge \dots \ge |\mu_m| > 1 - \delta \ge |\mu_{m+1}| \ge \dots \ge |\mu_N|$$

$$(2.4)$$

Τότε γίνεται προσδιορισμός των υπόχωρων  $\mathbb P$ και  $\mathbb Q\in\mathbb R^N$ :

- a)  $\mathbb{P} \equiv$ ο μέγιστος υπόχωρος που παραμένει αναλλοίωτος από τον  $F_U^*$ , που αντιστοιχεί στις ιδιοτιμές  $\{\mu_k\}_1^m$
- b)  $\mathbb{Q} \equiv \mathbb{R}^N \mathbb{P}$ , το ορθογώνιο συμπλήρωμα του  $\mathbb{P}$

Εδώ πρέπει να σημειωθεί ότι το  $\mathbb{Q}$  δεν είναι υπόχωρος αναλλοίωτος από το  $F_U^*$ . Συμβολίζουμε με P και Q, αντίστοιχα, τις ορθογώνιες προβολές του  $\mathbb{R}^N$  στους παραπάνω υπόχωρους. Τότε ισχύει:

$$\mathbb{R}^{N} = \mathbb{P} \otimes \mathbb{Q} = \boldsymbol{P} \mathbb{R}^{N} \otimes \boldsymbol{Q} \mathbb{R}^{N}$$
(2.5)

Εδώ ισχύει, Q = I - P, έτσι ώστε PQ = 0 (αφού  $P^2 = P$ ). Με βάση τη σχέση (2.5) για κάθε  $U \in \mathbb{R}^N$  ισχύει:

$$\boldsymbol{U} = \boldsymbol{p} + \boldsymbol{q}, \boldsymbol{p} \equiv \boldsymbol{P} \boldsymbol{U} \in \mathbb{P}, \boldsymbol{q} \equiv \boldsymbol{Q} \boldsymbol{U} \in \mathbb{Q}$$
(2.6)

Mε Lyapunov-Schmidt διάσπαση (Lyapunov-Schmidt decomposition) του συστήματος  $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}, \lambda)$  προκύπτει:

$$\boldsymbol{p} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}, \lambda) = \boldsymbol{P}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{p} + \boldsymbol{q}, \lambda)$$
(2.7a)

$$\boldsymbol{q} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}, \lambda) = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{p} + \boldsymbol{q}, \lambda) \tag{2.7b}$$

Είναι προφανές ότι κάθε κλάδος λύσεων  $U^*(\lambda)$  του  $U = F(U, \lambda)$  αντιστοιχεί σε λύση  $(p^*, q^*) \equiv (p^*(\lambda), q^*(\lambda))$  των σχέσεων (2.7).

Λήμμα 1. Αποδεικνύεται ότι όλες οι ιδιοτιμές του:

$$\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{q}}^{*} = \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{p}^{*}, \boldsymbol{q}^{*}, \lambda) = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{U}}^{*}\boldsymbol{Q}$$

βρίσκονται εντός του μοναδιαίου δίσκου  $K_{\delta}$ .

Από το παραπάνω προκύπτει ότι η επαναληπτική διαδικασία:

$$\boldsymbol{q}^{n+1} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{p}^n, \boldsymbol{q}^n, \lambda) \tag{2.8}$$

θα συγκλίνει τοπικά στο  $\mathbb{Q}$  σε κάποια περιοχή του ( $p^*, q^*$ ), ακόμα και αν η αρχική επαναληπτική διαδικασία F αποκλίνει στο  $\mathbb{R}^N$ . Η RPM βασίζεται σε εφαρμογή της μεθόδου Newton για το p στο σύστημα  $p = f(p, q, \lambda)$  ενώ συνεχίζεται η εφαρμογή της επαναληπτικής μεθόδου απλού βήματος για το q. Αυτό οδηγεί στο νέο σχήμα:

$$\left(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{f}_{\boldsymbol{p}}^{n}\right)\left(\boldsymbol{p}^{n+1} - \boldsymbol{p}^{n}\right) = \boldsymbol{f}\left(\boldsymbol{p}^{n}, \boldsymbol{q}^{n}, \lambda\right) - \boldsymbol{p}^{n}$$
(2.9a)

$$\boldsymbol{q}^{n+1} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{p}^n, \boldsymbol{q}^n, \lambda) \tag{2.9b}$$

Εδώ χρησιμοποιήθηκε η σχέση  $U^n = p^n + q^n$  για να ορισθεί η σχέση:

$$\boldsymbol{f}_{\boldsymbol{p}}^{n} \equiv \boldsymbol{f}_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{p}^{n}, \boldsymbol{q}^{n}, \lambda) \equiv \boldsymbol{P} \boldsymbol{F}_{\boldsymbol{U}}(\boldsymbol{U}^{n}, \lambda) \boldsymbol{P}$$
(2.10)

Е́іvai профаче́с о́ті то  $f_p^n$  є́іvai о періорібно́с той пі́vaka  $F_u(U^n, \lambda)$  отой ипо́хшро P. Етої о пі́vakaς  $(I - f_p^n)$ : P  $\rightarrow$  P є́іvai актібтре́ψіμоς ак то фа́бµа той  $f_p^n$  δεν περιέχει τη μονάδα. Αν αυτό σταµατήσει να ισχύει κατά τη διάρκεια του βηµατισµού στη παράµετρο  $\lambda$ , εφαρµόζεται βηµατισµός µήκους-τόξου (arc-length continuation), που θα παρουσιασθεί σε επόµενη παράγραφο. Αν θεωρηθεί αρχικά ότι υπάρχει ο  $(I - f_p^n)^{-1}$ : P  $\rightarrow$  P τότε το σταθεροποιηµένο επαναληπτικό σχήµα παίρνει τη μορφή:

i.  $\boldsymbol{p}^0 = \boldsymbol{P} \boldsymbol{U}^0(\lambda), \boldsymbol{q}^0 = \boldsymbol{Q} \boldsymbol{U}^0(\lambda)$ 

ii. Do until convergence:

a) 
$$p^{n+1} = p^n + (I - f_p^n)^{-1} (f(p^n, q^n, \lambda) - p^n)$$
 (2.11)  
b)  $q^{n+1} = g(p^n, q^n, \lambda)$ 

iii.  $\boldsymbol{U}^*(\lambda) = \boldsymbol{p}^{n_{final}} + \boldsymbol{q}^{n_{final}} \equiv \boldsymbol{p}^* + \boldsymbol{q}^*$ 

#### 2.1.2 Προσδιορισμός των Ρ και Q

Για την εφαρμογή της σταθεροποιημένης επαναληπτικής διαδικασίας είναι απαραίτητος ο προσδιορισμός των προβολών P και Q στους υπόχωρους  $\mathbb{P}$  και  $\mathbb{Q}$ . Για το σκοπό αυτό χρειάζεται μόνο ο προσδιορισμός της ορθοκανονικής βάσης Z για τον υπόχωρο  $\mathbb{P}$ . Έστω  $Z \in \mathbb{R}^{N \times m}$  μια ορθοκανονική βάση του  $\mathbb{P}$ . Τότε οι προβολές P και Q είναι:

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^{T}, \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^{T} \ \mu\varepsilon \ \boldsymbol{Z}^{T}\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{I}_{m} \in \mathbb{R}^{m \times m}$$
(2.12)

Θα δειχθεί ότι μια προσέγγιση της βάσης Z μπορεί να υπολογίζεται από τα βήματα της επαναληπτικής διαδικασίας και να ανανεώνεται όσο προχωρούν οι υπολογισμοί. Για τον υπολογισμό αυτό χρειάζονται μόνο οι τιμές  $q^n$  του αλγορίθμου (2.11) και δεν είναι αναγκαίος ο υπολογισμός Ιακωβιανών πινάκων.

#### 2.1.3 Αύξηση της διάστασης της βάσης

Έστω ότι αρχικά η διαδικασία βηματισμού ξεκινά με τιμή παραμέτρου  $\lambda=\lambda_{\alpha}$ για την οποία η επαναληπτική διαδικασία F συγκλίνει κανονικά. Τότε δεν υπάρχει ασταθής υπόχωρος  $\mathbb{P}$ , η διάστασή του είναι m = 0, κι έτσι  $\mathbf{Z} = \mathbf{0}$ . Οσο ο βηματισμός στο  $\lambda$  προχωρά, υπολογίζεται ένα σύνολο από m, m + 1 ή m + 2 διανύσματα βάσης. Αυτό γίνεται καταγράφοντας το ρυθμό της σύγκλισης της  $q^{n+1} = g(p^n, q^n, \lambda)$ . Αν ο ρυθμός ελαττωθεί τότε προκύπτει το συμπέρασμα ότι κάποιες από τις ιδιοτιμές του  $\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{q}}^{*} = \boldsymbol{Q} \boldsymbol{F}_{\boldsymbol{U}}^{*} \boldsymbol{Q}$  πλησιάζουν τα όρια του μοναδιαίου δίσκου. Στην απλούστερη περίπτωση μια πραγματική ιδιοτιμή μ<sub>m+1</sub> ή ένα ζευγάρι συζυγών μιγαδικών  $(\mu_{m+1}, \mu_{m+2})$  πλησιάζουν το  $\{|z| = 1\}$ . Πρέπει κάθε φορά να γίνεται διάκριση μεταξύ των παραπάνω περιπτώσεων και υπολογισμός ενός ή δύο διανυσμάτων που θα ενσωματωθούν στη βάση Z. Ετσι παράγεται ένας ευρύτερος υπόχωρος, που είναι αναλλοίωτος από το  $F_{U}^{*}$ , που αντιστοιχεί στο επαυξημένο σύνολο των ιδιοτιμών  $\{\mu_1, ..., \mu_{m+1}\}$ ή  $\{\mu_1, ..., \mu_{m+1}, \mu_{m+2}\}$ . Έτσι, μπορεί να υπολογιστεί μια ορθοκανονική βάση για τον υπόχωρο αυτό αν στη βάση Ζ ενσωματωθεί η βάση του χώρου που αντιστοιχεί στις καινούργιες ιδιοτιμές που πλησιάζουν τα όρια της ευστάθειας. Αυτό γίνεται από τα βήματα της επαναληπτικής διαδικασίας όπως περιγράφεται παρακάτω.

Έστω ότι για την τρέχουσα τιμή του  $\lambda$  ισχύει  $U^n = p^n + q^n \in B_{\varepsilon}(U^*(\lambda))$  και ότι η  $F_U(U, \lambda)$  και άρα τα  $g_p$  και  $g_q$  είναι συνεχή κατά Lipschitz στο  $B_{\varepsilon}(U^*(\lambda))$ . Τότε από τη (2.11.2b) προκύπτει:

$$\begin{aligned} \Delta q^{n} &= q^{n+1} - q^{n} \\ &= g(p^{n}, q^{n}, \lambda) - g(p^{n-1}, q^{n-1}, \lambda) \\ &= g(p^{n-1} + \Delta p^{n-1}, q^{n-1} + \Delta q^{n-1}, \lambda) - g(p^{n-1}, q^{n-1}, \lambda) \end{aligned}$$
(2.13)  
$$&= g_{p}^{*} \Delta p^{n-1} + g_{q}^{*} \Delta q^{n-1} + O(\varepsilon^{2}) \\ &= g_{q}^{*} \Delta q^{n-1} + O(\varepsilon^{2}) \end{aligned}$$

Εδώ χρησιμοποιήθηκε η σχέση  $g_p^* = QF_U^*P = 0$ . Αν αμεληθεί ο όρος  $O(\varepsilon^2)$ τότε προκύπτει:

$$\Delta \boldsymbol{q}^n \approx \left(\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{q}}^*\right)^n \Delta \boldsymbol{q}^0 \tag{2.14}$$

Δηλαδή τα διανύσματα { $\Delta q^n$ } προκύπτουν από μια μέθοδο δυνάμεων (power method) με εφαρμογή του πίνακα  $g_q^* = QF_U^*Q$  στο διάνυσμα  $\Delta q^0$ . Έτσι, ασυμπτωτικά αυτά τα διανύσματα θα τείνουν να ανήκουν στον κυρίαρχο ιδιόχωρο του  $g_q^*$ , με την προϋπόθεση ότι το αρχικό διάνυσμα  $\Delta q^0$  έχει ένα μη μηδενικό στοιχείο σε αυτή τη διεύθυνση.

Πρακτικά, αν η επαναληπτική διαδικασία δε συγκλίνει σε  $n_{max}$  επαναλήψεις, χρησιμοποιούνται δύο διανύσματα διαφορών { $\Delta q^n$ ,  $\Delta q^{n-1}$ } (δηλαδή οι διαφορές των πιο πρόσφατων επαναλήψεων) για την προσέγγιση του κυρίαρχου ιδιόχωρου του  $g_q^*$ ως εξής: εφαρμόζεται η μέθοδος παραγοντοποίησης Gram-Schmidt (*QR-factorization*):

$$\boldsymbol{D} \equiv \{\Delta \boldsymbol{q}^n, \Delta \boldsymbol{q}^{n-1}\} = \widehat{\boldsymbol{D}}\boldsymbol{T}$$
(2.15)

όπου  $T \in \mathbb{R}^{2\times 2}$  είναι άνω τριγωνικός και ο  $\widehat{D} \in \mathbb{R}^{N\times 2}$  είναι ορθογώνιος. Εάν ισχύει  $T_{11} \gg T_{22}$  προκύπτει ότι ο κυρίαρχος υπόχωρος του  $g_q^*$  είναι μονοδιάστατος και προσθέτουμε ένα διάνυσμα, τη πρώτη στήλη του  $\widehat{D}$ , στη βάση Z. Αλλιώς προκύπτει ότι η σύγκλιση επιβραδύνεται διότι ένα ζεύγος συζυγών ιδιοτιμών πλησιάζουν τα όρια του μοναδιαίου δίσκου και προσθέτουμε δύο διανύσματα, τις δύο πρώτες στήλες του  $\widehat{D}$ , στη βάση Z. Πρέπει εδώ να σημειωθεί ότι ο συγκεκριμένος αλγόριθμος αποκλείει το ενδεχόμενο να πλησιάζουν ταυτόχρονα δύο πραγματικές ιδιοτιμές τα όρια του μοναδιαίου κύκλου.

Η ακρίβεια της παραπάνω διαδικασίας μπορεί να βελτιωθεί αν αντί για δύο διανύσματα διαφορών, χρησιμοποιηθούν παραπάνω, έστω  $r: \{\Delta q^k\}_{n-r+1}^n$ . Για τα διανύσματα αυτά υπολογίζεται με τη μέθοδο Gram-Schmidt μια ορθοκανονική βάση, U. Υπολογίζεται, κατόπιν, το  $U^T F_U^* U$  και ο κυρίαρχος υπόχωρος,  $\hat{U}$  αυτού του  $r \times r$ πίνακα. Τέλος υπολογίζεται ο πίνακας  $U\hat{U}$  και ενσωματώνεται στη βάση Z. Η διαδικασία αυτή είναι πιο ακριβής αλλά έχει μεγαλύτερο κόστος (λόγω του υπολογισμού του  $U^T F_U^* U$ ).

#### 2.1.4 Διατήρηση της ακρίβειας της βάσης

Όσο ο βηματισμός στη παράμετρο προχωρά, ο κυρίαρχος ιδιόχωρος του  $F_U^*$  μεταβάλλεται, κάνοντας ανακριβή πλέον την προσέγγισή μας της βάσης **Z**. Αυτό διορθώνεται κάνοντας ένα βήμα ορθογώνιας μεθόδου δυνάμεων (orthogonal power method) στις στήλες του **Z** μετά από κάθε βήμα,

Ο παραπάνω συμβολισμός αντιστοιχεί σε υπολογισμό μιας ορθοκανονικής βάσης για το  $F_U^*Z$  με τη μέθοδο Gram-Schmidt. Το βήμα αυτό δεν απαιτεί επιπλέον δαπανηρούς υπολογισμούς αφού ότι απαιτείται έχει ήδη υπολογισθεί σε προηγούμενο στάδιο της μεθόδου. Μπορούμε εύκολα να ελέγχουμε την ακρίβεια της βάσης υπολογίζοντας το:

$$\mathcal{E} \equiv \boldsymbol{Q} \boldsymbol{F}_{\boldsymbol{U}}^* \boldsymbol{P} \tag{2.17}$$

το οποίο θα πρέπει να μηδενίζεται αν η βάση μας είναι όντως καλή. Αν το Ε γίνει πολύ μεγάλο τότε μπορούμε να διορθώσουμε τη βάση κάνοντας μερικά βήματα ακόμα της μεθόδου δυνάμεων. Συνήθως, όμως, στη πράξη αυτό δε κρίνεται αναγκαίο.

#### 2.1.5 Μείωση της διάστασης της βάσης

Μερικές φορές γίνεται αναγκαία η ελάττωση της διάστασης της βάσης Z γιατί πρέπει αυτή να είναι υπόχωρος αναλλοίωτος από το  $F_U^*$  και όχι απλά να τον περιέχει. Η διάσταση της βάσης αυξάνει όταν κάποιες ιδιοτιμές πλησιάζουν το {|z| = 1}. Όσο όμως ο βηματισμός στη παράμετρο συνεχίζει μπορεί κάποιες από τις ιδιοτιμές αυτές να επιστρέψουν στο ευρύτερο σύνολο των μικρότερων ιδιοτιμών. Τότε η βάση Z θα πάψει να παράγει τον αναλλοίωτο υπόχωρο, παρόλο που μπορεί ακόμα να περιέχει τον κυρίαρχο ιδιόχωρο. Επιπλέον, μπορεί η διαδικασία που περιγράφηκε στην προηγούμενη παράγραφο να υπερεκτιμήσει τη διάσταση του υπόχωρου. Έτσι ελέγχεται κατά πόσο πρέπει να ελαττωθεί η διάσταση της βάσης, εισάγοντας τον  $m \times m$ πίνακα H:

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{Z}^T \boldsymbol{F}_{\boldsymbol{U}}^* \boldsymbol{Z} = \boldsymbol{Z}^T \boldsymbol{f}_{\boldsymbol{p}}^* \boldsymbol{Z}$$
(2.18)

Οι ιδιοτιμές του **H** είναι υποσύνολο αυτών του  $F_U^*$ . Επιδιώκεται να είναι μόνο αυτές που βρίσκονται κοντά στα όρια του μοναδιαίου δίσκου  $K_\delta$ . Μετά από κάθε βήμα υπολογίζονται οι ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του **H**, το οποίο δεν έχει μεγάλο κόστος αφού πρόκειται για έναν μικρό  $m \times m$  πίνακα. Αν μόνο  $\hat{m} < m$ ιδιοτιμές του **H** βρίσκονται εκτός του  $K_\delta$ , υπολογίζεται μια πραγματική βάση  $V \in \mathbb{R}^{m \times \hat{m}}$  για τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα του **H**. Τότε η επιθυμητή βάση είναι η ορθοκανονική βάση του **ZV**:

$$\mathbf{Z} \leftarrow orth(\mathbf{Z}\mathbf{V}) \tag{2.19}$$

Έτσι η διάσταση της βάσης ελαττώνεται αυτόματα όποτε είναι απαραίτητο.

#### 2.1.6 Ο αριθμητικός αλγόριθμος: RPM

Στη παράγραφο αυτή περιγράφεται ο αλγόριθμος με τον οποίο εφαρμόζεται η RPM για τη σταθεροποίηση και επιτάχυνση επαναληπτικών διαδικασιών σταθερού σημείου.

Ο προτεινόμενος αλγόριθμος υπολογίζει μια προσέγγιση  $\hat{Z}$  της βάσης Z και τις αντίστοιχες προβολές:

$$\widehat{P} = \widehat{Z}\widehat{Z}^T \operatorname{Kat} \widehat{Q} = I - \widehat{Z}\widehat{Z}^T$$
(2.20)

Έχει βρεθεί ότι για την επαναληπτική διαδικασία (2.11) είναι αρκετό να υπολογιστεί ο πίνακας  $(I - f_p)^{-1}$  μόνο μια φορά για κάθε τιμή παραμέτρου και δε χρειάζεται να υπολογίζεται σε κάθε επανάληψη. Δηλαδή εφαρμόζεται μια ειδική μέθοδος Newton στον ασταθή υπόχωρο  $\widehat{\mathbb{P}}$ . Έτσι έχουμε:

i. 
$$\boldsymbol{p}^0 = \widehat{\boldsymbol{P}} \boldsymbol{U}^0(\lambda), \boldsymbol{q}^0 = \widehat{\boldsymbol{Q}} \boldsymbol{U}^0(\lambda)$$

ii. Do until convergence:

a) 
$$p^{n+1} = p^n + \left(I - \widehat{f_p^0}\right)^{-1} \left(\widehat{f}(p^n, q^n, \lambda) - p^n\right)$$
 (2.21)  
b)  $q^{n+1} = \widehat{g}(p^n, q^n, \lambda)$ 

iii. 
$$\boldsymbol{U}^*(\lambda) = \boldsymbol{p}^{n_{final}} + \boldsymbol{q}^{n_{final}} \equiv \boldsymbol{p}^* + \boldsymbol{q}^*$$

Εδώ χρησιμοποιήθηκαν οι σχέσεις:

$$\widehat{f}(p,q,\lambda) \equiv \widehat{P}F(p+q,\lambda) \quad \text{kal} \quad \widehat{g}(p,q,\lambda) \equiv \widehat{Q}F(p+q,\lambda) \quad (2.22)$$

Гіа va іσχύει ο παραπάνω αλγόριθμος πρέπει va υπάρχει ο αντίστροφος  $(I - \widehat{f}_p^0)^{-1}: \widehat{\mathbb{P}} \to \widehat{\mathbb{P}}$ , ο οποίος είναι ο περιορισμός του  $(I - F_U^0)$  στον υπόχωρο  $\widehat{\mathbb{P}}$ . Για τις ανάγκες της ανάλυσης στη παράγραφο αυτή θεωρείται ότι υπάρχει. Εύκολα αποδεικνύεται ότι:

$$\left(\boldsymbol{I} - \widehat{\boldsymbol{f}_{p}}\right)^{-1} = \widehat{\boldsymbol{Z}} \left(\boldsymbol{I} - \widehat{\boldsymbol{Z}}^{T} \boldsymbol{F}_{\boldsymbol{U}} \widehat{\boldsymbol{Z}}\right)^{-1} \widehat{\boldsymbol{Z}}^{T}$$
(2.23)

Για τη διεξαγωγή των υπολογισμών εισάγεται η μεταβλητή z για την οποία ισχύει:

$$z \equiv \widehat{Z}^T p = \widehat{Z}^T U$$
,  $z \in \mathbb{R}^m$  επομένως:  $p = \widehat{Z}z$  και  $U = \widehat{Z}z + q$  (2.24)

Το βήμα (2a) στη σχέση (2.21), με βάση τη νέα αυτή μεταβλητή γράφεται:

$$\mathbf{z}^{n+1} = \mathbf{z}^n + \left(\mathbf{I} - \widehat{\mathbf{Z}}^T \mathbf{F}_{\mathbf{U}}^0 \widehat{\mathbf{Z}}\right)^{-1} \left(\widehat{\mathbf{Z}}^T \mathbf{F}(\mathbf{U}^n, \lambda) - \mathbf{z}^n\right)$$
(2.25)

Για τον υπολογισμό του πίνακα  $\widehat{Z}^T F_U \widehat{Z}$  χρησιμοποιείται προσεγγιστική σχέση βασιζόμενη σε διαφορές:

$$F_{U}\widehat{Z}_{i} \approx \frac{1}{\varepsilon} \left[ F(U + \varepsilon \widehat{Z}_{i}, \lambda) - F(U, \lambda) \right] \quad \gamma \iota \alpha \quad i = 1, ..., m$$
(2.26)

Με τον τρόπο αυτό χρειάζεται μόνο ένας επιπλέον υπολογισμός της F αφού το  $F(U, \lambda)$  χρειάζεται και υπολογίζεται για το υπόλοιπο της μεθόδου.

Ο κώδικας που χρησιμοποιείται στη πράξη καλείται αλγόριθμος βηματισμού *RPM* και κάνει βηματισμό στη παράμετρο λ δίνεται συνοπτικά στη συνέχεια. Ο αλγόριθμος χρειάζεται ως δεδομένα δύο λύσεις  $(U_{-1}, \lambda_{-1})$  και  $(U_0, \lambda_0)$  πάνω στο κλάδο λύσεων Γ, καθώς και τις παραμέτρους  $n_{max}$ , δ, το βήμα δλ και τη τιμή tol για τον έλεγχο της σύγκλισης. Στον προτεινόμενο αλγόριθμο η σταθεροποιημένη επαναληπτική διαδικασία (2.21) εφαρμόστηκε χρησιμοποιώντας τη παράμετρο z σύμφωνα με τη σχέση (2.25), και τον ορισμό του  $\hat{Q}$  για να γραφτεί  $\hat{Q}U = U - \hat{Z}z$ . Στον παρακάτω αλγόριθμο εφαρμόζονται οι μέθοδοι που αναφέρονται σε προηγούμενες παραγράφους για τον υπολογισμό αρχικής τιμής  $U^{(0)}$ , την αύξηση βάσης Z, την ελάττωση βάσης Z και τη μέθοδο δυνάμεων επί της βάσης Z. Επίσης  $\sigma_k(\hat{H})$  είναι μια ιδιοτιμή του πίνακα  $\hat{H}$ . Το βήμα δλ, διατηρείται σταθερό όσο ο βηματισμός στη παράμετρο προχωρά. Σε ορισμένες περιπτώσεις μπορεί να είναι καλό αυτό να μεταβάλλεται. Τέλος πρέπει να σημειωθεί ότι ο αλγόριθμος λύνει γραμμικά συστήματα μόνο με το πίνακα  $(I - \hat{H})$  που έχει διάσταση  $m \times m$  και αποφεύγεται η εύρεση αντίστροφων του Ιακωβιανού πίνακα του F που έχει διάσταση  $N \times N$ .

34

## Αλγόριθμος 1.

Αλγόριθμος βηματισμού RPM ( $U_{-1}$ ,  $\lambda_{-1}$ ,  $U_0$ ,  $\lambda_0$ ,  $n_{max}$ ,  $\delta$ ,  $\delta\lambda$ , tol)

## $\widehat{Z} = []$

## while( $\lambda$ )

- 1. Υπολογισμός αρχικής τιμής  $U^{(0)}$
- 2.  $n \leftarrow 0$
- 3.  $F \leftarrow F(U, \lambda)$
- 4. Υπολογισμός παραγώγου  $F_U \widehat{Z}_i \approx \frac{1}{\varepsilon} [F(U + \varepsilon \widehat{Z}_i, \lambda) F(U, \lambda)]$
- 5.  $\widehat{H} \leftarrow \widehat{Z}^T F_U \widehat{Z}$
- 6. *while*( $||U F||_2 > tol$ )
  - i.  $z \leftarrow \widehat{Z}^T U; q \leftarrow U \widehat{Z} z; \zeta \leftarrow \widehat{Z}^T F$
  - ii. Σταθεροποιημένη επαναληπτική διαδικασία

a) 
$$\mathbf{z} \leftarrow \mathbf{z} + \left(\mathbf{I} - \widehat{\mathbf{H}}\right)^{-1} (\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{z})$$

b) 
$$\boldsymbol{q} \leftarrow \boldsymbol{F} - \widehat{\boldsymbol{Z}} \boldsymbol{z}$$

- iii.  $U \leftarrow \widehat{Z}z + q$
- iv.  $F \leftarrow F(U, \lambda)$
- v.  $n \leftarrow n + 1$
- vi.  $if(n > n_{max})$ 
  - a) Αύξηση της βάσης  $\widehat{Z}$
  - b)  $n \leftarrow 0$
  - c) Υπολογισμός παραγώγου  $F_U \widehat{Z}_i$

## endif

#### endwhile

7.  $if(\sigma_k(\hat{H}) \in \{|z| < 1 - \delta\}$  για κάποιο k)

Ελάττωση της βάσης  $\widehat{\mathbf{Z}}$ 

endif

- 8. Μέθοδος δυνάμεων στη βάση  $\widehat{Z}$
- 9.  $(\boldsymbol{U}_{-1}, \lambda_{-1}, \boldsymbol{U}_0, \lambda_0) \leftarrow (\boldsymbol{U}_0, \lambda_0, \boldsymbol{U}, \lambda)$

#### endwhile

#### 2.2 Μέθοδος βηματισμού μήκους τόξου

Ο αλγόριθμος που περιγράφεται στην παραπάνω παράγραφο αφορά στην περίπτωση που υπάρχει ο αντίστροφος του πίνακα  $(I - F_U)$  στη περιοχή της λύσης  $U^*(\lambda)$ . Αν, όμως, η επαναληπτική διαδικασία γίνει ασταθής λόγω του ότι μια πραγματική ιδιοτιμή βγαίνει από το μοναδιαίο δίσκο στο z = 1, τότε θα υπάρξει ένα  $\lambda^*$  για το οποίο ο πίνακας  $(I - F_U(U^*(\lambda^*), \lambda^*))$  δε θα είναι αντιστρέψιμος. Τέτοια σημεία λέγονται κρίσιμα και οδηγούν σε πτυχές και διακλαδώσεις. Για το βηματισμό πέρα από τα σημεία αυτά εφαρμόζονται μέθοδοι τύπου μήκους τόξου (arc-length continuation) (Keller 1977) οι οποίες συνδυάζονται με την RPM όπως θα δειχθεί παρακάτω. Έχει δειχθεί ότι η μέθοδος αυτή αρκεί να εφαρμοστεί μόνο στον υπόχωρο  $\mathbb{P}$ .

Για να συνεχιστεί ο βηματισμός πέρα από κρίσιμα σημεία, εισάγεται μια νέα παράμετρος s κι έτσι προκύπτει ένα νέο σύστημα:

- $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}, \lambda) \tag{2.27a}$
- $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}, \lambda) \tag{2.27b}$
- $N(\boldsymbol{p},\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{s}) = 0 \tag{2.27c}$

Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω ο βηματισμός μήκους τόξου εφαρμόζεται μόνο στον ασταθή υπόχωρο  $\mathbb{P}$ , που έχει μικρή διάσταση και έτσι αποφεύγονται οι επιπλέον δαπανηροί υπολογισμοί. Για το λόγο αυτό η κανονικοποίηση κατά μήκος τόξου έχει επιλεγεί να είναι ανεξάρτητη του  $\boldsymbol{q}$ :  $N(\boldsymbol{p}, \lambda, s) = 0$ . Η νέα παράμετρος του κλάδου των λύσεων είναι τώρα το s,  $\Gamma(s)$ : { $\boldsymbol{U}^*(s), \lambda^*(s)$ } με  $\boldsymbol{U}^*(s) = \boldsymbol{p}^*(s) + \boldsymbol{q}^*(s)$ και το  $\lambda^*(s)$  να ικανοποιούν τις σχέσεις (2.27).

Η νέα διαδικασία μήκους-τόξου χρησιμοποιεί μια μέθοδο πρόβλεψης διόρθωσης, όπως και προηγουμένως: για δύο λύσεις στο Γ, έστω  $(U_{-1}, \lambda_{-1}) \equiv$  $(U^*(s_{-1}), \lambda^*(s_{-1}))$  και  $(U_0, \lambda_0) \equiv (U^*(s_0), \lambda^*(s_0))$ , γίνεται πρόβλεψη μιας νέας λύσης με τη μέθοδο της τέμνουσας:

$$\lambda^{(0)}(s) = \lambda_0 + \frac{\delta s}{s_0 - s_{-1}} (\lambda_0 - \lambda_{-1})$$
(2.28a)

$$\boldsymbol{U}^{(0)}(s) = \boldsymbol{U}_0 + \frac{\delta s}{s_0 - s_{-1}} (\boldsymbol{U}_0 - \boldsymbol{U}_{-1})$$
(2.28b)

$$s = s_0 + \delta s \tag{2.28c}$$

όπου δs είναι το βήμα για τη νέα παράμετρο s. Χρησιμοποιείται η μέθοδος Newton για τις μεταβλητές (p,  $\lambda$ )  $\in \mathbb{P} \times \mathbb{R}$ . Για το  $q \in \mathbb{Q}$  χρησιμοποιείται η επαναληπτική μέθοδος απλού βήματος με την προσθήκη της διόρθωσης  $g_{\lambda}^{n}\Delta\lambda^{n}$ . Η διόρθωση αυτή γίνεται γιατί το  $\lambda$  μεταβάλλεται κατά τη διάρκεια του βηματισμού στο s. Η επαναληπτική διαδικασία που προκύπτει είναι:

$$\boldsymbol{q}^{n+1} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{p}^n, \boldsymbol{q}^n, \lambda^n) + \boldsymbol{g}^n_{\lambda} \Delta \lambda^n$$
(2.29a)

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{I} - \boldsymbol{f}_{\boldsymbol{p}}^{n} & -\boldsymbol{f}_{\lambda}^{n} \\ N_{\boldsymbol{p}} & N_{\lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \boldsymbol{p}^{n} \\ \Delta \lambda^{n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{p}^{n}, \boldsymbol{q}^{n}, \lambda^{n}) - \boldsymbol{p}^{n} \\ -N(\boldsymbol{p}^{n}, \lambda^{n}, s) \end{pmatrix}$$
(2.29b)

Οι αρχικές τιμές  $p^{(0)}$  και  $q^{(0)}$  λαμβάνονται από τη σχέση (2.28b) με τη βοήθεια της σχέσης:  $U^{(0)}(s) = p^{(0)} + q^{(0)}$ . Ακόμα ισχύουν οι σχέσεις  $\Delta p^n \equiv p^{n+1} - p^n$ ,  $\Delta \lambda^n \equiv \lambda^{n+1} - \lambda^n$ ,  $f_p^n \equiv f_p(p^n, q^n, \lambda^n)$ ,  $g_\lambda^n \equiv g_\lambda(p^n, q^n, \lambda^n)$  κλπ. Στην πράξη χρησιμοποιείται πάλι η μεταβλητή  $z \in \mathbb{R}^m$  όπως και στη προηγούμενη περίπτωση.

Χρησιμοποιείται η κανονικοποίηση μήκους τόξου:

$$N(\boldsymbol{p},\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{s}) = \dot{\boldsymbol{p}}^{T}(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}_{0}) + \dot{\boldsymbol{\lambda}}(\boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\lambda}_{0}) - (\boldsymbol{s} - \boldsymbol{s}_{0})$$
(2.30)

όπου  $(\dot{\boldsymbol{U}},\dot{\lambda}) = (\dot{\boldsymbol{p}} + \dot{\boldsymbol{q}},\dot{\lambda})$  είναι το μοναδιαίο εφαπτόμενο διάνυσμα στο κλάδο της λύσης  $\Gamma(s)$ . Σημειώνεται εδώ ότι, αντί για το διάνυσμα  $\dot{\boldsymbol{U}}$  που χρησιμοποιείται κατά κανόνα στην εφαρμογή της μεθόδου μήκους τόξου, χρησιμοποιείται το  $\dot{\boldsymbol{p}}$  δηλαδή η προβολή του  $\dot{\boldsymbol{U}}$  στον υπόχωρο  $\mathbb{P}$ . Στη πράξη, το  $\dot{\boldsymbol{U}}$  (άρα και το  $\dot{\boldsymbol{p}}$ ) είναι κατά προσέγγιση μόνο γνωστά και χρησιμοποιούνται προσεγγιστικές σχέσεις για αυτά, όπως θα δειχθεί και στη συνέχεια.

Τελικά η προτεινόμενη επαναληπτική διαδικασία γράφεται:

$$\boldsymbol{q}^{n+1} = \boldsymbol{g}^n + \boldsymbol{g}^n_{\lambda} \Delta \lambda^n \tag{2.31a}$$

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{p}^{n+1} \\ \boldsymbol{\lambda}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{p}^n \\ \boldsymbol{\lambda}^n \end{pmatrix} - [\boldsymbol{M}^n]^{-1} \begin{pmatrix} \boldsymbol{p}^n - \boldsymbol{f}^n \\ N^n \end{pmatrix}$$
(2.31b)

όπου 
$$\boldsymbol{M} \equiv \begin{bmatrix} \boldsymbol{I} - \boldsymbol{f}_{\boldsymbol{p}} & -\boldsymbol{f}_{\lambda} \\ \dot{\boldsymbol{p}}^{T} & \dot{\lambda} \end{bmatrix}^{-1}$$
 (2.31c)

Το βασικό σημείο της μεθόδου είναι ότι ο πίνακας M είναι αντιστρέψιμος ακόμα και όταν ο  $(I - f_p)$  δεν είναι, επιτρέποντας έτσι το βηματισμό και πέρα από τα κρίσιμα σημεία.

#### 2.3 Τεχνικές λεπτομέρειες εφαρμογής

Το λογισμικό που χρησιμοποιούμε για την επίλυση των εξισώσεων, όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως είναι το Fluent (Ansys 13). Η βασική ιδέα της διασύνδεσης του Fluent με τον κώδικα υποβοηθούμενης σύγκλισης, είναι ότι ο κώδικας χρησιμοποιείται σαν υπολογιστικό κέλυφος γύρω από το Fluent, το οποίο εδώ θεωρείται επαναληπτική μέθοδος σταθερού σημείου. Επίσης το Fluent χρησιμοποιείται ως «μαύρο κουτί» («black box»), δηλαδή ο χρήστης δεν παρεμβαίνει καθόλου στον τρόπο με τον οποίο επιλύει τις εξισώσεις (Cheimarios, Koronaki et al. 2011).

Στην εφαρμογή της μεθόδου μήκους τόξου απαιτείται η εύρεση των εφαπτόμενων στον κλάδο της λύσης Γ(s). Αυτές υπολογίζονται προσεγγιστικά από τις σχέσεις:

$$\dot{\boldsymbol{p}} \approx \frac{(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}_0)}{(\boldsymbol{s} - \boldsymbol{s}_0)} \tag{2.32a}$$

$$\dot{\lambda}_p \approx \frac{(\lambda_p - \lambda_{p0})}{(s - s_0)} \tag{2.32b}$$

Εδώ  $p_0$ ,  $\lambda_0$  είναι τιμές του p και του  $\lambda$  για μία δεδομένη τιμή της παραμέτρου  $s_0$ . Αναλυτικά ο αλγόριθμος της μεθόδου μήκους τόξου είναι ο Αλγόριθμος 2.

#### Αλγόριθμος 2.

Αλγόριθμος βηματισμού μήκους τόξου ( $U_{-2}$ ,  $\lambda_{-2}$ ,  $U_{-1}$ ,  $\lambda_{-1}$ ,  $n_{max}$ ,  $\delta$ ,  $\delta s$ , tol)

## $\widehat{Z} = []$

while  $(\lambda < \lambda_{max})$ 

- 1. Υπολογισμός αρχικής τιμής  $U^{(0)}$ ,  $\lambda^{(0)}$
- 2.  $n \leftarrow 0$
- 3. Fluent:  $F \leftarrow F(U, \lambda)$
- 4. Υπολογισμός **F**<sub>λ</sub>
- 5. Υπολογισμός παραγώγου  $F_U \widehat{Z}_i \approx \frac{1}{\varepsilon} \left[ F \left( U + \varepsilon \widehat{Z}_i, \lambda \right) F(U, \lambda) \right]$
- 6.  $\widehat{H} \leftarrow \widehat{Z}^T F_U \widehat{Z}$
- 7.  $while(||U F||_2 > tol)$ 
  - i.  $z \leftarrow \widehat{Z}^T U; q \leftarrow U \widehat{Z} z; \zeta \leftarrow \widehat{Z}^T F$

ii. 
$$\dot{\boldsymbol{p}} \leftarrow \frac{\hat{\boldsymbol{z}}^T (\boldsymbol{u}^{(0)} - \boldsymbol{u}_{-1})}{\delta s}; \dot{\boldsymbol{\lambda}} \leftarrow \frac{(\boldsymbol{\lambda}^{(0)} - \boldsymbol{\lambda}_{-1})}{\delta s}$$

- iii.  $\boldsymbol{z}_{\lambda} \leftarrow \widehat{\boldsymbol{Z}}^T \boldsymbol{F}_{\lambda}$
- iv.  $N \leftarrow \dot{\boldsymbol{p}}^T \left( \boldsymbol{z} \widehat{\boldsymbol{Z}}^T \boldsymbol{U}^{(0)} \right) + \dot{\lambda} \left( \lambda \lambda^{(0)} \right) \delta s$
- v. Σταθεροποιημένη επαναληπτική διαδικασία

a) 
$$\begin{pmatrix} \delta z \\ \delta \lambda \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} I - \hat{H} & -z_{\lambda} \\ \dot{p}^{T} & \dot{\lambda} \end{bmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \zeta - z \\ -N \end{pmatrix}$$
  
b)  $z \leftarrow z + \delta z; \ \lambda \leftarrow \lambda + \delta \lambda$   
c)  $q \leftarrow F - \hat{Z}z + (F_{\lambda} - \hat{Z}z_{\lambda})\delta \lambda$ 

- vi.  $U \leftarrow \widehat{Z}z + q$
- vii. Fluent:  $F \leftarrow F(U, \lambda)$

viii.  $n \leftarrow n + 1$ 

ix.  $if(n > n_{max})$ 

- a) Αύξηση της βάσης  $\widehat{Z}$
- b)  $n \leftarrow 0$
- c) Υπολογισμός παραγώγου  $F_U \widehat{Z}_i$

#### endif

#### endwhile

8.  $if(\sigma_k(\hat{H}) \in \{|z| < 1 - \delta\}$ για κάποιο k)

Ελάττωση της βάσης  $\widehat{Z}$ 

#### endif

- 9. Μέθοδος δυνάμεων στη βάση  $\widehat{Z}$
- 10.  $(\boldsymbol{U}_{-2}, \lambda_{-2}, \boldsymbol{U}_{-1}, \lambda_{-1}) \leftarrow (\boldsymbol{U}_{-1}, \lambda_{-1}, \boldsymbol{U}, \lambda)$

#### endwhile

Στην παρούσα υλοποίηση η παράγωγος του F ως προς την παράμετρο  $\lambda$ , η  $F_{\lambda}$ , η οποία χρειάζεται κατά τη διάρκεια των υπολογισμών υπολογίζεται με προσεγγιστική διαφόριση.

$$F_{\lambda} \approx \frac{F(U,\lambda + d\lambda) - F(U,\lambda)}{d\lambda}$$
(2.33)

Η παράμετρος  $d\lambda$  εξαρτάται από το μέγεθος του βήματος δs και εδώ ορίζεται ως  $d\lambda = \frac{\delta s}{10}$ . Πρακτικά, υλοποιείται η μέθοδος ψευδο-βηματισμού μήκους τόξου (pseudo arc-length), που σημαίνει ότι η  $F_{\lambda}$ , υπολογίζεται σε κάθε  $n_{max}$  εξωτερικές επαναλήψεις, δηλαδή μόνο όταν η βάση ενημερώνεται. Για μεγαλύτερη ακρίβεια μπορεί να υπολογισθεί και σε κάθε εξωτερική επανάληψη αλλά θα αύξανε το υπολογιστικό κόστος.

Όταν ανανεώνεται η βάση Z χρησιμοποιείται το κριτήριο  $T_{11} \gg T_{22}$  για να αποφασιστεί εάν θα είναι ένα ή δύο τα διανύσματα που θα προστεθούν στη βάση. Στην παρούσα εργασία το κριτήριο είναι  $T_{11} > 10^3 T_{22}$ . Ο παράγοντας  $10^3$  εξαρτάται από το φάσμα του  $F_U$ , αλλά η τιμή αυτή είναι αποτελεσματική για πληθώρα προβλημάτων.

Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως για τον υπολογισμό του πίνακα  $\widehat{Z}^T F_U \widehat{Z}$ χρησιμοποιείται προσεγγιστική η σχέση (2.26). Η παράμετρος ε εξαρτάται από το πρόβλημα και στην παρούσα εργασία από την προσέγγιση της λύσης, δηλαδή  $\varepsilon = 10^{-7} + 10^{-2} U$ . Ο μικρής διάστασης Ιακωβιανός πίνακας  $\widehat{H} = \widehat{Z}^T F_U \widehat{Z} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ είναι η προβολή του συνολικού Ιακωβιανού  $F_U$  στον υπόχωρο που περιέχει τις επικίνδυνες ιδιοτιμές, δηλαδή τις ιδιοτιμές που πλησιάζουν τον μοναδιαίο δίσκο. Οι ιδιοτιμές του  $\widehat{H}$  αντιστοιχούν στις κρίσιμες ιδιοτιμές του  $F_U$  και από τα ιδιοδιανύσματα  $y_i \in \mathbb{R}^{m \times 1}, i = 1, ..., m$  του  $\widehat{H}$ , τα ιδιοδιανύσματα  $w_i \in \mathbb{R}^{N \times 1}$ , του  $F_U$  μπορούν να ανακατασκευαστούν:

$$\boldsymbol{w}_i = \widehat{\boldsymbol{Z}} \boldsymbol{y}_i, i = 1, \dots, m \tag{2.34}$$

Κατά αυτόν τον τρόπο, τα ιδιοδιανύσματα του  $F_U$  που αντιστοιχούν στις κυρίαρχες ιδιοτιμές εξάγονται ως «παραπροϊόν» της RPM χωρίς επιπλέον υπολογιστικό κόστος. Αυτό είναι ιδιαίτερα χρήσιμο αφού το Fluent δεν προσφέρει τέτοιου είδους πληροφορίες.

Ο κώδικας υποβοηθούμενης σύγκλισης υλοποιήθηκε σε MatLab και χρησιμοποιείται σαν υπολογιστικό κέλυφος γύρω από το Fluent. Η επικοινωνία της RPM και του Fluent επιτυγχάνεται μέσω συναρτήσεων οριζόμενων από τον χρήστη (User Defined Functions ή UDFs) (2011). Οι UDFs είναι γραμμένες σε γλώσσα C και χρησιμοποιούνται για την ανταλλαγή της λύσης **U** μεταξύ της RPM και του Fluent. Επιπλέον μια UDF χρησιμοποιείται για την επιβολή της συνοριακής συνθήκης στην είσοδο του αντιδραστήρα μέσω της μακρο-εντολής DEFINE\_PROFILE. Η χρησιμοποίηση των UDFs καθιστά το υπολογιστικό πλαίσιο εύχρηστο καθώς ο χρήστης παρέχει μόνο τις αρχικές εκτιμήσεις για τη λύση **U**. Η παρουσίαση της μεθοδολογίας παρουσιάζεται σαν διάγραμμα ροής στην Εικόνα 7.



Εικόνα 7: Διάγραμμα ροής

#### 2.4 Εφαρμογή στο διδιάστατο πρόβλημα του Bratu

Προτού προχωρήσουμε στην ανάλυση ενός πολύπλοκου προβλήματος όπως αυτό ενός αντιδραστήρα ΧΑΑ, θα ήταν σκόπιμο να εφαρμόσουμε τον κώδικα υποβοηθούμενης σύγκλισης σε ένα απλό πρόβλημα το οποίο έχει μελετηθεί διεξοδικά στη βιβλιογραφία και έχει βρεθεί ότι παρουσιάζει δύο ξεχωριστούς κλάδους λύσεων – έναν ευσταθή και έναν ασταθή – που συναντώνται σε ένα σημείο στροφής. Το πρόβλημα αυτό είναι το διδιάστατο πρόβλημα του Bratu (Pashos, Koronaki et al. 2010). Μαθηματικά περιγράφεται από το παρακάτω μοντέλο:

$$\nabla^2 U(x, y) + \lambda e^{U(x, y)} = 0, \ (x, y) \in \Omega, \Omega = [0, 1] \times [0, 1]$$
(2.35a)

$$U(x,y)|_{\vartheta\Omega} = 0, \ \forall (x,y) \in \vartheta\Omega$$
(2.35b)

Η εξίσωση επιλύεται σε ένα τετραγωνικό χωρίο 1 × 1, όπου οι συνοριακές συνθήκες που ισχύουν είναι μηδενική τιμή της άγνωστης μεταβλητής στα όρια του χωρίου. Η παράμετρος του προβλήματος είναι το λ και είναι αυτή που καθορίζει τη μορφή της λύσης. Στην περίπτωση αυτή ο επιλύτης που χρησιμοποιείται σαν «μαύρο κουτί» είναι κώδικας γραμμένος σε γλώσσα C και βασιζόμενος στη μέθοδο Newton/GMRES. Η μέθοδος GMRES είναι μία επαναληπτική μέθοδος για την αριθμητική επίλυση μη-συμμετρικών συστημάτων γραμμικών εξισώσεων (Saad and Schultz 1986). Η σύζευξη του επιλύτη με την μέθοδο arc-length/RPM γίνεται μέσω MatLab και σε αυτήν την περίπτωση όπως και στην περίπτωση του Fluent απαιτείται ελάχιστη παρέμβαση από τον χρήστη. Στην πράξη απαιτούνται μόνο δύο αρχικές λύσεις. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από το βηματισμό πάνω στο τόξο λύσεων σχεδιάζονται ως η Ευκλείδεια νόρμα της λύσης συναρτήσει της παραμέτρου και παρουσιάζονται στην Εικόνα 8. Η Ευκλείδεια νόρμα ορίζεται ως: ||**U** $|| = <math>\sqrt{U_1^2 + \dots + U_n^2}$ . Ως  $U_1, \dots, U_n$  ορίζονται οι συνιστώσες του διανύσματος της

συνολικής λύσης και σε αυτήν την περίπτωση είναι οι τιμές των μεταβλητών  $U_x$  και  $U_y$  σε όλους τους κόμβους διακριτοποίησης του χωρίου επίλυσης.



Εικόνα 8: Χώρος λύσεων του 2D Bratu προβλήματος

Ο χώρος λύσεων που βρέθηκε ανταποκρίνεται σε αυτό που αναμένονταν. Ο κάτω (μπλε) κλάδος είναι κλάδος ευσταθών λύσεων και ο οποίος προσδιορίζεται και χρησιμοποιώντας αποκλειστικά τον κώδικα Newton/GMRES. Ο βηματισμός πάνω στο τόξο λύσεων εντόπισε ένα σημείο στροφής στη τιμή παραμέτρου λ ≈ 6.808, αποτέλεσμα που συμφωνεί με τη βιβλιογραφία (Graves-Morris 2007). Στην συνέχεια υπάρχει ένας κλάδος (κόκκινος) ασταθών λύσεων, ο οποίος είναι αδύνατο να βρεθεί χωρίς τη χρήση του κώδικα υποβοηθούμενης σύγκλισης. Στην Εικόνα 9 παρουσιάζονται δύο λύσεις του προβλήματος σε τιμή παραμέτρου στην οποία συνυπάρχουν οι δύο λύσεις.



Εικόνα 9: Ευσταθής κλάδος, λ=4



Εικόνα 10: Ασταθής κλάδος, λ=4

# 3. 2D αντιδραστήρας ΧΑΑ

Η πρώτη περίπτωση αντιδραστήρα ΧΑΑ που θα εξετάσουμε είναι ένας διδιάστατος αντιδραστήρας με αξονική συμμετρία. Η γεωμετρία του αντιδραστήρα και η διακριτοποίησή του σε στοιχειώδεις όγκους φαίνεται στην Εικόνα 11.



Εικόνα 11: Γεωμετρία του 2D αντιδραστήρα ΧΑΑ και πλέγμα

Το πρόβλημα που επιλύεται όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως δεν περιλαμβάνει χημικές αντιδράσεις καθώς αυτές επηρεάζουν ελάχιστα τη ροή αλλά αυξάνουν σημαντικά το υπολογιστικό κόστος. Το αέριο που εισέρχεται στον αντιδραστήρα είναι καθαρό άζωτο ( $N_2$ ), το οποίο είναι ένα σύνηθες φέρον αέριο. Στα τοιχώματα του αντιδραστήρα ισχύει η συνθήκη μη ολίσθησης και η θερμοκρασία είναι σταθερή στους 300 K. Στην επιφάνεια του δισκίου η θερμοκρασία είναι 700 K. Η συνοριακή συνθήκη εισόδου στον αντιδραστήρα ορίζεται ως ροή μάζας σε  $\frac{kg}{s}$  και είναι η παράμετρος με βάση την οποία κάνει βηματισμό η arc-length/RPM πάνω στο τόξο των λύσεων. Η πίεση λειτουργίας είναι 1300 Pa. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την εφαρμογή της μεθόδου σχεδιάζονται ξανά ως η Ευκλείδεια νόρμα της λύσης συναρτήσει της παραμέτρου και παρουσιάζονται στην Εικόνα 12. Στην περίπτωση αυτή ως  $U_1, ..., U_n$  του συνολικού διανύσματος της λύσης ορίζονται οι τιμές των  $u_x, u_y, P, T$  στους στοιχειώδεις όγκους ελέγχου του χωρίου επίλυσης.



Εικόνα 12: Χώρος λύσεων του 2D αντιδραστήρα ΧΑΑ

Στην παραπάνω εικόνα ο πάνω κλάδος (μπλε) είναι κλάδος ευσταθών λύσεων όπου κυριαρχεί η φυσική συναγωγή, η οποία προκαλείται από την αυξημένη θερμοκρασία του δισκίου. Ο κάτω κλάδος (πράσινος) είναι κλάδος επίσης ευσταθών λύσεων στις οποίες όμως κυριαρχεί η εξαναγκασμένη συναγωγή λόγω της εισροής του ρευστού στον αντιδραστήρα. Ο ενδιάμεσος κλάδος είναι κλάδος ασταθών λύσεων και οι λύσεις που προκύπτουν βρίσκονται ανάμεσα στις λύσεις των δύο ευσταθών κλάδων. Οι τρεις κλάδοι συνδέονται μεταξύ τους με δύο σημεία στροφής.

Οι δύο ευσταθείς κλάδοι είναι λύσεις στις οποίες μπορεί και συγκλίνει από μόνο του το Fluent. Το αν θα συγκλίνει στον πάνω ή στον κάτω κλάδο εξαρτάται από την αρχική εκτίμηση της λύσης και την παράμετρο στην οποία επιλύονται οι εξισώσεις. Έτσι παρατηρήθηκε ότι αν ως αρχική εκτίμηση της λύσης δοθεί μια μηδενική λύση και η παράμετρος βρίσκεται στην περιοχή της πολλαπλότητας των λύσεων, τότε το Fluent συγκλίνει τυχαία σε έναν από τους δύο κλάδους. Αντιθέτως αν ως αρχική εκτίμηση του ίδιου κλάδου ακόμα και στην περιοχή πολλαπλότητας. Η σύγκλιση του ίδιου κλάδου ακόμα και στην περιοχή πολλαπλότητας. Η σύγκλιση του Fluent στον ασταθή κλάδο είναι υποβοηθούμενη από τη μέθοδο arclength/RPM και χωρίς αυτήν ο κλάδος δε θα μπορούσε να προσδιοριστεί, κάτι που αποδεικνύει και την χρησιμότητα της μεθόδου. Προσδιορίσαμε με ακρίβεια την περιοχή στην οποία υπάρχει η πολλαπλότητα των λύσεων, αποτέλεσμα ιδιαίτερα σημαντικό για τον σχεδιασμό ενός αντιδραστήρα ΧΑΑ. Στις Εικόνες 13 – 15 παρουσιάζονται τα προφίλ θερμοκρασίας και οι ροϊκές γραμμές σε τιμή παραμέτρου όπου υπάρχουν πολλαπλές λύσεις, (*Massinflowrate* = 3.052 × 10<sup>-5</sup> kg/s).



Εικόνα 13: Πάνω ευσταθής κλάδος (φυσική συναγωγή)



Εικόνα 14: Κάτω ευσταθής κλάδος (εξαναγκασμένη συναγωγή)



Εικόνα 15: Ασταθής κλάδος

Στην παρούσα μεθοδολογία, ο χρήστης πρέπει να ορίσει τον αριθμό k, των επαναλήψεων που θα πραγματοποιήσει το Fluent ή διαφορετικά τον αριθμό των εσωτερικών επαναλήψεων που θα πρέπει να πραγματοποιήσει όταν καλείται από τον κώδικα της RPM. Δεν υπάρχει κανόνας για την επιλογή της παραμέτρου k και εξαρτάται από τον κλάδο που πρέπει να συγκλίνει. Για παράδειγμα στον ασταθή κλάδο, δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί μεγάλος αριθμός k καθώς ο Fluent έχει την τάση να αποκλίνει στον συγκεκριμένο κλάδο. Στον ευσταθή κλάδο, είναι πιθανόν να επιτευχθεί σύγκλιση για πολλές τιμές του k.

Για τους ευσταθείς κλάδους μπορεί να επιλεγεί k = 400 και η επαναληπτική διαδικασία να συγκλίνει. Ο αριθμός αυτός όμως είναι πολύ μεγάλος για τον ασταθή κλάδο, διότι το Fluent αποκλίνει μέσα στις 400 αυτές εσωτερικές επαναλήψεις. Από

την άλλη μεριά, όταν ο αριθμός των εσωτερικών επαναλήψεων μειώνεται στο k = 40, επιτυγχάνεται σύγκλιση τόσο στους ευσταθείς όσο και στον ασταθή κλάδο.

Μία επιπλέον παράμετρος που είναι σημαντική για την RPM είναι ο μέγιστος αριθμός των εξωτερικών επαναλήψεων n<sub>max</sub>, που πραγματοποιεί η RPM πριν κατασκευάσει νέα βάση. Το  $n_{max}$  συνδέεται με το k και συγκεκριμένα, όταν το kείναι μεγάλο, ο αριθμός των εξωτερικών επαναλήψεων είναι μικρός και αντίστροφα. Για παράδειγμα, για k = 400, ο αριθμός των εξωτερικών επαναλήψεων είναι  $n_{max} = 15$ , ενώ για k = 40,  $n_{max} = 60$ . Στην πρώτη περίπτωση, ο συνολικός αριθμός των επαναλήψεων που πραγματοποιείται για κάθε ανανέωση της βάσης είναι 6000 ενώ στη δεύτερη είναι 2400, που είναι ιδιαίτερα σημαντικό για την εξοικονόμηση υπολογιστικού χρόνου, διότι σε κάθε νέα παράμετρο, για την οποία αναζητείται η λύση, η RPM χρησιμοποιεί την ήδη κατασκευασμένη βάση από το προηγούμενο βήμα. Αν η βάση έχει προσεγγιστεί ικανοποιητικά, τότε η σύγκλιση θα επιτευχθεί για  $n < n_{max}$  αριθμό επαναλήψεων, όπως συμβαίνει συνήθως σε προβλήματα μακριά από ιδιάζοντα σημεία. Κοντά σε σημεία στροφής, η βάση χρειάζεται να ανακατασκευαστεί, συνήθως μία φορά, δηλαδή ένα ή δύο διανύσματα βάσης συμπληρώνουν την ήδη υπάρχουσα βάση, οπότε η σύγκλιση είναι γρηγορότερη όταν το Fluent πραγματοποιεί λιγότερες επαναλήψεις πριν την ανακατασκευή της βάσης. Οπότε, πραγματοποιώντας λίγες εσωτερικές επαναλήψεις, εδώ 40 – 50 και περισσότερες εξωτερικές επαναλήψεις, π.χ. 50 – 60, όχι μόνο βοηθά στο να κατασκευαστεί καλύτερη βάση αλλά και συνεισφέρει στην επιτάχυνση της διαδικασία στα πλαίσια του βηματισμού μήκους τόξου.

52

# 4. 3D αντιδραστήρας ΧΑΑ

Στο κεφάλαιο αυτό εξετάζεται η πιο πολύπλοκη περίπτωση, αυτή ενός τρισδιάστατου αντιδραστήρα ΧΑΑ. Η γεωμετρία του αντιδραστήρα και η διακριτοποίησή του σε στοιχειώδεις όγκους φαίνεται στην Εικόνα 16.



Εικόνα 16: Γεωμετρία του 3D αντιδραστήρα ΧΑΑ και πλέγμα

Το φυσικό πρόβλημα που μελετάται είναι αντίστοιχο αυτού στον 2D αντιδραστήρα, με την μόνη διαφορά ότι το αέριο τώρα είναι το υδρογόνο ( $H_2$ ). Η συνοριακή συνθήκη εισόδου στον αντιδραστήρα ορίζεται ως ταχύτητα εισόδου σε  $\frac{m}{s}$ .

Η πρώτη σειρά αποτελεσμάτων σχετίζεται με την πρότερη διερεύνηση του χώρου των λύσεων και με τη μορφή του που είχε προταθεί (Εικόνα 5) (Van Santen, Kleijn et al. 2000). Η ανεξάρτητη παράμετρος σε εκείνη την περίπτωση ήταν ο αριθμός Rayleigh, ο οποίος ορίζεται ως το γινόμενο των αριθμών Grashof και Prandtl:

$$Ra = Gr \times Pr = \frac{g\rho_{ref}^2 D^3(T_{wafer} - T_{wall})}{\mu_{ref}^2 T_{ref}} \times \frac{\mu_{ref} c_{p_{ref}}}{\lambda_{ref}}, \quad \acute{o}\pi ov \quad T_{ref} = \frac{T_{wafer} + T_{wall}}{2} \quad (4.1)$$

Πρακτικά ο αριθμός Rayleigh είναι ανάλογος της θερμοκρασίας του δισκίου. Η πρώτη σειρά αποτελεσμάτων προέρχεται από υπολογισμούς που πραγματοποιήθηκαν μόνο από το Fluent σε ταχύτητα εισόδου  $u_{in} = 0.09 \frac{m}{s}$  και σε διαφορετικές θερμοκρασίες δισκίου.



Εικόνα 17: Η νόρμα της λύσης συναρτήσει της θερμοκρασίας του δισκίου

Όπως φαίνεται στην Εικόνα 17 τα αποτελέσματα που προκύπτουν δεν είναι αυτά που αναμένονταν. Φαίνεται να υπάρχουν δύο ξεχωριστοί κλάδοι, ένας με αξονοσυμμετρικές λύσεις σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες (εξαναγκασμένη συναγωγή) και ένας με μη-αξονοσυμμετρικές (φυσική συναγωγή) οι οποίες εμφανίζονται όταν αυξηθεί η θερμοκρασία. Αυτό που έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον είναι ότι οι προηγούμενες εργασίες (Fotiadis, Kieda et al. 1990), (Van Santen, Kleijn et al. 2000) που είχαν εντοπίσει μη-αξονοσυμμετρικές λύσεις, το είχαν πετύχει επιβάλλοντας προσωρινές μη-συμμετρικές συνοριακές συνθήκες στο πρόβλημα. Σε αυτήν την περίπτωση το Fluent συγκλίνει στον μη-συμμετρικό κλάδο με συμμετρικές συνοριακές συνθήκες και ανεξάρτητα από την αρχική εκτίμηση της λύσης. Οι κατανομές θερμοκρασίας αυτών των λύσεων παρουσιάζονται στη συνέχεια.



Εικόνα 18: Αξονοσυμμετρικές λύσεις (εξαναγκασμένη συναγωγή) στους 350K και στους 400K





Εικόνα 19: Μη-αξονοσυμμετρικές λύσεις (φυσική συναγωγή) στους 500K, 1000K και στους 1500K

Δεδομένου ότι από τα προηγούμενα δε προκύπτει κάποιο ξεκάθαρο αποτέλεσμα για τον χώρο των λύσεων, στη συνέχεια θα εξετάσουμε την εξάρτηση της λύσης από την ταχύτητα εισόδου, διαδικασία που είχαμε ακολουθήσει και στο 2D πρόβλημα. Η πρώτη σειρά υπολογισμών προέρχεται μόνο από το Fluent σε διαφορετικές θερμοκρασίες μεταβάλλοντας την ταχύτητα εισόδου. Συνοπτικά τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 1.

Ταχύτητα	Θερμοκρασία δισκίου (Κ)		
Εισόδου $\left(\frac{m}{s}\right)$	450 <i>K</i>	500 <i>K</i>	1000 K
0.07	Μη-Αξονοσυμμετρική	Μη-Αξονοσυμμετρική	Μη-Αξονοσυμμετρική
0.09	Μη-Αξονοσυμμετρική	Μη-Αξονοσυμμετρική	Μη-Αξονοσυμμετρική
0.11	Μη-Αξονοσυμμετρική	Μη-Αξονοσυμμετρική	Μη-Αξονοσυμμετρική
0.13	Αξονοσυμμετρική	Αδυναμία σύγκλισης	Μη-Αξονοσυμμετρική
0.15	Αξονοσυμμετρική	Αξονοσυμμετρική	Μη-Αξονοσυμμετρική
0.20	Αξονοσυμμετρική	Αξονοσυμμετρική	Μη-Αξονοσυμμετρική
0.21	Αξονοσυμμετρική	Αξονοσυμμετρική	Αδυναμία σύγκλισης
0.23	Αξονοσυμμετρική	Αξονοσυμμετρική	Αδυναμία σύγκλισης
0.24	Αξονοσυμμετρική	Αξονοσυμμετρική	Αξονοσυμμετρική

Πίνακας 1: Αποτελέσματα υπολογισμών μέσω του Fluent σε διαφορετικές θερμοκρασίες δισκίου συναρτήσει της ταχύτητας εισόδου

Από τα αποτελέσματα παρατηρούμε ότι όσο αυξάνεται η θερμοκρασία του δισκίου, εμφανίζεται ένα εύρος τιμών στο οποίο το Fluent δε μπορεί να συγκλίνει μόνο του. Για να εξεταστεί καλύτερα ο χώρος λύσεων θα χρησιμοποιηθεί η μέθοδος arclength/RPM με αρχικές εκτιμήσεις λύσεων στον αξονοσυμμετρικό κλάδο. Η θερμοκρασία που επιλέγεται είναι 450*K*, για λόγους ταχύτητας υπολογισμών καθώς σε αυτήν την θερμοκρασία η σύγκλιση είναι ταχύτερη. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν παρουσιάζονται στην Εικόνα 20.



Εικόνα 20: Ο χώρος λύσεων στη θερμοκρασία των 450Κ

Ο μη-αξονοσυμμετρικός κλάδος έχει προκύψει από υπολογισμούς του Fluent και ο αξονοσυμμετρικός από βηματισμό πάνω στο τόξο λύσεων με την arclength/RPM. Η RPM παρότι χτίζει βάση και επιταχύνει τη σύγκλιση του Fluent, δεν εντοπίζει σημείο στροφής και φαίνεται ότι συγκλίνει ασυμπτωματικά σε μια κατακόρυφη ευθεία.

Η ίδια μέθοδος εφαρμόστηκε και στη θερμοκρασία των 500K. Οι υπολογισμοί μόνο μέσω του Fluent καταλήγουν σε δύο κλάδους που φαίνεται ότι συγκλίνουν ασυμπτωματικά σε μια κατακόρυφη ευθεία, ωστόσο υπάρχει και ένα εύρος της παραμέτρου ανάμεσα στους δύο κλάδους στο οποίο δεν επιτυγγάνεται σύγκλιση. Για να διερευνήσουμε καλύτερα αυτό το εύρος αυτό εφαρμόστηκε η μέθοδος arc-length/RPM με αρχικές εκτιμήσεις λύσεων στον αξονοσυμμετρικό κλάδο. Εντούτοις και η εφαρμογή της μεθόδου arc-length/RPM στον αξονοσυμμετρικό κλάδο δεν παρήγαγε σημαντικά αποτελέσματα καθώς δεν μπόρεσε να κάνει βηματισμό πάνω στο τόξο λύσεων πέρα από το σημείο στο οποίο είχαμε φτάσει χρησιμοποιώντας μόνο το Fluent. Δεδομένου της αδυναμίας σύγκλισης σε κάποιες τιμές παραμέτρων και του μεγάλου μεγέθους του προβλήματος το οποίο έχει ως αποτέλεσμα την πολύ αργή ταχύτητα με την οποία εκτελούνται οι υπολογισμοί, αποφασίστηκε να διερευνηθεί το ίδιο πρόβλημα αυτή τη φορά όμως σε 2D γεωμετρία ώστε να μπορέσουμε να εξάγουμε κάποια χρήσιμα συμπεράσματα για το 3D πρόβλημα.

Στην Εικόνα 21 παρουσιάζεται η γεωμετρία του αντιδραστήρα και η διακριτοποίησή του σε στοιχειώδεις όγκους ελέγχου.

59



Εικόνα 21: Γεωμετρία του 3D αντιδραστήρα ΧΑΑ και πλέγμα

Όπως βλέπουμε η γεωμετρία είναι ίδια με αυτή του 3D προβλήματος, με την διαφορά ότι τώρα έχουμε αξονοσυμμετρία ως συνοριακή συνθήκη. Τδιες παραμένουν οι υπόλοιπες συνοριακές συνθήκες καθώς και οι συνθήκες λειτουργίας. Πραγματοποιήθηκαν δύο σειρές υπολογισμών χρησιμοποιώντας τη μέθοδο arc-length/RPM. Η πρώτοι υπολογισμοί είναι στους 450K όπου το 3D πρόβλημα δεν

εμφανίζει εύρος της παραμέτρου στο οποίο δεν συγκλίνει το Fluent και οι δεύτεροι υπολογισμοί είναι στους 1000*K*, όπου το εύρος αυτό εμφανίζεται και είναι αρκετά μεγάλο. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν παρουσιάζονται στις Εικόνες 22-24.



Εικόνα 22: Χώρος λύσεων του 2D αντιδραστήρα XAA στους 450K



Εικόνα 23: Χώρος λύσεων του 2D αντιδραστήρα ΧΑΑ στους 1000Κ



Εικόνα 24: Μεγέθυνση του χώρου λύσεων του 2D αντιδραστήρα ΧΑΑ στους 1000Κ εκεί όπου εμφανίζονται τα σημεία στροφής

Από τα αποτελέσματα αυτά προκύπτει ότι ενώ στη θερμοκρασία των 450K δεν εμφανίζονται σημεία στροφής και κλάδος ασταθών λύσεων, όσο αυξάνεται η θερμοκρασία (1000K) ο χώρος λύσεων αλλάζει και εμφανίζεται πολλαπλότητα λύσεων σε συγκεκριμένο εύρος παραμέτρου. Στους 1000K, έχουμε δύο ευσταθείς κλάδους όπου στον πάνω (μπλε) κυριαρχεί η φυσική συναγωγή και στον κάτω (πράσινος) κυριαρχεί η εξαναγκασμένη συναγωγή. Επίσης εμφανίζονται δύο σημεία στροφής τα οποία δημιουργούν έναν ασταθή κλάδο στον οποίο αντιστοιχεί μία ενδιάμεση κατάσταση. Η κατανομή της θερμοκρασίας και οι ροϊκές γραμμές στους τρεις κλάδους στην τιμή παραμέτρου  $(u_{in} = 0.257\frac{m}{s})$  παρουσιάζονται στις Εικόνες 25-27.



Εικόνα 25: Πάνω ευσταθής κλάδος (φυσική συναγωγή)



Εικόνα 26: Κάτω ευσταθής κλάδος (εξαναγκασμένη συναγωγή)



Εικόνα 27: Ασταθής κλάδος

Τα αποτελέσματα που προέκυψαν είναι σημαντικά καθώς αποδείξαμε ότι η πολλαπλότητα λύσεων εμφανίζεται σε αντιδραστήρες ΧΑΑ ανεξάρτητα της γεωμετρίας τους και ο χώρος λύσεων δεν είναι σταθερός αλλά αλλάζει ανάλογα με τις λειτουργικές συνθήκες. Ωστόσο δε πετύχαμε τον αρχικό στόχο μας, ο οποίος ήταν να εξαχθούν συμπεράσματα για το 3D πρόβλημα βασιζόμενοι στα αποτελέσματα του 2D προβλήματος. Αυτό διότι το εύρος της παραμέτρου στο οποίο υπάρχει ο ασταθής κλάδος στο 2D  $(u_{in} \approx 0.24 - 0.27 \frac{m}{s})$  δεν αντιστοιχεί στο εύρος της παραμέτρου στο εύρος της παραμέτρου στο οποίο δεν συγκλίνει το 3D πρόβλημα  $(u_{in} \approx 0.21 - 0.23 \frac{m}{s})$ . Δεδομένης της διαφοράς αυτής δεν μπορεί να εξαχθεί κάποιο ασφαλές συμπέρασμα για το χώρο λύσεων του 3D προβλήματος και η διερεύνηση πρέπει να συνεχιστεί σε αυτό χρησιμοποιώντας τη μέθοδο arc-length/RPM.

## 5. Συμπεράσματα – Προοπτικές

Η ΧΑΑ είναι μία πολύ σημαντική διεργασία στη σύγχρονη βιομηχανία με πληθώρα εφαρμογών. Λόγω αυτού είναι πολύ σημαντικό να γίνεται διεξοδική μελέτη των αντιδραστήρων και των συνθηκών στις οποίες λειτουργούν, καθώς πρέπει να εξασφαλίζονται πάντοτε ομοιόμορφες, αξονοσυμμετρικές ροές ώστε να είναι και η απόθεση ομοιόμορφη, χωρίς κενά και ανωμαλίες της επιφάνειας.

Η μελέτη τέτοιων προβλημάτων συνήθως πραγματοποιείται με εμπορικά λογισμικά υπολογιστικών φαινομένων μεταφοράς, τα οποία παρά όλες τις δυνατότητές τους να λύνουν πολύπλοκα προβλήματα, αδυνατούν να εντοπίσουν όλο τον χώρο των λύσεων, χάνοντας έτσι πολύτιμες πληροφορίες όπως ασταθείς λύσεις και εύρη παραμέτρων στα οποία υπάρχει πολλαπλότητα λύσεων. Για να ξεπεραστεί αυτό το εμπόδιο χρησιμοποιούμε την μέθοδο αναδρομικής προβολής σε συνδυασμό με την μέθοδο παραμετρικού βηματισμού μήκους τόζου. Η μέθοδος αυτή είχε προταθεί ως μέθοδος σταθεροποίησης επαναληπτικών μεθόδων σταθερού σημείου και παρέχει την δυνατότητα να πετυχαίνουμε σύγκλιση σε ασταθείς λύσεις καθώς και να ξεπερνάμε σημεία στροφής σε τόξα λύσεων.

Συνδυάζοντας την arc-length/RPM με το Fluent σε 2D πρόβλημα καταφέραμε να «χαρτογραφήσουμε» ολόκληρο το πεδίο των λύσεων και να εντοπίσουμε ένα εύρος παραμέτρων στο οποίο πράγματι υπάρχουν πολλαπλές λύσεις.

Ένα 2D πρόβλημα ωστόσο είναι ένας μόνο υπόχωρος του συνολικού πραγματικού προβλήματος και αυτό καθιστά αναγκαίο να μελετηθεί ένας 3D αντιδραστήρας. Η διερεύνηση που έχει γίνει μέχρι στιγμής δεν έχει καταλήξει ακόμα σε οριστικό αποτέλεσμα για τον χώρο των λύσεων και πρέπει να συνεχιστεί.

66

Δυσχεραίνεται ωστόσο από το μέγεθος του προβλήματος, το οποίο έχει άμεση επίδραση στη ταχύτητα σύγκλισης και αυτό προκαλεί σημαντικές καθυστερήσεις στην εκτέλεση των υπολογισμών.

# 6. Βιβλιογραφία

Ansys/Fluent Documentation v13.0. (2011). ANSYS Inc.

- Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (2002). *Transport Phenomena* (2nd ed.). New York: John Wiley and Sons.
- Cheimarios, N., Kokkoris, G., & Boudouvis, A. G. (2010). Multiscale modeling in chemical vapordeposition processes: Coupling reactor scale with feature scale computations. *Chemical Engineering Science* 65, 5018.
- Cheimarios, N., Koronaki, E. D., & Boudouvis, A. G. (2011). Enabling a commercial computational fluid dynamics code to perform certain nonlinear analysis tasks. *Computers and Chemical Engineering 35*, 2632-2645.
- Choy, K. L. (2003). Chemical vapour deposition of coatings. *Progress in Materials Science 48*, 57.
- Deen, W. M. (1998). Analysis of transport phenomena: Oxford University Press.
- Fotiadis, D. I. (1990). Two- and three- dimensional finite elements simulation of reacting flows in chemical vapor deposition of compound semiconductors. University of Minnesota.

Fotiadis, D. I., Kieda, S., & Jensen, K. F. (1990). J. Crystal Growth 102, 441.

- Graves-Morris, P. R. (2007). BiCGStab, VPAStab and an adaptation to mildly nonlinear systems. *Journal of Computational and Applied Mathematics 201*, 284 – 299.
- Keijser, M. D., Opdorp, C., & Weber, C. (1988). J. Crystal Growth 92, 33.
- Keller, H. B. (1977). Numerical solution of bifurcation and nonlinear eigenvalue problems. in: P.H. Rabinowitz (Ed.), Applications of Bifurcation Theory, Academic Press, New York, 359-384.
- Ohring, M. (2002). Material Science of Thin Films Deposition & Structure: Academic Press.
- Pashos, G., Koronaki, E. D., Spyropoulos, A. N., & Boudouvis, A. G. (2010). Accelerating an inexact Newton/GMRES scheme by subspace decomposition. *Applied Numerical Mathematics*, 60, 397-410.
- Pierson, H. O. (1999). Handbook of Chemical Vapor Deposition: Principles, Technology and Applications: Noyes Publications.

- Saad, Y., & Schultz, M. (1986). GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 7(3), 856–869.
- Santen, H. V., Kleijn, C. R., & Akker, H. V. D. (2000). Symmetry breaking in a stagnation-flow CVD reactor. *J. Crystal Growth 212*, 311-323.
- Shroff, G. M., & Keller, H. B. (1993). Stabilization of unstable procedures: The recursive projection method. SIAM Journal on Numerical Analysis, 30, 1099-1120.
- Versteeg, H. K., & Malalasekera, W. (2007). An introduction to computational fluid dynamics. The finite volume method (2nd ed.). New York: Pearson Education Limited.
- Yan, X. T., & Xu, Y. (2010). Chemical Vapour Deposition: An Integrated Engineering Design for Advanced Materials: Springer Publications.
- Κορωνάκη, Ε. Δ. (2004). Ανάπτυζη αποδοτικών μεθόδων παραμετρικού βηματισμού και ευστάθειας σε υπολογισμούς μεγάλης κλίμακας. Αθήνα, ΕΜΠ.
- Χειμαριός, Ν. (2012). Προσομοίωση πολλαπλών χωρικών κλιμάκων και συστημική ανάλυση διεργασιών χημικής απόθεσης από ατμό. Αθήνα, ΕΜΠ.