POGLAVLJE 4.

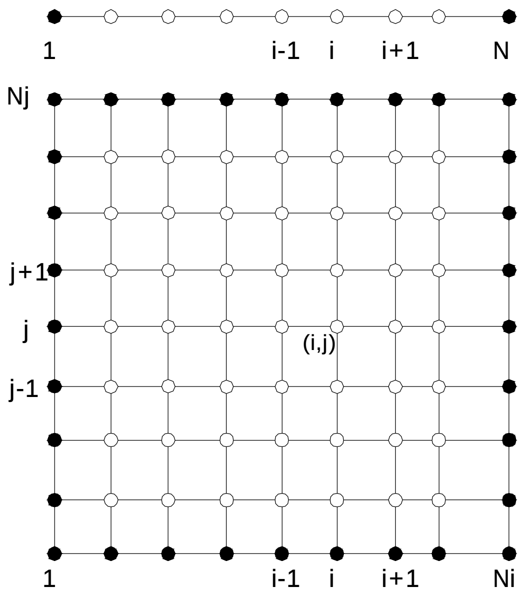
4.1 Metode diskretizacije osnovnih jednačina

Numeričke metode kod kojih se nepoznata funkcija Φ izračunava u čvorovima mreže zovu se obično čvorno bazirane, dok se metode kod kojih je nepoznata funkcija Φ vezana za ćeliju tj. zapreminu zovu zapreminski ili elementno bazirane metode. Tipični primjer čvorno bazirane metode je metoda konačnih razlika (FDM), dok su metode kontrolisane zapremine (CVM) konačnih elemenata (FEM) klasični primjeri zapreminski bazirane metode. Generalno posmatrano svake od ovih metoda imaju svoj prednosti i mane, a odabir neke od njih zavisi od tipa problema koji se rješava.

4.2 Metoda konačnih razlika (FDM)

Metoda konačnih razlika bazirana je na aproksimaciji funkcije Tajlorovim redom, i zanemarivanjem članova višeg reda koji se tretiraju kao ostatak. Numerička mreža koja predstavlja osnovu za diskretizaciju polane jednačine je obično strukturisana, tako da se pozicija svakog čvora može lako definisati koristeći klasični pristup koji je osnova Dekartovog koordinatnog sistema. Na slici 2.5 prikazane su klasične mreže za 1-D i 2-D problem. Svaki od čvorova je odredjen sa uredjenim parom (i,j) u 2-D geometriji npr. Susjedni čvorovi su lako odredivi mijenjanjem indeksa i ili j za po 1 unaprijed ili unazad. Granični čvorovi u kojima je definisana vrijednost funkcije graničnim uslovom (Dirichlet-ov uslov) ne zahtijevaju pisanje jednačine. Za razliku od ovog tipa graničnog uslova, kao granični uslov može biti zadan i gradijent funkcije

(Neumann-ov uslov) pa je tada potrebno diskretizovati i granični uslov na odredjeni način.

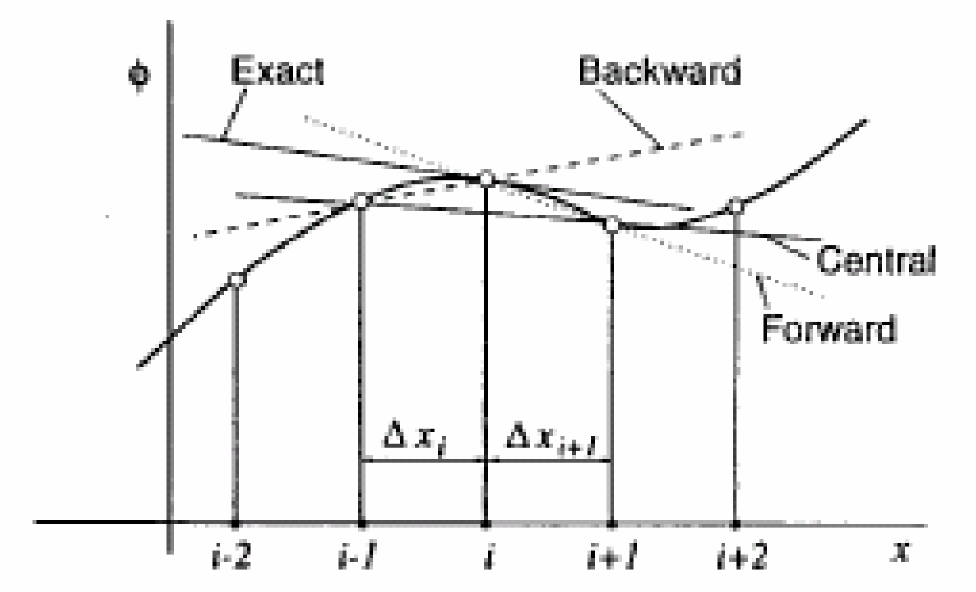


Slika 4.1. Primjer 1-D i 2-D numeričke mreže za metodu konačnih razlika

Osnovna ideja za metodu konačnih razlika leži u definiciji prvog izvoda funkcije u tački x_i koji se može definisati kao:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{x_i} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\phi(x_i + \Delta x) - \phi(x_i)}{\Delta x} \qquad (4.1)$$

Geometrijska interpretacija prvog izvoda prikazana je na slici 4.1. Kao što se vidi sa slike prvi izvod u tački x_i predstavlja nagib tangente u tački sa apscisom x_i. Prvi izvod funkcije može se u odnosu na potojeću tačku na tri različita načina: “unaprijed”, “unazad” i preko “centralne” sheme kao što je prikazano na slici. Sa slike je vidljivo da su neke sheme bolje reprezentuju prvi izvod od drugih. Konkretno, “centralna” shema daje najpribližniju vrijednost prvom izvodu u tački x_i, do je shema “unazad” najdalja od tačnog rješenja. Sa slike 4.1. je takodje vidljivo da je kvalitet aproksimacije funkcije bolji ako je mreža sitnija i ako je pored tačaka i, i-1 i i+1 uključeno još tačaka.



Slika 4.2 Aproksimacije prvog izvoda na tri različita načina

U nastavku će biti prikazan postupak tretiranja prvog i drugog izvoda koristeći zanemarivanje članova višeg reda u Tajlorovom redu kojim je moguće opisati funkciju Φ. Takodje biće razmatrani samo 1-D slučajevi, dok koordinatni sistem može biti Dekartov ili pak krivolinijski, jer rastojanje ne igra bitnu ulogu u definiciji problema.

4.2.1 Aproksimacija prvog izvoda

Svaka kontinualna funkcija $\Phi(x)$ može biti razvijena u red u okolini tačke x_i kao:

$$\phi(x) = \phi(x_i) + (x - x_i)\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_i + \frac{(x-x_i)^2}{2!}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i + \frac{(x-x_i)^3}{3!}\left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_i + \ldots\ldots + \frac{(x-x_i)^n}{n!}\left(\frac{\partial^n\phi}{\partial x^n}\right)_i + H, \qquad (4.2)$$

gdje H predstavlja više redove koji mogu biti manje ili više značajni. Zamjenom x sa x_{i+1} ili sa x_{i-1} dobija se vrijednost funkcije u susjednim čvorovima na osnovu izvoda u tački x_i. Takođe pravilo može biti prošireno i na susjedne tačke x_{i+2} i x_{i-2}. Zamjenom x sa x_{i+1} u jednačini (4.2) dobija se sledeći izraz za prvi izvod u tački “i”:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_i = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{x_{i+1} - x_i} - \frac{x_{i+1} - x_i}{2}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i - \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{6}\left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_i + H, \qquad (4.3)$$

dok se nešto drugačija jednačina dobija kada se u jednačinu (4.2) umjesto x zamijeni x_{i-1}:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_i = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} + \frac{x_i - x_{i-1}}{2}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i - \frac{(x_i - x_{i-1})^2}{6}\left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_i + H \,. \qquad (4.4)$$

Ako se želi dobiti aproksimacija “centralne” sheme zamjenom u jednačinu (4.2) umjesto Φ sa Φ_{i+1} i Φ_{i-1} i njihovim oduzimanjem dobija se:

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_i &= \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} - \frac{(x_{i+1} - x_i)^2 - (x_i - x_{i-1})^2}{2(x_{i+1} - x_{i-1})}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i \\ &\quad - \frac{(x_{i+1} - x_i)^3 + (x_i - x_{i-1})^3}{6(x_{i+1} - x_{i-1})}\left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_i + H \,.\end{aligned} \qquad (4.5)$$

Sva tri poslednja izraza predstaljaju tačne izraze za prvi izvod u tački x_i jer su na desnim stranama jednačina zadržani svi članovi zajedno sa članovima višeg reda H. Za dovoljno usitnjenu mrežu rastojanje izmedju čvorova je prilično malo, pa će i članovi višeg reda biti znatno manji u odnosu na prve članove na desnim stranama zadnje tri jednačine. Ako se zanemare članovi reda većeg od 1 tada se dolazi do sledećih aproksimativnih izraza za prvi izvod funkcije u tački x_i koristeći sheme “unaprijed”, “unazad” i “centralnu” respektivno:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_i \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{x_{i+1} - x_i} \,, \qquad (4.6)$$

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_i \approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \,, \qquad (4.7)$$

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_i \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \,. \qquad (4.8)$$

Članovi koji su zanemareni na desnim stranama jednačina (4.3)-(4.5) predstavljaju grešku višeg reda (tzv. ˝*truncation error*˝) u odnosu na tačno rješenje a koja se pravi svjesno u cilju pojednostavljivanja problema. Greška višeg reda predstavlja sumu članova koje kao zajednički imenitelj imaju rastojanje izmedju susjednih čvorova Δx:

$$\varepsilon = (\Delta x)^m \alpha_{m+1} + (\Delta x)^{m+1} \alpha_{m+2} + \ldots\ldots + (\Delta x)^n \alpha_{n+1} \,. \qquad (4.9)$$

Smanjivanjem rastojanja Δx između čvorova mreže greška teži nuli, tj. aproksimativna rješenja za prve izvode teže tačnim rješenjima. Kod određenih aproksimacija glavni član greške je jednak nuli kada je numerička mreža uniformna, tj. kada je rastojanje izmedju čvorova jednako (x_{i+1}-x_i=x_i-x_{i-1}=Δx). To je slučaj kod "centralne" sheme koja je opisana jednačinom (4.5). Greška višeg reda (*truncation error*) može se pisati kao ako se uzme da je Δx_{i+1}=x_{i+1}-x_i i Δx_i=x_i-x_{i-1}:

$$\varepsilon = -\frac{(\Delta x_{i+1})^2-(\Delta x_i)^2}{2(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i-1})}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i - \frac{(\Delta x_{i+1})^3+(\Delta x_i)^3}{6(\Delta x_{i+1}+\Delta x_{i-1})}\left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_i + H. \qquad (4.10)$$

Iz poslednje jednačine se vidi da je prvi član koji je vezan za drugi izvod jednak nuli kada je mreža uniformna tj. Δx_{i+1}=Δx_i. Osnovni cilj korišćenja ne-uniformne mreže jeste da se na mjestima gdje postoje značajni gradijenti i promjene funkcije Φ koristi što finija mreža, dok se na drugim mjestima gdje su promjene manje može koristiti krupnija mreža.

Pretpostavimo da se mreža skuplja ili širi u odnosu na prethodnu vrijednost sa konstantnim faktorom r_e prema izrazu:

$$\Delta x_{i+1} = r_e \Delta x_i\,, \qquad (4.11)$$

pa tada jednačina (4.10) koja predstavlja grešku za tzv. centralnu shemu uz zanemarivanje članova višeg reda dobija sledeći jednostavan oblik:

$$\varepsilon \approx \frac{(1-r_e)\Delta x_i}{2}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i. \qquad (4.12)$$

Analogan izraz za sheme "unaprijed" i "unazad" imaju isti oblik:

$$\varepsilon \approx \frac{\Delta x_i}{2}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i. \qquad (4.13)$$

Iz poslednja dva izraza se vidi da kada mreža teži uniformnoj raspodjeli (kada r_e teži jedinici) centralna shema ima najmanju grešku, dok se greška za ostale dvije sheme smanjuje samo usitnjavanjem mreže.

4.2.2 Aproksimacija drugog izvoda

Drugi izvod se javlja u difuzionom članu na desnoj strani svake transportne jednačine i reprezentuje molekularni transport funkcije Φ. Za aproksimaciju drugog izvoda koji reprezentuje konkavnost odnosno konvektnost funkcije može poslužiti isti prilaz kao i za prvi izvod:

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i \approx \frac{\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{i+1} - \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_i}{x_{i+1} - x_i}, \tag{4.14}$$

gdje se u jednačini (4.14) podrazumijeva shema "unaprijed". Ako se za prve izvode u tačkama i i i+1, uzmu definicije prvog izvoda prema shemi "unazad" (jednačina 4.7) dobija se sledeći izraz za drugi izvod funkcije u tački i:

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i \approx \frac{\phi_{i+1}(x_i - x_{i-1}) + \phi_{i-1}(x_{i+1} - x_i) - \phi_i(x_{i+1} - x_{i-1})}{(x_{i+1} - x_i)^2(x_i - x_{i-1})}. \tag{4.15}$$

Ista jednačina dobija se i kada se za spoljašnji izvod (drugi) usvoji shema "unazad" a za prve izvode shema "unazad". Za razliku od shema "unaprijed" i "unazad" "central-na" shema podrazumijeva određivanje prvog izvoda funkcije korišćenjem centralne sheme na osnovu polu-rastojanja između čvorova i i i+1, kao i između čvorova i i i-1 kao:

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2}} \approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{x_{i+1} - x_i}, \tag{4.16}$$

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{i-\frac{1}{2}} \approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}. \tag{4.17}$$

Korišćenjem tzv. "centralne" sheme izraz za drugi izvod funkcije:

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i \approx \frac{\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{i-\frac{1}{2}}}{\frac{1}{2}(x_{i+1} - x_{i-1})}, \tag{4.18}$$

i zamjenom jednačina (4.16) i (4.17) u poslednju jednačinu dobija se izraz za drugi izvod prema "centralnoj" shemi:

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i \approx \frac{\phi_{i+1}(x_i - x_{i-1}) + \phi_{i-1}(x_{i+1} - x_i) - \phi_i(x_{i+1} - x_{i-1})}{\frac{1}{2}(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)(x_i - x_{i-1})}. \tag{4.19}$$

Ako se podrazumijeva jednako rastojanje izmedju čvorova dobija se uprošćeni izraz za drugi izvod:

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i \approx \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{(\Delta x)^2}. \tag{4.20}$$

Korišćenjem Tajlor-ovog reda za razvijanje funkcije može se na drugi način dobiti približni izraz za drugi izvod funkcije. Koristeći centralnu shemu kao osnovu i diferenciranjem jednačine (4.19) dobija se izraz za drugi izvod sa greškom:

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_i \approx \frac{\phi_{i+1}(x_i - x_{i-1}) + \phi_{i-1}(x_{i+1} - x_i) - \phi_i(x_{i+1} - x_{i-1})}{0.5(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)(x_i - x_{i-1})} - \frac{(x_{i+1} - x_i) - (x_i - x_{i-1})}{3}\left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_i + H \quad . \tag{4.21}$$

Glavni član u grešci je jednak nuli kada je mreža uniformna, što na ovaj način čini aproksimaciju drugog izvoda veoma preciznom. Međutim, i sa ne-uniformnom mrežom usitnjavanjem mreže greška se može svesti na podnošljiv nivo.

4.2.3 Primjer diskretizacije drugog izvoda metodom konačnih razlika

Kao što je već naprijed rečeno drugi izvod funkcije u generalnoj transportnoj jednačini (1.47) javlja se u difuzionom članu na desnoj strani. Najčešće korišćena shema za diskretizaciju drugog izvoda je tzv. "centralna" shema kada se prvi izvod funkcije sračunava na polu-rastojanju između čvorova (i) i (i+1) odnosno (i-1) i (i). Ako se radi jednostavnosti zanemare konvektivni i nestacionarni član jednačine (1.47) i ako se problem posmatra kao jednodimenzioni jednačina (1.47) dobija oblik:

$$\frac{d}{dx}\left(\Gamma\frac{d\phi}{dx}\right) + S = 0 \, . \tag{4.22}$$

Prvi član poslednje jednačine koji predstavlja drugi izvod funkcije ϕ u tački (i) može se diskretizovati koristeći centralnu shemu:

$$\left[\frac{d}{dx}\left(\Gamma\frac{d\phi}{dx}\right)\right]_i \approx \frac{\left(\Gamma\frac{d\phi}{dx}\right)_{i+\frac{1}{2}} - \left(\Gamma\frac{d\phi}{dx}\right)_{i-\frac{1}{2}}}{\frac{1}{2}(x_{i+1} - x_{i-1})} \approx \frac{\Gamma_{i+\frac{1}{2}}\frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{x_{i+1} - x_i} - \Gamma_{i-\frac{1}{2}}\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}}{\frac{1}{2}(x_{i+1} - x_{i-1})} \, , \tag{4.23}$$

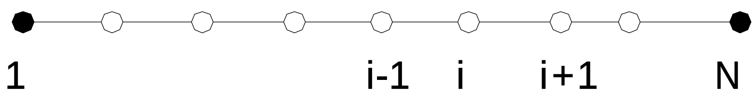
a ako se uzme da je koeficijent difuzije Γ konstantan i da je mreža uniformna dobija se pojednostavljeni izraz za drugi izvod funkcije u tački (i):

$$\left[\frac{d}{dx}\left(\Gamma\frac{d\phi}{dx}\right)\right]_i \approx \Gamma\frac{\phi_{i-1} + \phi_{i+1} - 2\phi_i}{(\Delta x)^2} \quad , \tag{4.24}$$

pa jednačina (4.22) dobija sledeći diskretizovani oblik u tački (i):

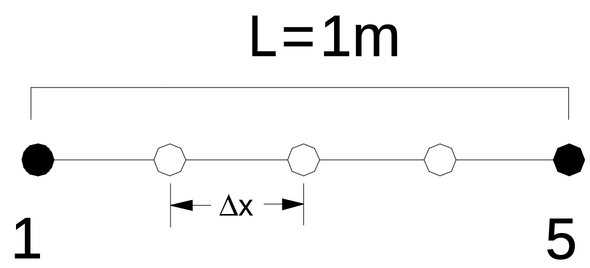
$$\frac{2\Gamma}{(\Delta x)^2}\phi_i = \frac{\Gamma}{(\Delta x)^2}\phi_{i-1} + \frac{\Gamma}{(\Delta x)^2}\phi_{i+1} + S_i\,. \tag{4.25}$$

Iz poslednje jednačine se vidi da vrijednost funkcije u tački (i) zavisi od vrijednosti funkcija u susjednim tačkama (i-1) i (i+1), kao i od vrijednosti izvornog člana S u tački (i). Kada izvorni član ne bi postojao vrijednost funkcije u tački (i) bila bi aritmetička sredina između dvije susjedne vrijednosti, što je prouzrokovano uniformnom numeričkom mrežom i uniformnošću koeficijenta Γ u domenu. U drugim slučajevima na vrijednost funkcije u tački (i) susjedni koeficijenti imaju kvantitativno različit uticaj. Mreža za diskretizovanu jednačinu (4.25) prikazana je na slici 4.3.



Slika 4.3. Prosta 1-D mreža za diskretizaciju jednačine (4.22)

Kao demonstraciju postavimo sistem jednačina kojima se rješava jednačina 2.22. Neka je dužina domena L=1, neka je koeficijent difuzije Γ=1 i neka je izvorni član konstantan i neka je S=2. Radi jednostavnosti domen integracije podijelimo na 4 jednaka dijela tako da je Δx=0.25. Neka su poznate granične vrijednosti funkcije u čvorovima 1 i 5 i neka je $\Phi_1=0$, $\Phi_5=100$. Slika numeričke sheme data je na slici 4.4.



Slika 4.4. Numerička mreža za rješavanje jednačine 2.22

Primjenom jednačine 4.25 na čvorove 2,3,4 dobija se sistem jednačina od 3 nepoznate koje imaju oblik:

$$\begin{aligned}
&\text{čvor } 2: \ \phi_1 + \phi_3 - 2\phi_2 + 0.0625 \cdot S_2 = 0 \\
&\text{čvor } 3: \ \phi_2 + \phi_4 - 2\phi_3 + 0.0625 \cdot S_3 = 0 \, . \\
&\text{čvor } 4: \ \phi_3 + \phi_5 - 2\phi_4 + 0.0625 \cdot S_4 = 0
\end{aligned} \tag{4.26}$$

U sistemu jednačina (4.26) vidi se da su uključeni i granični uslovi preko vrijednosti funkcija Φ_1 i Φ_5. Uzimajući da je $S_2=S_3=S_4=2$ i sredjivanjem sistema (4.26) dobija se sistem jednačina napisan u matričnom obliku:

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \\ 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.125 \\ -0.125 \\ -100.125 \end{bmatrix} . \tag{4.27}$$

Rješavanjem sistema jednačina (4.27) dobijaju se vrijednosti u tabeli T 4.1. Treba reći da jednačina 4.22 koja se razmatra metodom kontrolisane zapremine ima i analitičko rješenje koje za naprijed navedene uslove ima rješenje:

$$\Phi = -x^2 + 101 \cdot x \, . \tag{4.28}$$

Rezultati analitičkog rješenja takodje su dati u tabeli 4.1.

Tabela 4.1

X(m)	FDM	Tačno rješenje	Greška (%)
0	0	0	0
0.25	22.305	25.187	11.4
0.5	44.485	50.25	11.47
0.75	66.54	75.1875	11.5
1	100	100	0

4.3 Metoda konačnih elemenata (FEM)

Razmotrimo kao i u prethodnom slučaju jednačinu (4.22). Postoje razne vrste konačnih elemenata kojima se može diskretizovati pomenuta jednačina. Zadržimo se na popularnoj Galerkinovoj metodi za konačne elemente. Neka je $\bar{\phi}$ aproksimacija funkcije ϕ koja je nepoznata. S obzirom da je to samo aproksimacija jednačina (4.22) neće biti zadovoljena već će se na desnoj strani jednačine pojaviti ostatak:

$$\frac{d}{dx}\left(\Gamma \frac{d\bar{\phi}}{dx}\right) + S = R \, . \tag{4.26}$$

Aproksimacija $\bar{\phi}$ treba da je takva da se integracijom po definisanom domenu dobije da je:

$$\int_{domen} WR dx = 0 , \qquad (4.27)$$

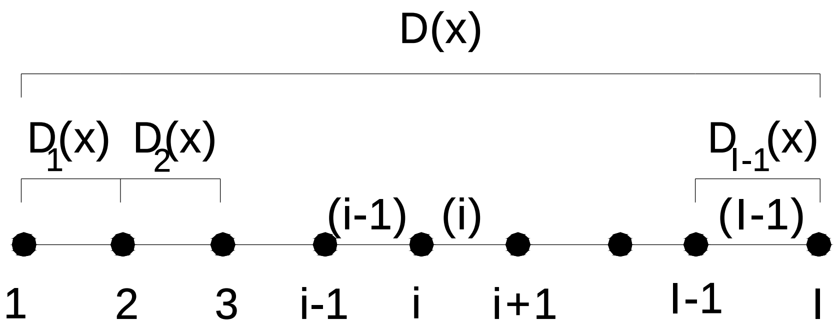
gdje je W težinska funkcija, a iz poslednje jednačine se vidi da ostatak R treba da bude jednak nuli u težinskom smislu u cijelom domenu. U cilju dobijanja konačnog broja algebarskih lineranih jednačina, čiji broj odgovara broju diskretnih elemenata u kojima se odredjuje vrijednost funkcije ϕ, umjesto težinske funkcije W uvodi se familija težinskih funkcija W_i (i=1,2..N) gdje je N broj elemenata. Tada se umjesto uslova datog jednačinom (4.27) dobija set uslova:

$$\int_{domen} W_i R dx = 0 \quad i = 1,2..N , \qquad (4.28)$$

gdje su težinske funkcije W_i tipično lokalne i imaju ne-nulte vrijednosti u čvorovima, dok su van čvorova jednake nuli. Dalje, potrebno je da se usvoje i funkcije oblika za aproksimaciju $\bar{\phi}$, tj. kakva je promjena funkcije između čvorova. Uobičajeno se uzima i da je ova promjena lokalna. Na primjer najprostija aproksimacija je da je promjena funkcije između čvorova linearna. Galerkinova metoda zahtijeva da težinske funkcije i aproksimativne funkcije između čvorova budu iste. S obzirom da Galerkinova metoda konačnih elemenata zahtijeva samo da ostatak bude nula u težinskom smislu, ona ne tretira posebno zakone o održanju i ne vodi računa da bilansi budu zadovoljeni.

4.3.1 Primjer diskretizacije jednačine metodom konačnih elemenata (FEM)

Posmatrajmo jednačinu (4.26) kao i u prethodnom primjeru sa metodom konačnih razlika. Neka je $\bar{\phi}$ približno rješenje koje zadovoljava jednačinu (2.26). Kao što je naprijed već navedeno koncept konačnih elemenata podrazumijeva integraljenje reziduala pomnoženog sa težinskim funkcijama i njegovo izjednačavanje sa nulom, što je prikazano jednačinom (4.27). Podijelimo domen integracije (a,b) na tako da je broj čvorova I, a broj elemenata I-1 kao na slici 2.8. Dakle svaki element (i) sadrži dva čvora (i) i (i+1). Takodje, kompletan domen integracije je podijeljen na I-1 domena, pa će se za svaki element sračunavati integral definisan jednačinom (4.28).



Slika 4.5. Diskretizaciona shema za metodu konačnih elemenata

Poslije diskretizacije domena integracije drugi korak je formiranje aproksimativne funkcije $\bar{\phi}$ za svaki element tj $\phi^{(i)}(x)$ za svaki od čvorova elemenata. Najčešće se kao funkcija na elementu (i) uzima kombinacija funkcija, odabranih tako da u čvorovima vrijednosti funkcije budu ϕ_i. Na primjer vrijednost funkcije na elementu (i) može se pisati kao:

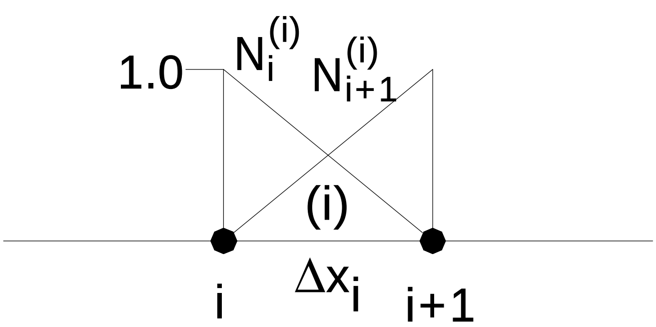
$$\phi^{(i)}(x) = \phi_i N_i^{(i)}(x) + \phi_{i+1} N_{i+1}^{(i)}(x)\,, \tag{4.29}$$

gdje su $N_i^{(i)}(x)$ i $N_{i+1}^{(i)}(x)$ funkcije oblika ili tzv. interpolacione funkcije. U najprostijem slučaju može se kao funkcija oblika uzeti linearna funkcija:

$$N_i^{(i)}(x) = -\frac{x - x_{i+1}}{\Delta x_i}\,, \tag{4.30a}$$

$$N_{i+1}^{(i)}(x) = \frac{x - x_i}{\Delta x_i}\,, \tag{4.30b}$$

Geometrijski posmatrano, na svakom elementu definisane su po dvije linearne funkcije, jedna sa negativnim a jedna sa pozitivnim gradijentom posmatrano s lijeva na desno. Linearne funkcije oblika za proizvoljni element (i) prikazane su na slici 4.6.



Slika 4.6. Linearne funkcije oblika za proizvoljni element (i)

Sada kada su definisane funkcije oblika moguće je napisati izraz za inegral koji je definisan jednačinom (4.28) kao:

$$I(\bar{\phi}(x)) = \int_a^b W_j \left(\frac{d}{dx}\left(\Gamma \frac{d\bar{\phi}}{dx} \right) + S \right) dx = 0 \,, \tag{4.31}$$

Prvi dio izvoda koji sadrži integraljenje drugog izvoda funkcije može se transformisati u pogodan oblik da se izbjegne drugi izvod funkcije koji bi bio jednak nuli s obzirom na linearne funkcije oblika:

$$\int_a^b W_j \Gamma \frac{d^2\bar{\phi}}{dx^2} dx = -\int_a^b \frac{dW_j}{dx} \Gamma \frac{d\bar{\phi}}{dx} dx + \Gamma \frac{d\bar{\phi}}{dx} W_j \Big|_a^b \,, \tag{4.32}$$

pa se jednačina (4.31) može pisati u obliku:

$$\int_a^b W_j \left[\Gamma \frac{d^2\bar{\phi}}{dx^2} + S \right] dx = \Gamma \frac{d\bar{\phi}}{dx} W_j \Big|_a^b - \Gamma \int_a^b \frac{dW_j}{dx} \frac{d\bar{\phi}}{dx} dx + \int_a^b W_j S dx \,. \tag{4.33}$$

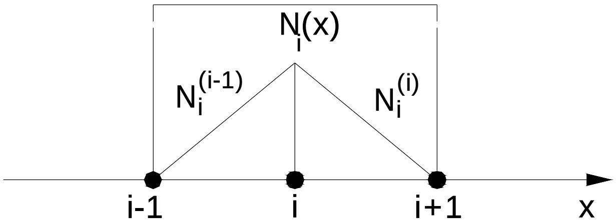
Poslednja jednačina napisana je za kompletan domen integracije. Međutim mnogo je pogodnije napisati integralne jednačine za svaki od elemenata, s čime se dobija sistema algebarskih jednačina, čijim se rješavanjem dobijaju vrijednosti funkcija u čvorovima. Kao što je naprijed već rečeno Galerkinov metod je karakterističan po tome što se za težinske funkcije uzimaju iste funkcije kao i funkcije oblika ($W_j = N_i$). U tom slučaju kada se umjesto težinske funkcije W_j uzme funkcija oblika $N_i^{(i)}(x)$ integral napisan za konkretan konačni element (i) ima oblik:

$$I_i^{(i)} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left[-\Gamma \frac{d\bar{\phi}}{dx} \frac{dN_i^{(i)}(x)}{dx} + N_i^{(i)}(x) S \right] dx = 0 \,, \tag{4.34}$$

a ako je umjesto W_j uzme drugi dio funkcije oblika na elementu (i) $N^{(i)}_{i+1}(x)$ jednačina (2.34) dobija oblik:

$$I_{i+1}^{(i)} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left[-\Gamma \frac{d\bar{\phi}}{dx} \frac{dN_{i+1}^{(i)}(x)}{dx} + N_{i+1}^{(i)}(x) S \right] dx = 0 \,. \tag{4.35}$$

Poslednje dvije jednačine predstavljaju jednačine za element (i). Alternativno, može se napisati i jedna jednačina ali sada za čvor i, koja je bazirana na dvije susjedne funkcije oblika na dva susjedna elementa kao na slici 4.7.



Slika 4.7. Funkcije oblika za čvor i

U tom slučaju koristi se desna funkcija od elementa (i-1) i lijeva funkcija od elementa (i) pa integral napisan za čvor i ima oblik:

$$
\begin{aligned}
I(\bar{\phi}(x)) = &\int_{x_{i-1}}^{x_i} \left[-\Gamma \frac{d\bar{\phi}}{dx} \frac{dN_i^{(i-1)}(x)}{dx} + N_i^{(i-1)}(x) S \right] dx \\
&+ \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left[-\Gamma \frac{d\bar{\phi}}{dx} \frac{dN_i^{(i)}(x)}{dx} + N_i^{(i)}(x) S \right] dx = 0
\end{aligned} \quad . \qquad (4.36)
$$

Poslednja jednačina predstavlja čvornu jednačinu za čvor i, a kasnije ćemo vidjeti da se ona može dobiti sabiranjem odgovarajućih jednačina napisanih za dva susjedna elementa.

Pređimo sada na integraciju jednačina (4.34) i (4.35) koje predstavljaju jednačine za element (i). Iz jednačina (4.30) lako se dobijaju vrijednosti izvoda koji figurišu u jednačinama (4.34) i (4.35):

$$\frac{dN_i^{(i)}(x)}{dx} = -\frac{1}{\Delta x_i}\,, \qquad (4.37a)$$

$$\frac{dN_{i+1}^{(i)}(x)}{dx} = \frac{1}{\Delta x_i}\,, \qquad (4.37b)$$

dok se izvod aproksimativne funkcije $\bar{\phi}$ dobija iz jednačine (4.29):

$$\frac{d\bar{\phi}}{dx} = \frac{\bar{\phi}_{i+1} - \bar{\phi}_i}{\Delta x_i}\,, \qquad (4.38)$$

pa se smjenom jednačina (4.37) i (4.38) u jednačine (4.34) i (4.35) dobijaju dvije algebarske jednačine za element (i):

$$I_i^{(i)} = \Gamma \frac{1}{\Delta x_i} \frac{\bar{\phi}_{i+1} - \bar{\phi}_i}{\Delta x_i} \Delta x_i + \frac{1}{2} S^{(i)} \Delta x_i = 0\,, \qquad (4.39a)$$

$$I_{i+1}^{(i)} = -\Gamma \frac{1}{\Delta x_i} \frac{\bar{\phi}_{i+1} - \bar{\phi}_i}{\Delta x_i} \Delta x_i + \frac{1}{2} S^{(i)} \Delta x_i = 0 \,. \tag{4.39b}$$

Napišimo sada analogno jednačinama (4.39) jednačine za element (i-1):

$$I_{i-1}^{(i-1)} = \Gamma \frac{1}{\Delta x_{i-1}} \frac{\bar{\phi}_i - \bar{\phi}_{i-1}}{\Delta x_{i-1}} \Delta x_{i-1} + \frac{1}{2} S^{(i-1)} \Delta x_{i-1} = 0 \,, \tag{4.40a}$$

$$I_i^{(i-1)} = -\Gamma \frac{1}{\Delta x_{i-1}} \frac{\bar{\phi}_i - \bar{\phi}_{i-1}}{\Delta x_{i-1}} \Delta x_{i-1} + \frac{1}{2} S^{(i-1)} \Delta x_{i-1} = 0 \,. \tag{4.40b}$$

Radi jednostavnosti posmatrajmo uniformnu mrežu tj. $\Delta x_i = \Delta x_{i-1} = \Delta x$ i saberimo jednačine (4.40b) i (4.39a) da se dobije čvorna jednačina za čvor i:

$$2\Gamma\bar{\phi}_i = \Gamma\bar{\phi}_{i-1} + \Gamma\bar{\phi}_{i+1} + \frac{1}{2}(S^{(i-1)} + S^{(i)})\Delta x^2 \,. \tag{4.41}$$

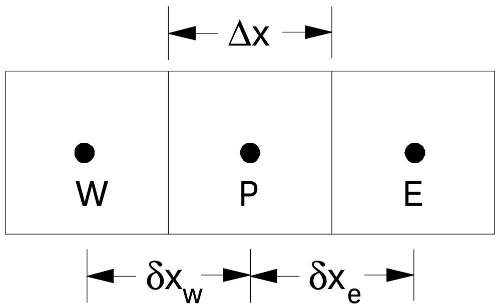
Poslednja jednačina se može razviti za sve čvorne tačke diskretizovanog domena čime se dobija sistem linearnih algebarskih jednačina koje se mogu riješiti pogodnom metodom u cilju određivanja vrijednosti funkcije $\bar{\phi}_i$ (i=1,I). Izvorni član na desnoj strani jednačine (4.41) predstavlja osrednjenu vrijednost između dva susjedna elementa. Takodje, može se primijetiti da diskretizovana jednačina dobijena primjenom metode konačnih elemenata ima isti oblik kao jednačina dobijena metodom konačnih razlika (4.25), zbog uprošćene linearne funkcije koja je uzeta kao funkcija oblika i kao težinska funkcija. Za neki drugi oblik funkcije oblika diskretizovana jednačina ima drugi oblik. Odabiranje funkcije oblika zavisi od prethodno pretpostavljene prirode promjene tražene funkcije u domenu koji se razmatra.

4.4 Metoda kontrolisane zapremine (CVM)

Metoda kontrolisane zapremine (nekada se zove i metoda konačne zapremine) pretpostavlja dijeljenje domena integracije na konačan broj kontrolisanih zapremina koje se međusobno ne preklapaju. Za svaku od kontrolisanih zapremina vrši se integracija transportne jednačine koja se rješava na način da je zadovoljena jednačina o održanju transportovane funkcije. Za početak posmatrajmo jednačinu kojom se opisuje stacionarna difuzija kao 2-D problem sa izvorom:

$$\frac{d}{dx}\left(\Gamma\frac{d\phi}{dx}\right)+S=0\,. \tag{4.42}$$

Razmotrimo za početak jednodimenzionu mreža koja je prikazana na slici 4.8. Vrijednosti funkcije ϕ sračunavaju se u centrima kontrolisanih zapremina koje su označene slovima P, E i W. Obično se za oznake koriste notacije za strane svijeta (E east, W west) u odnosu na posmatranu zapreminu P.



Slika 4.8. Kontrolisane zapremine za diskretizaciju jednačine (2.26)

Posmatrajmo sada kontrolisanu zapreminu koja je označena sa P, i izvršimo integraciju jednačine (2.42) po zapremini P. Dobija se:

$$\int_w^e \frac{d}{dx}\left(\Gamma\frac{d\phi}{dx}\right)dx+\int_w^e S dx=0\,, \tag{4.43}$$

ili ako se uzmu u obzir granice kontrolisane zapremine prethodna jednačina prelazi u sledeći oblik:

$$\left(\Gamma\frac{d\phi}{dx}\right)_e-\left(\Gamma\frac{d\phi}{dx}\right)_w+\int_w^e S dx=0\,. \tag{4.44}$$

gdje su oznake (e,w) predstavljaju vrijednosti na granicama kontrolisane zapremine P prema susjednim E i W redom. Sledeći korak je pravljenje aproksimacije o izvodima, tj. o gradijentima na granicama kontrolisane zapremine. Ako pretpostavimo da je promjena transportovane funkcije ϕ linearna između centara kontrolisanih zapremina može se pisati:

$$\Gamma_e\frac{\phi_E-\phi_P}{(\delta x_e)}-\Gamma_e\frac{\phi_P-\phi_W}{(\delta x_w)}+\bar{S}\Delta x=0\,, \tag{4.45}$$

gdje je $\bar{S}$ srednja vrijednost izvornog člana u kontrolisanoj zapremini P. Iz prethodne jednačine je jasno da ona ne daje tačne vrijednosti s obzirom da se pretpostavlja da je promjena funkcije ϕ između kontrolisanih zapremina linearna. Sređivanjem posled-nje jednačine i sabiranjem istih članova dobija se:

$$a_P\phi_P = a_E\phi_E + a_W\phi_W + b, \tag{4.46}$$

gdje su koeficijenti uz vrijednosti funkcija i izvorni član definisani kao:

$$\begin{aligned} a_E &= \frac{\Gamma_e}{(\delta x_e)}, \\ a_W &= \frac{\Gamma_w}{(\delta x_w)}, \\ a_P &= a_E + a_W, \\ b &= \bar{S}\Delta x. \end{aligned} \tag{4.47}$$

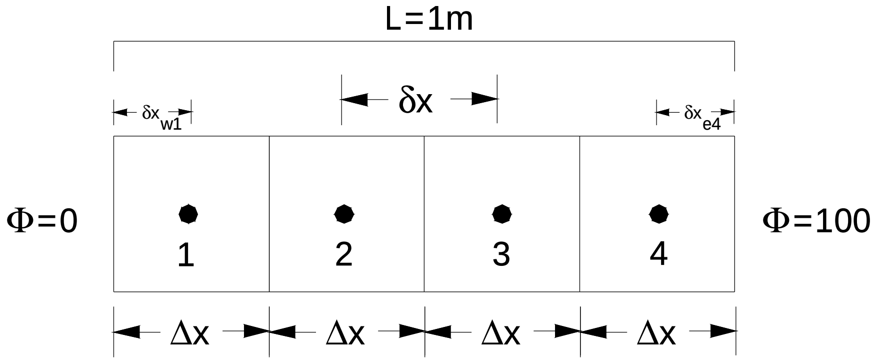
Jednačina (4.46) može biti napisana za sve kontrolisane zapremine u domenu čime se dobija sistem linearnih algebarskih jednačina koje se mogu rješavati različitim metodama. Nekoliko bitnih karakteristika je potrebno istaći o metodi kontrolisane zapremine koje je čine posebno značajnom pri diskretizaciji jednačina koje predstav-ljaju zakone o održanju neke transportovane funkcije ϕ.

Kao prvo, sam proces diskretizacije je zasnovan na jednačini bilansa tako da vrijednosti funkcija koje se dobijaju kao rezultati imaju fizičkog smisla bez obzira na dimenziju mreže.

Kao drugo, to što je garantovano očuvanje bilansa ne znači da su dobijena rješenja tačna, jer se povećanje tačnosti može ostvariti samo sa povećanjem broja kontrolisanih zapremina, tj. usitnjavanjem mreže.

Vrijednost fluksa $-(\Gamma d\phi/dx)$ se određuje na granicama kontrolisane zapremine. Jednačina održanja za posmatranu zapreminu je napisana na osnovu flukseva na granični površinama, što znači da gradijenti funkcija moraju biti definisani na granič-nim površinama. Obično se vrijednosti fluksa na graničnim površinama sračunavaju na osnovu vrijednosti funkcije u susjednim zapreminama, sa lineranom aproksimaci-jom. Da bi ona bila prihvatljiva potrebno je da diskretizaciona mreža bude dovoljno sitna.

Kao i kod metode konačnih razlika napišimo sada diskretizovane jednačine koje se dobijaju korišćenjem jednačine 4.46, a na osnovu geometrije koja je data na slici 4.9.



Slika 4.9 Numerička mreža za rješavanje jednačine 4.42 metodom CV

Primjenom jednačine 4.46 dobijaju se sledeće algebarske jednačine za kontrolisane zapremine 1-4 imajući u vidu da je δx_w za zapreminu 1 i δx_e za zapreminu 4 dvostruko manja od istih za ostale kontrolisane zapremine:

$$\begin{aligned} &\text{zapremina } 1: \; 12\phi_1 - 8\phi_0 - 4\phi_2 = 0.25 \cdot S_1 \\ &\text{zapremina } 2: \; 8\phi_2 - 4\phi_1 - 4\phi_3 = 0.25 \cdot S_2 \\ &\text{zapremina } 3: \; 8\phi_3 - 4\phi_2 - 8\phi_4 = 0.25 \cdot S_3 \; \cdot \\ &\text{zapremina } 4: 12\phi_4 - 4\phi_3 - 8\phi_5 = 0.25 \cdot S_4 \end{aligned} \tag{4.48}$$

Napomenimo da su vrijednosti Φ_0 i Φ_5 poznate kao granični uslovi. Rješavanjem sistema jednačina (4.48) dobijaju se vrijednosti funkcija u zapreminama koje su date u tabeli 4.2, zajedno sa uporednim tačnim rješenjima jednačine 4.22. Napomenimo da su vrijednosti S_1, S_2, S_3 i S_4 konstantne u svim zapreminama.

Tabela 4.2

	X(m)	CV	Tačno rješenje	Greška (%)
Gr.	0	0	0	0
1	0.125	10.7766	12.609	14.53
2	0.375	32.2048	37.734	14.653
3	0.625	53.508	62.734	14.706
4	0.875	80.075	87.609	8.599
Gr.	1	100	100	0