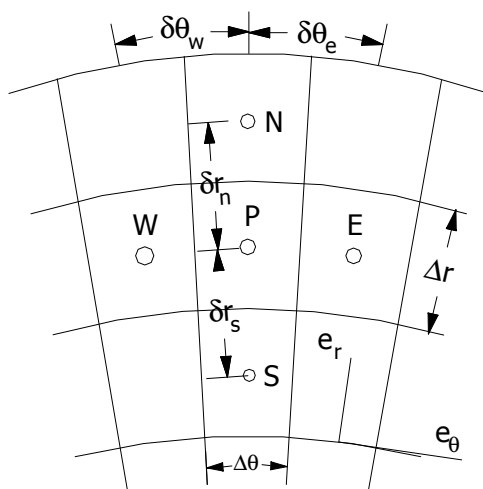


POGLAVLJE 7.

- 7.1 Difuziona jednačina u polarno cilindričnim koordinatama u ravni r- θ ;
- 7.2 Difuziona jednačina u polarno cilindričnim koordinatama u ravni r-z;
- 7.3 Završni zaključci sa napomenama;
 - 7.3.1 Interpolacija koeficijenta difuzije;
 - 7.3.2 Linearizacija izvornih članova i tretiranje nelinearnosti;
 - 7.3.3 Relaksacija tokom procesa iterativnog rješavanja;

7.1 Difuziona jednačina u polarno cilindričnim koordinatama u ravni r- θ

Polazna jednačina difuzije (6.1) napisana je u vektorskom obliku pa se ona može razlagati i u drugim koordinatama, u skladu sa zadatom geometrijom za koju se vrši izračunavanje funkcije ϕ . Razmotrimo za početak dvodimenzijske polarne koordinate. Tipičan izgled kontrolisane zapremine prikazan je na slici 7.1. Kontrolisana zapremina je pozicionirana u r \rightarrow θ ravni i ograničena je površinama kod kojih je konstantno r i θ . Centar kontrolisane zapremine je P kao i u ranijim prikazima mreže za Dekartov koordinatni sistem. Zapremina kontrolisane zapremine je $\Delta V = r_p \Delta \theta \Delta r$.



Slika 7.1. Kontrolisane zapremine u polarno cilindričnim koordinatama u ravni r- θ

Pretpostavka je da nema promjena u z pravcu ($\partial\phi/\partial z=0$) tako da se sve promjene odigravaju u $r \rightarrow \theta$ ravni. Takodje neka se samo razmatra stacionarna difuzija, jer se nestacionarni član lako nadograđuje. Integracijom jednačine (6.1) po kontrolisanoj zapremini dobija se:

$$(J \cdot A)_e + (J \cdot A)_w + (J \cdot A)_s + (J \cdot A)_n = \bar{S}\Delta V, \quad (7.2)$$

gdje su vektori površina definisani kao:

$$\begin{aligned} A_e &= \Delta r \cdot e_{\theta,e} \\ A_w &= -\Delta r \cdot e_{\theta,w} \\ A_n &= r_n \Delta \theta \cdot e_r \cdot \\ A_s &= -r_s \Delta \theta \cdot e_r \end{aligned} \quad (7.3)$$

Fluks je definisan jednačinom (6.2) dok je operator “nabla” u polarno cilindričnim koordinatama definisan kao:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial r} e_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} e_\theta, \quad (7.4)$$

pa se konačno dobijaju izrazi za flukseve na površinama kao:

$$\begin{aligned} J_e \cdot A_e &= -\Gamma_e \Delta r \frac{1}{r_e} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \theta} \right)_e \\ J_w \cdot A_w &= \Gamma_w \Delta r \frac{1}{r_w} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \theta} \right)_w \\ J_n \cdot A_n &= -\Gamma_n r_n \Delta \theta \left(\frac{\partial \phi}{\partial r} \right)_n \cdot \\ J_s \cdot A_s &= \Gamma_s r_s \Delta \theta \left(\frac{\partial \phi}{\partial r} \right)_s \end{aligned} \quad (7.5)$$

Kao i prije usvaja se linearna aproksimacija na graničnim površinama između zapremina pa se jednačina (6.8) može prikazati u diskretizovanom obliku:

$$\begin{aligned} J_e \cdot A_e &= -\Gamma_e \Delta r \frac{\phi_E - \phi_P}{r_e (\delta \theta)_e} \\ J_w \cdot A_w &= \Gamma_w \Delta r \frac{\phi_P - \phi_W}{r_w (\delta \theta)_w} \cdot \end{aligned} \quad (7.6)$$

$$J_n \cdot A_n = -\Gamma_n r_n \Delta \theta \frac{\phi_N - \phi_P}{(\delta r)_n}$$

$$J_s \cdot A_s = \Gamma_s r_s \Delta \theta \frac{\phi_P - \phi_S}{(\delta r)_s}$$

Izvorni član ima oblik kao i ranije a koji je dat jednačinom (6.12), pa se konačno izraz za određivanje vrijednosti funkcije ϕ u tački P može pisati kao:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_S \phi_S + a_N \phi_N + b, \quad (7.7)$$

gdje su koeficijenti za susjedne zapremine i izvorni član definisani sledećim izrazima:

$$a_E = \frac{\Gamma_e \Delta r}{r_e (\delta \theta)_e}$$

$$a_W = \frac{\Gamma_w \Delta r}{r_w (\delta \theta)_w}$$

$$a_N = \frac{\Gamma_n r_n \Delta \theta}{(\delta r)_n}$$

$$a_S = \frac{\Gamma_s r_s \Delta \theta}{(\delta r)_s}$$

$$a_P = a_E + a_W + a_S + a_N - S_P \Delta V$$

$$b = S_C \Delta V$$
(7.8)

Kao neki generalni zaključci o diskretizaciji u polarno cilindričnim koordinatama u ravni $r \rightarrow \theta$ može se reći sledeće:

1. Osnovni princip diskretizacije je isti kao i kod ortogonalne Dekartove mreže, pa se integracijom osnovne jednačine po zapremini dolazi do izraza za vrijednost funkcije u zapremini P;
2. Jedina razlika u odnosu na Dekartov koordinatni sistem je u jedničnim vektorima površina kao i u operatoru gradijenta;
3. I ovaj koordinatni sistem čuva osobinu ortogonalnosti jer su jednični vektori normalni na granične površine, pa se fluks kroz površine sračunava na isti način kao i kod Dekartovog sistema, dok se za slučajeve neortogonalnih mreža pojavljuju i neki drugi članovi koji su posledica neortogonalnosti mreže.

7.2 Difuziona jednačina u polarno cilindričnim koordinatama u ravni r-x

Slična procedura za diskretizaciju polazne transportne jednačine može biti sprovedena za osnosimetrične geometrije tj. kada je $\partial\phi/\partial\theta=0$. Izgled numeričke mreže za ovakav tip geometrije prikazan je na slici 4.4. Vrijednost funkcije se takodje sračunava u centru kontrolisane zapremine P, čija je zapremina $\Delta V=r_p\Delta r\Delta x$. Vektori površina su:

$$\begin{aligned} A_e &= r_e\Delta r \cdot i \\ A_w &= -r_w\Delta r \cdot i \\ A_n &= r_n\Delta x \cdot e_r \quad , \\ A_s &= -r_s\Delta x \cdot e_r \end{aligned} \quad (7.9)$$

dok je operator gradijenta definisan kao:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial r} e_r + \frac{\partial}{\partial x} i. \quad (7.10)$$

Na osnovu poslednja dva izraza mogu se sračunati fluksevi na površinama:

$$\begin{aligned} J_e \cdot A_e &= -\Gamma_e r_e \Delta r \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \\ J_w \cdot A_w &= \Gamma_w r_w \Delta r \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \\ J_n \cdot A_n &= -\Gamma_n r_n \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial r} \right)_n \cdot \\ J_s \cdot A_s &= \Gamma_s r_s \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial r} \right)_s \end{aligned} \quad (7.11)$$

Ako se smatra da se fluks na površinama sračunava na osnovu vrijednosti u ćelijama koristeći linearnu aproksimaciju kao i ranije jednačine (7.11) postaju:

$$\begin{aligned} J_e \cdot A_e &= -\Gamma_e r_e \Delta r \frac{\phi_E - \phi_P}{(\delta x)_e} \\ J_w \cdot A_w &= \Gamma_w r_w \Delta r \frac{\phi_P - \phi_W}{(\delta x)_w} \cdot \end{aligned} \quad (7.12)$$

$$J_n \cdot A_n = -\Gamma_n r_n \Delta x \frac{\phi_N - \phi_P}{(\delta r)_n}$$

$$J_s \cdot A_s = \Gamma_s r_s \Delta x \frac{\phi_P - \phi_S}{(\delta r)_s}$$

Izvorni član ima oblik kao i kod prethodne geometrije a dat je jednačinom (6.12), pa se izraz za određivanje vrijednosti funkcije ϕ u tački P dobija kao i ranije:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_S \phi_S + a_N \phi_N + b, \quad (7.13)$$

gdje su koeficijenti za susjedne zapremine i izvorni član:

$$a_E = \frac{\Gamma_e r_e \Delta r}{(\delta x)_e}$$

$$a_W = \frac{\Gamma_w r_w \Delta r}{(\delta x)_w}$$

$$a_N = \frac{\Gamma_n r_n \Delta x}{(\delta r)_n}$$

$$a_S = \frac{\Gamma_s r_s \Delta x}{(\delta r)_s}$$

$$a_P = a_E + a_W + a_S + a_N - S_P \Delta V$$

$$b = S_C \Delta V$$
(7.14)

7.3 Završni zaključci sa napomenama

Ovdje će biti prikazani neki važni zaključci i preporuke koje su važne za iterativni proces rješavanja jednačine, kao i preporuke vezane za koeficijent difuzije koji je prethodno samo konstatovan u svim oblicima diskretizovane transportne jednačine.

7.3.1 Interpolacija koeficijenta difuzije

Kroz sve oblike diskretizacionih jednačina primjećuje se da se vrijednost koeficijenta difuzije Γ uvijek sračunava na granicama kontrolisane zapremine. S

obzirom da se vrijednost ovog koeficijenta čuva za svaku kontrolisanu zapreminu postavlja se pitanje kojim prilazom treba vršiti sračunavanje vrijednosti koeficijenta Γ na graničnim površinama. Jedan od prilaza može da bude linearna interpolacija izmedju susjednih čvorova P i E sa poznatim koeficijentom f_e :

$$\Gamma_e = f_e \Gamma_P + (1 - f_e) \Gamma_E, \quad (7.15)$$

gdje je

$$f_e = \frac{0.5 \Delta x_E}{(\delta x)_e}. \quad (7.16)$$

Ovakav pristup je prilično dobar ako se koeficijent Γ mijenja lagano. Medjutim postoje procesi i pojave gdje se koeficijent difuzije može mijenjati znatno intezivnije pa se uslijed toga može pojaviti velika razlika u vrijednostima koeficijenta Γ u dvijema susjednim ćelijama. Naša želja je da se fluks na granici prikaže što je moguće vjerodostojnije. Ako se dvije susjedne ćelije posmatraju kao dva vezana otpornika tada se može pisati da je fluks na površini izmedju ćelija P i E:

$$J_e = - \frac{\phi_E - \phi_P}{(0.5 \Delta x_P) / \Gamma_P + (0.5 \Delta x_E) / \Gamma_E}, \quad (7.17)$$

što znači da se ekvivalentni otpor može sračunati kao:

$$\frac{\delta x_e}{\Gamma_e} = \frac{0.5 \Delta x_P}{\Gamma_P} + \frac{0.5 \Delta x_E}{\Gamma_E}, \quad (7.18)$$

odakle se ako se uzme uopšteni faktor f_e dobije da je:

$$\Gamma_e = \left(\frac{1 - f_e}{\Gamma_P} + \frac{f_e}{\Gamma_E} \right)^{-1}. \quad (7.19)$$

Ako se uzme da je $f_e=0.5$ dobije se izraz pogodan za diskutovanje:

$$\Gamma_e = \frac{2 \Gamma_P \Gamma_E}{\Gamma_P + \Gamma_E}. \quad (7.20)$$

Ako je na primjer $\Gamma_P \gg \Gamma_E$ dobija se $\Gamma_e = 2 \Gamma_E$. To je i logično ako se zna da je otpor difuziji kroz ćeliju P neznatan u odnosu na onaj u ćeliji E, pa praktično postoji otpor samo u ćeliji E, tj. na njenoj polovini.

Takodje, važno je napomenuti da je ovakav način interpolacije prihvatljiv samo za jednodimenzijску difuziju. Ipak, ovaj metod se može koristiti i za

multidimenzione probleme i ima značajnu prednost u odnosu na linearnu interpolaciju na primjer. Ova metoda određivanja koeficijenta difuzije je jako pogodna za domene u kojima se mogu pojaviti skokovite promjene koeficijenta Γ , kao na primjer kod smješe tečnosti i čvrste faze, koje tada nije potrebno posebno razdvajati već se mogu tretirati kao jedan domen.

7.3.2 Linearizacija izvornih članova i tretiranje nelinearnosti

Osnovni cilj kod svake numeričke metode je dobijanje seta algebarskih jednačina pogodnih za rješavanje određenom metodom u cilju dobijanja rješenja ϕ u diskretnom broju tačaka posmatranog domena. Kada polazne jednačine sadrže nelinearnost tada i algebarske jednačine takodje sadrže u sebi nelinearnost koju je potrebno prevazići tokom procesa rješavanja. Nelinearnost se može pojaviti uslijed različitih uzroka. Na primjer ako je koeficijent difuzije Γ funkcija od ϕ (recimo temperature) tada problem automatski postaje nelinearan. Izvorni član takodje može uzrokovati nelinearnost ako zavisi od tražene funkcije ϕ . Postoje mnogi načini da se problem nelinearnosti prevaziđe. Jedan od najčešćih načina je sračunavanje koeficijenata a_p , a_{nb} , S_C i S_P na osnovu vrijednosti funkcije iz prethodnog vremenskog koraka, i zatim njihovo stalno “updatovanje” tokom iterativnog procesa. Prethodno je već naglašeno da se izvorni član može pisati kao:

$$S = S_C + S_P \phi, \quad (7.21)$$

pa razmotrimo na momenat kako se može izvršiti diskretizacija ako je S nelinearna funkcija od ϕ . Neka je ϕ^* prethodna vrijednost funkcije ϕ . To je i vrijednost koja figuriše tokom tekuće iteracije. Ako se napiše Tajlorov red u okolini prethodne vrijednosti funkcije kao:

$$S = S^* + \left(\frac{\partial S}{\partial \phi} \right)^* (\phi - \phi^*), \quad (7.22)$$

jasno se vidi da je:

$$\begin{aligned}
 S_C &= S^* - \left(\frac{\partial S}{\partial \phi} \right)^* \phi^* \\
 S_P &= \left(\frac{\partial S}{\partial \phi} \right)^*
 \end{aligned}
 \tag{7.23}$$

Jasno se vidi da je $(\partial S / \partial \phi)^*$ gradijent koji se sračunava na osnovu prethodne vrijednosti ϕ^* . Za veliku klasu problema ovaj je izvod negativan pa je S_P negativno samim tim, a to pogoduje procesu numeričkog rješavanja jer je a_P najveći od svih koeficijenata u diskretizovanoj jednačini za određivanje vrijednosti ϕ_P .

7.3.3 Relaksacija tokom procesa iterativnog rješavanja

S obzirom da je iterativni način rješavanja problema daleko zastupljeniji od direktnih metoda koje zahtijevaju značajne računarske resurse, potrebno je izvršiti praćenje promjene vrijednosti funkcije ϕ_P tokom njenog izračunavanja. Ako postoji nelinearnost u izvornom članu na primjer, i ako su pretpostavljene vrijednosti u prvoj iteraciji daleko od tačnog rješenja može se desiti da vrijednost ϕ značajno osciluje u odnosu na rješenje. U ekstremnim slučajevima može se desiti i divergencija rješenja, tj. pojava da se oscilacije tokom iterativnog procesa povećavaju a ne smanjuju. Radi prevencije takvih slučajeva uvodi se tzv. relaksacija, koja treba da eliminiše pojavu divergencije tokom iterativnog rješavanja.

Neka je trenutna vrijednost funkcije u nekoj tekućoj iteraciji ϕ_P^* . Ako se zna da ϕ_P treba da zadovolji jednačinu:

$$a_P \phi_P = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b, \tag{7.24}$$

vrijednost funkcije se može sračunati kao:

$$\phi_P = \frac{\sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b}{a_P}, \tag{7.25}$$

pa je razlika između prethodne i trenutne vrijednosti:

$$\phi_P = \frac{\sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b}{a_P} - \phi_P^* \quad (7.26)$$

Radi ublažavanja oscilatornih promjena funkcije ϕ_P neka nova vrijednost bude dijelom izražena preko nove i dijelom preko stare vrijednosti, koristeći neki težinski faktor α tako da je:

$$\phi_P = \phi_P^* + \alpha \left(\frac{\sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b}{a_P} - \phi_P^* \right) \quad (7.27)$$

Sredjivanjem poslednje jednačine dobija se:

$$\frac{a_P}{\alpha} \phi_P = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b + \frac{1-\alpha}{\alpha} a_P \phi_P^* \quad (7.28)$$

Iz poslednje jednačine mogu se izvući određeni zaključci:

1. Kada iteracije konvergiraju ka rješenju ($\phi_P = \phi_P^*$) tada se dobija polazna jednačina. Dakle relaksacija je samo promjena puta do rješenja a ne i mijenjanje rješenja, tako da se sa i bez relaksacije stiže do istog rješenja;
2. Težinski faktor α se uvijek odabira da bude $\alpha < 1$ tako da je uvijek $a_P / \alpha > \sum_{nb} a_{nb}$. Vrijednosti manje od 1 obezbjeđuju da je uvijek zadovoljen Scarborough-ov kriterijum;
3. Optimalna vrijednost koeficijenta α zavisi od prirode jednačine koja se rješava, tj kako je jaka nelinearnost. Vrijednosti bliske jedinici uzimaju se za slučajeve gdje proces brzo konvergira, dok se manje vrijednosti uzimaju tamo gdje postoji sklonost ka oscilatornim promjenama tokom iterativnog rješavanja;
4. Uvođenje relaksacije tokom rješavanja sistema algebarske jednačine liči na proces rješavanja nestacionarne jednačine, gdje su vrijednosti iz dva vremenska trenutka a_P / α i $((1-\alpha) / \alpha) a_P \phi_P^*$.