

POGLAVLJE 9.

- 9.1 Nestacionarna konvekcija;
- 9.2 1-D Diskretizacija bazirana na kontrolisanoj zapremini;
- 9.3 Centralno diferencijalna shema;
- 9.4 "Upwind" shema prvog reda;
- 9.5 Analiza greške;
- 9.6 Sheme višeg reda;
- 9.6.1 "Upwind" shema drugog reda;
- 9.6.2 "Upwind" shema trećeg reda;
- 9.7 Završni zaključci;

9.1 Nestacionarna konvekcija

Razmotrimo sada nestacionarnu konvekciju. Radi jednostavnosti neka je gustina $\rho=1$ i neka je koeficijent difuzije $\Gamma=0$. Konvektivno - difuziona jednačina tada ima oblik:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0. \quad (9.1)$$

Poslednja jednačina se često zove u literaturi linearno talasno jednačina. Zove se linearna zato što je brzina u konstantna i ne zavisi od transportne funkcije ϕ . Ovaj tip jednačine pripada jednačinama hiperboličkog tipa. Da bi se riješila ova jednačina potrebno je definisati početne i granične uslove. Početni uslov može biti zadat u obliku $\phi(x,0)=\phi_0(x)$, pa se rješenje jednačine 9.1 može dati u obliku $\phi(x,t)=\phi_0(x-ut)$, što znači da je praktično rješenje jednačine isto kao i početni uslov samo translatorno pomjereno u vremenu za $-ut$.

9.2 1-D Diskretizacija bazirana na kontrolisanoj zapremini

Izvršimo sada diskretizaciju jednačine (9.1). Neka je numerička mreža uniformna i neka je dimenzija ćelije Δx kao na slici 8.1. Integracijom pomenute jednačine po kontrolisanoj zapremini P može se pisati:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)_P \Delta x + (u_e \phi_e - u_w \phi_w) = 0, \quad (9.2)$$

pa ako se uzme da je brzina u konstantna prethodna jednačina se pojednostavljuje i dobija oblik:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)_P + \frac{u}{\Delta x} (\phi_e - \phi_w) = 0. \quad (9.3)$$

Iz poslednje jednačine se vidi da se problem određivanja fluksa na granici svodi na određivanje vrijednosti funkcije ϕ na granicama. Generalno gledano za nas su interesantne dvije klase problema. U nekim slučajevima može biti interesantno kako se mijenja rješenje u nekim prelaznim režimima. S obzirom da se radi o jednačini hiperboličkog tipa rješenje zavisi samo od prethodno sračunatih vrijednosti, a ne od budućih. Tako se može dobiti rješenje jednačine kroz vrijeme na osnovu prethodnih vrijednosti marširajući kroz vrijeme do željenog trenutka. Druga klasa problema vezana je za određivanje stacionarnog stanja tj. kada $\partial\phi/\partial t \rightarrow 0$. Iz prethodno izloženih glava vidi se da se stacionarno stanje može određivati direktno iterativnim rješavanjem sistema algebarskih jednačina, ili pak rješavanjem nestacionarne jednačine za dovoljno dug vremenski period kada se vidi da je promjena funkcije ϕ u vremenu zanemarljiva za sve tačke domena. Sa ova dva generalna slučaja u nastavku će biti razmotrene neke specifične sheme koje tretiraju problem nestacionarnosti.

9.3 Centralno diferencijalna shema

Ako se koristi eksplicitna shema koja je prikazana u prethodnoj glavi jednačina 9.1 se može diskretizovati u oblik:

$$\frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t} + u \frac{\phi_E^0 - \phi_W^0}{2\Delta x} = 0, \quad (9.4)$$

gdje su vrijednosti bez gornjeg znaka 0 vrijednosti iz tekućeg vremena, dok su vrijednosti sa znakom 0 iz prethodnog vremenskog trenutka. Kao što je naprijed zaključeno vrijednosti funkcije za tekući vremenski trenutak sračunavaju se na osnovu vrijednosti iz prethodnog i nije potrebno iterativno ili neko direktno rješavanje sistema jednačina. Centralno diferencijalna shema je shema drugog reda

preciznosti u prostornoj skali i prvog reda preiznosti u vremenskoj skali. Primjenom Von Neumann - ovog kriterijuma stabilnosti vidi se da je ova shema izuzetno nestabilna, pa nema neku značajniju primjenu osim u nekim zaključcima koji se iz nje mogu izvesti. Nestabilnost nije uzrokovana pojedinačno prostornom ili vremenskom diskretizacijom već objema spregnuto. Šta više potpuno drugačije ponašanje se dobija ako se koristi implicitna shema za nestacionarni član a eksplicitna shema za konvektivni član:

$$\frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t} + u \frac{\phi_E - \phi_W}{2\Delta x} = 0. \quad (9.5)$$

Veoma lako je pokazati da je ovakva shema bezuslovno stabilna, ali stabilnost ne garantuje rješenja koja imaju fizički smisao uvijek. Prethodna jednačina se može napisati u malo izmijenjenom obliku:

$$\phi_P = u\Delta t \frac{\phi_E - \phi_W}{2\Delta x} + \phi_P^0, \quad (9.6)$$

odakle se lako uočava da je koeficijent a_W uz ϕ_W negativan kada je $u > 0$, i da je a_E negativan kada je $u < 0$. To znači da vrijednost funkcije u nekoj od zapremina nije ograničena vrijednošću u susjednim zapreminama i vrijednošću iz prethodnog vremenskog trenutka. Ova shema je implicitna pa zahtijeva neku metodu za rješavanje sistema algebarskih jednačina, ali i Scarborough - ov kriterijum nije zadovoljen što predstavlja problem za iterativne solvere.

9.4 Upwind shema prvog reda

Ako se iskoristi upwind shema za diskretizaciju konvektivnog člana jednačine 5.48 i ako se uzme u obzir eksplicitna shema za diskretizaciju konvektivnog člana dobija se:

$$\frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t} + u \frac{\phi_P^0 - \phi_W^0}{\Delta x} = 0. \quad (9.7)$$

Već je pokazano da je upwind shema prvog reda preciznosti kao i eksplicitna shema. Ova shema je stabilna ako je zadovoljen uslov:

$$0 \leq u \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1. \quad (9.8)$$

Vrijednost $v=u\Delta t/\Delta x$ u literaturi je poznat kao Courant - ov ili CFL broj. Eksplicitne sheme obično moraju da zadovolje određeni uslov koji je diktiran Courant - ovim brojem. Obično je potrebno da vremenski korak integracije bude dovoljno mali pa je korišćenje eksplicitne sheme za određivanje stacionarnih stanja praktično neprihvatljivo. Takodje je interesantno da će koeficijenti uz susjedni član W kao i član iz prethodnog trenutka biti pozitivni ako je zadovoljena jednačina (9.8). Tada se dobija da je:

$$\phi_P = (1-v) \cdot \phi_P^0 + v\phi_W, \quad (9.9)$$

odakle se vidi da je shema stabilna i monotona kada je $v \leq 1$.

9.5 Analiza greške

Kao što je u prethodnom poglavlju izvršen razvoj funkcije u Tajlorov red za prostornu promjenu funkcije ϕ , takodje se može izvršiti razvoj funkcije u Tajlorov red u vremeskoj skali u okolini tačke ϕ_P^0 . Izraz za funkciju ϕ_P ima sledeći oblik:

$$\phi_P = \phi_P^0 + \Delta t \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{(\Delta t)^2}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + O(\Delta t^3), \quad (9.10)$$

pa se nestacionarni član može pisati kao:

$$\frac{\phi_P - \phi_P^0}{\Delta t} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + O(\Delta t^2). \quad (9.11)$$

Ako se sada izvrši smjena jednačina 8.27 i 9.11 u jednačinu 9.7 dobija se nakon sređivanja sledeći izraz:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{u\Delta x}{2} (1-v) \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \dots. \quad (9.12)$$

Iz poslednjeg izraza se vidi da i nestacionarni član pati od pojave lažne difuzije koja je funkcija Courant - ovog broja. Kada je Courant - ov broj >1 tada je vještačka difuzija negativna, što može dovesti do rasta greške tokom iterativnog rješavanja. Lako se pokazuje da za centralnu shemu (jednačina 9.4) važi sledeća jednačina:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = -\frac{u^2 \Delta t}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \dots, \quad (9.13)$$

odakle se vidi da ova shema stvara negativnu vještačku difuziju i čini ovakvu shemu nestabilnom. Implicitna verzija iste sheme (jednačina 9.5) ima sledeći oblik jednačine koja se dobija metodom unazad:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{u^2 \Delta t}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \dots. \quad (9.14)$$

Ova shema je numerički stabilna ali takodje ima manu da se javlja tzv. vještačka difuzija.

9.6 Sheme višeg reda

Iz prethodno izloženog se vidi da upwind i centralno diferencijalna shema imaju nekoliko ozbiljnih nedostataka i ograničenja uslijed pojave tzv. lažne difuzije i disperzije. Bilo bi veoma poželjno ako se ovi efekti mogu nekom metodom minimizirati, pa je jedna od ideja interpolacija sa većim redom preciznosti. Osnovni cilj aproksimacija višeg reda je dobijanje greške najmanje drugog reda, dok se ostatak koji je posledica zanemarivanja članova višeg reda može kontrolisati pogodnim odabirom metode za rješavanje sistema algebarskih jednačina. Do sada, vrijednost funkcije ϕ se podrazumijevala da je konstantna u ćeliji i na na granici pa je za $Fe > 0$ važno $\phi_e = \phi_p$. Umjesto konstantne vrijednosti u zapremini (ćeliji) funkcija ϕ se može razviti u Tajlorov red, pa se uzeti da važi linearna ili kvadratna aproksimacija. Ako je $Fe > 0$ razvoj funkcije u Tajlorov red bi imao formu:

$$\phi(x) = \phi_p + (x - x_p) \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{(x - x_p)^2}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + O((\Delta x)^3). \quad (9.15)$$

9.6.1 Upwind shema drugog reda

Upwind shema drugog reda podrazumijeva uzimanje u obzir samo prva dva člana na desnoj strani jednačine 9.15. Ako je mreža uniformna i ako se zna da je $x_e = x_p + (\Delta x)/2$ dobija se da je:

$$\phi_e = \phi_P + \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial \phi}{\partial x}, \quad (9.16)$$

pa je očigledno da ova aproksimacija ima grešku reda veličine $O(\Delta x^2)$. U cilju dobijanja vrijednosti funkcije na granici ϕ_e kao funkciju vrijednosti u zapreminama, može se koristiti neka od aproksimacija za prvi izvod ($\partial\phi/\partial x$) kao što su centralna, shema unaprijed, shema unazad i sl. Ako se uzme centralna shema za aproksimaciju prvog izvoda:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\phi_E - \phi_W}{2\Delta x}, \quad (9.17)$$

dobija se aproksimacija za graničnu vrijednost funkcije:

$$\phi_e = \phi_P + \frac{\phi_E - \phi_W}{4}, \quad (9.18)$$

ili ako se lijevoj strani doda i oduzme $\phi_P/4$ dobija se:

$$\phi_e = \phi_P + \frac{\phi_P - \phi_W}{4} + \frac{\phi_E - \phi_P}{4}. \quad (9.19)$$

Ova shema poznata je u literaturi kao Fromm - ova shema. Ako se za aproksimaciju prvog izvoda uzme shema unazad:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x}, \quad (9.20)$$

dobija se:

$$\phi_e = \phi_P + \frac{\phi_P - \phi_W}{4}, \quad (9.21)$$

a ova shema je u literaturi poznata kao Beam - Warming shema.

9.6.2 Upwind shema trećeg reda

Ako se pored linearnog u jednačini 9.15 zadrži i drugi član u opisu vrijednosti funkcije na granici ϕ_e tako da je:

$$\phi(x) = \phi_P + (x - x_P) \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{(x - x_P)^2}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}, \quad (9.22)$$

pa se korišćenjem vrijednosti u susjednim zapreminama za određivanje prvog i drugog izvoda u obliku:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\phi_E - \phi_W}{2\Delta x} + O(\Delta x^2), \quad (9.23)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{\phi_E + \phi_W - 2\phi_P}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x^2). \quad (9.24)$$

dobija izraz za vrijednost funkcije na granici:

$$\phi_e = \phi_P + \frac{\phi_E - \phi_W}{4} + \frac{\phi_E + \phi_W - 2\phi_P}{8}, \quad (9.25)$$

koji se može rearanžirati u oblik:

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} - \frac{\phi_E + \phi_W - 2\phi_P}{8}. \quad (9.26)$$

Ova shema se u literaturi zove QUICK shema (Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinetics). Ova se shema može posmatrati kao parabolična korekcija linearne interpolacije za funkciju ϕ_e . Ako se uvede faktor zakrivljenosti C tako da se poslednja jednačina napiše u obliku:

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} - C(\phi_E + \phi_W - 2\phi_P), \quad (9.27)$$

gdje je $C=1/8$. Generalno sheme drugog i trećeg reda mogu se napisati u generalnom izrazu za ϕ_e :

$$\phi_e = \phi_P + \frac{(1-\kappa)}{4}(\phi_P - \phi_W) + \frac{(1+\kappa)}{4}(\phi_E - \phi_P). \quad (9.28)$$

Lako se može pokazati da se za $\kappa=-1$ dobija Beam - Warmingova shema, za $\kappa=0$ Fromm - ova shema, za $\kappa=1/2$ QUICK shema. Konačno za $\kappa=1$ dobija se centralno diferencijalna shema.

Iz jednačine 9.28 se vidi da neki od koeficijenata uz susjedne članove može biti negativan. Ali efekat koji sheme višeg reda daju smanjivanjem oscilacija tokom rješavanja sistema algebarskih jednačina, u poređenju sa centralno diferencijalnom shemom čini ih prihvatljivim za upotrebu.

9.7 Završni zaključci

Ako se sistem algebarskih diferencijalnih jednačina rješava nekom iterativnom metodom potrebno je da je zadovoljen Scarborough – ov kriterijum. U skladu sa tim primjena shema višeg reda je vezana za primjenu upwind sheme kao njena korekcija. Za QUICK shemu konvektivni transport se opisuje sledećom jednačinom:

$$F_e \phi_e = F_e \phi_P + F_e \left(\frac{(\phi_E^* + \phi_P^*)}{2} - \frac{(\phi_E^* + \phi_W^* - 2\phi_P^*)}{8} - \phi_P^* \right). \quad (9.29)$$

Prvi član na desnoj strani jednačine opisuje upwind fluks. Drugi član predstavlja korekciju, i on je u stvari razlika između QUICK i upwind fluksa. Upwind član je ugrađen u koeficijente a_P i a_{nb} dok je korekcija uključena obično u izvorni član b , a izračunava se kao što se vidi na osnovu vrijednosti iz prethodnog vremenskog trenutka, ili prethodne iteracije ako se radi o stacionarnom slučaju. Kada sistem jednačina konvergira tada je $\phi_P = \phi_P^*$ i QUICK shema je potpuno zadovoljena. Do upwind shema obezbjeđuje pozitivne koeficijente kojim je obezbijeđen Scarborough – ov kriterijum, QUICK shema obezbjeđuje stabilnost pri rješavanju. Za iterativno rješavanje problema veoma je važno i kako odabrati početne vrijednosti koje obezbjeđuju stabilnost tokom iterativnog rješavanja jednačina.