

## 1. Εισαγωγικά αριθμητικών μεθόδων

Οι εξισώσεις κίνησης (Navier-Stokes equations) για ασυμπίεστη ή συμπιεστή ροή είναι γνωστές για περισσότερο από εκατό χρόνια. Η μεγάλη περιπλοκότητα και ο μη γραμμικός χαρακτήρας των εξισώσεων κίνησης καθιστά όμως αδύνατη την επίλυση τους για προβλήματα πρακτικού ενδιαφέροντος, όπως η ροή σε μηχανές turbojet, η ροή γύρω από πτέρυγες αεροσκαφών, πτερυγίων ελικοπτέρων και ανεμογεννητριών κλπ. Αναλυτικές λύσεις των εξισώσεων κίνησης είναι γνωστές μόνο για ένα πολύ περιορισμένο αριθμό στοιχειωδών ροών για απλές γεωμετρίες και οριακές συνθήκες. Οι υπάρχουσες αναλυτικές λύσεις είναι απαραίτητες στην κατανόηση της μηχανικής των ρευστών και αποτελούν πολύτιμα εργαλεία για την πιστοποίηση της αξιοπιστίας των αριθμητικών μεθόδων επίλυσης των εξισώσεων κίνησης που είναι το αντικείμενο αυτού του μαθήματος. Προβλήματα ροής σε περίπλοκες γεωμετρίες και συνθήκες ροής (ασταθής ή τυρβώδης ροή) που έχουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον στις βιομηχανικές εφαρμογές και τον σχεδιασμό μπορεί να αντιμετωπισθούν μόνο με αριθμητικές επλύσεις.

Είναι σήμερα γνωστό και γενικά παραδεκτό ότι οι εξισώσεις κίνησης Navier-Stokes (NS) περιγράφουν επ' ακριβώς όλες τις καταστάσεις ροής από τις πιο απλές, όπως η στρωτή ροή μέσα σε κυλινδρικούς αγωγούς και οριακά στρώματα πάνω από επίπεδες επιφάνειες, μέχρι τις πλέον περίπλοκες, όπως π.χ. η τυρβώδης ροή μέσα σε στροβιλοκινητήρες, και η ροή γύρω από αεροσκάφη και διαστημοχώματα. Η αδυναμία αναλυτικής επίλυσης ακόμη δε και η κατανόηση της ποιοτικής συμπεριφοράς των περίπλοκων εξισώσεων NS οδήγησε στην χρήση απλοποιημένων μορφών εξισώσεων κίνησης, όπως είναι οι εξισώσεις Euler, οι εξισώσεις του οριακού στρώματος και οι εξισώσεις του δυναμικού πεδίου. Η αναλυτική επίλυση αυτών απλοποιημένων εξισώσεων κίνησης στην γενική τους μορφή είναι αδύνατη στις περισσότερες περιπτώσεις που συναντώνται στην πράξη.

Η μεγάλη ανάγκη που υπήρχε στην βιομηχανία για ποσοτική πληροφορία όσον αφορά την κατανομή και το μέγεθος δυνάμεων που αναπτύσσονται από πεδία ροής οδήγησε από τις αρχές του προηγούμενου ακόμη αιώνα στην συστηματική πειραματική μελέτη τους, που σε συνδυασμό με την χρήση αδιάστατης ανάλυσης και αρχών της ρευστοδυναμικής κατάφερε να δώσει πολύτιμη ποιοτική (flow visualization) αλλά και ποσοτική πληροφορία σε σχέση με τις δυνάμεις και τις αντιστάσεις ροής, όπως ο συντελεστής άντωσης και οπισθέλκουσας κλπ. που μπορούμε να βρούμε από διαγράμματα ή πίνακες. Οι πειραματικές μετρήσεις έχουν όμως μεγάλο κόστος, είναι πολύ χρονοβόρες, και έχουν το σοβαρό περιορισμό ότι δεν δίνουν την δυνατότητα να προσομοιάσουμε συγχρόνως πολλούς αδιάστατους αριθμούς που χαρακτηρίζουν την ροή. Κλασικό παράδειγμα είναι η μελέτη της ροής γύρω από πλοία όπου είναι αδύνατο να επιτύχουμε στο πειρακτικό μοντέλο τους ίδιους αριθμούς Reynolds και Froude όπως στην πραγματικότητα. Ένα ακόμη παράδειγμα είναι η μελέτη της συμπιεστής ροής γύρω από αεροσκάφη όπου είναι σχεδόν αδύνατο να επιτύχουμε στην αεροσήραγγα ταυτόχρονα τους ίδιους αριθμούς Reynolds και Mach που παρατηρούνται στην πτήση του αεροσκάφους. Οι πειραματικές μετρήσεις, παρά τις δυσκολίες που αντιμετωπίζουν και των περιορισμών που αναφέραμε ότι έχουν, παραμένουν και αναμένεται ότι θα συνεχίσουν να αποτελούν, ανεκτίμητο μέσο στην έρευνα και τον σχεδιασμό διότι είναι οι μόνες που μπορούν να δώσουν ακριβή πληροφορία για τις περίπλοκες διαδικασίες της μετάβασης ροής και της τύρβης που αποτελούν ακόμη και σήμερα ανοιχτά προβλήματα έρευνας.

Οι αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης εισήχθησαν ουσιαστικά από τον Newton έλλειψη υπολογιστικής ισχύος δεν κατέστησε όμως δυνατή την εκτεταμένη τους χρήση μέχρι τα μέσα του 20<sup>ου</sup> αιώνα που εμφανίστηκαν οι πρώτοι ηλεκτρονικοί υπολογιστές. Είναι αναμφισβήτητο, ότι οι πρόδοι που επιτελέστηκαν τα τελευταία 50 χρόνια στην αριθμητική ή υπολογιστική ρευστοδυναμική (computational fluid dynamics (CFD)) είναι τεράστιες. Σήμερα η αριθμητική ρευστοδυναμική αποτελεί απαραίτητο εργαλείο που χρησιμοποιείται από την αυτοκινητοβιομηχανία την αεροπορική βιομηχανία μέχρι τον σχεδιασμό νέων ιατρικών μηχανημάτων. Η πρόδοις των σχετίζονται με τις τεράστιες εξελίξεις και την αύξηση της ταχύτητας των ηλεκτρονικών επεξεργαστών, που επηρέασαν σε μεγάλο βαθμό και τις πειραματικές τεχνικές και οδήγησαν στην δημιουργία νέων, όπως particle image velocimetry (PIV), που δεν θα ήταν δυνατόν να φαντασθούμε ότι θα μπορούσε να εφαρμοσθούν στην πράξη πριν από δύο δεκαετίες. Οι σύγχρονες πειραματικές τεχνικές και η υπολογιστική μηχανική ρευστών, CFD, υπόσχονται μεγάλες προόδους στην διερεύνηση και κατανόηση φαινομένων ροής αλλά και νέες δυνατότητες στον σχεδιασμό στο εγγύς μέλλον. Στις παρακάτω παραγράφους θα κάνουμε μία σύντομη ανασκόπηση των εξισώσεων συμπιεστής και ασυμπιεστής ροής η αριθμητική επίλυση των οποίων είναι ένας από τους κύριους στόχους της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής. Οι εξισώσεις ρευστοδυναμικής εκφράζουν νόμους διατήρησης και η πλήρης ανάπτυξη τους και επεξήγηση της φυσικής σημασίας των διαφόρων όρων αποτελεί αντικείμενο της μηχανικής ρευστών. Ο κύριος λόγος για τον οποίο αναφέρονται οι εξισώσεις ροής είναι να συνδέουμε την γνώση που συσσωρεύτηκε στην κατά την μακρόχρονη πορεία της ανάπτυξης της μηχανικής ρευστών με τις σύγχρονες απατήσεις που θα φανούν στην σύντομη αναδρομή της εξέλιξης της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (που ουσιαστικά άρχισε από την δεκαετία του 50) τη οποία θα κάνουμε επόμενο κεφάλαιο.

Οι νόμοι διατήρησης παίζουν κεντρικό ρόλο στην μηχανική των συνεχών μέσων και εκφράζουν την διατήρηση ποσοτήτων όπως η μάζα ενέργεια και ορμή που περιέχονται σε ένα όγκο ελέγχου. Η γενική μορφή του νόμου διατήρησης είναι

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}(q) = S$$

Όπου  $q$  είναι η ανά μονάδα όγκου διατηρούμενη ποσότητα (π.χ. ορμή  $\rho \bar{\mathbf{u}}$ ),  $\mathbf{F}$  είναι το διάνυσμα ροής αυτής της ποσότητας και εκφράζει την ανταλλαγή της με το περιβάλλον και  $S$  είναι ένας όρος παραγωγής (π.χ. βαρύτητα  $\rho g$  στην εξίσωση διατήρησης ορμής).

Οι εξισώσεις της συμπιεστής ροής σε διανυσματική μορφή είναι έκφραση των νόμων διατήρησης μάζας, ορμής και ενέργειας:

$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{\mathbf{u}}) = 0$	μάζα
$\frac{\partial \rho \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{\mathbf{u}} \otimes \bar{\mathbf{u}} + pI - \vec{\mathfrak{J}}) = 0$	ορμή
$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{\mathbf{u}} H - \kappa \nabla T - \vec{\mathfrak{J}} \cdot \bar{\mathbf{u}}) = 0$	ενέργεια

όπου  $\vec{\mathfrak{J}}$  είναι ο τανυστής των ιξωδών τάσεων,

$$\mathfrak{J}_{ij} = \mu \left[ \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right]$$

$H = h + |\mathbf{u}|^2 / 2$  είναι η ολική ενθαλπία ή ενθαλπία αποκοπής, και  $E = e + |\mathbf{u}|^2 / 2$  είναι η ολική ενέργεια ανά μονάδα μάζας και η ολική ενέργεια είναι  $E_t = \rho E$ . Η παραπάνω εξισώσεις συχνά γράφονται στην μορφή

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{μάζα}$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial \mathfrak{J}_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad \text{oρμή}$$

$$\frac{\partial E_t}{\partial t} + \frac{\partial E_t u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial q_i}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\mathfrak{J}_{ij} u_i) = 0 \quad \text{ενέργεια}$$

Η πλέον συνήθης μορφή των νόμων διατήρησης σε σύστημα Cartesian συντεταγμένων η οποία απαντάται στην βιβλιογραφία της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής είναι

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}^{\text{inv}}(\mathbf{U})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}^{\text{inv}}(\mathbf{U})}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{G}^{\text{inv}}(\mathbf{U})}{\partial z} = \frac{1}{Re} \left[ \frac{\partial \mathbf{E}^{\text{vis}}(\mathbf{U}, \nabla \mathbf{U})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}^{\text{vis}}(\mathbf{U}, \nabla \mathbf{U})}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{G}^{\text{vis}}(\mathbf{U}, \nabla \mathbf{U})}{\partial z} \right]$$

όπου

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ E_t \end{bmatrix}, \quad \mathbf{E}^{\text{inv}}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (E_t + p)u \end{bmatrix}, \quad \mathbf{E}^{\text{vis}}(\mathbf{U}, \nabla \mathbf{U}) = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{zx} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + w\tau_{zx} - q_x \end{bmatrix}$$

με ανάλογους ορισμούς για τους άλλους όρους και

$$\tau_{xx} = \frac{2}{3} \mu \left( 2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial w}{\partial z} \right), \quad \tau_{yx} = \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) = \tau_{xy}, \quad \tau_{xz} = \mu \left( \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) = \tau_{zx}$$

Οι εξισώσεις ασυμπίεστης ροής προκύπτουν από τις εξισώσεις συμπιεστής ροής και έχουν την παρακάτω σημαντικά απλούστερη μορφή διότι δεν είναι αναγκαίο να συμπεριλάβουμε την εξίσωση διατήρησης της ενέργειας

$$\nabla \cdot \vec{\mathbf{u}} = 0$$

$$\frac{D \vec{\mathbf{u}}}{Dt} = \frac{\partial \vec{\mathbf{u}}}{\partial t} + (\vec{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \vec{\mathbf{u}} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \vec{\mathbf{u}}$$

Η εξίσωση στροβιλισμού είναι επίσης σημαντική στην ρευστοδυναμική και βρίσκεται όταν θεωρήσουμε το  $\text{curl} = \nabla \times$  της εξίσωσης ορμής

$$\frac{D\vec{\omega}}{Dt} = \underbrace{(\vec{\omega} \cdot \nabla) \vec{u}}_{\substack{\text{vorticity stretching} \\ \text{due to velocity gradient}}} - \underbrace{\vec{\omega}(\nabla \cdot \vec{u})}_{\substack{\text{vorticity stretching} \\ \text{due to velocity dilatation}}} + \underbrace{\frac{1}{\rho^2} \nabla \rho \times \nabla p}_{\substack{\text{baroclinic generation} \\ \text{of vorticity}}} + \nabla \times \left( \frac{\nabla \cdot \vec{\mathfrak{J}}}{\rho} \right)$$

Η παραπάνω εξίσωση σε τανυστική μορφή είναι

$$\frac{\partial \omega_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \omega_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \omega_i \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + e_{ijk} \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \frac{\partial p}{\partial x_k} + e_{ijk} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial \mathfrak{J}_{km}}{\partial x_m} \right)$$

Η εξίσωση στροβιλισμού για ασυμπίεστη ροή απλοποιείται σημαντικά

$$\frac{D\vec{\omega}}{Dt} = \underbrace{(\vec{\omega} \cdot \nabla) \vec{u}}_{\substack{\text{vorticity stretching} \\ \text{due to velocity gradient}}} + \nabla \times \left( \nabla \cdot \vec{\mathfrak{J}} \right)$$

Και για δυσδιάστατη ασυμπίεστη ροή η εξίσωση στροβιλισμού είναι η εξίσωση διάχυσης μεταφοράς.

Σημαντική απλοποίηση των εξισώσεων ροής επιτυγχάνεται όταν αμελήσουμε του όρους ιξώδους. Το σύστημα εξισώσεων παραμένει μη γραμμικό (εξισώσεις Euler) και ως εκ τούτου περικλείει όλη την δυσκολία στην αριθμητική επίλυση όπως και το πλήρες σύστημα εξισώσεων ροής αλλά έχει σημαντικά μικρότερες απαιτήσεις για την αριθμητική του επίλυση.

Οι εξισώσεις οριακού στρώματος είναι μία ακόμα απλουστευμένη μορφή των εξισώσεων ροής και είναι

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} &= 0 \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u^2) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho uv) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho uw) &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho uv) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v^2) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho vw) &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) \end{aligned}$$

Οι εξισώσεις οριακού στρώματος παρ όλη την απλούστευση που παρέχουν απαιτούν καλή διακριτική ικανότητα πλέγματος κοντά στο τοίχωμα και συνεπώς απαιτούν σημαντική υπολογιστική ισχύ. Επειδή δε δεν ισχύουν για αποκολλημένες ροές η χρήση τους σήμερα είναι σχετικά περιορισμένη. Χρησιμοποιήθηκαν όμως στο παρελθόν σημαντικά ειδικά σε συνδυασμό με την potential flow equation που προκύπτει όταν η ροή είναι μη συνεκτική και αστροβιλη  $\vec{\omega} = \nabla \times \vec{u} = 0$  και η

ταχύτητα  $\bar{u} = \nabla \Phi$  δίδεται από την κλίση της συνάρτησης δυναμικού  $\Phi$ . Υπό τις παραπάνω προϋποθέσεις το πεδίο ροής περιγράφεται από μία μόνο εξίσωση

$$\rho_t + \nabla \cdot (\rho \nabla \Phi) = 0$$

Η οποία για δυσδιάστατη ροή είναι

$$(\rho \Phi_x)_x + (\rho \Phi_y)_y = 0$$

και λαμβάνοντας  $\nu \pi'$  όψη ότι  $\rho = \rho_\infty \left[ 1 - 0.5(\gamma-1)M_\infty^2 (1 - (u^2 + v^2)/V_\infty^2) \right]^{1/(\gamma-1)}$  βρίσκουμε την εξίσωση

$$(c^2 - u^2)\Phi_{xx} - 2uv\Phi_{xy} + (c^2 - v^2)\Phi_{yy} = 0$$

Η οποία είναι ελλειπτικού χαρακτήρα για υποηχητική ροή ( $M_\infty < 1$ ) και υπερβολικού χαρακτήρα για υπερηχητική ροή ( $M_\infty > 1$ ).

Η full potential εξίσωση στις δύο διαστάσεις μπορεί επί πλέον να απλοποιηθεί όταν θεωρήσουμε μικρές διαταραχές του δυναμικού  $\Phi = V_\infty x + \varphi$  προερχόμενες από την παρουσία ενός λεπτού αεροδυναμικού σώματος.

$$\begin{aligned} u &= \Phi_x = V_\infty x + \varphi_x \\ v &= \Phi_y = \varphi_y \end{aligned}$$

τότε για δι-ηχητική ροή (transonic flow) το πεδό ροής υπολογίζεται από την παρακάτω εξίσωση

$$\left[ 1 - M_\infty^2 - (\gamma + 1)M_\infty^2 \varphi_x \right] \varphi_{xx} + \varphi_{yy} = 0$$

Ενώ για υποηχητικές και υπερηχητικές ροές η εξίσωση μικρών διαταραχών έχει ακόμη πιο απλή μορφή

$$(1 - M_\infty^2) \varphi_{xx} + \varphi_{yy} = 0$$

Για ροή με πολύ μικρή ταχύτητα  $V_\infty \ll c_\infty$ ,  $M_\infty \ll 1$  η παραπάνω εξίσωση είναι η εξίσωση Laplace,  $\nabla^2 \varphi = \varphi_{xx} + \varphi_{yy} = 0$  που συναντάμε στην ασυμπίεστη ροή

## 1.1 Εισαγωγικά αριθμητικών μεθόδων

Παράλληλα με τις συστηματικές πειραματικές μετρήσεις και ήδη από τις αρχές του προηγούμενου αιώνα έγινε συστηματική προσπάθεια επίλυσης των απλοποιημένων μορφών των εξισώσεων NS, όπως οι εξισώσεις δυναμικού πεδίου και οριακού στρώματος. Η αναλυτική ή ημι-αναλυτική επίλυση αυτών των απλοποιημένων εξισώσεων έδωσε πολύτιμα αποτελέσματα για τον καλύτερο σχεδιασμό και σε πολλές περιπτώσεις η συμφωνία με το πείραμα ήταν πολύ ικανοποιητική. Η εφαρμογή των ημι-αναλυτικών αλλά και των αριθμητικών μεθόδων

για την επίλυση των απλουστευμένων εξισώσεων απαιτεί πολλούς υπολογισμούς που σήμερα βέβαια στους γρήγορους επεξεργαστές που έχουμε στην διάθεση μας μπορούν να εκτελεστούν σε δευτερόλεπτα ακόμα και για τα πιο σύνθετα προβλήματα όπως ροή γύρω από αεροσκάφος που υπολογίζεται με την μέθοδο panels.

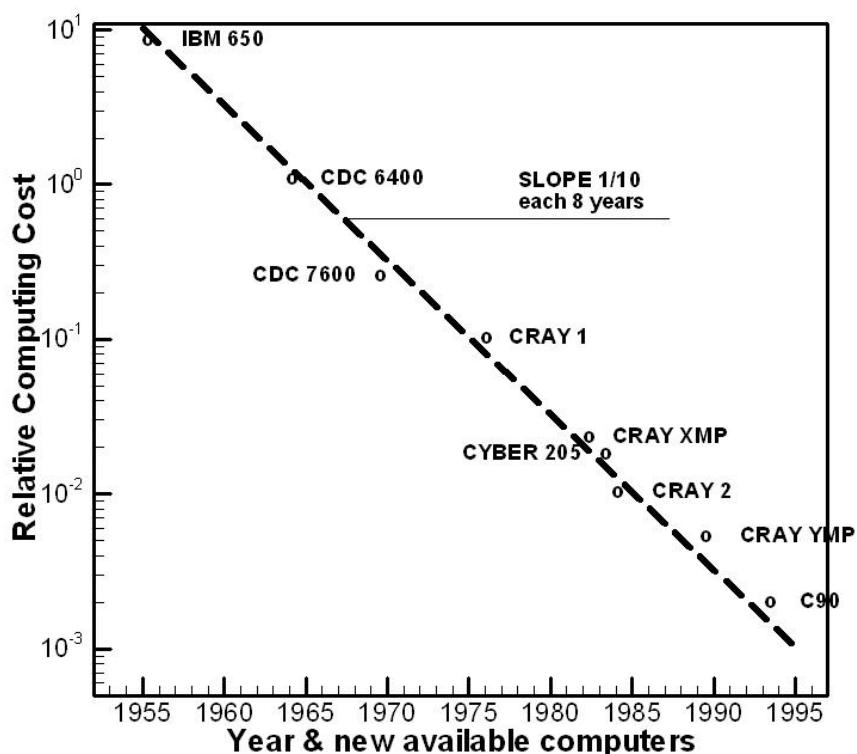
Τα βασικά συστατικά για την αριθμητική επίλυση του ανώτερου βαθμού προσέγγισης των εξισώσεων NS όπως οι εξισώσεις οριακού στρώματος και οι εξισώσεις Euler ήταν γνωστά ήδη πριν τις αρχές του προηγούμενου αιώνα. Η εφαρμογή αριθμητικών μεθόδων ήταν όμως αδύνατη πριν από την εμφάνιση των υπολογιστικών μηχανών. Οι πρώτοι ηλεκτρονικοί υπολογιστές κατασκευάστηκαν την δεκαετία του 1950. Παρ' όλα ταύτα οι πρώτες προσπάθειες για την αριθμητική επίλυση εξισώσεων με μερικές παραγώγους άρχισαν την δεκαετία του 1940 από τον von Neumann. Στα μέσα της δεκαετίας του 50 ο Lax (1954) παρουσίασε για πρώτη φορά μια αριθμητική μέθοδο για τον υπολογισμό συμπιεστών ροών με ασυνέχειες ροής. Τα μεγάλα ποιοτικά άλματα στην μεθοδολογία αριθμητικής επίλυσης των συμπιεστών ροών έγινε όμως από τον Godunov (1959) ο οποίος πρότεινε μια αριθμητική μέθοδο επίλυσης ροών με κρουστικά κύματα (shock waves), που αποτελούν ασυνέχειες ροής. Η μέθοδος Godunov χρησιμοποιεί την λύση του προβλήματος Riemann για να υπολογίσει το διάνυσμα ροής  $\nabla \cdot \vec{F}$  στα σύνορα των κελιών του υπολογιστικού πλέγματος. Την δεκαετία του 70 ο van Leer (1974, 1979) και ο Roe (1980) παρουσίασαν μεθόδους δεύτερης και ανώτερης τάξης ακρίβειας που βασίζονταν στην μέθοδο Godunov.

Στο τέλος της δεκαετίας του 70 υπήρχε για πρώτη φορά διαθέσιμη ικανή υπολογιστική δύναμη αλλά και κατάλληλοι αλγόριθμοι για την επίλυση πρακτικών προβλημάτων ροής. Το 1971 ο Murman και Cole έκαναν μια σημαντική συνεισφορά αριθμητική μηχανική των ρευστών με την παρουσίαση μιας μεθόδου για την επίλυση της εξίσωσης μιαρών διαταραχών συμπιεστής ροής, για διηχητική ροή που είναι μια απλοποιημένη μορφή των εξισώσεων Euler. Το δεύτερο ποιοτικό άλμα που έγινε την δεκαετία του 70 για την θεμελίωση των βασικών αρχών και αλγορίθμων και τεχνικών της υπολογιστικής μηχανικής των ρευστών ήταν η απόδειξη του θεωρήματος ισοδυναμίας από τον Lax (Lax's equivalence theorem) που έδωσε το απαραίτητο θεωρητικό υπόβαθρο για περαιτέρω ανάπτυξη στην δεκαετία του 80.

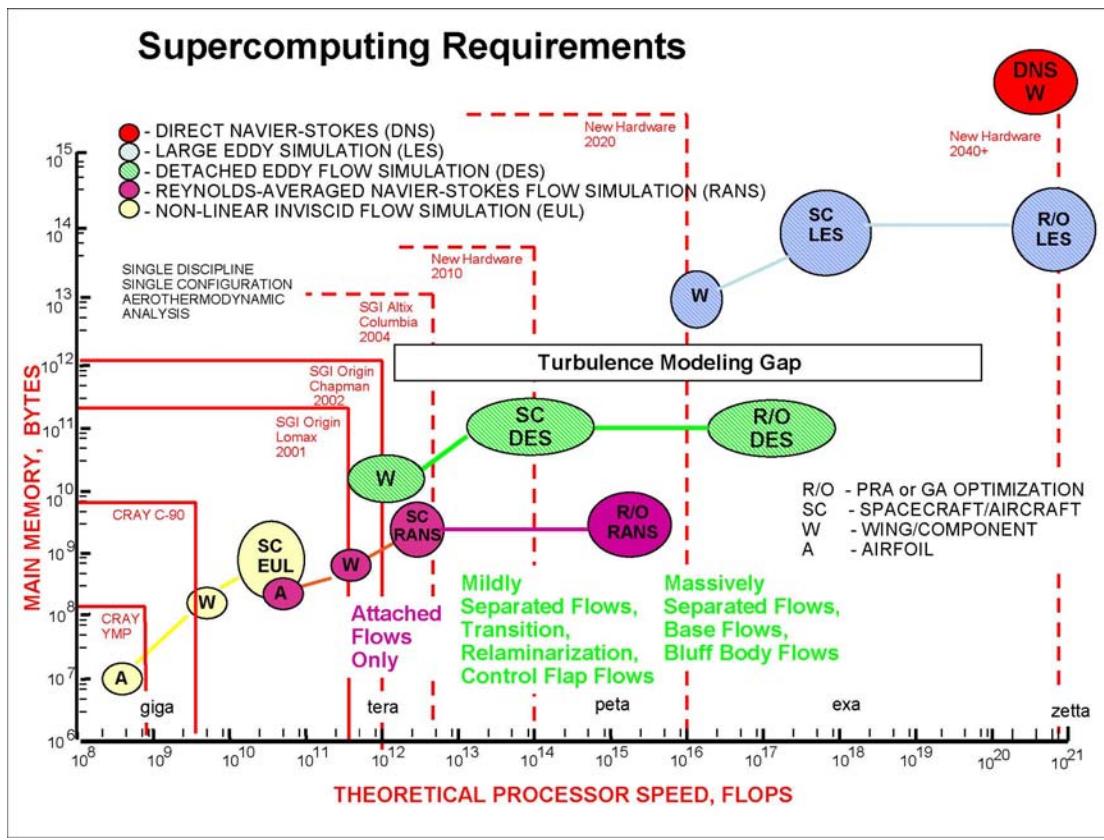
Στην δεκαετία του 80 επιτελέστηκαν πιθανώς οι μεγαλύτερες αλγορίθμικές εξελίξεις στην υπολογιστική μηχανική των ρευστών με τις συνεισφορές των Steger και Warming (flux vector splitting 1979), Harten (T V D schemes, flux limiters, and ENO schemes) και άλλων όπως του Mac Cormack, Osher, Chokravarthy H. C. Yee κλπ. Παράλληλα με τις αλγορίθμικές εξελίξεις η παρουσία των πρώτων υπολογιστών CRAY, που ήταν πιθανώς το ποιοτικό άλμα στην ταχύτητα επεξεργασίας, έγιναν δυνατοί οι πρώτοι υπολογισμοί σε προβλήματα πρακτικού ενδιαφέροντος. Η ύπαρξη μεγάλης υπολογιστικής δυνατότητας κατέστησε δυνατή την απ' ευθείας προσομοίωση τύρβης (DNS) με την αριθμητική επίλυση των ασυμπίεστων εξισώσεων NS. Ο υπολογισμός DMS τύρβης του Kim and Moin αποτέλεσαν την πρώτη έμμεση απόδειξη ότι οι εξισώσεις NS περιγράφουν όλο το εύρος καταστάσεων ροής. Άλλες σημαντικές εξελίξεις στην υπολογιστική μηχανική είναι η εισαγωγή των πολυπλεγματικών μεθόδων (multigrid methods) από τον Fedovenko (1962) και η περεταίρω ανάπτυξη τους από τον Brandt (1972) και η εφαρμογή τους σε πρακτικά προβλήματα από τον Jameson.

Η ανάπτυξη των αλγόριθμων υπολογιστικής μηχανικής είναι ακόμα και σήμερα ένα πεδίο εντατικής έρευνας όπως παραδείγματος χάριν οι μέθοδοι WENO (Osher and Shu) και οι εξελίξεις στην μέθοδο Discontinuous Galerkin (Cockburn and Shu). Η μεγάλη πρόοδος στους αλγόριθμους και τις υπολογιστικές τεχνικές, που

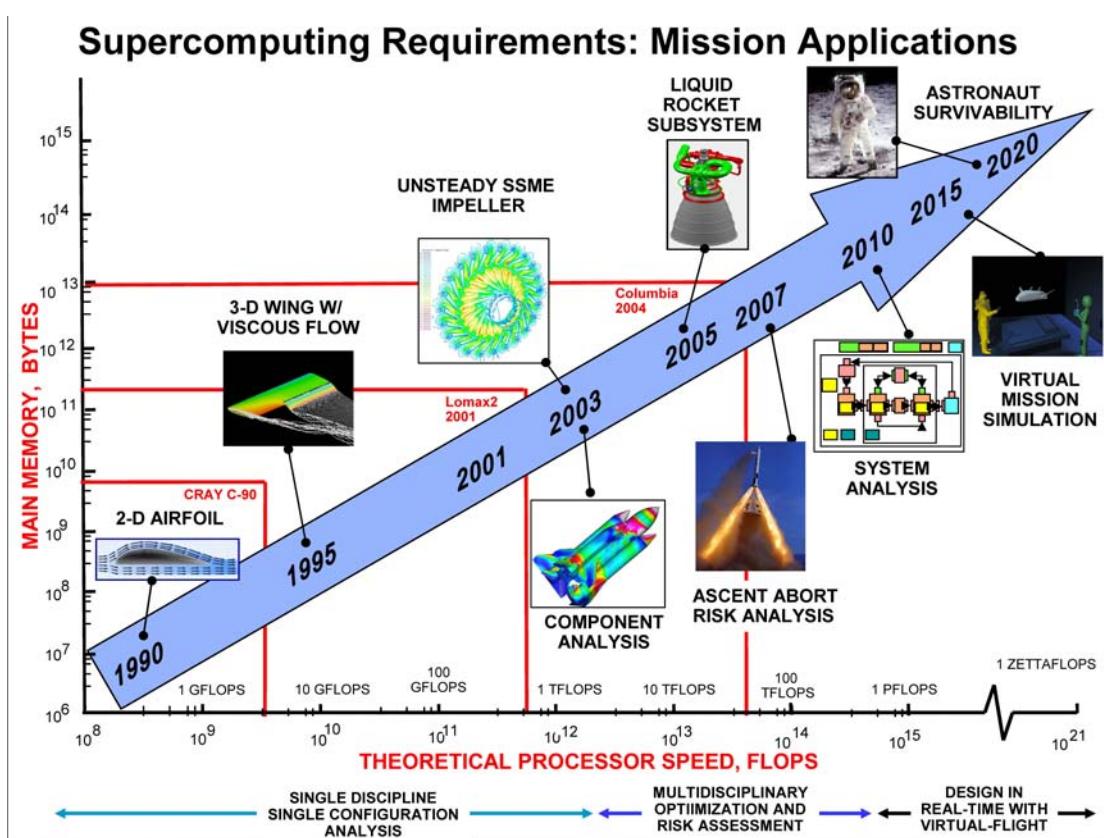
επιτελέστηκε από την παρουσίαση των πρώτων τεχνικών από τον Lax (1954) και Godunov (1959) μαζί με την τεράστια αύξηση της υπολογιστικής ισχύος που επιτελέστηκε τα τελευταία χρόνια έχει καταστήσει σήμερα την υπολογιστική μηχανική ρευστών ένα εργαλείο αποφασιστικής σημασίας στην βιομηχανία. Η μείωση του υπολογιστικού κόστους που επιτεύχθηκε από τα πρώτα βήματα της υπολογιστικής μηχανικής των ρευστών (computational fluid dynamics CFD) δηλαδή το 1955 μέχρι το 1995 που ουσιαστικά το CFD άρχισαν να χρησιμοποιούνται σαν εργαλείο στην βιομηχανία φαίνεται στο Σχ. 1. Είναι φανερό ότι τα τελευταία 50 χρόνια η υπολογιστική ταχύτητα διπλασιάζεται κάθε οκτώ χρόνια. Οι προβλεπόμενες δυνατότητες για τα επόμενα χρόνια φαίνονται στα Σχ. 2 και 3. Δεδομένης λοιπόν της περαιτέρω αύξησης της υπολογιστικής ταχύτητας είναι αναμενόμενο ότι η υπολογιστική μηχανική ρευστών πρόκειται να παίξει ακόμη πιο αποφασιστικό ρόλο στον βιομηχανικό σχεδιασμό και στην επιστημονική έρευνα τις επόμενες δεκαετίες.



Σχήμα 1 Αύξηση της ταχύτητας επεξεργαστών τα τελευταία 40 χρόνια

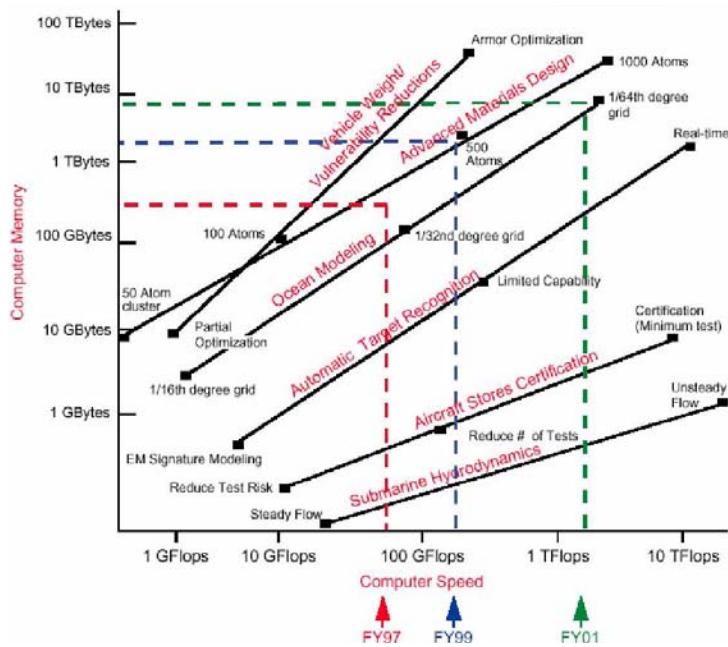


Σχήμα 2. Δυνατότητες αεροδυναμικών υπολογισμών σε σχέση με την θεωρητική ταχύτητα επεξεργασίας και τις απαιτήσεις σε μνήμη.



Σχήμα 3 Απαιτήσεις σε ταχύτητα επεξεργασίας και μνήμη για αεροδυναμικούς υπολογισμούς.

Οι σημερινές δυνατότητες των CFD είναι προσομοίωση ροής γύρω από αεροσκάφος με την χρήση των εξισώσεων Euler ή NS με μοντέλο τύρβης. Η χρήση παράλληλων επεξεργαστών ή δικτύων υπολογιστών στα CFD είναι σήμερα ευρέως διαδεδομένη. Επίσης διαδεδομένη στην βιομηχανία είναι και η χρήση έτοιμων προγραμμάτων CFD όπως το FLUENT, CFD++ και άλλων. Το βασικό πρόβλημα που ακόμα παραμένει άλυτο είναι ο ακριβής υπολογισμός τυρβωδών ροών. Η εφαρμογή DNS για τον υπολογισμό τύρβης σε πρακτικές και βιομηχανικές εφαρμογές δεν προβλέπεται να καταστεί δυνατή την επόμενης 50ετία. Εκείνο που φαίνεται εφικτό να επιτευχθεί τις επόμενες δεκαετίες είναι η δυνατότητα εφαρμογής μεθόδων υπολογισμού τύρβης που βασίζονται σε προσομοίωση μεγάλων δυνών (large eddy simulation LES). Η περεταίρω ανάπτυξη αλγορίθμων CFD σε συνδυασμό με την εφαρμογή LES αναμένεται ότι θα αποτελέσει αντικείμενο έρευνας και επανωρίς τις επόμενες δεκαετίες. Άλλα η ρευστοδυναμική δεν είναι το μέλλον της τεχνικές έχουν μεγάλη εφαρμογή. Στο Σχ. 4 δείχνει μία ιναγκών στη ρευστοδυναμική και άλλους κλάδους



**Σχήμα 4.** Υπολογιστικές απαιτήσεις ρευστομηχανικής σε σχέση με άλλες εφαρμογές

## 2. ΜΕΘΟΔΟΙ ΔΙΑΚΡΙΤΟΠΟΙΗΣΗΣ

Η προσεγγιστική λύση του περίπλοκου, μη γραμμικού συστήματος της διαφορικής μορφής ή ολοκληρωματικής μορφής των εξισώσεων κίνησης επιτυγχάνεται με την εφαρμογή κάποιας μεθόδου διακριτοποίησης που η οποία τις προσεγγίζει σε σε ορισμένα σημεία (finite-difference and spectral) ή σε ορισμένες διακριτικές περιοχές (finite volume and finite element methods). Το πλέγμα σημείων ή χωριών όπου προσεγγίζεται αριθμητικά η λύση ονομάζεται αριθμητικό πλέγμα (grid on mesh) και η κατασκευή του θα μας απασχολήσει σε άλλο κεφάλαιο. Η παραπάνω διαδικασία προσέγγιση είναι γνωστή σαν διακριτοποίηση και η εφαρμογή της μετατρέπει τις διαφορετικές εξισώσεις σε ένα σύστημα γραμμικών ή μη γραμμικών αλγεβρικών εξισώσεων. Τα συστήματα μη γραμμικών εξισώσεων, όπως είναι γνωστό έχουν ιδιαίτερη δυσκολία στην επίλυσή τους, γι' αυτό τον λόγο συνήθως εφαρμόζουμε κάποια τεχνική γραμμικοποίησης με σκοπό την δημιουργία ενός γραμμικού αλγεβρικού συστήματος εξισώσεων που μπορεί να λυθεί με προσεγγιστικές (GMRES) ή με απ' ευθείας μεθόδους (direct methods) όπως LU decomposition. Η διαδικασία της διακριτοποίησης εφαρμόζεται στον χρόνο και στον χώρο και η ακρίβεια των αποτελεσμάτων, όπως ακριβώς και στις πειραματικές μετρήσεις, εξαρτάται κατά μεγάλο βαθμό από την πυκνότητα του πλέγματος διακριτοποίησης και από τις ιδιότητες του αλγορίθμου ή του αριθμητικού σχήματος διακριτοποίησης. Το υπόλογιστικό πλέγμα καλύπτει ένα ορισμένο χώρο και στα όρια του πλέγματος απαιτείται ο καθορισμός οριακών συνθηκών. Σε αντίθεση με τις συνήθεις διαφορικές εξισώσεις, όπου ο αριθμός των οριακών συνθηκών εξαρτάται από την τάξη τους, στα συστήματα εξισώσεων ο προσδιορισμός των οριακών συνθηκών είναι πιο πολύπλοκος και αποτελεί ιδιαίτερο αντικείμενο μελέτης ειδικά στην περίπτωση συμπιεστών ροών. Οι μέθοδοι διακριτοποίησης που αναφέραμε έχουν εφαρμοσθεί σε πολλά λογισμικά που έχουν εμπορικό ή ερευνητικό χαρακτήρα. Ο σκοπός μας δεν είναι να παρουσιάσουμε κάποια από αυτά τα λογισμικά ή να προσπαθήσουμε να εκτιμήσουμε την αξιοπιστία τους ή τα πλεονεκτήματα τους. Εκείνο που θα μας απασχολήσει είναι ο σχεδιασμός και η κατανόηση μεθόδων που θα μας επιτρέψουν να βρούμε ακριβείς αριθμητικές επιλύσεις των εξισώσεων κίνησης με την μεγαλύτερη δυνατή ταχύτητα στους υπόλογισμούς.

Στο υπόλοιπο αυτού του εισαγωγικού κεφαλαίου θα κάνουμε μια σύντομη αναδρομή στις διάφορες μεθόδους διακριτοποίησης και θα αναφερθούμε σε ορισμένους περιορισμούς και ιδιότητες που πρέπει να πληρούν οι αριθμητικές επιλύσεις ώστε να είναι χρήσιμες στην πράξη. Η λεπτομερέστερη παρουσίαση των μεθόδων διακριτοποίησης και ανάλυση τους μαζί με πρακτικές εφαρμογές θα αποτελέσουν το αντικείμενο των επόμενων κεφαλαίων.

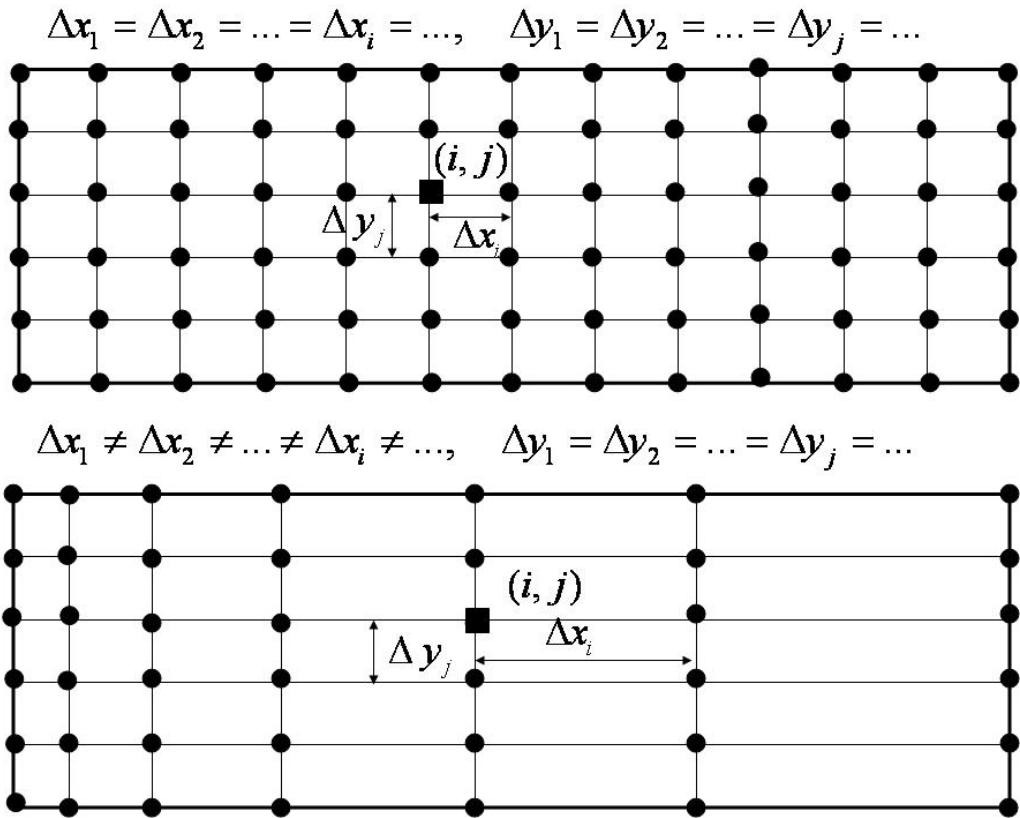
### 2.1 Χωρική διακριτοποίηση

Η διακριτοποίηση στον χώρο γίνεται με την βοήθεια ενός υπόλογιστικού πλέγματος στις δύο ή τρεις διατάσεις. Η κατασκευή του υπόλογιστικού πλέγματος για περίπλοκες γεωμετρίες, όπως θάλαμος καύσης μηχανών εσωτερικής καύσης με βαλβίδες εισαγωγής / εξαγωγής, στροβιλομηχανές κλπ., που συνήθως είναι το αντικείμενο ενδιαφέροντος στην βιομηχανία, δεν είναι απλή υπόθεση. Η κατασκευή των τρισδιάστατων πλεγμάτων γίνεται συνήθως με έτοιμα λογισμικά (grid generation packages). Υποθέτοντας ότι το υπόλογιστικό πλέγμα του χωρίου για το οποίο ενδιαφερόμαστε να υπολογίσουμε την λύση αριθμητικά θα παρουσιάσουμε στα επόμενα εδάφια τις διάφορες μεθόδους διακριτοποίησης.

### 2.1.1 Μέθοδοι πεπερασμένων διαφορών

Η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών είναι η παλαιότερη μέθοδος χωρικής, αλλά όπως θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο και χρονικής διακριτοποίησης. Πιστεύεται ότι χρησιμοποιήθηκε για πρώτη φορά από τον Euler τον 18<sup>ο</sup> αιώνα. Είναι η πλέον αποδοτική (Computationally efficient) και ευκολότερη στην εφαρμογή της για αριθμητικές επιλύσεις σε χωρία με σχετικά απλή γεωμετρία.

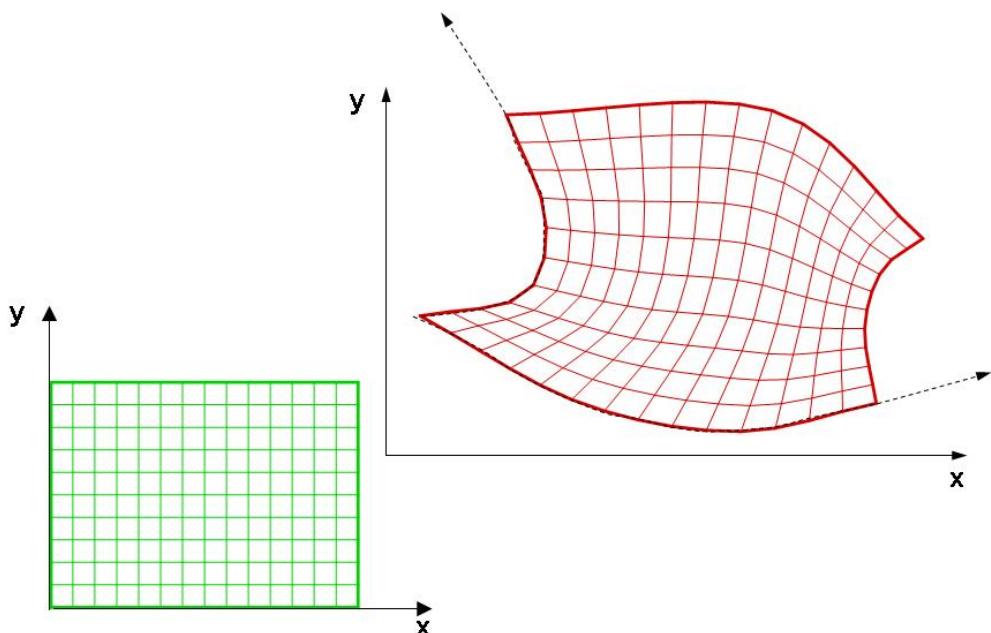
Η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών (ΠΔ) εφαρμόζεται απ' ευθείας στην διαφορική μορφή των εξισώσεων κίνησης που είναι έκφραση των νόμων διατήρησης μάζας, ορμής και ενέργειας. Διακριτοποίηση με την μέθοδο ΠΔ επιτυγχάνεται όταν όλες οι μερικές παράγωγοι προσεγγισθούν με τιμές των μεταβλητών (π.χ. u, v, w, p σε ασυμπίεστη ροή) στους κόμβους του πλέγματος. Η προσέγγιση των παραγώγων επιτυγχάνεται με την χρήση αναπτυγμάτων Taylor ή πολυωνύμων. Η μέθοδος ΠΔ μπορεί να εφαρμοσθεί σε κάθε είδος πλέγματος. Τα πλεονεκτήματα της μεθόδου ΠΔ όμως επιτυγχάνονται μόνο για διακριτοποίησης σε δομημένα πλέγματα. Δομημένα πλέγματα είναι εκείνα στα οποία οι γραμμές του πλέγματος είναι ή μπορεί να θεωρηθούν σαν τοπικές γραμμές συντεταγμένων. Μια ειδική μορφή πλεγμάτων είναι τα Καρτεσιανά (Cartesian) πλέγματα όπου οι γραμμές είναι ορθογώνιες. Η εφαρμογή των μεθόδων ΠΔ σε Cartesian πλέγματα με ισομήκεις διαμερισμούς κατά μήκος των αξόνων x και y, δηλαδή  $\Delta x_i = h_x$ ,  $i = 1, \dots, I_{\max}$ ,  $\Delta y_j = h_y$ ,  $j = 1, \dots, J_{\max}$  (δες Σχ. 2.1) είναι εύκολη. Η εφαρμογή τους σε πλέγματα με ανισομερείς διαμερισμούς (δες Σχ. 2.1b) είναι επίσης εύκολη.

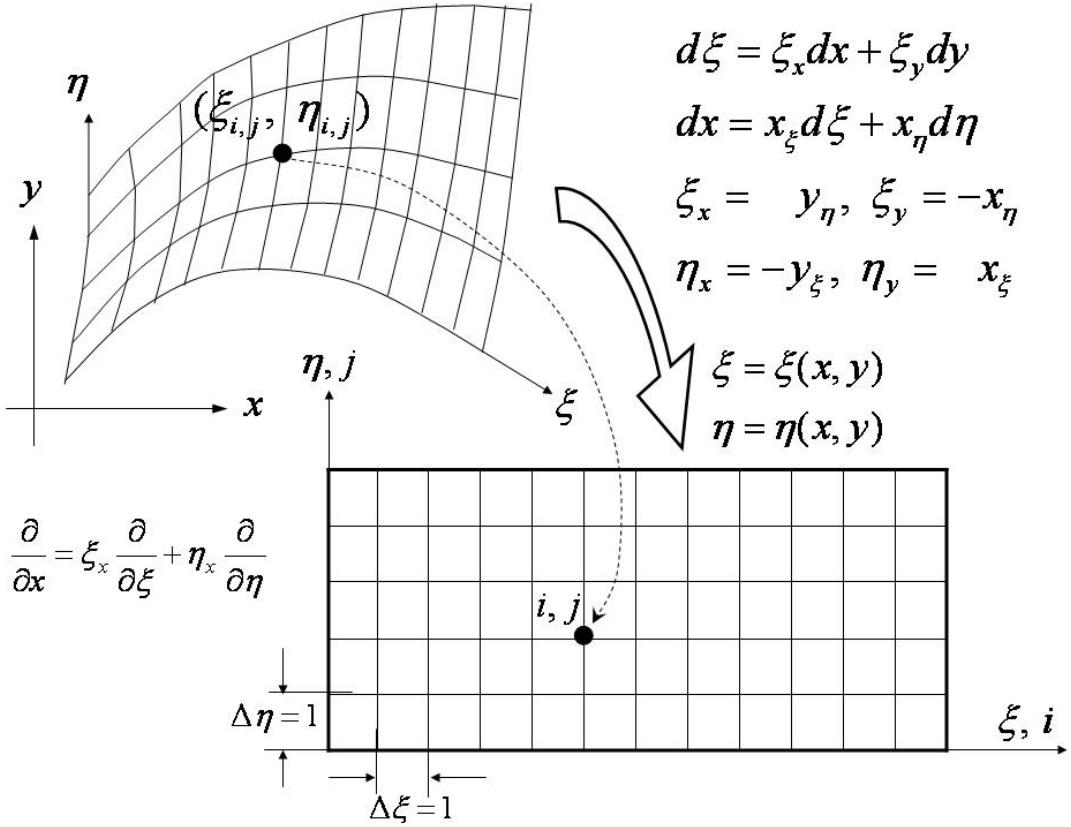


Σχήμα 2.1 Δυσδιάστατο, Καρτεσιανό υπολογιστικό πλέγμα .

Στην πράξη όμως όταν η συνάρτηση κατανομής  $\bar{x} = \bar{x}(x)$  είναι γνωστή τότε είναι πιο βολικό να μετασχηματίσουμε τις παραγώγους στην συντεταγμένη  $\bar{x}$  όπου η κατανομή έχει ισομήκεις διαμερισμούς. Ο μετασχηματισμός γίνεται με τον κανόνα  $\partial / \partial x = (\partial \bar{x} / \partial x) \partial / \partial \bar{x}$  όπου η παράγωγος  $\partial \bar{x} / \partial x$  είναι γεωμετρική παράμετρος και ο υπολογισμός της παραγώγου  $\partial / \partial \bar{x}$  γίνεται σε πλέγμα με ισομήκεις διαμερισμούς. Η εφαρμογή της μεθόδου ΠΔ σε δομημένα πλέγματα της μορφής του Σχ. 2.2 είναι επίσης δυνατή. Στην περίπτωση αυτή πριν να γίνει η προσέγγιση της παραγώγου με ΠΔ πρέπει να γίνει αριθμητικά ο μετασχηματισμός του δομημένου πλέγματος από το καμπύλο σύστημα συντεταγμένων στο Cartesian σύστημα του Σχ. 2.2. Οι μετασχηματισμοί των εξισώσεων σε γενικευμένες συντεταγμένες θα παρουσιασθεί λεπτομερώς στο επόμενο κεφάλαιο.

Η εφαρμογή της μεθόδου ΠΔ είναι σχετικά απλή και αποτελεσματική. Επί πλέον η εφαρμογή σχημάτων ΠΔ με μεγάλη τάξη ακρίβειας είναι επίσης δυνατή. Τα μειονεκτήματα των μεθόδων ΠΔ είναι ότι συντηρητικότητα δεν εξασφαλίζεται πάντοτε και η εφαρμογή σε περίπλοκες γεωμετρίας δεν είναι απλή έστω και με την εφαρμογή μετασχηματισμών γενικευμένων συντεταγμένων





Σχήμα 2.2 Γενικευμένος μετασχηματισμός συντεταγμένων.

Οι γεωμετρικές ποσότητες  $\xi_x, \xi_y, \eta_x, \eta_y$  υπολογίζονται και αποθηκεύονται για κάθε κόμβο  $(i, j)$  του φυσικού χωρίο του πλέγματος με Καρτεσιανές συντεταγμένες  $(x_{i,j}, y_{i,j})$  από τις σχέσεις  $\xi_x = y_\eta$ ,  $\xi_y = -x_\eta$ ,  $\eta_x = -y_\xi$ ,  $\eta_y = x_\xi$  χρησιμοποιώντας κεντρικού τύπου πεπερασμένες διαφορές π.χ.  $\xi_x = y_\eta = (y_{i,j+1} - y_{i,j-1})/2$ . Κατά μήκος των καμπυλόγραμμων συντεταγμένων του υπολογιστικού χωρίου ορίζονται οι ανταλλοιωτές συνιστώσες της ταχύτητας  $U = \xi_x u + \eta_x v$  και  $V = \eta_x u + \eta_y v$ , οι οποίες είναι εφαπτόμενες στις καμπύλες  $\xi$  και  $\eta$ , αντίστοιχα.

### 2.1.2 Φασματικές μέθοδοι (spectral methods)

Οι μέθοδοι ΠΔ προσεγγίζουν τις παραγώγους μιας μεταβλητής  $f(x)$  με την βοήθεια μερικών γειτονικών τιμών της π.χ.  $df(x)/dx \approx [f(x+h) - f(x-h)]/2h$  όπου  $h$  είναι το μικρό μήκος διαμερισμού του χωρίου διακριτοποίησης. Οι μέθοδοι ΠΔ είναι εκ κατασκευής σχεδιασμένες έτσι ώστε να προσεγγίζουν επ' ακριβώς τις μεταβολές της συνάρτησης  $f(x)$  που είναι πολυώνυμα χαμηλής τάξης, για παράδειγμα ΠΔ δεύτερης τάξης υποθέτουν ότι η μεταβολή  $f(x)$  μεταξύ  $x - h$  και  $x + h$  προσεγγίζουν μια παραβολική (πολυώνυμο δεύτερης τάξης) κατανομής. Οι ΠΔ διαφορές έχουν τοπικό χαρακτήρα και προσεγγίζουν την παράγωγο σε ένα κόμβο του πλέγματος χρησιμοποιώντας μικρό αριθμό γειτονικών τιμών της συνάρτησης.

Αντίθετα με τις περασμένες διαφορές οι φασματικές μέθοδοι που επίσης χρησιμοποιούν την διαφορική μορφή των νόμων διατήρησης, έχουν γενικό (global) χαρακτήρα.

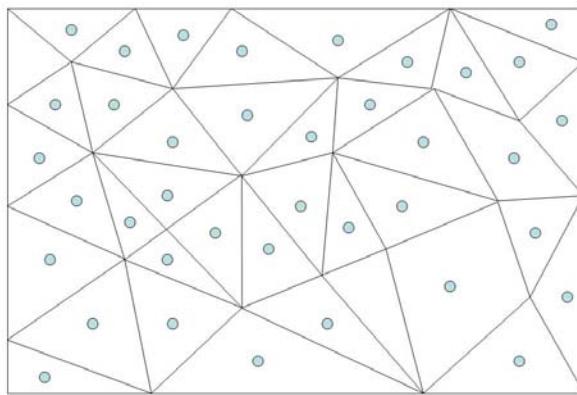
Στις φασματικές μεθόδους η συνάρτηση  $f$  της οποίας επιθυμούμε να υπολογίσουμε την παράγωγο εκφράζεται σαν ένα πεπερασμένο άθροισμα ομαλών συναρτήσεων βάσης (smooth basis functions) ως

$$f(x) = \sum_{k=0}^N A_k \varphi_k(x)$$

όπου  $\varphi_k(x)$  μπορεί να είναι τριγωνομετρικές συναρτήσεις πολυώνυμα Chebyshev ή πολυώνυμα Legendre. Οι παράγωγοι των συναρτήσεων βάσης βρίσκονται αναλυτικά ακριβώς και ο άγνωστος είναι μόνο ο συντελεστής,  $A_k$ , που σε απλές περιπτώσεις προκύπτουν από την λύση ενός γραμμικού συστήματος. Η αριθμητική λύση διαφορικών εξισώσεων με φασματικές μεθόδους έχει τα πλεονεκτήματα ότι το σφάλμα της προσεγγιστικής λύσης είναι πολύ μικρό, η τάξη ακρίβειας της μεθόδου είναι μεγάλη και η σύγκλιση πολύ γρήγορη. Τα κύρια μειονεκτήματα των φασματικών μεθόδων είναι η αδυναμία επίλυσης πολυδιάστατων προβλημάτων σε περίπλοκα χωρία και ότι η συνάρτησης βάσης πρέπει να ικανοποιούν τις οριακές συνθήκες.

Οι φασματικές μέθοδοι παρέχουν καθορισμένη διακριτοποίηση στο χωρίο ενδιαφέροντος και δεν έχουν την δυνατότητα συγκέντρωση «σημείων» σε οποιαδήποτε περιοχή του χωρίου όπως οι άλλες μέθοδοι διακριτοποίησης. Το μεγάλο πλεονέκτημα των φασματικών μεθόδων είναι η μεγάλη ακρίβεια προσέγγισης της λύσης και το εξαιρετικά χαμηλότερο κόστος τους συγκρινόμενο με το κόστος των άλλων μεθόδων διακριτοποίησης. Στο επόμενο κεφάλαιο θα ασχοληθούμε μόνο με την παρουσίαση των πλέον βασικών συστατικών των φασματικών μεθόδων διότι η χρήση τους είναι διαδεδομένη μόνο για την απ' ευθείας προσομοίωση τύρβης σε απλά γεωμετρικά χωρία, όπως το χωρίο που απαιτείται για την προσομοίωση οριακού στρώματος, ή στρώματος διάτμησης (shear layer).

### 2.1.3 Η μέθοδος πεπερασμένων όγκων



Σχήμα 2.3 Δυσδιάστατο, αδόμητο πλέγμα ; ;όπου οι μεταβλητές ορίζονται στα κέντρα βάρους των υπολογιστικών κελιών (τριγώνων και τετραπλεύρων) για αριθμητική την επίλυση με την μέθοδο ΟΕ που είναι τα υπολογιστικά κελιά.

Η μέθοδος πεπερασμένων όγκων ΠΟ χρησιμοποιεί την ολοκλήρωματική μορφή των νόμων διατήρησης (π.χ. η εξίσωση συνέχειας για ασυμπίεστη ροή σε ολοκληρωματική μορφή προκύπτει από την διαφορική μορφή  $\nabla \cdot \vec{u}$  με ολοκλήρωση για το χωρίο  $d\Omega$  και εφαρμογή του θεωρήματος του Gauss και είναι  $\int_s \vec{u} \cdot \vec{n} dS = 0$ ).

Ο χώρος όπου επιθυμούμε να υπολογίζουμε την ροή αριθμητικά διαιρείται σε ένα πεπερασμένο αριθμό όγκων ελέγχου (OE), δες Σχ. 2.3, που δεν υπερκαλύπτουν ο ένας τον άλλο και οι εξισώσεις διατήρησης εφαρμόζονται στην ολοκληρωματική τους μορφή για κάθε OE.

Στο κέντρο κάθε OE υποτίθεται ότι υπάρχει ένας κόμβος όπου θεωρείται ότι βρίσκεται η τιμή της μεταβλητής που πρόκειται να υπολογίσουμε. Εφαρμογή της μεθόδου ΠΟ για ένα τριγωνικό πλέγμα μπορεί να γίνει θεωρώντας την τιμή της ταχύτητας και πίεσης ομοιόμορφα κατανεμημένη σε κάθε τρίγωνο και ίση με την τιμή στο κέντρο βάρους KE. Επίσης είναι δυνατό να θεωρήσουμε ότι η τιμή της μεταβλητής μεταβάλλεται γραμμικά OE και να υπολογίσουμε την τιμή της στις πλευρές του τριγώνου με παρεμβολή γραμμική ή ανώτερης τάξης. Τα επιφανειακά (γραμμικά (line integrals) και χωρικά ολοκληρώματα που εμφανίζονται στους νόμους διατήρησης όπως  $\iint_S \vec{u} \cdot \vec{n} dS$  και  $\int_\Omega \vec{u} d\Omega$  αντίστοιχα υπολογίζονται με

κατάλληλους κανόνες ολοκλήρωσης. Μετά την διακριτοποίηση και αριθμητική ολοκλήρωση προκύπτει ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων για κάθε OE στο οποίο εμφανίζονται και τιμές των μεταβλητών από τους γειτονικούς όγκους.

Η μέθοδος ΠΟ έχει το μεγάλο πλεονέκτημα ότι μπορεί να εφαρμοσθεί σε κάθε στοιχείο διακριτοποίηση τρίγωνο τετράπλευρο πολύγωνο ή πολύεδρο (δηλ. τετράεδρο, πρίσμα, πυραμίδα, εξάεδρο σε τρεις καταστάσεις). Οι OE ορίζονται μόνο τα όρια του ΟΕ και δεν απαιτείται να αναφέρονται σε συγκεκριμένο σύστημα συντεταγμένων. Επίσης η μέθοδος ΠΟ είναι συντηρητική εκ κατασκευής και εύκολη στον προγραμματισμό και την κατανόηση επειδή όλοι οι όροι έχουν φυσικό νόημα. Τα μειονεκτήματα της μεθόδου ΠΟ έναντι της μεθόδου ΠΔ είναι το κάπως υψηλότερο υπολογιστικό κόστος και η δυσκολία ανάπτυξης μεθόδων υψηλής τάξης ακρίβειας. Η μέθοδος ΠΟ θα παρουσιασθεί λεπτομερώς σε επόμενο κεφάλαιο.

#### 2.1.4 Μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων

Η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων χρησιμοποιεί την ασθενή μορφή των νόμων διατήρησης  $\partial_t q + \nabla \cdot F(\vec{q}) = 0$  (Galerkin approach)

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_\Omega q \varphi d\Omega + \int_\Omega (V \cdot F) \varphi d\Omega = 0$$

Στην παραπάνω ολοκληρωματική μορφή η λύση προσεγγίζεται με μια γραμμική ή ανώτερης τάξης μεταβολή των άγνωστων ποσοτήτων που ονομάζεται συνάρτηση μορφής (Shape function). Η συνάρτηση μορφής στις συνήθεις μεθόδους Galerkin πρέπει να εξασφαλίζει συνέχεια της λύσης ανάμεσα στα γειτονικά υπολογιστικά κελιά (elements).

Ο τρόπος κατασκευής των συναρτήσεων βάσης και η επίλυση του συστήματος που προκύπτει από τις αριθμητικές ολοκληρώσεις είναι αντικείμενο ξεχωριστού μαθήματος για την εφαρμογή των πεπερασμένων στοιχείων και δεν θα καλυφθεί στο μάθημα της υπολογιστικής μηχανικής των ρευστών.

## 2.2 Ιδιότητες αριθμητικής λύσης

Η περιληπτική αναφορά που κάναμε στις μεθόδους διακριτοποιήσεις καθιστά φανερό ότι τα αριθμητικά αποτελέσματα είναι πάντα προσεγγίσεις κάποιας τάξης μιας υποτιθέμενης «ακριβούς» λύσης που υπάρχει για την συγκεκριμένη ροής. Επί πλέον όταν το σύστημα εξισώσεων (γραμμικό ή μη γραμμικό) που προκύπτει μετά την διακριτοποίηση είναι μεγάλο απαιτείται να χρησιμοποιήσουμε επαναληπτικές μεθόδους για την επίλυσή του, που δεν δίνουν πάντα την ακριβή λύση του συστήματος. Στο σφάλμα διακριτοποίησης και στα τυχόν σφάλματα που οφείλονται στην επίλυση του συστήματος προστίθεται και το σφάλμα αποκοπής του υπολογιστή που εκτελεί πράξεις με συγκεκριμένο αριθμό ψηφίων.

Η αριθμητική λύση που βρίσκουμε για ένα συγκεκριμένο πρόβλημα ροής πρέπει τελικά να ικανοποιεί ορισμένες απαιτήσεις ακρίβειας. Οι περίπλοκες τυρβώδεις ροές που ενδιαφέρουν στην πράξη δεν έχουν αναλυτικές λύσεις, επί πλέον η μείωση του σφάλματος διακριτοποίησης δεν εγγυάται πάντα την ορθότητα των αριθμητικών αποτελεσμάτων. Ένα επί πλέον πρόβλημα που αντιμετωπίζεται με την χρήση πολύπλοκων αλγορίθμων και λογισμικών είναι το αν ο αλγόριθμος που επιλέξαμε όντως επιλύει τις εξισώσεις κίνησης που ενδιαφερόμαστε. Η απάντηση σ' αυτό το πρόβλημα δίνεται με την διαδικασία επαλήθευσης (verification) που συνίσταται στον έλεγχο του αν το λογισμικό και ο αλγόριθμος που επιλέξαμε (με τα σφάλματα και άλλες προσεγγίσεις που εισάγει όπως γραμμικοποίησεις κλπ.) για την επίλυση των εξισώσεων κίνησης μπορεί να επαληθεύσει ορισμένες «τεχνικές λύσεις». Οι «τεχνιτές λύσεις» (Manufactured solutions) είναι γνωστές συναρτήσεις που αντικαθιστούμε στις εξισώσεις κίνησης (όπως π.χ.  $u = \sin x$ ,

$v = z^2$ ,  $\omega = \bar{e}^{(x^2+y^2)}$ ,  $p = 1+x+y$ ) και οι οποίες γνωρίζουμε ότι δεν είναι ακριβείς λύσεις συνεπώς το αριστερό μέλος δεν μηδενίζεται αλλά αφήνει κάποιο υπόλοιπο. Η αριθμητική λύση με το συγκεκριμένο αλγόριθμο και το λογισμικό πρέπει να επαληθεύουν το ίδιο υπόλοιπο (verification).

Ο δεύτερος πιο ουσιαστικός έλεγχος στον οποίο υποβάλλονται τα αριθμητικά αποτελέσματα είναι η πιστοποίηση της ακρίβειας για συγκεκριμένα προβλήματα με τις οριακές συνθήκες τους (ή τις προσεγγίσεις αυτών που κάνουμε) και το μοντέλο τύρβης που χρησιμοποιούμε. Η πιστοποίηση πραγματοποιείται μέσω σύγκρισης με το πείραμα. Σύγκριση με απλές αναλυτικές λύσεις δεν παρέχουν πλήρη πιστοποίηση της μεθόδου διότι ο αντικειμενικός μας στόχος είναι να χρησιμοποιήσουμε την αριθμητική μέθοδο επίλυσης και το λογισμικό μας για βιομηχανικές εφαρμογές όπου οι ροές είναι περίπλοκες και τυρβώδεις. Το στάδιο αυτό δοκιμασίας της μεθόδου και του λογισμικού ονομάζεται validation. Οι παραπάνω έλεγχοι (verification and validation) πρέπει να γίνονται προσεκτικά για αριθμητικές μεθόδους και λογισμικά που πρόκειται να χρησιμοποιήσουμε. Η πιστοποίηση των αριθμητικών αποτελεσμάτων είναι όμως το τελικό στάδιο αποδοχής της αριθμητικής μεθόδου, ή του αριθμητικού σχήματος. Η εκλογή όμως ρου αριθμητικού σχήματος βασίζεται σε ορισμένες ιδιότητες που πρέπει να ικανοποιεί και που είναι η συνέπεια (consistency),

η ευστάθεια (stability), η σύγκλιση (convergence) και άλλες που θα ορίσουμε στις παρακάτω παραγράφους.

### Συνέπεια

Η διακριτή λύση διαφέρει από την “ακριβή” λύση κατά το σφάλμα αποκοπής. Η διακριτή λύση πρέπει να τείνει προς την “ακριβή” λύση καθώς και το μέγεθος των κελιών διακριτοποίησης τείνει προς το μηδέν. Οι αριθμητικές λύσεις που ικανοποιούν την παραπάνω συνθήκη είναι συνεπείς. Η συνέπεια της αριθμητικής μεθόδου δεν εκπληρείται από μεθόδους διακριτοποίησης όπου το σφάλμα αποκοπής εξαρτάται από τον λόγο  $\Delta x / \Delta t$ . Η συνέπεια της μεθόδου δεν είναι ικανή συνθήκη για την εύρεση ακριβούς λύσης διότι επί πλέον της συνέπειας το αριθμητικό σχήμα πρέπει να είναι ευσταθές.

### Ευστάθεια

Μια μέθοδος αριθμητικής επίλυσης είναι ευσταθής όταν δεν πολλαπλασιάζει το μέγεθος των σφαλμάτων που εισάγονται από την διακριτοποίηση και κατά την διάρκεια της αριθμητικής επίλυσης. Η έννοια της ευστάθειας έχει διαφορετικό νόημα για χρονομετάβλητα και ανεξάρτητα από τον χρόνο προβλήματα. Σε ανεξάρτητα από τον χρόνο προβλήματα, όπου η λύση βρίσκεται με κάποια επαναληπτική διαδικασία, ευστάθης είναι η μέθοδος που δεν αποκλίνει. Σε προβλήματα που εξαρτώνται από τον χρόνο η ευστάθεια της αριθμητικής μεθόδου εγγυάται ότι η μέθοδος δίνει πεπερασμένες λύσεις (bounded solutions). Η ευστάθεια της αριθμητικής μεθόδου είναι μια σημαντική ιδιότητα που πρέπει να μελετήσουμε πριν εφαρμόσουμε και χρησιμοποιήσουμε κάποιο σχήμα διακριτοποίησης. Η πλέον γνωστή μέθοδος μελέτης ευστάθειας αριθμητικού σχήματος είναι η μέθοδος Von Neumann, που ισχύει για γραμμικά προβλήματα, και θα παρουσιασθεί σε επόμενο κεφάλαιο.

### Σύγκλιση

Μια συνεπής και ευσταθής αριθμητική μέθοδος πρέπει να συγκλίνει προς την ακριβή λύση. Την παραπάνω συνθήκη εγγυάται το θεώρημα του Lax (Lax equivalence theorem) που αποδεικνύει ότι «Δεδομένου ενός καλώς ορισμένου (well posed problem) γραμμικού προβλήματος και μιας διακριτοποίησης πεπερασμένων διαφορών σ' αυτό που είναι συνεπής, η ευστάθεια είναι ικανή συνθήκη (sufficient condition) για την σύγκλιση της μεθόδου». Το θεώρημα του Lax ισχύει μόνο για γραμμικά προβλήματα. Η πιστοποίηση της σύγκλισης και της ευστάθειας της μεθόδου σε μη γραμμικά προβλήματα γίνεται σε αριθμητικά πειράματα υπολογίζοντας λύσεις με διαδοχικό μικρότερους διαμερισμούς στον χώρο  $\Delta x$  και στον χρόνο  $\Delta t$ . Οι αριθμητικές λύσεις σε διαδοχικά πυκνότερα πλέγματα μας δίνουν την αληθή τάξη σύγκλισης της μεθόδου και οι λύσεις που υπολογίζονται με αρκετά μικρούς διαμερισμούς διαφέρουν ελάχιστα. Δηλαδή επιτυγχάνεται ανεξάρτητη του μήκους διαμερισμού λύση (grid independent solution).

### Διατήρηση (conservation)

Οι εξισώσεις που επιλύουμε αριθμητικά στην μηχανική ρευστών είναι νόμοι διατήρησης. Συνεπώς η αριθμητική μέθοδος πρέπει να ικανοποιεί αυτούς τους νόμους τοπικά και συνολικά (locally and globally). Η μέθοδος πεπερασμένων όγκων εφαρμοσμένη στην συντηρητική μορφή των νόμων διατήρησης (conservation law

form) εγγυάται ότι, κάθε στοιχειώδη όγκο αλλά και για όλο το χωρίο επίλυσης, το πόσο κάθε διατηρούμενης ποσότητας όπως η μάζα που εισέρχεται ....ίσο με αυτό που εξέρχεται. Δηλαδή οι διακριτοποιημένες με την μέθοδο πεπερασμένων όγκων εξισώσεις ικανοποιούν εκ ταυτότητος τους νόμους διατήρησης. Άλλες μέθοδοι διακριτοποίησης δεν ικανοποιούν πάντα τους νόμους διατήρησης. Εφαρμογή μεθόδων που είναι μη συντηρητικές μπορεί να οδηγήσει στην δημιουργία πηγών (μάζας ορμής κ λ π). Τα σφάλματα αυτά όμως είναι σημαντικά όταν το μήκος διαμερισμού είναι σχετικά μεγάλο. Η αριθμητική λύση με μη συντηρητικά σχήματα, τα οποία είναι συνεπή και ευσταθή, σε πυκνούς διαμερισμούς δεν παρουσιάζουν τούτο το πρόβλημα στην ίδια έκταση και στο όριο του πολύ μικρού μήκους διαμερισμού επιτυγχάνεται η διατήρηση. Είναι όμως προφανές ότι οι μέθοδοι διακριτοπίησης που εξασφαλίζουν την διατήρηση πρέπει να προτιμώνται στην αριθμητική μηχανική ρευστών.

### **Οριακή σύγκλιση (boundedness)**

Οι ποσότητες που υπολογίζονται από την αριθμητική λύση πρέπει να βρίσκονται ενός ορισμένων ορίων και να ικανοποιούν ορισμένους φυσικούς περιορισμούς όπως θετική πυκνότητα, πίεση, ενέργεια κ λ π. Η ιδιότητα της οριακής σύγκλισης δεν είναι εύκολο να μελετηθεί εκ των προτέρων. Επί πλέον οι τιμές ποσοτήτων που βασίζονται σε μοντέλα, όπως τα μοντέλα τύρβης, πρέπει να βρίσκονται εντός φυσικών ορίων. Το πρόβλημα όμως αυτό δεν εξαρτάται από το αριθμητικό σχήμα μόνο αλλά πολλές φορές οφείλεται μόνο στο μοντέλο.

### **Ακρίβεια μεθόδου**

Η αριθμητική λύση των εξισώσεων κίνησης με κάποια μέθοδο<sup>9</sup> που είναι συνεπής, ευσταθής, και συντηρητική είναι μόνο μια προσεγγιστική λύση πεδίου ροής που θα μετρηθεί πειραματικά. Η αριθμητική λύση εκτός από τα σφάλματα και τις προσεγγίσεις (π.χ. γραμμικοποίηση) που εισάγει ο αλγόριθμος, οι αριθμητικές οριακές συνθήκες, αλλά ακόμα και λάθη στον προγραμματισμό περιέχει τα παρακάτω συστηματικά σφάλματα.

- Σφάλματα διακριτοποίησης που εξαρτώνται από το σφάλμα αποκοπής της μεθόδου και μειώνονται με την ελάττωση του μήκους διαμερισμού.
- Σφάλματα επανάληψης που υπάρχουν όταν χρησιμοποιούνται επαναληπτικές μέθοδοι για την λύση αλγεβρικών γραμμικών συστημάτων εξισώσεων.
- Σφάλματα μοντελοποίησης που μπορεί να οφείλονται σε απλοποίηση της γεωμετρίας (ακόμη και απλής όπως ο κύλινδρος που προσεγγίζεται συνήθως από υπολογιστικά στοιχεία με ευθείς πλευρές) αλλά και μοντέλων τύρβης κλπ.

Το σφάλμα διακριτοποίησης έχει συνήθως δυο διαφορετικές συνιστώσες το σφάλμα διασποράς (dispersion error) και το σφάλμα διάχυσης (dissipation error). Το σφάλμα διάχυσης της μεθόδου προκαλεί μείωση του εύρους της τιμής που υπολογίζουμε με την διακριτική μέθοδο από την ακριβή τιμή. Παραδείγματος χάριν η παράγωγος που υπολογίζουμε με πεπερασμένες διαφορές που δεν είναι κεντρικές διαφέρει από την πραγματική τιμή κατά ένα ποσό που εξαρτάται από το ποσό είναι μετατοπισμένο το εύρος των σημείων από το σημείο υπολογισμού. Το σφάλμα διασποράς υπάρχει σε όλα τα σχήματα διακριτοποίησης και προκαλεί μετατόπιση της κατανομής της συνάρτησης από την αληθή τιμή. Ο συνδυασμός της διασποράς και διάχυσης είναι η απόσβεση (diffusion = dissipation + dispersion). Οι ιδιότητες αυτές διακριτοποίησης καθώς και οι άλλες ιδιότητες διακριτοποίησης όπως ευστάθεια κλπ. θα παρουσιαστούν πιο αναλυτικά στα παρακάτω κεφάλαια.

### 3. Βασικές μορφές εξισώσεων

Η κίνηση των ρευστών, όπως και πολλά άλλα φυσικά φαινόμενα (μεταφορά θερμότητας, ηλεκτρομαγνητικό πεδίο κλπ.), περιγράφονται πολύ αξιόπιστα από διαφορικές εξισώσεις με μερικές παραγώγους. Η κατανόηση του χαρακτήρα και της συμπεριφοράς των εξισώσεων αυτών είναι απαραίτητη προϋπόθεση για την κατάστρωση ενός αριθμητικού σχήματος που προσεγγιστικά την λύση του σε διακριτά χωρία ή σημεία.

Πριν λοιπόν παρουσιάσουμε τις μεθόδους διακριτοποίησης και τα αριθμητικά σχήματα που πρέπει να εφαρμόσουμε για την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων κίνησης ρευστών θα ασχοληθούμε με την μελέτη της συμπεριφοράς ορισμένων χαρακτηριστικών τύπων εξισώσεων με μερικές παραγώγους. Οι εξισώσεις κίνησης είναι μη γραμμικές και η συμπεριφορά τους είναι περίπλοκος συνδυασμός των χαρακτηριστικών τύπων εξισώσεων με μερικές παραγώγους που θα μελετήσουμε σ' αυτό το κεφάλαιο. Οι κυρίες ιδιότητες τους θα δειχθούν με κλασσικά παραδείγματα. Οι βασικές τύποι εξισώσεων θα διακριτοποιηθούν με μεθόδους που αναφέραμε (πεπερασμένες διαφορές, πεπερασμένους όγκους κλπ.) σε επόμενα κεφάλαια.

#### 3.1 Φυσική κατάταξη διαφορικών με μερικές παραγώγους

##### Προβλήματα ισορροπίας (equilibrium problems)

Προβλήματα ισορροπίας περιγράφονται αποκλίσεις διάφορες με μερικές παραγώγους ( $\Delta M \Pi$ ) που υπόκεινται σε προκαθορισμένες οριακές συνθήκες και κλειστό χωρίο επίλυσης. Τα προβλήματα ισορροπίας είναι προβλήματα οριακών τιμών. Κλασικά παραδείγματα προβλημάτων ισορροπίας είναι η κατανομή θερμοκρασίας σε στερεό σώμα με καθορισμένη θερμοκρασία στο σύνορο του, το στατικό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο και η κατανομή τάσης ή παραμόρφωσης σε στερεό με καθορισμένη φόρτιση. Όπως θα δούμε παρακάτω τα προβλήματα ισορροπίας περιγράφονται από ορισμένο τύπο  $\Delta M \Pi$  που ονομάζονται ελλειπτικές.

Η κατανομή θερμοκρασίας σε στερεό του οποίου τα όρια διατηρούνται σε σταθερή θερμοκρασία βρίσκεται από την λύση της εξίσωσης Laplace,  $\nabla^2 T = 0$ , στο χωρίο που περικλείει το σώμα δηλαδή

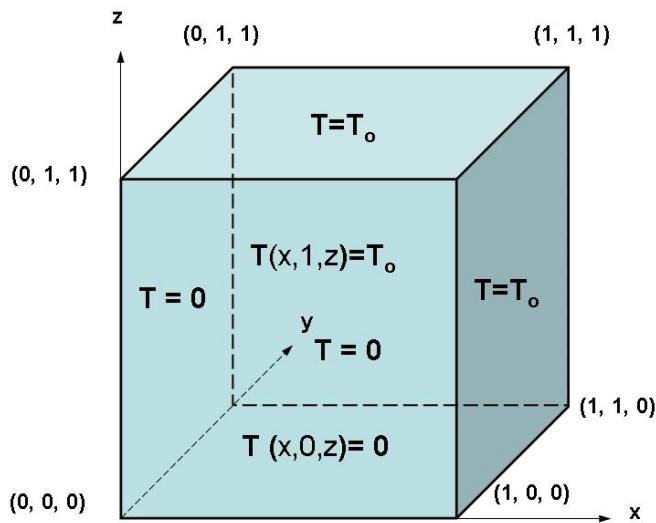
$$\nabla^2 T = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0 \quad \begin{cases} 0 \leq x \leq 1 \\ 0 \leq y \leq 1 \\ 0 \leq z \leq 1 \end{cases}$$

με οριακές συνθήκες τις γνωστές κατανομές θερμοκρασίας

$$T(o, y, z) = 0 \quad T(x, o, z) = 0 \quad T(x, y, o) = 0$$

$$T(1, y, z) = T_o \quad T(x, 1, z) = T_o \quad T(y, z, 1) = T_o$$

Το Σχ. 3.1 αναπαριστά γραφικά το πρόβλημα που περιγράψαμε.

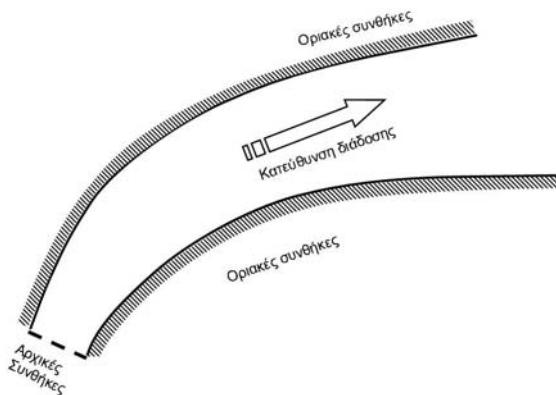


Σχήμα 3.1 Οριακές συνθήκες προβλήματος οριακών τιμών

### Προβλήματα διάδοσης (propagation problems)

Τα προβλήματα διάδοσης περιγράφονται από ΔΜΠ που ισχύουν για ανοιχτά χωρία και υπόκεινται σε αρχικές και οριακές συνθήκες. Η γραφική αναπαράσταση του Σχ. 3.2 δείχνει το χωρίο με τις οριακές συνθήκες σε πρόβλημα διάδοσης. Η αριθμητική επίλυση των προβλημάτων διάδοσης βρίσκεται προωθώντας προς την κατεύθυνση διάδοσης την επιφάνεια αρχικών συνθηκών ενώ συγχρόνως ικανοποιούνται οι οριακές συνθήκες. Τα προβλήματα διάδοσης περιγράφονται από εξισώσεις υπερβολικού ή παραβολικού τύπου όπως θα αναφέρουμε παρακάτω.

Κλασσικά παραδείγματα διάδοσης είναι η διάδοση κυμάτων (wave equation  $\partial^2 u / \partial t^2 = c^2 \nabla^2 u$ ). Τα φαινόμενα που περιγράφονται από την εξίσωση θερμότητας και κύματος είναι τελείως διαφορετικά παρ' όλο ότι και οι δυο είναι εξισώσεις διάδοσης. Σαν αποτέλεσμα οι αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης τους διαφέρουν σημαντικά. Οι εξισώσεις οριακού στρώματος είναι κλασσικά παραδείγματα εξίσωσης διάδοσης με χαρακτήρα παρόμοιο με την εξίσωση θερμότητας.



Σχήμα 3.1 Πρόβλημα διάδοσης

### 3.2 Μαθηματική κατάταξη

Η μαθηματική κατάταξη των ΔΜΠ βασίζεται στην έννοια των χαρακτηριστικών, που είναι ήδη γνωστή από την θεωρία της συμπιεστής ροής. Οι χαρακτηριστικές είναι γραμμές στις δύο διαστάσεις και επιφάνειες στις τρεις διαστάσεις, κατά μήκος των οπίων ορισμένες ποσότητες παραμένουν σταθερές. Οι χαρακτηριστικές σχετίζονται με τις κατευθύνσεις κατά μήκος των οποίων μεταδίδεται κάποια πληροφορία που περιγράφεται από τις ΔΜΠ.

Η μαθηματική κατάταξη γίνεται με την βοήθεια της παρακάτω ΔΜΠ δεύτερης τάξης.

$$A\varphi_{xx} + B\varphi_{xy} + C\varphi_{yy} + D\phi_x + E\phi_y + F\phi = G(x, y) \quad (3.1)$$

όπου  $A, B, C, D, E$  και  $F$  είναι συναρτήσεις των ανεξάρτητων μεταβλητών  $x, y$ . Η Εξ. 3.1 είναι γραμμική, αλλά η διαδικασία που θα παρουσιάσουμε παρακάτω είναι παρόμοια ακόμη και όταν  $A, B, C$  κλπ. είναι συναρτήσεις των  $\varphi, \varphi_x$  και  $\varphi_y$ .

Η κατάταξη μιας ΔΜΠ της μορφής (3.1) γίνεται όταν αυτή γραφεί στην μορφή.

$$A\varphi_{xx} + B\varphi_{xy} + C\varphi_{yy} = H(x, y, \varphi_x, \varphi_y, \varphi) \quad (3.2)$$

δηλαδή η κατάταξη εξαρτάται μόνο από τις δεύτερης τάξης παραγώγους και η εξίσωση (3.1) κατατάσσεται ως

$$B^2 - 4AC \begin{cases} > 0 & \text{Υπερβολική} \\ = 0 & \text{Παραβολική} \\ < 0 & \text{Ελλειπτική} \end{cases}$$

Η συστηματική διαδικασία που οδηγεί στην παραπάνω κατάταξη και δείχνει ταυτόχρονα την σημασία των χαρακτηριστικών είναι ο ακόλουθος. Θεωρούμε μια παράμετρο  $S$ , που περιγράφει την καμπύλη  $\Gamma$  στο χωρίο ορισμού της ΔΜΠ. Δηλαδή πάνω στην καμπύλη  $\Gamma$ ,  $x = x(s)$ ,  $y = y(s)$  και επάνω στην καμπύλη  $\Gamma$ .

$$\begin{aligned} \varphi_{xx} &= \xi(s) \\ \varphi_x &= p(s) & \varphi_{xy} &= \eta(s) \\ \varphi_y &= q(s) & \varphi_{yy} &= \zeta(s) \end{aligned} \quad (3.3)$$

οπότε η Εξ. (3.2) γράφεται

$$A\xi(s) + B\eta(s) + Cq(s) = H \quad (3.4)$$

και χρησιμοποιώντας τις παραμετρικές μορφές βρίσκουμε

$$\frac{dp}{ds} = \xi \frac{dx}{ds} + \eta \frac{dy}{ds} \quad (3.4)$$

$$\frac{dq}{ds} = \eta \frac{dx}{ds} + \zeta \frac{dy}{ds} \quad (3.5)$$

Δηλαδή οι παράγωγοι δεύτερης τάξης πάνω στην καμπύλη  $\Gamma$  βρίσκονται από την λύση του παρακάτω συστήματος ΔΜΠ.

$$\begin{bmatrix} A & B & C \\ \frac{dx}{ds} & \frac{dy}{ds} & 0 \\ 0 & \frac{dx}{ds} & \frac{dy}{ds} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi \\ \eta \\ \zeta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} H \\ \frac{dp}{ds} \\ \frac{dq}{ds} \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

Οι παράγωγοι δεύτερης τάξης δεν έχουν μονοσήμαντο ορισμό κατά μήκος της καμπύλης  $\Gamma$  για δεδομένες τιμές της συνάρτησης  $\varphi$  και των παραγώγων όταν η διακρίνουσα του μητρώου των συντελεστών είναι μηδέν δηλαδή όταν

$$A\left(\frac{dy}{ds}\right)^2 - B\left(\frac{dx}{ds}\right)\left(\frac{dy}{ds}\right) + C\left(\frac{dx}{ds}\right)^2 = 0$$

ή

$$A(dy)^2 - B dx dy + C(dx)^2 = 0$$

ή

$$Ah^2(dx)^2 - Bh(dx)^2 + C(dx)^2 = 0$$

$$h = dy/dx$$

ή όταν

$$Ah^2 - Bh + C = 0 \quad (3.7)$$

Οι καμπύλες  $\Gamma(s)$  η  $y = y(x)$  πάνω στις οποίες ικανοποιείται ή παραπάνω εξίσωση είναι οι χαρακτηριστικές τις ΔΜΠ. Οι χαρακτηριστικές ικανοποιούν

$$h = \frac{dy}{dx} = \frac{B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A} \quad (3.8)$$

κατά μήκος αυτών των καμπύλων  $y = y(x)$  οι δεύτερης τάξης παράγωγοι δεν ορίζονται. Είναι φανερό ότι ο τύπος της ΔΜΠ εξαρτάται από το πρόσημο της διακρίνουσας όπως αναφέρθηκε προηγουμένως.

### Υπερβολικές εξισώσεις

Όταν η διακρίνουσα της εξίσωσης χαρακτηριστικών είναι θετική έχουμε δυο διαφορετικές οικογένειες χαρακτηριστικών και η εξίσωση (3.1) είναι υπερβολικού τύπου. Οι δυο χαρακτηριστικές είναι

$$\frac{dy}{dx} = \lambda_1 \quad \text{και} \quad \frac{dy}{dx} = \lambda_2 \quad (3.9)$$

οι παραπάνω είναι συνήθεις διαφορικές με λύση

$$y = \lambda_1 x + k_1 \quad \text{και} \quad y = \lambda_2 x + k_2 \quad (3.10)$$

Ένα κλασσικό παράδειγμα υπερβολικού τύπου ΔΜΠ είναι η εξίσωση κύματος

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ u_{tt} &= a^2 u_{xx} \end{aligned} \quad (3.11)$$

όπου  $a$  είναι η ταχύτητα διάδοσης του κύματος και η Εξ. (3.11) είναι ορισμένη στο χωρίο,  $-\infty < x < \infty$ , με αρχικές συνθήκες  $u(x, 0) = f(x)$ ,  $u_t(x, 0) = g(x)$ . Η εξ. (3.11) έχει σταθερούς συντελεστές  $a^2 u_{xx} - u_{tt} = 0$  και  $dx/dt = \pm a$ . Δηλαδή οι χαρακτηριστικές γραμμές είναι  $\xi = x + at$  και  $\eta = x - at$ . Οι ευθείες  $\xi$ ,  $\eta$  μπορούν να θεωρηθούν σαν μετασχηματισμένες συντεταγμένες όπου η Εξ. (3.11) γράφεται ως  $u_{\xi\eta} = 0$ .

Οι χαρακτηριστικές που περνούν από το σημείο  $(x_o, y_o)$  στον χώρο ορισμού  $(x, t)$  της Εξ. (3.1) είναι  $x + at$  και  $x - at$  που φαίνονται στο Σχ. 3.3. Η χαρακτηριστική με κλίση  $1/a$  είναι η προς τα δεξιά κατευθυνόμενη και προς τα αριστερά κατευθυνόμενη έχει κλίση  $-1/a$ . Η λύση στο σημείο  $x_o, t_o$  εξαρτάται μόνο από αρχικές συνθήκες στο διάστημα  $x_o - at_o \leq x \leq x_o + at_o$ .

Η λύση της Εξ. (3.11) με αρχικές συνθήκες  $u(x, 0) = f(x)$  και  $u_t(x, 0) = g(x)$  είναι της μορφής.

$$u(x, t) = \frac{f(x + at) + f(x - at)}{2} + \frac{1}{2a} \int_{x - at}^{x + at} g(\tau) d\tau \quad (3.12)$$

όπου ο πρώτος όρος αντιστοιχεί σε διάδοση των αρχικών συνθηκών κατά μήκος των χαρακτηριστικών ενώ ο δεύτερος όρος δείχνει πως επηρεάζουν την λύση στο

$(x_o, t_o)$  οι αρχικές συνθήκες στον χρόνο  $t = 0$  που βρίσκονται στο διάστημα  $x_o + at \leq x \leq x_o + at_o$ .

Η βασική ιδιότητα των υπερβολικών εξισώσεων είναι ο περιορισμένος χώρος εξάρτησης όπως φαίνεται και στο παραπάνω παράδειγμα. Η οποιαδήποτε διαταραχή που δεν βρίσκεται στον χώρο εξάρτησης δεν επηρεάζει την λύση στο σημείο  $(x_o, t_o)$ . Οι εξισώσεις ροής για συμπιεστό ρευστό και μη ιξώδη ροή (εξισώσεις Euler) είναι υπερβολικού τύπου. Οι εξισώσεις Euler σε πρωτογενείς (μη-συντηρητικές) μεταβλητές για μονοδιάστατη ροή είναι

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{Bmatrix} \rho \\ u \\ p \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} u & \rho & 0 \\ 0 & u & 1/\rho \\ 0 & \gamma p & u \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \begin{Bmatrix} \rho \\ u \\ p \end{Bmatrix} = 0$$

$$\mathbf{U}_t + A\mathbf{U}_x = 0$$

Οι ιδιοτιμές του μητρώου  $A$  είναι πραγματικές  $\lambda_1 = u$ ,  $\lambda_2 = u - c$ ,  $\lambda_3 = u + c$  όπου  $c$  είναι η ταχύτητα του ήχου  $c = \sqrt{\gamma RT} = \sqrt{\gamma p / \rho}$  και το μητρώο  $A$  μπορεί να διαγωνιοποιηθεί όπου  $R(\mathbf{U})$  είναι το μητρώο με στήλες τα εκ δεξιών ιδιοδιανύσματα,  $\Lambda$  είναι το διαγώνιο μητρώο ιδιοτιμών, και  $(R^{-1})_{ij} = \ell_{ij}$  είναι το αντίστροφο του  $R$ .

Οι εξισώσεις Euler γράφονται ως

$$\sum_{k=1}^3 \ell_{ik} (U_k)_t + \lambda_i \sum_{k=1}^3 \ell_{ik} (U_k)_x = 0 \quad \text{ή} \quad (\delta w_i)_t + \lambda_i (\delta w_i)_x = 0$$

Και όπως θα δείξουμε η ποσότητες  $R_i$  (Riemann invariants),  $R_1 = s = p / \rho^\gamma$ ,  $R_2 = u + 2c / (\gamma - 1)$ , και  $R_3 = u + 2c / (\gamma - 1)$  διατηρούνται σταθερές κατά μήκος των χαρακτηριστικών καμπύλων, δηλαδή

$$\frac{dx}{dt} = \lambda_i$$

## Παραβολικές εξισώσεις

Παραβολικού τύπου ΔΜΠ είναι εκείνες που η διακρίνουσα είναι μηδέν και υπάρχει μόνο μια χαρακτηριστική που είναι

$$\frac{dy}{dx} = \frac{b}{2a} \tag{3.13}$$

Κλασσικό παράδειγμα ΔΜΠ παραβολικού τύπου είναι η εξίσωση μεταφοράς θερμότητας.

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ u_t &= \kappa u_{xx} \end{aligned} \tag{3.14}$$

που υπόκεινται σε οριακές συνθήκες  $u(0, x) = 0$ ,  $u(t, 0) = t$ ,  $u(t, \infty) = 0$ .

Με χρήση της μεταβλητής  $\eta = \frac{x}{2\sqrt{kt}}$  η Εξ. (3.14) μετασχηματίζεται σε μη συνήθη διαφορική  $f'' + 2\eta f' = 0$  και η γενική λύση είναι

$$u(x,t) = U \{1 - erf(\eta)\} \quad (3.15)$$

$$erf(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\eta} e^{-\eta^2} d\eta$$

Η παραπάνω λύση δείχνει ότι διάδοση της θερμοκρασίας στον χρόνο εξαρτάται από τον συντελεστή αγωγιμότητας κ. Παραβολικού τύπου εξισώσεις στην μηχανική ρευστών είναι οι εξισώσεις του οριακού στρώματος.

### Ελλειπτικές εξισώσεις

Οι ελλειπτικές εξισώσεις έχουν μιγαδικές χαρακτηριστικές. Τυπικό παράδειγμα ελλειπτικής ΔΜΠ είναι η εξίσωση Laplace που έχει χαρακτηριστικό γνώρισμα ότι η λύση της εξαρτάται μόνο από τις οριακές συνθήκες στα όρια του χωρίου και η "ταχύτητα απόδοσης" δεν ορίζεται διότι το αποτέλεσμα των οριακών συνθηκών γίνεται απ' ευθείας αισθητό σε όλο τον χώρο αναφοράς.

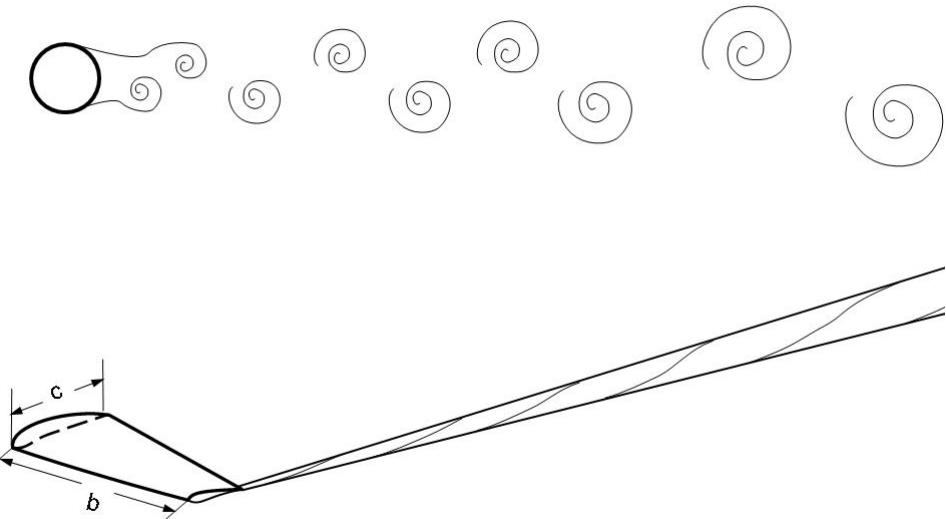
Το σύστημα εξισώσεων που διέπει την κίνηση ασυμπίεστου ρευστού είναι μικτού τύπου και αναφέρεται στην βιβλιογραφία σαν incomplete parabolic. Εχει όμως ισχυρό ελλειπτικό χαρακτήρα που επιβάλλεται από την εξίσωση συνέχειας και από τον όρο  $1/\text{Re} \nabla^2 \vec{u}$  των εξισώσεων  $N - S$ .

### 3.3 Οριακές συνθήκες

Η μορφή των εξισώσεων καθορίζει και τις οριακές συνθήκες. Οι ελλειπτικού τύπου διαφορικές εξισώσεις απαιτούν να προσδιορίσουμε οριακές συνθήκες σε όλο το τα όρια του πεδίου ορισμού, για να προσδιορίσουμε την κατανομή θερμοκρασίας παραδείγματος χάριν πρέπει πρώτα να καθορίσουμε την θερμοκρασία ή την ροή θερμότητας σε όλα όρια. Ο καθορισμός των οριακών συνθηκών ή συνοριακών συνθηκών για τα προβλήματα ασυμπίεστης ή συμπιεστής ροής είναι πιο περίπλοκος.

Ανεξάρτητα από την μέθοδο διακριτοίσης και την μορφή του υπολογιστικού πλέγματος είναι κατανοητό ότι το υπολογιστικό χωρίο δεν είναι δυνατόν να επεκτείνεται σε πολύ μεγάλες αποστάσεις από την περιοχή ενδιαφέροντος έτσι ώστε να είναι δυνατόν να καθορίσουμε στα όρια συνθήκες όπου η ροή δεν έχει διαταραχές. Παραδείγματος χάριν για τον υπολογισμό της ροής γύρω από ένα κύλινδρο γνωρίζουμε ότι δημιουργείται ένα απόρευμα με στροβιλισμούς (von Karmann vortex street δες Σχ. 2.4).

Οι στροβιλισμοί του απορεύματος εξασθενούν όσο απομακρυνόμαστε από τον κύλινδρο λόγω της ιξώδους διάχυσης. Άλλα όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε και από πειράματα οι στροβιλισμοί του απορεύματος είναι ορατοί ακόμα και σε μήκος πέραν των 50 διαμέτρων του κυλίνδρου. Σε ακόμη μεγαλύτερη απόσταση είναι ορατοί οι στροβιλισμοί ακροπτερυγίου (δες Σχ. 2.4).



**Σχήμα 2.4** Στροβιλισμοί πίσω από κύλινδρο και πτέρυγα.

Η επέκταση όμως του υπολογιστικού πλέγματος σε πολύ μεγάλες αποστάσεις, όπου όλες οι διαταραχές της ροής από την παρουσία της πτέρυγας ή του κυλίνδρου είναι σχεδόν μηδενικές, δεν είναι δυνατή διότι θα απαιτούνταν πολύ μεγάλος αριθμός υπολογιστικών στοιχείων ή κόμβων και το υπολογιστικό κόστος θα γινόταν πολύ μεγάλο. Παρόμοιους περιορισμούς έχουμε και σε υπολογισμούς εσωτερικών ροών, όπως ροές μέσα σε αγωγούς. Στα τεχνητά όρια στα οποία καθορίζεται, κατά τρόπο σχετικά αυθαίρετο, το πέρας του υπολογιστικού χωρίου είναι αναγκαίο να εφαρμόσουμε οριακές συνθήκες που ονομάζονται αριθμητικές οριακές συνθήκες οι οποίες πρέπει να προσεγγίζουν όσο το δυνατόν καλύτερα τις πραγματικές συνθήκες ροής. Ο προσδιορισμός αριθμητικών οριακών συνθηκών είναι περισσότερο περίπλοκος στην υποηχητική συμπιεστή ροή όπου λόγου του κυματικού χαρακτήρα των εξισώσεων συμπιεστής ροής υπάρχει πάντα διάδοση κυμάτων. Στην περίπτωση αυτή η δημιουργία διαταραχών στα όρια του υπολογιστικού χωρίου λόγω κακής επιλογής των οριακών συνθηκών επηρεάζει σημαντικά την ακρίβεια των αποτελεσμάτων. Για διεξοδική αντιμετώπιση του προβλήματος επιβολής οριακών συνθηκών σε συμπιεστή ροή μπορεί κανείς να ανατρέξει σε δημοσιεύσεις όπως,

- (i) Thompson, K.V., "Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems," *J. of Comp. Physics*, Vol. 68, 1987, pp. 1-24 και (ii) Poinsot, T.J. and Lele, S. K., "Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows," *J. of Comp. Physics*, Vol. 101, No. 1, 1992, pp. 104-129.

Στη αριθμητική επίλυση ασυμπιεστης ροής συχνά γίνεται χρήση σχέσεων μεταφοράς όπως  $\varphi_t + \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi = 0$  για την επιβολή οριακών συνθηκών σε ποσότητες όπως ο στροβιλισμός και η θερμοκρασία. Οι παρακάτω δημοσιεύσεις δίνουν περισσότερες πληροφορίες για την επιβολή οριακών συνθηκών σε ασυμπιεστη ροή.

- (i) Papanastasiou, T.C., Malamatis, N., and Ellwood, K., "A new outflow boundary condition," *International Journal for Numerical Methods in Fluids* (1992).
- (ii) Fournier, G., Golanski, F., and Pollard, A., "A novel outflow boundary condition for incompressible laminar wall-bounded flows," *J. of Comp. Physics* (2008).

(iii) Hasan, N., Anwer, S.F, and Sanghi, S., “On the outflow boundary condition for external incompressible flows: A new approach.” *Journal of Computational Physics*, Vol. 206, 2005, pp. 661–683.

Η επιβολή οριακών συνθηκών στην επιφάνεια για ιξώδη ασυμπίεστη ροή γύρω από τον κύλινδρο ή την πτέρυγα επιβάλει να μην υπάρχει διολίσθηση στη επιφάνεια  $\mathbf{u}_{wall} = (u, v, w)_{wall} = 0$ . Σε μη-ιξώδη ροή ης οριακή συνθήκη για την ταχύτητα είναι η συνθήκη μη διείσδυσης στην στερεή επιφάνεια  $\mathbf{u}_{wall} \cdot \mathbf{n} = 0$ , όπου  $\mathbf{n}$  είναι το μοναδιαίο κάθετο στην επιφάνεια διάνυσμα. Η οριακή συνθήκη για την πίεση στο στερεό τοίχωμα κατά μήκος του x μπορεί να βρεθεί από την απλοποιημένη για το τοίχωμα εξίσωση διατήρησης της ορμής κάθετη προς το τοίχωμα κατεύθυνση y

$$\cancel{\frac{\partial \psi}{\partial t}} + \mu \cancel{\frac{\partial v}{\partial x}} + \nu \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \left( \cancel{\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right)$$

αλλά για προσκολλημένες ροές η παράγωγος  $v_y|_w$  της κάθετης προς στο τοίχωμα ταχύτητας  $v_y|_w = \partial v / \partial y|_w \approx O(1)$  είναι μικρή και ο όρος  $\nu \partial v / \partial y \approx 0$  είναι συνεπώς αμελητέος, οπότε  $\partial p / \partial y|_w \approx 0$ . Όταν όμως το τοίχωμα δεν είναι κατά μήκος του άξονα x πρέπει να θεωρήσουμε την εξίσωση ορμής στην, η, κατεύθυνση των καμπυλόγραμμων συντεταγμένων  $(\xi, \eta)$  (δες Σχ. 2.2) για να εξάγουμε την κατάλληλη οριακή συνθήκη για την πίεση στο τοίχωμα. Ο προσδιορισμός οριακών συνθηκών σε διεπιφάνειες όπως ατμός/νερό είναι πιο περίπλοκος. Ο προσδιορισμός οριακών συνθηκών στις διεπιφάνειες φαίνεται στο Παράρτημα A.

Ο καθορισμός των συνοριακών συνθηκών εισόδου / εξόδου για συμπιεστή ροή βασίζεται στην μαθηματική θεωρία των χαρακτηριστικών που θα αναπτύξουμε αναλυτικά σε επόμενο κεφάλαιο. Λόγω του υπερβολικού χαρακτήρα των συμπιεστών εξισώσεων ροής ο καθορισμός των οριακών συνθηκών εισόδου / εξόδου πρέπει να είναι συμβατός με την μετάδοση πληροφορίας σε υπερβολικά προβλήματα. Όπως θα δούμε για τρισδιάστατη ροή υπάρχουν πέντε χαρακτηριστικές ταχύτητες μετάδοσης, που είναι οι ιδιοτιμές του Ιακοβιανού μητρώου, αυτές είναι

$$\lambda_{1, 2, 3} = u$$

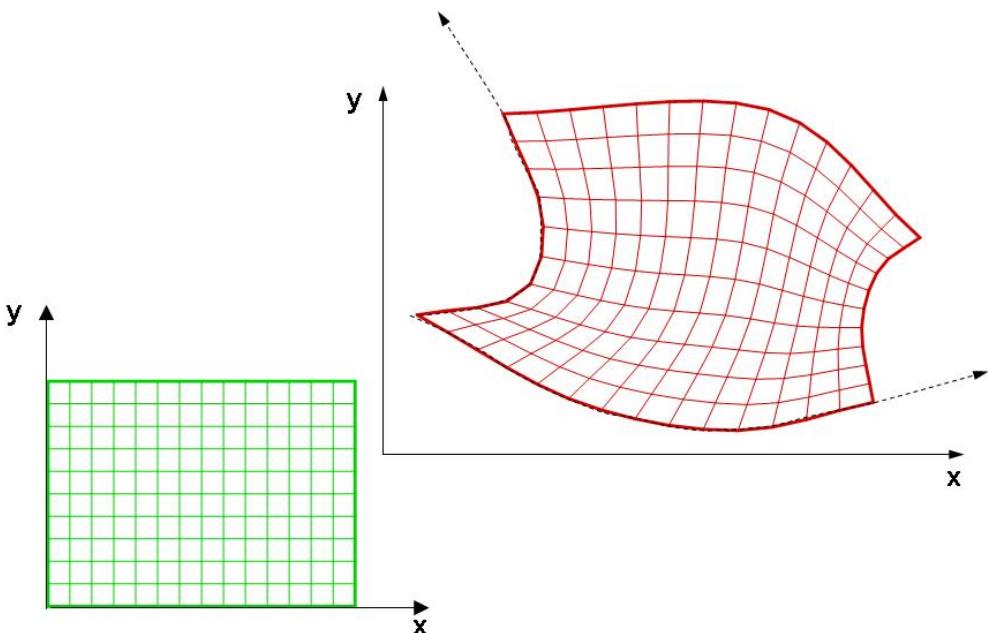
$$\lambda_4 = u + c$$

$$\lambda_5 = u - c$$

Στο σύνορο εισόδου υποηχητικής ροής ( $u < c$ ) είναι δυνατόν να καθορισθούν μόνο τέσσερις ποσότητες ενώ η πέμπτη, η οποία αντιστοιχεί αρνητική ταχύτητα μετάδοσης  $\lambda_5 = u - c < 0$ , θα πρέπει να υπολογισθεί από την λύση στο εσωτερικό του χωρίου. Παρόμοια στο σύνορο εξόδου μόνο μία συνοριακή συνθήκη μπορεί να καθορισθεί που αντιστοιχεί σε πληροφορία που έρχεται εκτός του χωρίου, ενώ όλες οι άλλες ποσότητες πρέπει να υπολογισθούν από το εσωτερικό του χωρίου.

#### 4. Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών

Η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών (ΠΔ) διακριτοποιεί το συνεχές πρόβλημα σε ένα σύνολο σημείων που συνήθως συνδέονται μεταξύ του με το υπολογιστικό πλέγμα. Οι εξαρτημένες μεταβλητές στην μέθοδο ΠΔ ορίζονται μόνο στους κόμβους του υπολογιστικού πλέγματος. Απαραίτητη προϋπόθεση για την επίλυση ενός προβλήματος στις δυο ή στις τρεις διαστάσεις είναι η κατασκευή του υπολογιστικού πλέγματος. Το υπολογιστικό πλέγμα για τις ΠΔ είναι δομημένο. Δηλαδή είναι τυπολογικά όμοιο με ένα Cartesian δίκτυο στο επίπεδο ή στον χώρο. Η κατασκευή των υπολογιστικών πλεγμάτων γύρω από μη τετριμμένες καμπύλες γεωμετρίας θα μας απασχολήσει σε επόμενα κεφάλαια. Η παρουσίαση και η εφαρμογή των μεθόδων ΠΔ γίνεται για ένα Cartesian υπολογιστικό πλέγμα όπου όλοι οι διαμερισμοί είναι ισομήκεις, όπως αναφέρθηκε όμως σε προηγούμενο κεφάλαιο οι γενικευμένοι μετασχηματισμοί συντεταγμένων επιτρέπουν τον μετασχηματισμό του ανισομερούς κατανεμημένου πλέγματος σε ένα ισομερώς κατανεμημένου Cartesian πλέγματος.



Σχήμα 4.1 Υπολογιστικό και φυσικό χωρίο.

Το Σχ. 4.1 δείχνει σχηματικά τον σχηματισμό του πλέγματος από το φυσικό χωρίο στο υπολογιστικό χωρίο. Το πλέγμα του φυσικού χωρίου ακολουθεί την γεωμετρία γύρω από την οποία πρόκειται να γίνει η αριθμητική επίλυση. Είναι ανισομερώς κατανεμημένο και έχει συγκέντρωση σημείων μικρού μεγέθους υπολογιστικά στοιχεία σε περιοχές όπου απαιτείται να υπολογισθούν μεγάλες κλίσεις του πεδίου ροής όπως οριακά στρώματα κλπ. ενώ έχει μεγάλου μεγέθους υπολογιστικά στοιχεία σε περιοχές όπου το πεδίο ροής είναι σχεδόν ομοιόμορφο. Ο μετασχηματισμός του πλέγματος από το φυσικό στο υπολογιστικό χωρίο επιτυγχάνεται στην γενική περίπτωση αριθμητικά. Η εφαρμογή του μετασχηματισμού καμπυλόγραμμων

(γενικευμένων) συντεταγμένων συνεπάγεται και τον ανάλογο μετασχηματισμό των εξισώσεων κίνησης, όπως και στην περίπτωση των κυλινδρικών η άλλων μορφών συντεταγμένων που δίνονται από αναλυτικές εκφράσεις.

Οι γενικευμένοι μετασχηματισμοί συντεταγμένων θα μας απασχολήσουν σε ένα επόμενο κεφάλαιο. Η αριθμητική επίλυση σε γεωμετρίες με σφαιρική ή κυλινδρική συμμετρία μπορεί να γίνουν με χρήση της αντίστοιχης μορφής των εξισώσεων κίνησης, (κυλινδρικές ή σφαιρικές συντεταγμένες). Η χρήση των κυλινδρικών ή σφαιρικών συντεταγμένων είναι πολύ περιορισμένη διότι στις περισσότερες περιπτώσεις πλέγματα με ισομήκεις διαμερισμούς δεν παρέχουν την ακρίβεια διακριτοποίησης που απαιτείται σε προβλήματα ρευστομηχανικής. Η μέθοδος ΠΔ θα παρουσιασθεί για ισομερώς κατανεμημένα πλέγματα διότι ΠΔ για ανισομερώς κατανεμημένα πλέγματα δεν χρησιμοποιούνται .

## 4.2 Εύρεση μορφών ΠΔ σειρές Taylor και πολυώνυμα

Η παρουσίαση της μεθόδου ΠΔ θα γίνει υποθέτοντας ότι πρόκειται να διακριτοποιήσουμε μια ΔΜΠ σε δυο διαστάσεις για την ανεξάρτητη μεταβλητή  $u(x,y)$  που ορίζεται στο χωρίο  $0 \leq x \leq 1$ ,  $0 \leq y \leq 1$ . Η μεταβλητή  $u(x,y)$  ορίζεται μόνο στους κόμβους του πλέγματος  $(i,j)$  και η διακριτή της μορφής είναι  $u(i\Delta x, j\Delta y)$ . Οι κόμβοι του δομημένου πλέγματος ορίζονται πλήρως από τους δείκτες  $i, j$  στις δυο διαστάσεις ή τους δείκτες  $i, j, k$  στις τρεις διαστάσεις, συνεπώς η διακριτή μορφή της ΔΜΠ για κάθε κόμβο  $(i,j)$  γράφονται ως προς τους δείκτες  $i, j$  και τους γειτονικούς του  $i-1, j+1$  κλπ. Ο συμβολισμός των διακριτών τιμών για τον κόμβο  $u(x_o, y_o) = u(i,j)$  και τους γειτονικούς του  $u_{i+1,j} = u(x_o + \Delta x, y_o)$ ,  $u_{i,j+1} = u(x_o, y_o + \Delta y)$  κλπ. φαίνεται στο Σχ. 4.2.

Η βασική ιδέα της μεθόδου ΠΔ και η αναπαράσταση παραγώγου μιας συνεχούς συνάρτησης από τις διακριτές τιμές της συνάρτησης στους κόμβους και βασίζεται στον ορισμό της παραγώγου.

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x_o + \Delta x, y_o) - u(x_o, y_o)}{\Delta x} \quad (4.1)$$

Που για συνεχείς συναρτήσεις γίνεται πολύ καλή προσέγγιση για μικρά μήκη διαμερισμού  $\Delta x$ .

Η διακριτοποίηση της πρώτης ή δεύτερης παραγώγου μπορεί να γίνει με διαφορετικές αναπαραστάσεις ή τύπους ΠΔ (finite difference formulas) που μπορούμε να βρούμε αναπτύσσοντας την συνάρτηση σε σειρά Taylor ή προσεγγίζοντας τοπικά την συνάρτηση με πολυώνυμα όπως θα δείξουμε παρακάτω. Το ανάπτυγμα Taylor της συνάρτησης  $u(x_o, y_o)$  γύρω από τον κόμβο αναφοράς  $x_o, y_o$  είναι

$$u(x_o + \Delta x, y_o) = u(x_o, y_o) + (\Delta x) \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x_o, y_o} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x_o, y_o} + \dots + \frac{(\Delta x)^n}{n!} \left. \frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right|_{x_o, y_o} \quad (4.2)$$

Βασιζόμενοι στο ανάπτυγμα Taylor της Εξ. (4.2) βρίσκουμε την απλούστερη μορφή ΠΔ την προς τα εμπρός ή κατάντη διακριπτοποίηση (forward difference)

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x_o, y_o} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2!} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x_o, y_o} = \frac{u_{j+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (4.3)$$

όπου ο όρος  $\mathcal{O}(\Delta x)$  συμβολίζει το σφάλμα αποκοπής (truncation error) που είναι ουσιαστικά η διαφορά μεταξύ της πραγματικής τιμής της παραγώγου και της διακριτής της τιμής που υπολογίζεται από την Εξ. (4.3). Ο συμβολισμός  $\mathcal{O}(\Delta x)$  σημαίνει ότι το σφάλμα αποκοπής είναι μικρότερο από  $K|\Delta x|$  όπου  $K$  είναι η τιμή μιας σταθεράς. Δηλαδή ο συμβολισμός  $\mathcal{O}(\Delta x)$  σημαίνει ότι το σφάλμα αποκοπής ελαττώνεται γραμμικά με την μείωση του μήκους διαμερισμού αλλά δεν γνωρίζουμε εκ των προτέρων το ακριβές του μεγέθους του σφάλματος. Το σφάλμα αποκοπής για διακριπτοποίηση ΠΔ που οι όροι παραγώγων ανώτερης τάξης πολλαπλασιάζονται με το μήκος διαμερισμού είναι πρώτης τάξης ακρίβειας. Η σύγκλιση της διακοπής τιμής της πρώτης παράγου που αναπαρίσταται με σφάλμα αποκοπής πρώτης τάξης είναι γραμμική.

Τα αναπτύγματα Taylor της συνάρτησης.

$$u(x_o - \Delta x, y_o) = u(x_o, y_o) - (\Delta x) \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x_o, y_o} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x_o, y_o} - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left. \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right|_{x_o, y_o} + \dots \quad (4.4)$$

δίνει απευθείας την σχέση για την προσέγγιση της 1<sup>ης</sup> παραγώγου με πρώτης τάξης ακρίβειας πεπερασμένες διαφορές

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x_o, y_o} = \frac{u_{i-1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (4.5)$$

Η προσέγγιση ΠΔ με δεύτερης τάξης ακρίβειας κεντρικές διαφορές βρίσκεται αφαιρώντας τις Εξ. (4.2) και (4.4)

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x_o, y_o} = \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (4.6)$$

Παρόμοια η προσέγγιση ΠΔ δεύτερης τάξης για την δεύτερη παράγωγο βρίσκεται προσθέτοντας την Εξ. (4.2) και (4.4).

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x^2) \quad (4.7)$$

Ένας άλλος τρόπος εύρεσης της προσέγγισης ΠΔ είναι να παρεμβάλουμε ένα πολυώνυμο δια μέσου των κόμβων του διαμερισμού και να βρούμε την διακριτή τιμή της παραγώγου από την προσέγγιση του πολυωνύμου. Θεωρούμε ένα πολυώνυμο

παρεμβολής δεύτερης τάξης που διέρχεται από τους κόμβους  $i-1$ ,  $i$  και  $i+1$ , δηλαδή μια παραβολή, και υπολογίζοντας την παράγωγον του πολυώνυμου παρεμβολής βρίσκουμε την δεύτερης τάξης ακρίβειας αναπαράσταση της παραγώγου σε μορφή ΠΔ ως

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{u_{i+1}(\Delta x_i)^2 - u_{i-1}(\Delta x_{i+1})^2 + u_i[(\Delta x_{i+1})^2 - (\Delta x_i)^2]}{2(\Delta x_{i-1})(\Delta x_i)(\Delta x_{i+1})} \quad (4.8)$$

όπου  $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$ . Η προσέγγιση ΠΔ της Εξ. (4.8) για ισοκατανεμημένο διαμερισμό ( $\Delta x_i = \Delta x_{i+1} = \Delta x_{i-1}$ ) είναι η ίδια ακριβώς με έκφραση που βρήκαμε από την Εξ. (4.5) με την βοήθεια αναπτυγμάτων Taylor

Η προσέγγιση της πρώτης παραγώγου έχει γενικά αποκοπής την ίδια τάξη με τον βαθμό του πολυώνυμου που χρησιμοποιείται τοπικά για την προσέγγιση της συνάρτησης. Η τρίτης τάξης ακρίβειας προσέγγισης της παραγώγου  $\partial u / \partial x$  βρίσκεται παρεμβάλλοντας ένα πολυώνυμο τρίτου βαθμού από τον κόμβο  $i$  και τρεις γειτονικούς του.

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{2u_{i+1} + 3u_i - 6u_{i-1} + u_{i-2}}{6\Delta x} + O(\Delta x^3) \quad (4.9)$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{-u_{i+2} + 6u_{i+1} - 3u_i - 2u_{i-1}}{6\Delta x} + O(\Delta x^3) \quad (4.10)$$

Παρόμοια με παρεμβολή ενός πολυώνυμου τέταρτης τάξης από ένα ισοκατανεμημένο διαμερισμό, η με σειρές Taylor βρίσκουμε την παρακάτω τέταρτης τάξης ακρίβειας σχέση ΠΔ

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{-u_{i+2} + 8u_{i+1} - 8u_{i-1} + u_{i-2}}{12(\Delta x)} + O(\Delta x^4) \quad (4.11)$$

Η αναπαράσταση ΠΔ της παραγώγου K τάξης που υπολογίζεται με N τάξη ακρίβειας την γενική μορφή

$$\left. \frac{d^k u}{dx^k} \right)_i = \sum_{m=M_1}^{M_2} C_m^k u(x_m) + O(\Delta x^N) \quad (4.12)$$

$k = 1, 2, \dots$

Οι τιμές των συντελεστών της Εξ. (4.12) για την προσέγγιση παραγώγων  $k = 1, 2, 3, 4$  τάξης με κεντρικές ΠΔ ( $M_1 = -M$ ,  $M_2 = M$ ) τάξης ακρίβειας N δίνονται στον πίνακα 4.1. Οι τιμές των συντελεστών της Εξ. (4.12) για προσεγγίσεις ΠΔ στο αριστερό σύνορο του χωρίου ( $i = 0$ ) με χρήση τιμών εκ δεξιών ( $i = 0, \dots, 8$ ) δίνεται στον πίνακα 4.2. Οι ίδιοι συντελεστές με αλλαγή πρόσημου ισχύουν για το δεξιό σύνορο του χωρίου.

### Πίνακας 4.1Α

Συντελεστές για την 1<sup>η</sup> παράγωγο με κεντρικές ΠΔ τάξης 2<sup>ας</sup> - 8<sup>ης</sup>.

	$j-4$	$j-3$	$j-2$	$j-1$	$j$	$j+1$	$j+2$	$j+3$	$j+4$
2 <sup>ας</sup> τάξης				-1/2	0	1/2			
4 <sup>ης</sup> τάξης			1/12	-2/3	0	2/3	-1/12		
6 <sup>ης</sup> τάξης		-1/60	3/20	-3/4	0	3/4	-3/20	1/60	
8 <sup>ης</sup> τάξης	1/280	-4/105	1/5	-4/5	0	4/5	-1/5	4/105	-1/280

### Πίνακας 4.1Β

Συντελεστές για την 2<sup>η</sup> παράγωγο με κεντρικές ΠΔ τάξης 2<sup>ας</sup> - 8<sup>ης</sup>.

	$j-4$	$j-3$	$j-2$	$j-1$	$j$	$j+1$	$j+2$	$j+3$	$j+4$
2 <sup>ας</sup> τάξης				1	-2	1			
4 <sup>ης</sup> τάξης			-1/12	4/3	-5/2	4/3	-1/12		
6 <sup>ης</sup> τάξης		1/90	-3/20	3/2	-49/18	3/2	-3/20	1/90	
8 <sup>ης</sup> τάξης	-1/560	8/315	-1/5	8/5	-205/72	8/5	-1/5	8/315	-1/560

### Πίνακας 4.2

Συντελεστές υπολογισμού της 1<sup>ης</sup> παραγώγου με μονομερείς πεπερασμένες διαφορές και τάξη ακρίβειας από 1<sup>η</sup> μέχρι και 8<sup>η</sup>.

	0	1	2	3	4	5	6	7	8
1 <sup>η</sup>	-1	1							
2 <sup>η</sup>	− $\frac{3}{2}$	2	− $\frac{1}{2}$						
3 <sup>η</sup>	− $\frac{11}{6}$	3	− $\frac{3}{2}$	$\frac{1}{3}$					
4 <sup>η</sup>	− $\frac{25}{12}$	4	-3	$\frac{4}{3}$	− $\frac{1}{4}$				

$5^n$	$-\frac{137}{60}$	5	-5	$\frac{10}{3}$	$-\frac{5}{4}$	$\frac{1}{5}$		
$6^n$	$-\frac{49}{20}$	6	$-\frac{15}{2}$	$\frac{20}{3}$	$-\frac{15}{4}$	$\frac{6}{5}$	$-\frac{1}{6}$	
$7^n$	$-\frac{363}{140}$	7	$-\frac{21}{2}$	$\frac{35}{3}$	$-\frac{35}{4}$	$\frac{21}{5}$	$-\frac{7}{6}$	$\frac{1}{7}$
$8^n$	$-\frac{761}{280}$	8	-14	$\frac{56}{3}$	$-\frac{35}{2}$	$\frac{56}{5}$	$-\frac{14}{3}$	$\frac{8}{7}$

Ο προσδιορισμός των συντελεστών ΠΔ για την προσέγγιση παραγώγων μικτού τύπου όπως  $\partial^2 u / \partial x \partial y|_{i,j}$  γίνεται με κατάλληλες επιλύσεις αναπτυγμάτων Taylor. Οι συντελεστές και το σφάλμα αποκοπής διαφόρων προσεγγίσεων ΠΔ δίνονται στον Πίνακα 4.3.

Η προσέγγιση ΠΔ μικτών παραγώγων ή παραγώγων ανώτερης τάξης γίνεται πολλές φορές στην πράξη με διαδοχική εφαρμογή ΠΔ διαφορών παραγώγου πρώτης τάξης, παραδείγματος χάριν

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_i = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \right) = \frac{u_{i+2} - 2u_i + u_{i-2}}{4(\Delta x)^2} + O(\Delta x^2) \quad (4.13)$$

Η διαδικασία διαδοχικής εφαρμογής ΠΔ των παραγώγων πρώτης τάξης για τον υπολογισμό παραγώγων ανώτερης τάξης έχει σαν αποτέλεσμα την διερεύνηση του εύρους τιμών που εμπλέκονται στον τύπο υπολογισμού (σύγκρινε Εξ. (4.7) (4.13)). Σε περιπτώσεις που επιθυμούμε να υπολογίσουμε ΠΔ παραγώγων ανώτερης τάξης με διαδοχική εφαρμογή ΠΔ παραγώγων πρώτης τάξης χρησιμοποιούμε τεχνητούς ενδιάμεσους κόμβους όπως δείχνεται στο παρακάτω παράδειγμα.

Η προσέγγιση της παραγώγου δεύτερης τάξης  $\partial^2 u / \partial x^2$  μπορεί να γίνει και με διαδοχική εφαρμογή τελεστών πεπερασμένων διαφορών πρώτης τάξης, δηλαδή  $\partial^2 u / \partial x^2 = \partial / \partial x (\partial u / \partial x)$ . Η διαδοχική εφαρμογή τελεστών πρώτης τάξης είναι ιδιαίτερα βολική για τις εξισώσεις της ρευστοδυναμικής όπου στους ιξώδεις όρους  $\nabla \cdot (\nabla u)$  χρειάζεται να υπολογίσουμε παραγώγους της μορφής  $\partial / \partial x (\mu(x, y, z) \partial u / \partial x)$  όπου  $\mu(x, y, z)$  είναι ο συντελεστής ιξώδους που σε συμπιεστή ροή μπορεί να έχει μεγάλη μεταβολή από σημείο σε σημείο λόγω μεταβολών του πεδίου θερμοκρασίας.

Ο υπολογισμός της δεύτερης παράγωγου σ' αυτήν την περίπτωση γίνεται ως ακολούθως. Ένας τρόπος είναι να υπολογίσουμε την παράγωγο  $\partial u / \partial x$  στους κόμβους  $i, \pi, \chi$ .

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_i = \frac{1}{2\Delta x} (u_{i+1} - u_{i-1}) + O(\Delta x^2) \quad \text{δεύτερης τάξης}$$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_\pi = \frac{1}{12\Delta x} (-u_{i+2} + 8(u_{i+1} - u_{i-1}) + u_{i-2}) + O(\Delta x^4) \quad \text{τέταρτης τάξης}$$

και να επαναλάβουμε την διαδικασία που σημαίνει ότι το εύρος αυξάνεται κατά πολύ διότι η δεύτερης τάξης παράγωγος απαιτεί πέντε σημεία. Ο εναλλακτικός τρόπος για να μειώσουμε το εύρος είναι να υπολογίσουμε την παράγωγο στα σημεία  $i+1/2$  π.χ.

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i+1/2} = \frac{1}{\Delta x} (u_{i+1} - u_i) + O(\Delta x^2) \quad \text{δεύτερης τάξης}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i+1/2} = \frac{1}{24\Delta x} (u_{i-1} - 27u_i + 27u_{i+1} - u_{i+2}) + O(\Delta x^4) \quad \text{τέταρτης τάξης}$$

να βρούμε τις τιμές των όρων στους κόμβους  $i+1/2$  δια παρεμβολής

$$\pi.\chi. \mu_{i+1/2} = \frac{1}{2\Delta x} (\mu_{i+1} + \mu_i) + O(\Delta x^2)$$

$$\mu_{i+1/2} = \frac{1}{16\Delta x} (-\mu_{i-1} + 9(\mu_i + \mu_{i+1}) - \mu_{i+2}) + O(\Delta x^4)$$

και κατόπιν να βρούμε με ΠΔ την παράγωγο του όρους  $d_{ih} = \left[ \mu_{i+1/2} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i+1/2} \right]$  από  $i+1/2$  στους κόμβους  $i$  του πλέγματος

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_i = \frac{\partial}{\partial x} d_{i+1/2} = \frac{1}{\Delta x} (d_{ih} - d_{ih-1}) + O(\Delta x^2)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_i = \frac{\partial}{\partial x} d_{i+1/2} = \frac{1}{24\Delta x} [d_{ih-2} - 27d_{ih-1} + 27d_{ih+1}] + O(\Delta x^4)$$

### 4.3. Compact Schemes

Η προσέγγιση πρώτης και δεύτερης παραγώγου, που απαντώνται στις εξισώσεις κίνησης συμπιεστού και ασυμπίεστου ρευστού, για ομοιόμορφα κατανεμημένους διαμερισμούς μπορεί να πραγματοποιηθεί με διάφορα ειδικά σχήματα όπως τα compact schemes που θα παρουσιάσουμε παρακάτω. Το πλεονέκτημα αυτών των σχημάτων είναι ότι απαιτούν μικρότερο αριθμό σημείων για τον υπολογισμό ΠΔ ανώτερης τάξης, χρησιμοποιώντας προσεγγίσεις ΠΔ που δεν περιέχουν μόνο την άγνωστη τιμή της παραγώγου στον κόμβο  $i$  αλλά και τις τιμές της σε γειτονικούς κόμβους. Τα σχήματα αυτά ονομάζονται μη ρητά (implicit or compact) και βρίσκονται με την χρήση κατάλληλων πολυωνύμων παρεμβολής. Η προσέγγιση ΠΔ που δείξαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο γίνονται με εφαρμογή αλγεβρικών εξισώσεων που περιέχουν τιμές της συνάρτησης σε γειτονικούς κόμβους και γνωστούς συντελεστές, δες π.χ. την γενική μορφή της Εξ. (4.12), γι' αυτό τον λόγο τα σχήματα αυτά αναφέρονται και ως ρητά.

Τα μη ρητά σχήματα (compact schemes) σε αντίθεση με τα ρητά απαιτούν την λύση συστήματος εξισώσεων για την προσέγγιση παραγώγου με ΠΔ. Η γενική μορφή ΠΔ με μη ρητά σχήματα είναι

$$bu'_{i-2} + au'_{i-1} + u'_i + au'_{i-1} + bu'_{i-2} = A \frac{(u_{i+1} - u_{i-1})}{2h} + B \frac{u_{i+2} - u_{i-2}}{4h} + C \frac{u_{i+3} - u_{i-3}}{6h} \quad (4.14)$$

Οι τιμές των συντελεστών για μη ρητά σχήματα που προσεγγίζουν την πρώτη παράγωγο με  $4^n$  και  $6^n$  ακρίβεια δίνονται στον πίνακα 4.3.

### ΠΙΝΑΚΑΣ 4.3

Υπολογισμός της πρώτης παραγώγου με τάξη ακρίβειας από  $4^n$  μέχρι  $10^n$  μη ρητά σχήματα κεντρικών διαφορών

Τάξη ακρίβειας	a	b	A	B	C
$4^n$	$1/4$	0	$3/4$	0	0
$6^n$	$1/3$	0	$14/9$	$1/9$	0
$8^n$	$4/9$	$1/36$	$40/27$	$25/54$	0
$10^n$	$1/2$	$1/20$	$17/12$	$101/150$	$1/100$

Ο τρόπος υπολογισμού των συντελεστών για  $4^n$  τάξης ακρίβειας μη ρητές ΠΔ με χρήση πολυωνύμων παρουσιάζεται παρακάτω. Θεωρούμε το  $4^n$  τάξης πολυώνυμο παρεμβολής στον κόμβο  $i$ .

$$u(x) = a_\infty + a_1(x - x_1) + a_2(x - x_i)^2 + a_3(x - x_i)^3 + a_4(x - x_i)^4$$

και βρίσκουμε τις τιμές των συντελεστών  $a_o, a_1, a_2, a_3, a_4$  έτσι ώστε να ικανοποιεί δυο γειτονικές τιμές της συντήρησης και ταυτοχρόνως δυο γειτονικές τιμές της πρώτης παράγωγου της συντήρησης. Η παράγωγος του πολυώνυμου είναι

$$u'(x) = a_1 + 2a_2(x - x_i) + 3a_3(x - x_i)^2 + 4a_4(x - x_i)^3$$

δηλαδή

$$\frac{du}{dx} \Big|_{x=x_i} = u'_2 = a_1$$

Η αναπαράσταση του πολυωνύμου και της παραγώγου για  $x = x_{i-1}$  και  $x = x_{i+1}$  μας δίνει την παρακάτω σχέση για ΠΔ

$$\frac{1}{4}u'_{i+1} + u'_i + \frac{1}{4}u'_{i-1} = \frac{3}{4h}(u_{i+1} - u_{i-1})$$

Η παραπάνω σχέση σε αντίθεση με την Εξ. (4.11), που προσεγγίζει την πρώτη παράγωγο με ΠΔ τέταρτης τάξης χρησιμοποιώντας τέσσερις γειτονικούς κόμβους (δυο από αριστερά και δυο από δεξιά), προσεγγίζει την παράγωγο με πληροφορία μόνο από δυο γειτονικούς κόμβους. Η προσέγγιση όμως της παραγώγου με μη ρητές πεπερασμένες διαφορές δεν είναι άμεση. Δηλαδή δεν πραγματοποιείται με απλούς

αλγεβρικούς απολογισμούς αλλά απαιτεί την λύση ενός τρι-διαγωνίου συστήματος αλγεβρικών εξισώσεων όπου άγνωστοι είναι οι προσεγγίσεις ΠΔ στους κόμβους  $i = 1, \dots, I_{\max}$  του πλέγματος. Η αντιστροφή του τρι-διαγωνίου μητρώου δεν έχει όμως ιδιαίτερα αυξημένο υπολογιστικό κόστος. Από τον Πίνακα 4.3 παρατηρούμε ότι προσέγγιση της πρώτης παραγώγου με ΠΔ και τάξη ακρίβειας  $4^n$  και  $6^n$  και με την χρήση μη-ρητών σχημάτων πραγματοποιείται με την επίλυση ενός τρι-διαγωνίου συστήματος. Η προσέγγιση της παραγώγου με  $8^n$  ή  $10^n$  τάξη ακρίβειας απαιτεί την αντιστροφή ενός πεντα-διαγωνίου μητρώου. Το υπολογιστικό κόστος για την αντιστροφή του πεντα-διαγωνίου μητρώου είναι μεγαλύτερο από εκείνο για το τρι-διαγώνιο μητρώο (που αντιστρέφεται με τον αλγόριθμο Thomas) αλλά όχι και τόσο σημαντικό. Στις περισσότερες εφαρμογές όμως η  $6^n$  τάξης προσέγγιση της πρώτης παραγώγου με μη ρητά σχήματα ΠΔ είναι ικανοποιητική.

Τα πεπλεγμένα (μη-ρητά) σχήματα έχουν το πλεονέκτημα ότι επιτυγχάνουν μεγαλύτερη τήξη ακρίβειας για μικρότερο εύρος γειτονικών τιμών. Η ιδιότητα αυτή διευκολύνει την εφαρμογή του σχήματος κοντά στα όρια του υπολογιστικού χωρίου. Ένα άλλο πλεονέκτημα των μη ρητών σχημάτων είναι ότι εισάγουν μικρότερο ποσό αριθμητικής διάχυσης όπως θα δείξουμε αμέσως παρακάτω αλλά και σε επόμενα κεφάλαια. Η ελαχιστοποίηση της αριθμητικής διάχυσης είναι επιθυμητή ιδιότητα του αριθμητικού σχήματος ιδιαίτερα όταν πρόκειται να επιχειρήσουμε να προσομοιώσουμε αριθμητικά μετάδοση κυμάτων (όπως στην αερο-ακουστική και τον ηλεκτρομαγνητισμό) αλλά και όταν επιθυμούμε να διατηρήσουμε αναλλοίωτες δομές. Η απ' ευθείας προσομοίωση της τύρβης (direct numerical simulation DNS) ή οι προσομοιώσεις τύρβης μεγάλων δυνών (large eddy simulation LES) συνήθως γίνονται με σχήματα μεγάλης τάξης αριθμητικής ακρίβειας όπως πεπερασμένες διαφορές  $4^n$  ή και μεγαλύτερης τάξης ακρίβειας, με φασματικές μεθόδους, με ENO ή WENO σχήματα, ή με μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων μεγάλης τάξης ακρίβειας (spectral elements) και την ασυνεχή μέθοδο Galerkin.

#### 4.4 Οριακές τιμές διακριτοποιήσεων ΠΔ

Ο τρόπος με τον οποίο γίνεται η προσέγγιση της παραγώγου στα όρια των υπολογιστικών χωρίων έχει μεγάλη σημασία διότι επηρεάζει σημαντικά όχι μόνο την ακρίβεια των υπολογισμών, ιδιαίτερα στα σχήματα μεγάλης τάξης ακρίβειας, αλλά και την ευστάθεια των σχημάτων. Γενικά η προσέγγιση της παραγώγου στα όρια μπορεί να είναι μόνο μιας τάξης μικρότερης. Παραδείγματος χάριν, για ένα σχήμα δεύτερης τάξης η παράγωγος στα όρια μπορεί να υπολογισθεί με προσέγγιση πρώτης τάξης ακρίβειας ΠΔ όπως  $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i=L} = (u_1 - u_2)/\Delta x + O(\Delta x)$  και  $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i=Im_{ox}} = (u_{Im_{ax}} - u_{Im_{ax}-1})/\Delta x + O(\Delta x)$  ή με δεύτερης τάξης ακρίβειας μονομερή (one sited) ΠΔ όπως είναι η  $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i=1} = (-3u_1 + 4u_2 - u_3)/2\Delta x + O(\Delta x^2)$  και η  $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i=Im_{ax}} = (3u_{Im_{ax}} - 4u_{Im_{ax}-1} + u_{Im_{ax}-2})/2\Delta x + O(\Delta x^2)$ . Αστάθεια του σχήματος ΠΔ λόγω εφαρμογής οριακών συνθηκών δεν παρατηρείται με τα δεύτερης τάξης ακρίβειας σχήματα. Το πρόβλημα της ακρίβειας και αστάθειας εμφανίζεται με τα ανώτερης τάξης ακρίβειας σχήματα ΠΔ γι' αυτό τον λόγο δίνονται τα σχήματα υπολογισμού της παραγώγου με ΠΔ στα όρια του χωρίου για τα ρητά και πεπλεγμένα (compact) σχήματα.

Για το ρητό τέταρτης τάξης ακρίβειας σχήμα η προσέγγιση της πρώτης παραγώγου γίνεται ως εξής.

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i=1} = \frac{1}{12\Delta x} (-25u_1 + 48u_2 - 36u_3 + 16u_4 - 3u_5)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i=2} = \frac{1}{12\Delta x} (-3u_1 - 10u_2 + 18u_3 - 6u_4 + u_5)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_i = \frac{1}{12\Delta x} (u_{i-2} - 8u_{i-1} + 8u_{i+1} - u_{i+2})$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i=I-1} = \frac{1}{12\Delta x} (-u_{I-4} + 6u_{I-3} - 18u_{I-2} + 10u_{I-1} + 3u_I)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i=I} = \frac{1}{12\Delta x} (3u_{I-4} - 16u_{I-3} + 36u_{I-2} - 48u_{I-1} + 25u_I)$$

Οι παραπάνω σχέσεις μπορεί να γραφούν υπό μορφή μητρώου ως ακολούθως.

$$u' = M_e \vec{u}$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial x} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i=1} \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i=2} \\ \vdots \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_i \\ \vdots \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i=I-1} \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i=I} \end{bmatrix} M_e = \begin{bmatrix} -25 & 48 & -36 & 16 & -3 \\ -3 & -10 & 18 & -6 & 1 \\ 1 & -8 & 0 & 8 & -1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & -8 & 0 & 8 & -1 \\ -1 & 6 & 18 & 10 & 3 \\ 3 & -16 & 36 & -48 & 25 \end{bmatrix} \vec{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_I \end{bmatrix}$$

Παρόμοια για τα πεπλεγμένα (compact) σχήματα ο υπολογισμός της παραγώγου στα όρια με μονόπλευρα σχήματα πεπλεγμένων ΠΔ γίνεται ως ακολούθως

$$u'_1 + 3u'_2 = \frac{1}{6\Delta x} (-17u_1 + 9u_2 + 9u_3 - u_4)$$

$$3u'_{I-1} + u'_I = \frac{1}{6\Delta x} (u_{I-3} - 9u_{I-2} - 9u_{I-1} + 17u_I)$$

η υπό μορφή μητρώου

$$\left[ M_c^4 \right] \vec{u}' = \left[ B^4 \right]$$

$$\vec{u}' = \begin{bmatrix} u'_2 \\ u'_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ u'_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ u'_{I-1} \\ u'_I \end{bmatrix} M_c^4 = \begin{bmatrix} 6 & 18 & & \\ & 1 & 4 & 1 \\ & & 1 & 4 & 1 \\ & & & 18 & 6 \end{bmatrix}, B^4 = \begin{bmatrix} -17 & 9 & 9 & -1 \\ -3 & 0 & 3 & \\ & -3 & 0 & 3 \\ & & -3 & 0 & 3 \\ & & & -3 & 0 & 3 \\ & & & & -3 & 0 & 3 \\ & & & & & 1 & -9 & -9 & 17 \end{bmatrix}$$

Παρόμοια η μορφή μητρώου του πλήθους (συμπεριλαμβανομένων και των συνοριακών όρων πεπλεγμένου 6<sup>ης</sup> τάξης σχήματος είναι

$$\left[ M_c^6 \right] \vec{u}' = B^6$$

$$M_c^6 = \begin{bmatrix} -6 & 18 & & \\ -3 & 18 & 9 & \\ 1 & 3 & 1 & \\ & 1 & 3 & 1 \\ & 9 & 18 & 3 & \\ & 18 & 6 & \end{bmatrix} B^6 = \begin{bmatrix} -17 & 9 & 9 & 1 \\ -10 & 9 & -18 & -1 \\ -1/12 & 4/16 & 4/16 & 1/12 \\ & -1/12 & 4/16 & 4/16 & 1/12 \\ & & -1/12 & 4/16 & 4/16 & 1/12 \\ & & & 10 & -9 & 18 & 1 \\ & & & 17 & -9 & -9 & 1 \end{bmatrix}$$

Το παραπάνω σχήμα είναι 4–5–6 τάξης ακρίβειας που σημαίνει ότι στο όριο δηλαδή τον κόμβο  $i=1$  η παράγωγος υπολογίζεται με ΠΔ  $4^{\text{ης}}$  τάξης ως  $6u'_1 + 18u'_2 = -17u_1 + 9u_2 + 9u_3 - u_4$ , στον κόμβο  $i = 2$  υπολογίζεται με ΠΔ  $5^{\text{ης}}$  τάξης ακρίβειας  $3u'_1 + 18u'_2 + 9u'_3 = -10u_1 + 9u_2 - 18u_3 - u_4$ , ενώ στο υπόλοιπο του χωρίου (εκτός  $i = I-1$  και  $I-2$ ) η παράγωγος ΠΔ υπολογίζεται με τις  $6^{\text{ης}}$  τάξης ακρίβειας ΠΔ

$$u'_{i-1} + 3u'_i + u'_{i+1} = \frac{1}{48} [-4u_{i-2} + 3u_{i-1} + 3u_{i+1} + 4u_{i+2}]$$

Πρόσφατα αναπτύχθηκαν πεπλεγμένα σχήματα τα οποία μπορεί να χρησιμοποιηθούν για τον ταυτόχρονο υπολογισμό της πρώτης και της δεύτερης παραγώγου. Τα σχήματα αυτά έχουν την γενική μορφή

$$A_1 u'_{i-1} + B_1 u'_i + A_1 u'_{i+1} + \Delta x C_1 (u''_{i-1} + u''_{i+1}) =$$

$$\frac{\alpha_1}{\Delta x} (u_{i+1} - u_{i-1}) + \frac{C_1}{\Delta x} (u_{i+2} - u_{i-2})$$

$$A_2 (u'_{i+1} - u'_{i-1}) - \Delta x (C_2 u''_{i-1} + D_2 u''_i + E_2 u''_{i+1}) =$$

$$\frac{\alpha_2}{\Delta x} (u_{i+1} + u_{i-1}) + \frac{b_2}{\Delta x} u_i + \frac{c_2}{\Delta x} (u_{i+2} - u_{i-2})$$

Δηλαδή υπάρχουν δυο πεπλεγμένες εξισώσεις ΠΔ από τις οποίες υπολογίζονται οι παράγωγοι  $u'$  και  $u''$  ταυτόχρονα. Η ακρίβεια είναι  $6^{\text{ης}}$  τάξης για εύρος τριών σημείων (δηλ.  $c_1 = c_2 = 0$ ) και  $8^{\text{ης}}$  τάξης για εύρος πέντε σημείων (δηλ.  $c_1 \neq 0, c_2 \neq 0$ )

Το πλήρες σχήμα υπολογισμού της παραγώγου (συμπεριλαμβανομένων και των ορίων) δίνεται για το  $6^{\text{ης}}$  και  $8^{\text{ης}}$  τάξης ακρίβειας σχήμα σε μορφή πινάκων στο άρθρο (A Family of High Order Finite Difference Schemes with Good Spectral Resolution

*Journal of Computational Physics, Volume 145, Issue 1, 1 September 1998, Pages 332-358 K. Mahesh).*

#### 4.5 Ανάλυση σχημάτων ΠΔ

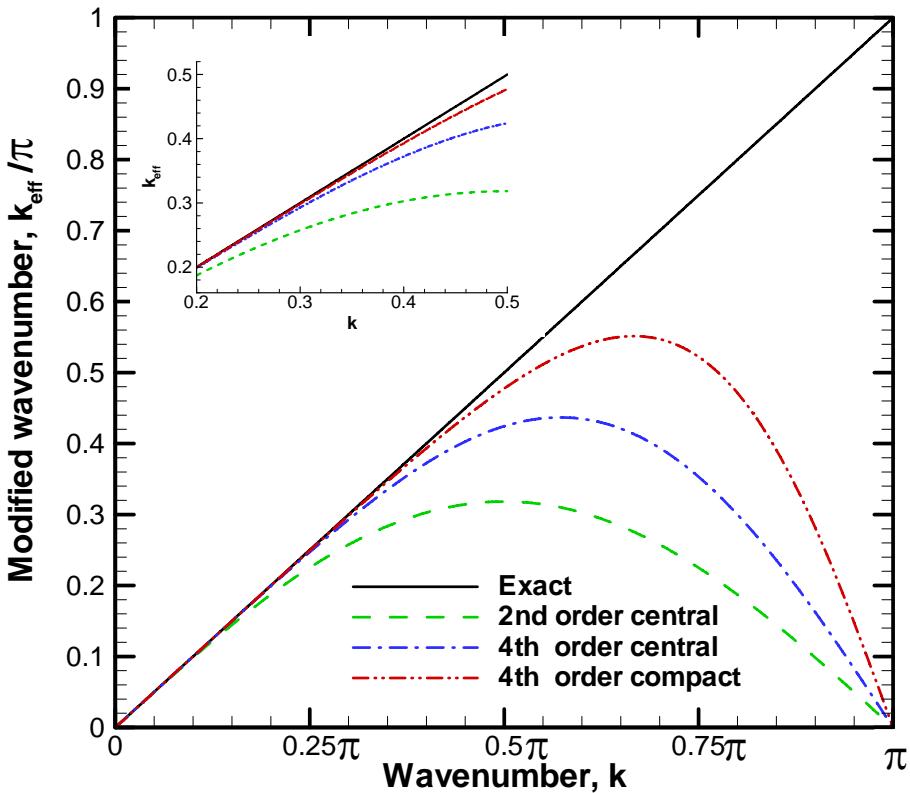
Υποθέτουμε ότι η συνάρτηση της οποίας επιθυμούμε να υπολογίσουμε την παράγωγο είναι της μορφής  $e^{ikx}$ , δηλαδή ένας όρος της διακριτής σειράς Fourier.

$$\hat{f}(x_i) = \sum_{n=-N/2}^{N/2-1} \hat{f}(k_n) e^{ik_n x_i} \quad i = 1, 2, \dots, N$$

$$x_i = i \Delta x$$

$$\hat{f}(kn) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N f(x_i) e^{-ik_n x_i} \quad k_n = \frac{2\pi n}{\Delta x N}$$

που προσεγγίζει μια συνάρτηση  $f(x_i)$  από ημιτονοειδείς όρους.



Σχήμα 4.3 Διακριτική ικανότητα σχημάτων κεντρικών διαφορών.

Η ακριβής τιμή της παραγώγου του όρου  $e^{ikx}$  είναι  $ike^{ikx}$ . Η αναπαράσταση της τιμής της παραγώγου που υπολογίζεται αναλυτικά ή της ακριβούς τιμής της παράγωγου είναι η διαγώνιος στο Σχ. 4.3 που είναι το διάγραμμα στον χώρο κυματαριθμού. Η προσέγγιση της παραγώγου με πεπερασμένες διαφορές εισάγει σφάλμα αποκοπής που είναι ανάλογο της τάξης προσέγγισης. Προσέγγισης της παραγώγου με κεντρικές ΠΔ δεύτερης τάξης συνεπάγεται ότι

$$\frac{d}{dx} \left( e^{ikx} \right) = \frac{e^{ik(x+\Delta x)} - e^{ik(x-\Delta x)}}{2\Delta x} = i \frac{\sin(k\Delta x)}{\Delta x} e^{ikx}$$

Δηλαδή ότι η προσέγγιση ΠΔ προσεγγίζει τον ακριβή κυματαρυθμό  $k$  με τον όρο  $k_{eff}^{2e} = \sin(k\Delta x)/\Delta x$  αντί με  $k_{exact} = ik$ . Παρόμοια βρίσκουμε ότι η προσέγγιση με τέταρτης τάξης κεντρικές ΠΔ έχει κυματαρυθμό.

$$k_{eff}^{2e} = \frac{\sin(k\Delta x)}{\Delta x} [4 - \cos(k\Delta x)]$$

ενώ οι μη ρητές (compact) ΠΔ 4<sup>ης</sup> τάξης ή και ανώτερης έχουν βελτιωμένο κυματορυθμό όπως φαίνεται στο Σχ. 4.3.

Η απόκλιση του κυματοαριθμού διαφόρων προσεγγίσεων ΠΔ από την ακριβή τιμή  $k$  που δείχνεται στο Σχ. 4.3 αντιστοιχεί μόνο σε κεντρικές ΠΔ. Πρέπει να σημειωθεί ότι η απόκλιση κεντρικών διαφορών είναι πραγματική συνάρτηση του  $\Delta x$

που σημαίνει ότι η διαφορά της προσέγγισης ΠΔ από την ακριβή τιμή έχει μόνο διαφορά φάσης. Η διαφορά φάσης για την δεύτερης τάξης προσέγγιση με κεντρικές διαφορές είναι

$$i(k - k_{\text{eff}}) = i \left[ k - k^3 \frac{(\Delta x)^2}{3!} \dots \right] \approx i k^3 \frac{\Delta x}{3!} .$$

Παρόμοια βρίσκουμε ότι για τις μονόπλευρες (ανάντη και κατάντη) προσεγγίζεις ΠΔ προκύπτει μιγαδικός τροποποιημένος κυματαριθμός. Το φανταστικό μέρος του τροποποιημένου κυματαριθμού εκφράζει το σφάλμα διάχυσης (dissipative error). Παραδείγματος χάριν ο κυματαριθμός των πρώτης τάξης μονόπλευρων πεπερασμένων διαφορών είναι

$$k_{\text{eff}} = (1 - e^{-ik\Delta x}) / \Delta x = [(1 - \cos k\Delta x) - i \sin k\Delta x] / \Delta x .$$

που σημαίνει ότι έχουμε σημαντική διάχυση. Για τον λόγο αυτό η διακριτοπίση με πεπερασμένες διαφορές πρώτης τάξης ακρίβειας πρέπει να αποφεύγεται. Κατ' επέκταση διακριτοπήσης με μονόπλευρες ΠΔ έστω και ανώτερης πρέπει να χρησιμοποιούνται με προσοχή.

## ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α.

### A.1 Οριακή συνθήκη διεπιφάνειας (Laplace-Young)

Η ελεύθερη ενέργεια Helmholtz,  $F$ , ορίζεται ως  $F = U - TS$ , όπου  $S$  είναι η εντροπία και είναι η εσωτερική ενέργεια  $U = U(S, N)$  που είναι συνάρτηση της εντροπίας και του αριθμού των moles. Άλλα

$$dU = TdS + \mu dN, \quad T = \left( \frac{\partial U}{\partial S} \right)_N, \quad \mu = \left( \frac{\partial U}{\partial N} \right)_S$$

$$dF = -SdT + \mu dN - PdV$$

και η συνολική μεταβολή στην περιοχή του υγρού και του ατμού και στην διεπιφάνεια τους είναι μηδέν  $dF = 0$

$$dF = -S_i dT + \mu dN_i + \sigma dA_i$$

$$-S_l dT + \mu dN_l - P_l dV_l$$

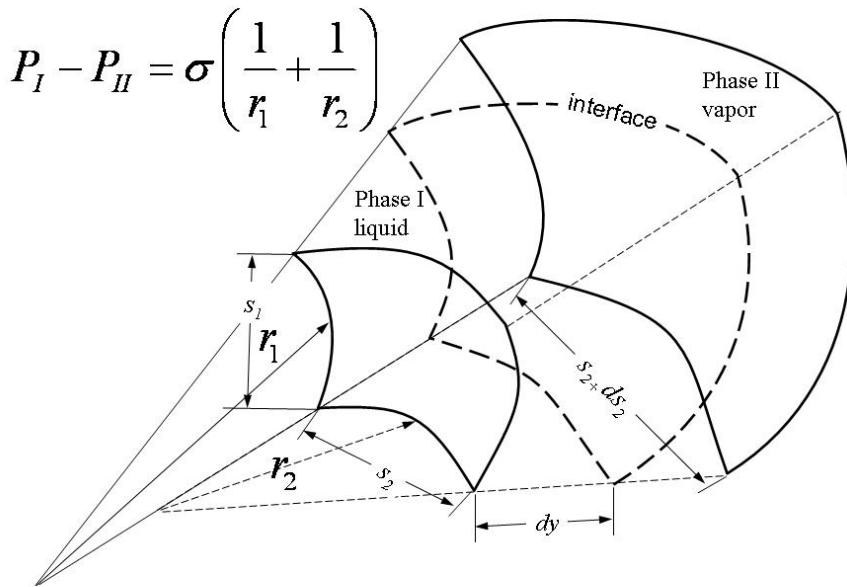
$$-S_v dT + \mu dN_v - P_v dV_v$$

Άλλα η θερμοκρασία δεν αλλάζει, ο ολικός όγκος και ο ολικός αριθμός των moles παραμένει αμετάβλητοι

$$dT = 0$$

$$dV = dV_l + dV_v = 0$$

$$dN = dN_l + dN_v + dN_i = 0$$



Σχήμα A.1 Γεωμετρικοί ορισμοί διεπιφάνειας.

Συνεπώς

$$P_l - P_v = \sigma \frac{dA_i}{dV_l}$$

Αλλά  $dA_i = s_2 ds_1 + s_1 ds_2$ ,  $dV_l = s_1 s_2 dy$ ,  $ds_1 = s_1 dy / r_1$ ,  $ds_2 = s_2 dy / r_2$  οπότε

$$\frac{dA_i}{dV_l} = \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}$$

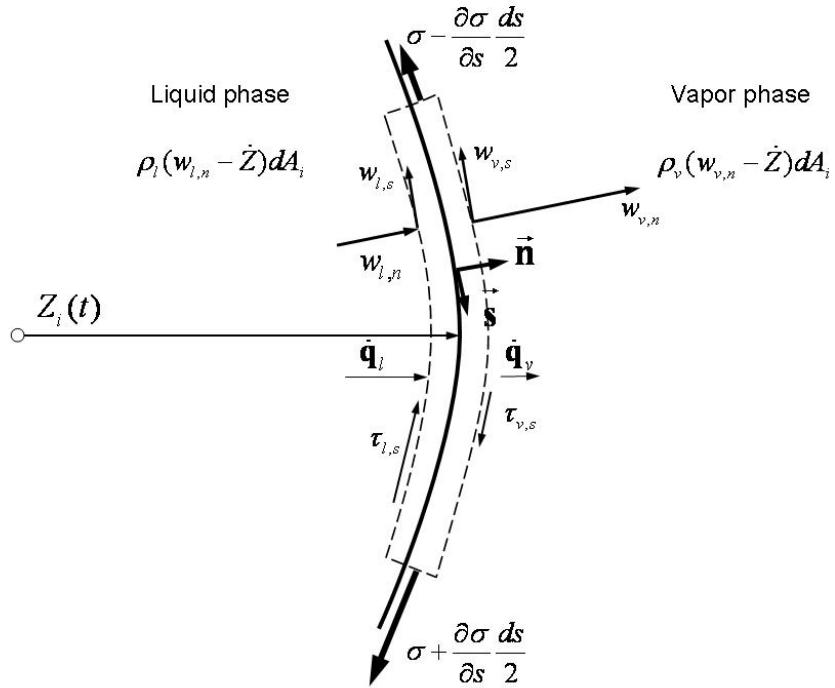
και βρίσκουμε ότι η συνθήκη που σε κατάσταση ισορροπίας συνδέει την διαφορά πίεσης κατά μήκος της διεπιφάνειας με την τάση στην διεπιφάνεια είναι

$$P_l - P_v = \sigma \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right)$$

Η οριακή αυτή συνθήκη στην διεπιφάνεια είναι γνωστή ως η συνθήκη Young-Laplace.

## A.2 Καθορισμός οριακών συνθηκών διεπιφάνειας

Θεωρούμε την διεπιφάνεια  $A_i$  του Σχ. A.2 η οποία κινείται με ταχύτητα  $\dot{Z}_i = dZ_i / dt$ . Στην περιοχή του υγρού μάζα ανά μονάδα όγκου  $\rho_l$  (ρευστό πυκνότητας  $\rho_l$ ) κινείται με ταχύτητα  $\vec{w}_l = (w_{l,n}, w_{l,s})$  προς την διεπιφάνεια.



**Σχήμα A.2** Γεωμετρικοί ορισμοί δυσδιάστατης διεπιφάνειας.

Ο ρυθμός ροής μάζας υγρού που ρέει προς τον όγκο ελέγχου ο οποίος κινείται με την διεπιφάνεια είναι  $\rho_l(w_{l,n} - \dot{Z}_i)$  ενώ ο ρυθμός ροής μάζας ατμού που κινείται από τον όγκο ελέγχου είναι  $\rho_v(w_{v,n} - \dot{Z}_i)$ . Η διατήρηση της μάζας επιβάλει

$$\rho_l(w_{l,n} - \dot{Z}_i) = \rho_v(w_{v,n} - \dot{Z}_i) \Rightarrow \rho_l w_{l,n} - \rho_v w_{v,n} = (\rho_l - \rho_v) \dot{Z}_i$$

Η εξίσωση μεταφοράς ορμής στην κατεύθυνση κάθετη προς την διεπιφάνεια η οποία συμπεριλαμβάνει την διαφορά πίεσης και την δύναμη που οφείλεται σε επιφανειακή τάση είναι

$$P_l - P_v = \sigma \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \rho_l(w_{l,n} - \dot{Z}_i) w_{l,n} - \rho_v(w_{v,n} - \dot{Z}_i) w_{v,n}$$

Οι όροι όμως  $\rho_l(w_{l,n} - \dot{Z}_i) w_{l,n}$  και  $\rho_v(w_{v,n} - \dot{Z}_i) w_{v,n}$  είναι σχετικά μικροί και ενώ η ακτίνα  $r_2 = 0$  για δυσδιάστατη διεπιφάνεια οπότε

$$P_l - P_v = \frac{\sigma}{r_1}$$

Η ορμή κατά την εφαπτόμενη στην διεπιφάνεις κατεύθυνση,  $s$ , επίσης διατηρείται, οπότε

$$\tau_{l,s} - \tau_{v,s} - \frac{\partial \sigma}{\partial s} = \rho_l(w_{l,n} - \dot{Z}_i) w_{l,s} - \rho_v(w_{v,n} - \dot{Z}_i) w_{v,s}$$

αλλά για μικρές μεταβολές της επιφανειακής τάσης,  $\partial \sigma / \partial s \approx 0$ , λόγω της συνθήκης μη διολίσθησης,  $w_{l,s} = w_{v,s}$ , και λαμβάνοντας υπ' όψη την διατήρηση της μάζας βρίσκουμε μία ακόμη οριακή συνθήκη στην διεπιφάνεια

$$\tau_{l,s} = \tau_{v,s} \Rightarrow \mu_l \left( \frac{\partial w_{l,n}}{\partial s} - \frac{\partial w_{l,s}}{\partial n} \right)_{z=Z_i} = \mu_v \left( \frac{\partial w_{v,n}}{\partial s} - \frac{\partial w_{v,s}}{\partial n} \right)_{z=Z_i}$$

Το ισοζύγιο θερμικής ενέργειας στην διεπιφάνεια επιβάλει

$$q_l - q_v = \rho_l(w_{l,n} - \dot{Z}_i) \hat{h}_l - \rho_v(w_{v,n} - \dot{Z}_i) \hat{h}_v$$

όπου  $\hat{h}_l$ ,  $\hat{h}_v$  είναι οι λανθάνουσες θερμότητες ατμοποίησης και υγροποίησης η παραπάνω σχέση λόγω της εξίσωσης συνέχειας γίνεται

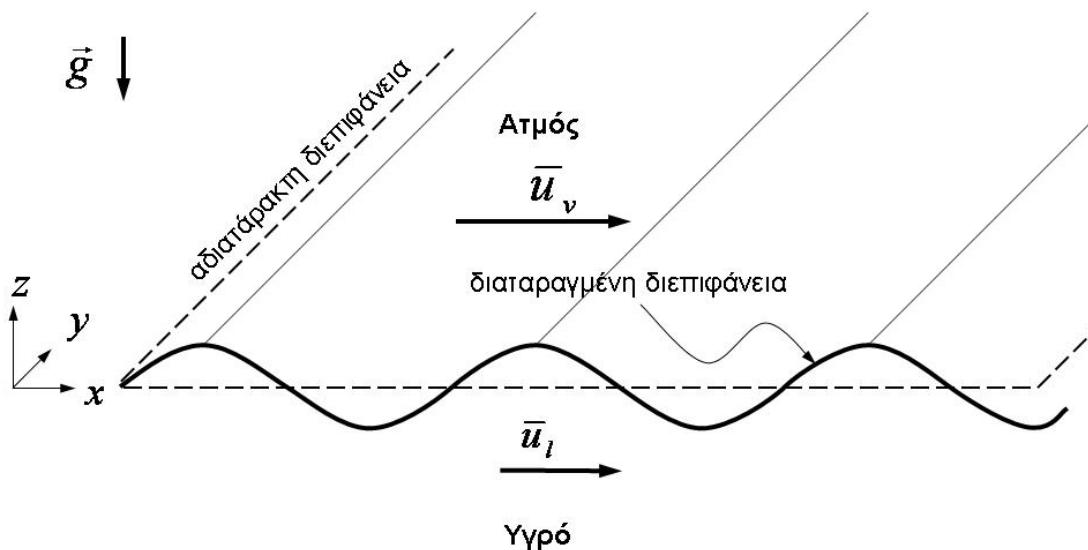
$$q_l - q_v = \rho_l(w_{l,n} - \dot{Z}_i) \hat{h}_v, \quad \hat{h}_{lv} = \hat{h}_l - \hat{h}_v$$

Υποθέτοντας τοπική θερμοδυναμική ισορροπία, μικρή καμπυλότητα ( $P_l \approx P_v$ ) και απλές ουσίες (π.χ. νερό/ατμό, υγρο/αέριο άζωτο) και όχι μίγματα τότε υπάρχει μία μοναδική σχέση μεταξύ θερμοκρασίας και πίεσης ατμού,  $T_{sat} = T_{sat}(P_v)$  η οποία και αποτελεί την αναγκαία οριακή συνθήκη για μεταφορά θερμότητας στην διεπιφάνεια. Διαφορετικά η οριακή συνθήκη που επιβάλλεται από το θερμικό ισοζύγιο στην διεπιφάνεια είναι.

$$k_v \left( \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{z=Z_i} - k_l \left( \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{z=Z_i} = \rho_l (w_{l,n} - \dot{Z}_i) \hat{h}_v$$

### A.3 Η αστάθεια Kelvin-Helmholtz

Θεωρούμε επίπεδη αδιατάρακτη διεπιφάνεια στο επίπεδο  $z = 0$  στην οποία ο ατμός κινείται με ομοιόμορφη σταθερή ταχύτητα  $\bar{u}_v$ , και το υγρό κινείται με σταθερή ταχύτητα  $\bar{u}_l$  κατά μήκος του άξονα  $x$  που ορίζει την διεπιφάνεια. Οι ταχύτητες κατά τις άλλες διευθύνσεις είναι μηδενικές. Έστω ότι εισάγεται μία δυσδιάστατη διαταραχή  $\delta(x,t)$  με μεταβλητότητα μόνο κατά την  $x$  κατεύθυνση και στον χρόνο. Επίσης υποθέτουμε ότι ο αριθμός Reynolds είναι μεγάλος και οι όροι ιξώδους μπορεί να αμεληθούν.



**Σχήμα A.3** Διαταραχή διεπιφάνειας για την ανάλυση γραμμικής ευστάθειας.

Σύμφωνα με την παραπάνω περιγραφή οι εξισώσεις που ικανοποιούν την ροή είναι οι εξισώσεις Euler για ασυμπίεστη ροή. Οι εξισώσεις Euler σε Καρτεσιανές συντεταγμένες είναι:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} &= 0 \\ \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + w \frac{\partial u}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho_l} \frac{\partial P}{\partial x} \\ \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + w \frac{\partial w}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho_l} \frac{\partial P}{\partial z} - \rho g\end{aligned}$$

Θεωρούμε ότι μετά την μικρή διαταραχή της διεπιφάνειας οι συνιστώσες της ταχύτητας και η πίεση είναι άθροισμα μιας βασικής ροής, η οποία ικανοποιεί τις εξισώσεις Euler και μία διαταραχή

$$u = \bar{u} + u', \quad v = \bar{v} + v', \quad u = \bar{P} + P'$$

Οι ποσότητες αυτές αντικαθίστανται στις εξισώσεις Euler και λαμβάνοντας υπ' όψη ότι  $\partial \bar{u} / \partial x = \partial \bar{u} / \partial z = 0$  και  $\bar{w} = 0$ , και αμελώντας ανώτερης τάξης, όπως όρους της μορφής  $u' \bar{u}' / \partial x$  καταλήγουμε στο παρακάτω γραμμικό σύστημα διαφορικών εξισώσεων που πρέπει να ικανοποιούν οι διαταραχές

$$\begin{aligned}\frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial w'}{\partial z} &= 0 \\ \frac{\partial u'}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial u'}{\partial x} &= -\frac{1}{\rho_l} \frac{\partial P'}{\partial x} \\ \frac{\partial w'}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial w'}{\partial x} &= -\frac{1}{\rho_l} \frac{\partial P'}{\partial z}\end{aligned}$$

Οι εξισώσεις διατήρησης ορμής για τις διαταραχές μας δίνουν μία εξίσωση Laplace την οποία πρέπει να ικανοποιεί η πίεση διαταραχών.

$$\frac{\partial^2 P'}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P'}{\partial z^2} = 0$$

Επειδή όμως όλες οι εξισώσεις για τις διαταραχές είναι γραμμικές αρκεί να υποθέσουμε ότι η αρχική μορφή διαταραχής  $\delta(x, t=0)$  της διεπιφάνειας είναι αρμονική

$$\delta(x, 0) = A e^{i \alpha x}$$

Δηλαδή ημιτονοειδής με μήκος κύματος  $\lambda = 2\pi/a$  εφ' όσον μόνο το πραγματικό μέρος έχει φυσική σημασία. Λόγω γραμμικής εξάρτησης, για τους μεταγενέστερους χρόνους μπορούμε να υποθέσουμε εξάρτηση των διαταραχών της μορφής

$$\begin{aligned}\delta(x, t) &= A e^{i \alpha x + \beta t} \\ w'(x, z, t) &= \hat{w}(z) e^{i \alpha x + \beta t} \\ P'(x, z, t) &= \hat{P}(z) e^{i \alpha x + \beta t}\end{aligned}$$

όπου  $a$  είναι πραγματικό και  $\beta = \beta_{real} + i\beta_{imag}$  μιγαδικό και όταν το πραγματικό μέρος  $\beta_{real}$  είναι θετικό οι διαταραχές ενισχύονται με την πάροδο του χρόνου.

Μετά από αντικατάσταση της παραπάνω μορφής των λύσεων το εύρος της πίεση διαταραχών στην διεπιφάνεια,  $\hat{P}(z)$ , βρίσκεται από την λύση της γραμμικής συνήθους διαφορικής

$$\frac{d^2 \hat{P}(z)}{dz^2} = a \hat{P}(z)$$

Επειδή όμως το εύρος των διαταραχών μηδενίζεται μακριά από την διεπιφάνεια,  $\lim \hat{P}(z) |_{z \rightarrow \pm\infty} = 0$ , η λύσεις για το εύρος πίεσης διαταραχών ατμού και υγρού είναι

$$\begin{aligned}\hat{P}_v(z) &= C_v e^{-az} \\ \hat{P}_l(z) &= C_l e^{az}\end{aligned}$$

Μετά από αντικατάσταση των  $w'(x, z, t) = \hat{w}(z)e^{iax+\beta t}$ ,  $P'(x, z, t) = \hat{P}(z)e^{iax+\beta t}$  στην εξίσωση κάθετης ορμής των διαταραχών βρίσκουμε

$$\hat{w}(z) = -\frac{\left( d\hat{P}(z) / dz \right)}{\rho(\beta + ia\bar{u})}$$

Και μετά από αντικατάσταση των λύσεων για το εύρος διαταραχών βρίσκουμε

$$\begin{aligned}\hat{w}_v(z) &= \frac{aC_v e^{-az}}{\rho_v(\beta + ia\bar{u}_v)} \\ \hat{w}_l(z) &= -\frac{aC_l e^{az}}{\rho_l(\beta + ia\bar{u}_l)}\end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας την μορφή διαταραχής  $w'(x, z, t) = \hat{w}(z)e^{iax+\beta t}$  στην εξίσωση συνέχειας βρίσκουμε

$$u'(x, z, t) = \frac{i}{a} \left( \frac{d\hat{w}(z)}{dz} \right) e^{iax+\beta t}$$

Η παραπάνω λύση και η μορφή την διαταραχών για την πίεση και την κατακόρυφη ικανοποιεί την εξίσωση ορμής διαταραχών κατά την  $x$  κατεύθυνση.

Στην διεπιφάνεια η οριακή συνθήκη για την διαταραχή ταχύτητας  $w'(x, z \rightarrow 0, t)$  είναι

$$w'(x, t)_{z \rightarrow 0} = \frac{\partial \delta}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \delta}{\partial x}$$

Δηλαδή η κάθετη ταχύτητα διαταραχής στην διεπιφάνεια από την πλευρά του ατμού και του υγρού είναι

$$\frac{aC_v e^{-az}}{\rho_v(\beta + i\alpha \bar{u}_v)} = \beta A + i\alpha A \bar{u}_v$$

$$-\frac{aC_l e^{az}}{\rho_l(\beta + i\alpha \bar{u}_l)} = \beta A + i\alpha A \bar{u}_l$$

από τις δύο αυτές σχέσεις βρίσκουμε τις σταθερές  $C_v$  και  $C_l$

$$C_v = A \frac{\rho_v}{\alpha} (\beta + i\alpha \bar{u}_v)^2$$

$$C_l = -A \frac{\rho_l}{\alpha} (\beta + i\alpha \bar{u}_l)^2$$

Στην διεπιφάνεια η ακτίνα καμπυλότητας  $r_2 \rightarrow \infty$  και η συνθήκη Young – Laplace είναι  $P_l - P_v = \sigma / r_1$  όπου η ακτίνα καμπυλότητας  $r_1$  δίνεται από

$$r_1 = -\frac{\left[1 + \left(\frac{\partial \delta}{\partial x}\right)^2\right]^{3/2}}{\frac{\partial^2 \delta}{\partial x^2}}$$

και

$$P_l = \bar{P}_l + P'_l, \quad \bar{P}_l = P_o - \rho_l g z$$

$$P_v = \bar{P}_v + P'_v, \quad \bar{P}_v = P_o - \rho_v g z$$

Αντικαθιστώντας τις παραπάνω σχέσεις στην συνθήκη Young – Laplace και αμελώντας όρους ανώτερης τάξης βρίσκουμε την γραμμικοποιημένη οριακή συνθήκη στην διεπιφάνεια

$$C_l - C_v = A \left[ (\rho_l - \rho_v) g + \sigma a^2 \right]$$

Αντικαθιστώντας τις τιμές των σταθερών  $C_l, C_v$  στην παραπάνω σχέση και λύνοντας ως προς  $\beta$  έχουμε

$$\beta = \pm \frac{\left\{ a^2 \rho_l \rho_v (\bar{u}_l - \bar{u}_v)^2 - [\sigma a^3 + (\rho_l - \rho_v) g a] (\rho_l + \rho_v) \right\}^{1/2}}{\rho_l + \rho_v} - i \frac{a (\rho_l \bar{u}_l + \rho_v \bar{u}_v)}{\rho_l + \rho_v}$$

Το πραγματικό μέρος  $\beta_{real}$  είναι θετικό όταν

$$|\bar{u}_l - \bar{u}_v| > \left\{ \frac{(\rho_l + \rho_v) \left[ \sigma a + (\rho_l - \rho_v) \frac{g}{a} \right]}{\rho_l \rho_v} \right\}^{\frac{1}{2}}$$

Δηλαδή για μία διαταραχή μήκους κύματος  $\lambda$  που επιβάλλεται στην διεπιφάνεια αστάθεια της διεπιφάνειας προκύπτει όταν

$$|\bar{u}_l - \bar{u}_v| > \left\{ \frac{(\rho_l + \rho_v) \left[ \frac{2\pi\sigma}{\lambda} + (\rho_l - \rho_v) \frac{g\lambda}{2\pi} \right]}{\rho_l \rho_v} \right\}^{\frac{1}{2}}$$

Η ελάχιστη τιμή του όρου στο δεξί μέλος είναι για χωρικές διαταραχές με κρίσιμο μήκος κύματος  $\lambda_c$  ή αντίστοιχο κρίσιμο κυματαριθμό  $a_c$

$$a_c = \left[ \frac{(\rho_l - \rho_v) g}{\sigma} \right]^{1/2}$$

με την αντίστοιχη κρίσιμη ταχύτητα  $u_c$

$$u_c = \left[ \frac{2(\rho_l - \rho_v)}{\rho_l} \right]^{1/2} \left[ \frac{\sigma(\rho_l - \rho_v) g}{\rho_v^2} \right]^{1/4}$$

και οι διαταραχές είναι ασταθείς όταν  $|\bar{u}_l - \bar{u}_v| > u_c$

Με εναλλαγή του πρόσημου για την βαρύτητα βρίσκουμε ότι η ευστάθεια του συστήματος ατμού νερού προκύπτει όταν

$$|\bar{u}_l - \bar{u}_v| > \left\{ \frac{(\rho_l + \rho_v) \left[ \sigma a - (\rho_l - \rho_v) \frac{g}{a} \right]}{\rho_l \rho_v} \right\}^{\frac{1}{2}}$$

Εάν επί πλέον  $\bar{u}_l = \bar{u}_v = 0$  τότε αστάθεια της διεπιφάνεις μεταξύ ακίνητου ατμού που καλύπτεται από ακίνητο νερό προκύπτει όταν

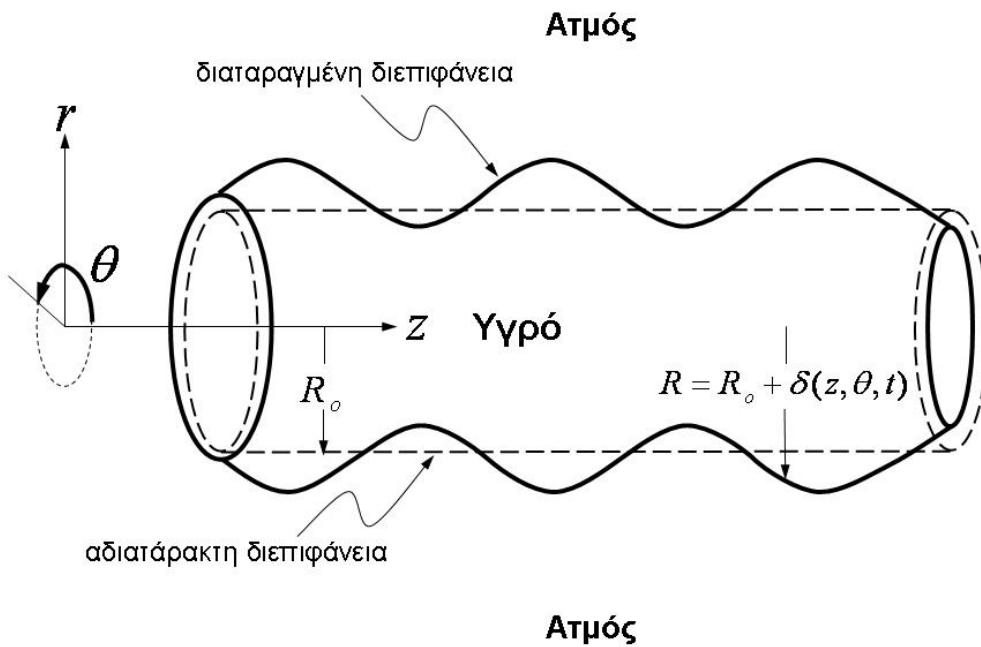
$$a > a_c = \left[ \frac{(\rho_l - \rho_v) g}{\sigma} \right]^{1/2} \quad \text{ή} \quad \lambda > \lambda_c = 2\pi \left[ \frac{\sigma}{(\rho_l - \rho_v) g} \right]^{1/2}$$

Η αστάθεια αυτής της μορφής είναι γνωστή ως αστάθεια Reyleigh – Taylor και για το σύστημα νερού ατμού σε  $100^\circ C$  προκύπτει για  $\lambda > \lambda_c = 1.6 \text{ cm}$

Οι αστάθειες Kelvin-Helmholtz και Reyleigh – Taylor αποτελούν καλά προβλήματα με τα οποία μπορούμε να ελέγξουμε την ακρίβεια των υπολογισμών και την καταλληλότητα των αλγορίθμων.

#### A.4 Ευστάθεια δέσμης (jet stability)

Η ευστάθεια κυλινδρικής δέσμης μπορεί να αναλυθεί με την ίδια μεθοδολογία για να βρούμε τις συνθήκες κάτω από τις οποίες μία λεπτή δέσμη αποδομείται (jet breakup). Θεωρούμε κυλινδρική δέσμη ακτίνας  $R_o$  με ομοιόμορφη σταθερή ταχύτητα  $u_l$  κατά την κατεύθυνση  $z$ . Θεωρούμε σύστημα συντεταγμένων κινούμενο με σταθερή ταχύτητα  $u_l$  και τις επιδράσεις του ιξώδους και της βαρύτητας αμελητέες.



**Σχήμα A.4 Κυλινδρική δέσμη στην αδιατάρακτη και διαταραγμένη μορφή**

Η κίνηση του ρευστού στην δέσμη και οι διαταραχές περιγράφονται από τις εξισώσεις Euler σε κυλινδρικές συντεταγμένες.

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{r} \frac{\partial(r u_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial u_z}{\partial z} &= 0 \\
 \frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_r}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta^2}{r} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho_l} \frac{\partial P}{\partial r} \\
 \frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} - \frac{u_\theta u_r}{r} + u_z \frac{\partial u_\theta}{\partial z} &= -\frac{1}{r \rho_l} \frac{\partial P}{\partial \theta} \\
 \frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} &\quad + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_l} \frac{\partial P}{\partial z}
 \end{aligned}$$

Όπως και προηγουμένως υποθέτουμε διαταραχές της μορφής

$$u_r = \bar{u}_r + u'_r, \quad u_\theta = \bar{u}_\theta + u'_\theta, \quad u_z = \bar{u}_z + u'_z, \quad P = \bar{P} + P'$$

Όπου για το κινούμενο με την δέσμη σύστημα συντεταγμένων  $\bar{u}_r = \bar{u}_\theta = \bar{u}_z = 0$ . Με αντικατάσταση και παραλείποντας τους όρους ανώτερης τάξης βρίσκουμε.

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial(ru'_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u'_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial u'_z}{\partial z} &= 0 \\ \frac{\partial u'_r}{\partial t} &= -\frac{1}{\rho_l} \frac{\partial P'}{\partial r} \\ \frac{\partial u'_\theta}{\partial t} &= -\frac{1}{r\rho_l} \frac{\partial P'}{\partial \theta} \\ \frac{\partial u'_z}{\partial t} &= -\frac{1}{\rho_l} \frac{\partial P'}{\partial z} \end{aligned}$$

Με την αντίστοιχη εξίσωση Laplace για την πίεση

$$\nabla^2 P' = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial P'}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial^2 P'}{\partial \theta^2} \right) + \frac{\partial^2 P'}{\partial z^2} = 0 .$$

Θεωρούμε διαταραχή της διεπιφάνεις ημιτονοειδούς μορφής

$$R = R_o + \delta_o B(t=0) e^{i(m\theta+\alpha z)} = R_o + \delta_o B(t) e^{i(m\theta+\alpha z)}$$

Με αντίστοιχες αποκρίσεις για την πίεση και την ταχύτητα κατά την ακτινική διεύθυνση.

$$\begin{aligned} P'(r, \theta, z, t) &= A(t) \hat{P}(r) e^{i(m\theta+\alpha z)} \\ u'_r(r, \theta, z, t) &= A(t) \hat{u}(r) e^{i(m\theta+\alpha z)} \end{aligned}$$

όπου αξισυμμετρικές διαταραχές αντιστοιχούν σε  $m = 0$ .

Αντικατάσταση των παραπάνω μορφών διαταραχών στην εξίσωση για την πίεση δίνει μία συνήθη διαφορική για το εύρος της πίεσης διαταραχών.

$$r^2 \frac{d^2 \hat{P}}{dr^2} + r \frac{d\hat{P}}{dr} - (m^2 + a^2 r^2) \hat{P} = 0$$

η λύση της οποίας δίνεται με τις τροποποιημένες συναρτήσεις Bessel τάξης  $m$ , πρώτου είδους  $I_m$ , και δευτέρου είδους  $K_m$ .

$$\hat{P}(r) = p_1 I_m(ar) + p_2 K_m(ar)$$

$$\text{αλλά } \lim_{r \rightarrow 0} K(r) = \infty \text{ οπότε } \hat{P}(r) = p_1 I_m(ar)$$

Από την εξίσωση ορμής για την ακτινική κατεύθυνση έχουμε

$$\frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \hat{u}_r(r) = -\frac{1}{\rho} \frac{d\hat{P}(r)}{dr} \quad \dot{\eta} \quad \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} = -\frac{1}{\rho \hat{u}_r(r)} \frac{d\hat{P}(r)}{dr} = \beta$$

δηλαδή

$$A(t) = A_o e^{\beta t}$$

αλλά,  $\hat{P}(r) = p_1 I_m(ar)$  και με την ταυτότητα  $dI_m(x)/dx = I_{m+1}(x) + (m/x)I_m(x)$  βρίσουμε

$$\hat{u}_r(r) = -\left( \frac{p_1 a}{\rho_l \beta} \right) \left[ I_{m+1}(ar) + \frac{m}{ar} I_m(ar) \right]$$

Η ταχύτητα κατά την ακτινική κατεύθυνση στην διεπιφάνεια είναι η χρονική μεταβολή της διαμέτρου της δέσμης στην διεπιφάνεια

$$\frac{dR}{dt} = \delta_o B(t) e^{i(m\theta + az)} = u'(R_o) = A(t) \hat{u}(R_o) e^{i(m\theta + az)} \Rightarrow B(t) = \left[ \frac{A_o \hat{u}(R_o)}{\beta \delta_o} \right] e^{\beta t}$$

άλλα  $B(0) = 1$  συνεπώς

$$A_o = \frac{\beta \delta_o}{\hat{u}(R_o)} \quad \text{και} \quad A(t) = \frac{\beta \delta_o}{\hat{u}(R_o)} e^{\beta t}$$

Στην διεπιφάνεια ισχύει η σχέση Young – Laplace  $(P_l - P_v)_{r=R_o} = \sigma(1/r_1 + 1/r_2)$  η οποία για  $\delta = 0$  είναι  $(P_l - P_v)_{r=R_o} = \sigma/R_o$ , δηλαδή  $(P_v)_{r=R_o} = (P_l)_{r=R_o} - \sigma/R_o$ . Η σχέση Young – Laplace για  $\delta \neq 0$ ,  $\delta/R_o \ll 1$  με τις γεωμετρικές σχέσεις  $1/r_1 = [1 - \delta/(dR/dr)]/R_o + m^2/R_o^2$ ,  $1/r_2 = -(d^2\delta/dz^2) = a^2\delta$  και  $P_l = \bar{P}_l + P'_l$  δίνει μία εξίσωση που λύνεται ως προς τον άγνωστη παράμετρο  $\beta$

$$\beta^2 = -\left( \frac{\sigma a^3}{\rho_l} \right) \left[ \frac{1 + (m^2 + 1)}{a^2 R_o^2} \right] \left[ \frac{m}{a R_o} + \frac{I_{m+1}(a R_o)}{I_m(a R_o)} \right]$$

αλλά  $I_m(a R_o) > 0$ ,  $\forall m \neq 0$  οπότε το δεξί μέλος είναι αρνητικό για και το  $\beta$  είναι πάντα φανταστικό για  $m \neq 0$ . Το  $\beta$  είναι πραγματικό και θετικό όταν

$$a > a_c = \frac{1}{R_o}$$

Δηλαδή η δέσμη είναι ασταθής για αξονο-συμμετρικές διαταραχές με μήκος κύματος

$$\lambda = 2\pi/a > \lambda_c = 2\pi R_o$$

Το μέγιστο μήκος κύματος για ασταθείς διαταραχές είναι

$$a_{\max} = \frac{0.7}{R_o}, \quad \beta_{\max} = 0.34 \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_l R_o^3}}$$