Egyetemi doktori értekezés

Tranziens kétfázisu folyadékáramlást leiró parciális differenciálegyenletek numerikus megoldásának problémái

D ú s Magdolna

1983.
Budapest

Tartalomjegyzék

Bevezetés

Az utóbbi évtizedben széleskörü kutatás foglalkozik a tranziens /időben változó/ egy- és kétfázisu áramlás leirásával. Ezek ismerete nagyon sok ipari, müszaki probléma vizsgálatához elengedhetetlen. Kutatásuk része az atomreaktorok biztonsági analizisének. Ahhoz, hogy a reaktorokat biztonságosan lehessen üzemeltetni, szükség van a bennük lejátszódó folyamatok és az elképzelhető balesetek modellezésére. Erre a célra több nagy számitógépes programrendszert hoztak létre különböző kutató intézetekben s fejlesztésük folyamatosan történik ujabb, pontosabb modellek beépitésével, hatékonyabb numerikus megoldási módszerek kidolgozásával. Ezeknek a programrendszereknek fontos része az egy- és kétfázisu áramlás modellezése. Tranziens egyfázisu áramlási problémák a reaktorok inditásakor, leállitásakor, egy-egy hütőkör lezárásakor lépnek fel. Tranziens kétfázisu áramlás jön létre különböző üzemzavari jelenségek esetén. Pl. a nyomástartó rendszer meghibásodása esetén /primerköri csőtörés vagy valamilyen szelep nyitva maradása/ a nyomás leesik, emiatt a hütőfolyadék elkezd forrni. Ezt az áramlást le kell tudni irni az idő függvényében ahhoz, hogy a feltételezett baleset esetén megfelelő vészhütést lehessen biztositani.

Ezeket a tranziens jelenségeket parciális differenciálegyenletek irják le; a tömeg, az impulzus és az energia megmaradásának egyenletei. Egy fázis és egy térdimenzió esetén 3 parciális differenciálegyenletre van szükség, két fázis esetén egy dimenzióban az alkalmazott fizikai modelltől függően 6-ra is nőhet a felhasznált megmaradási egyenletek száma.

A modellek és a megoldásukra használható numerikus módszerek összefoglalása eddig még nem történt meg az irodalomban. A különböző modellek más és más körülmények között adnak a gyakorlat számára elfogadható eredményt. A dolgozattal segitséget próbálok nyujtani a hazai felhasználóknak, hogy mikor melyik modellel érdemes számolni. Bizonyos esetekben elegendő egy durvább, viszont kevesebb számitásigényü modell alkalmazása, máskor viszont szükség lehet pontosabb, részletesebb modell kidolgozására.

A fizikai modelleknek megfelelő matematikai modellek numerikus megoldása is sok problémát vet fel. Nem lehet általánosan használható módszert megadni, mindig a konkrét feladathoz kell igazodni. Vannak viszont általános irányelvek a módszerek felirására, melyeknek egyrészt elméleti alapja van, másrészt gyakorlati tapasztalatok bizonyitják hasznosságukat. Ezeket is összefoglalom a dolgozatban.

A fizikai jelenségek, folyamatok nagy része parciális differenciálegyenletekkel irható le. Ezek általános megoldása még kevesebb esetben irható fel, mint a közönséges differenciálegyenletek esetében. Ha felirható, akkor is ritkán segit a konkrétan felmerülő fizikai kérdés megválaszolásában. Az alkalmazások te-

rületén általában olyan megoldásokat keresünk, melyek bizonyos további feltételeknek is eleget tesznek. Ilyenek a kezdeti és a peremfeltételek. Közönséges differenciálegyenletek esetében a kivánt megoldás gyakran előállitható az általános megoldásban szereplő tetszőleges konstans alkalmas megválasztásával. Parciális differenciálegyenletek esetében ez csak kivételes esetekben lehetséges. Ennek oka, hogy az általános megoldás tetszőleges konstans helyett tetszőleges függvényt tartalmaz /ha egyáltalán felirható/.

Közönséges differenciálegyenletek esetén a szükséges feltételek sokféleképpen megadhatók. A feladatnak általában lesz egyértelmü megoldása, ha számuk megfelel az egyenlet rendjének. Ez azonban parciális differenciálegyenletekre nem igaz, a feltételek nem irhatók fel tetszőleges módon.

Mivel a matematikai fizika feladatai reális fizikai folyamatokat irnak le, ezért ezeket a feladatokat ugy kell megfogalmaznunk, hogy eleget tegyenek az alábbi természetes követelményeknek:

a./ Valamely M_1 függvényosztályban létezzék megoldás.

b./ Valamely M_2 függvényosztályban a megoldás egyértelmü legyen.

c./ A megoldás folytonosan függjön a feladat adataitól /a kezdeti és peremfeltétel adataitól, a differenciálegyenlet jobb oldalától, az egyenlet együtthatóitól, stb./

Definició:

Az olyan feladatot, amely eleget tesz az a./ - c./ követelményeknek, korrekt kitüzésü feladatnak nevezzük, a megfelelő $M_1 \cap M_2$ függvényosztályt pedig a korrekt kitüzés osztályának. [1]

A megoldás folytonos függését az adatoktól azért kell megkövetelnünk, mert a fizikai probléma adatai általában csak kisérleti uton, közelitőleg határozhatók meg; ezért nem engedhető meg, hogy a feladat megoldása lényegesen függjön a mérési hibától.

A különböző tipusu parciális differenciálegyenletek esetén különböző kezdeti és peremfeltételekre van szükség ahhoz, hogy a feladat korrekt kitüzésü legyen. Hiperbolikus egyenletek esetén a karakterisztikák elmélete nyujt segitséget az alkalmas feltételek megválasztásában.

A parciális differenciálegyenleteknek csak kis része oldható meg egzakt módon. A feladat bonyolultsága miatt szükség van olyan numerikus megoldási módszerek kidolgozására, melyek lehetővé teszik a számitógépes megoldást. Mivel az adatok általában mérések eredményei és a számábrázolás pontossága is korlátozott a számitógépen, az analitikus megoldások is csak közelitő numerikus eredményt adnak. Emellett sokszor bonyolultabb lenne az analitikus megoldás numerikus kiértékelése, mint a numerikus módszer végigszámolása. Általában a numerikus közelitő módszerek

adnak egyszerübben és hatékonyabban megfelelő pontosságu megoldást. Emellett az integrálás tartományának vagy a kezdeti és peremfeltételeknek a megváltoztatása gyakran lehetetlenné teszi az analitikus megoldást, ugyanakkor a numerikus módszereket nem befolyásolja döntően.

A kétfázisu áramlás matematikai modelljei hiperbolikus ill. hiperbolikus jellegü parciális differenciálegyenletrendszer alkotnak. Hiperbolikus egyenletek esetén a karakterisztikák módszere gyorsan és aránylag egyszerüen ad viszonylag pontos közelitést. Ennek a módszernek az alkalmazhatósági köre azonban eléggé korlátozott, kiterjesztése kettőnél több független változóra bonyolult. A számitás nehézkessé válik, ezért nemigen használatos.

A legáltalánosabban használható és leginkább elterjedt numerikus módszer a véges differenciák modszere, melyben a deriváltakat véges differenciákkal helyettesitjük egy, az értelmezési tartományra helyezett rács segitségével. Az a módszer lineáris és nemlineáris egyenletekre egyaránt használható, s egyszerüen kifejezhető több dimenzióra is.

A dolgozat első részében röviden összefoglalom a karakterisztikák módszerét hiperbolikus egyenletekre. Itt vizsgálom, hogy a karakterisztikák segitségével hogyan lehet meghatározni a szükséges peremfeltételeket ahhoz, hogy a hiperbolikus feladat korrekt kitüzésü legyen.

Ezután vizsgálom a véges differenciák módszerét. Ennek alkalmazásakor fellépő legfontosabb kérdések a pontosság, a stabilitás és a konvergencia. A Lax-féle ekvivalencia tétel szerint bizonyos feltételek mellett a konvergencia és stabilitás ekvivalens fogalmak [2], ezért különösen fontos a stabilitás vizsgálata. Az erre a célra legelterjedtebben használt módszert Neumann dolgozta ki [3].

A folyadékáramlási modellek egy része nem teljesen hiperbolikus. Ezzel kapcsolatban ujabb problémák merülnek fel, hogy mikor lesz a feladat korrekt kitüzésü és hogyan lehet stabil megoldási módszereket megadni. Eddig még nem sikerült olyan általános elméletet kidolgozni, amely minden esetet magába foglal. Ezzel a kérdéssel kapcsolatban vizsgálom az első rész utolsó fejezetében, hogy mi az összefüggés a karakterisztikák és a differenciálegyenlet-rendszer stabilitása között.

A dolgozat második részében foglalom össze az egy- és kétfázisu áramlásra kidolgozott legfontosabb modelleket és ezek numerikus megoldását a véges differenciák módszerével. Mivel a modellek egy része nem teljesen hiperbolikus egyenletrendszert alkot, a hozzájuk tartozó kezdeti érték feladat nem korrekt kitüzésü. Ezzel kapcsolatban a kutatók véleménye megoszlik. Egy részük azt állitja, hogy a feladat átalakitható korrekt kitüzésüvé, ha figyelembe veszünk bizonyos jelenségeket, melyeket eddig elhanyagoltunk. Tehát szerintük a modell eredetileg helytelen vagy hiányos volt. E csoport szerint minden fizikai jelenséget le kell tudni irni

korrekt kitüzésü feladat formájában. Az utóbbi időben azonban egyre több kutatás irányul olyan numerikus sémák meghatározására, melyek segitségével a nem korrekt kitüzésü feladat megoldása is közelithető megfelelő pontossággal annak ellenére,hogy ez nem függ folytonosan a kezdeti értékektől. Erre példa a dolgozat második részének végén szereplő két modell numerikus számitása.

I. Rész

1.1 A karakterisztikák módszere hiperbolikus egyenletekre

A hiperbolikus parciális differenciálegyenletek megoldására használható numerikus módszer a karakterisztikák módszere. Lényege, hogy az egyenletet vagy egyenletrendszert a karakterisztikák segitségével közönséges differenciálegyenlet-rendszerre vezetjük vissza. Két fő lépésre bontható: az elsőben meghatározzuk a karakterisztikákat, a másodikban az igy kapott közönséges differenciálegyenleteket integráljuk a karakterisztikák mentén.

Ez a módszer szinte kizárólag csak két független változó esetén használatos. Ilyenkor ez a legpontosabb és legkényelmesebb eljárás. Több független változó esetén azonban lényegesen bonyolultabbá válik, ezért nem szokás alkalmazni.

A karakterisztikák vizsgálata segitséget nyujt annak eldöntésében, hogy milyen kezdeti és peremfeltételekre van szükség ahhoz, hogy a megoldás egyértelmü legyen.

Minden parciális differenciálegyenlet átalakitható egy elsőrendü parciális differenciálegyenlet-rendszerré. A következőkben csak elsőrendü rendszereket vizsgálunk. Ezek közül is azokat, melyek az alábbi mátrix alakban irható fel.

$$A \frac{\partial \underline{v}}{\partial x} + B \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} = \underline{c} \qquad /1.1/$$

ahol $A = [a_{ij}]_{n\times n}$, $B = [b_{ij}]_{n\times n}$ az együttható mátrixok, $\underline{c} = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T$ a jobboldal vektora és $\underline{v} = (v_1, v_2, \dots, v_n)^T$ a függő változók vektora.

Definició: Az /1.1/ egyenletrendszer lineáris, ha az a_{ij} és b_{ij} együtthatók csak az x,t független változók függvényei, s nem függnek a $\underline{v}$ függő változóktól.
Ha az együtthatók $\underline{v}$-től is függnek, akkor az egyenletrendszer kvázi-lineáris.

Definició: Az /1.1/ egyenletrendszer hiperbolikus, ha létezik olyan nem-elfajuló lineáris transzformáció, melynek M mátrixával /1.1/ baloldala az alábbi formára hozható:

$$M\left(A\frac{\partial \underline{v}}{\partial x}+B\frac{\partial \underline{v}}{\partial t}\right)=D\frac{\partial \underline{w}}{\partial x}+\frac{\partial \underline{w}}{\partial t} \qquad /1.2/$$

ahol $D = \mathrm{diag}(\lambda_i)$ / λ_i valós és különböző/, és $\underline{w}=MB\underline{v}$

A fenti definició jelentése, hogy ha az /1.1/ egyenletrendszer hiperbolikus,akkor lineáris transzformációval olyan n differenciálegyenletté választható szét, melyben az i-edik egyenlet csak a w_i változó λ_i irány szerinti deriváltját tartalmazza. Ha ugyanis λ_i adja meg az i-edik irányt, azaz $dx-\lambda_i dt = 0$, akkor egy tetszőleges u függő változó λ_i irány szerinti deriváltja $\lambda_i\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial u}{\partial t}$

ez pedig megfelel /1.2/ jobboldalának.

Ha létezik ilyen transzformáció, akkor az M mátrix m_i^T sorának ki kell elégitenie az $m_i^T A=\lambda_i m_i^T B$

egyenletet, ami azt jelenti, hogy a λ_i valós és különböző irányok a

$$\det(A-\lambda B)=0 \qquad /1.3/$$

általánositott sajátérték feladat sajátértékei. Ha tehát /1.1/ hiperbolikus, akkor az /1.3/ sajátérték feladatnak van n db valós és különböző sajátértéke, amely az /x,t/ sikon n valós iránynak felel meg.

Megforditva, ha /1.3/-nak van n db valós és különböző λ_i gyöke, akkor az $m_i^T(A-\lambda_i B)=0$

n db homogén lineáris egyenletrendszernek van n db nem-triviális megoldása, melyek egymástól lineárisan függetlenek. Ezeket egy mátrix sorainak tekintve kapjuk az /1.2/ definicióban szereplő transzformációs mátrixot. Ezzel beláttuk az alábbi tételt:

Tétel: Az /1.1/ egyenletrendszer akkor és csak akkor hiperbolikus, ha az /1.3/ általánositott sajátérték feladat gyökei valósak és különbözőek.

Definició: Azokat a görbéket, melyek érintői minden pontban a λ_i irányok, az /1.1/ egyenletrendszer karakterisztikáinak nevezzük.

Példaként vizsgáljuk meg, hogy mi a feltétele annak, hogy egy másodrendü parciális differenciálegyenlet karakterisztikái való-

sak legyenek.
Az általános kvázi-lineáris egyenlet alakja a következő:

$$a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2b\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + c\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + p\frac{\partial u}{\partial x} + q\frac{\partial u}{\partial t} + su = f$$

Bevezetve a $v_1 = u$, $v_2 = \frac{\partial u}{\partial x}$ és $v_3 = \frac{\partial u}{\partial t}$ változókat, a következő elsőrendü rendszert kapjuk:

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial v_1}{\partial x} &= v_2 \\ \frac{\partial v_2}{\partial t} &= \frac{\partial v_3}{\partial x} \\ a\frac{\partial v_2}{\partial x} + b\left(\frac{\partial v_2}{\partial t} + \frac{\partial v_3}{\partial x}\right) + c\frac{\partial v_3}{\partial t} &+ pv_2 + qv_3 + sv_1 = f \end{aligned}\right\}$$

Ebben a rendszerben az A és B együttható-mátrixok a következők:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & a & b \end{bmatrix}, \qquad B = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & b & c \end{bmatrix}$$

Az /1.3/ egyenlet alakja ebben az esetben:

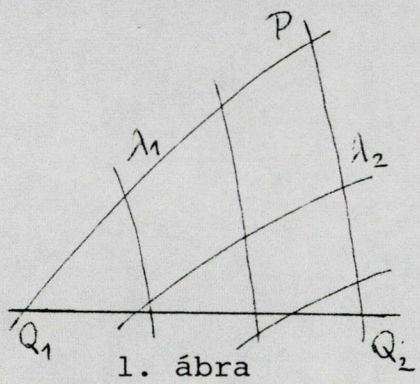
$$a - 2\lambda b + \lambda^2 c = 0$$

Ennek gyökei akkor valósak és különbözők, ha $b^2 - ac > 0$, ez tehát a rendszer hiperbolicitásának feltétele.

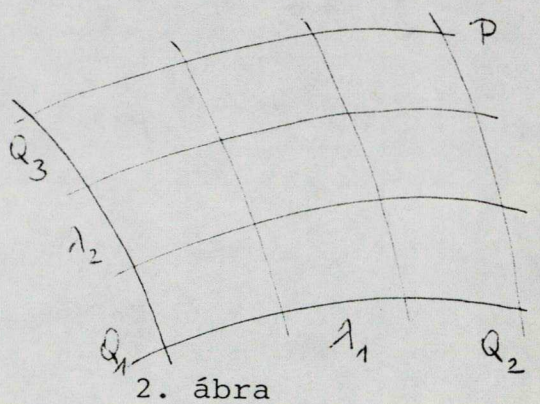
Ha A és B konstans, akkor a λ_i-k is rögzitettek, a feladat egyszerü. Általában azonban /1.1/-ben az együtthatók és a jobboldal x-től, t-től és v-től is függ. Emiatt a λ_i irányok nem konstansok az integrálás tartományán, pontról pontra változik az értékük. Feltéve, hogy /1.3/ gyökei valósak és különbözők az értelmezési tartomány minden pontjában, definiálni tudunk egy un. karakterisztikus görbe hálózatot, amely mentén az /1.1/ egyenlet alakja /1.2/ jobboldalának megfelelő lesz, s ezt fel tudjuk használni közelitő megoldás meghatározására.

A valós karakterisztikák létezését a fenti tétel szerint vehetjük a hiperbolikus rendszer definiciójaként. Ezek elméleti és gyakorlati számitási szempontból egyaránt fontosak. A karakterisztikák mutatják meg, hogy milyen peremfeltételekre van szükség ahhoz, hogy egy adott tartományon egyértelmüen meg tudjuk határozni a megoldást. Pl. n=2 esetén a sik minden pontján két karakterisztika halad át, melyet a λ_1 és λ_2 irány határoz meg. Ezek általában nem egyenesek, de a különböző pontokon átmenő, azonos λ -hoz tartozó karakterisztikák nem metszik egymást /mert akkor a metszéspontban egy λ -hoz két különböző karak-

terisztika tartozna/, ezért felhasználhatók koordináta-rendszerként. Az 1. ábrán feltesszük, hogy v_1 és v_2 ismert a $\overline{Q_1Q_2}$ szakaszon, amely nem karakterisztika. Ekkor a karakterisztikák mentén integrálva meg tudjuk határozni v_1 és v_2 értékét a PQ_1Q_2 tartomány minden pontjában. A P pontbeli megoldás csak a $\overline{Q_1Q_2}$ szakaszon megadott feltételektől függ, az ezen kivüli adatok nem befolyásolják.



1. ábra



2. ábra

A 2. ábrán feltesszük, hogy a $\overline{Q_1Q_2}$ és $\overline{Q_1Q_3}$ karakterisztikákon adottak a peremfeltételek. Ha $\overline{Q_1Q_2}$ és $\overline{Q_1Q_3}$ mindegyikén az egyik változó értéke ismert és Q_1-ben mindkettő, akkor a karakterisztikák mentén érvényes differenciálegyenletek segitségével a másik változó értékét is meg tudjuk határozni ezen görbék mentén. Ezután a teljes $Q_1Q_2PQ_3$ tartományban meg tudjuk határozni a megoldást.

Egy n egynletből álló rendszer esetén az /x,t/ sik minden P pontján n karakterisztika halad át és a P-beli megoldást a feltételt tartalmazó görbe azon szakaszán felvett értékek határozzák meg, melyet a P-n átmenő legszélső karakterisztikák metszenek ki.

A karakterisztikák és a peremfeltételek közti összefüggés fontos következménye, hogy a tartomány határán fellépő diszkontinuitások a karakterisztikák mentén terjednek a tartomány belsejében. Ilyenkor különösen előnyös a karakterisztikus rácson való számitás. Nem-lineáris esetben azonban ez nem feltétlenül igaz. Diszkontinuitások a tartomány belsejében is keletkezhetnek, s nem szükségképpen terjednek a karakterisztikák mentén. Az ilyen nem-lineáris diszkontinuitások /lökéshullámok/ kezelése nagyban függ az egyenletek konkrét alakjától. Általában olyan fizikai jelenségnek felelnek meg, melyekről további információink is vannak /pl. megmaradási törvények/. Ezek segitségével már integrálhatók az egyenletek.

Ilyen nem-lineáris rendszerre példa a kompresszibilis áramlást leiró egyenletrendszer:

Az i-edik karakterisztika mentén a v_i változók a következő egyenleteket elégitik ki:

$$\sum_{j=1}^{n} \sigma_{ij}\, dv_j = \tau_i\, dt \qquad i=1,2,\dots,n \qquad /1.5/$$

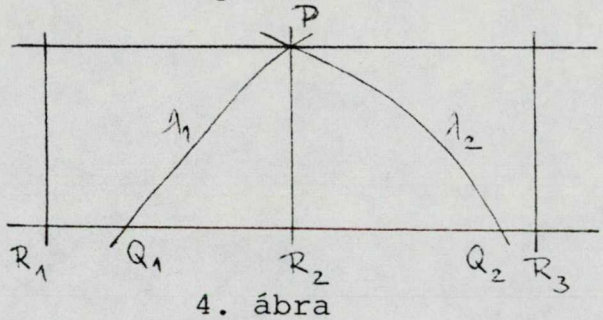
ahol $\sigma_{ij} = \sum_{k=1}^{n} m_{ik} b_{kj}$ és $\tau_i = \sum_{k=1}^{n} m_{ik} c_k$

Az együtthatók általában x, t és $\underline{v}$ függvényei, ezért /1.4/ és /1.5/ megoldásakor iterációra van szükség. A közelitést a trapéz-szabály segitségével szokás felirni. Ez /1.4/ esetén a következő:

$$x(P) - x(Q_i) = \frac{1}{2}\left[\lambda_i(P) + \lambda_i(Q_i)\right]\left[t(P) - t(Q_i)\right]$$

Hasonló összefüggés irható fel /1.5/-re is.
$Q_1, Q_2, \dots, Q_n$ meghatározásához n ismeretlen mennyiséget kell kiszámitani, mivel ezek egy rögzitett egyenes pontjai. További n ismeretlen a $v_1, v_2, \dots, v_n$ függvények P-beli értékei.
/1.4/ és /1.5/ adja a szükséges 2n egyenletet, s elég kis lépéshossz esetén ez az iteráció konvergens.

A karakterisztikus háló nyomonkövetése nagyon bonyolult lehet. Még n=2 esetén is az integrálás előre haladásával annyira eltorzulhat a háló, hogy szükség lehet egyes pontok törlésére, vagy ujabbak beiktatására azért, hogy a karakterisztikák eloszlása a hálóban aránylag egyenletes legyen. Egyszerüsithető a számitás, ha a karakterisztikus összefüggéseket derékszögü rácson használjuk fel /lsd. 4. ábra/.



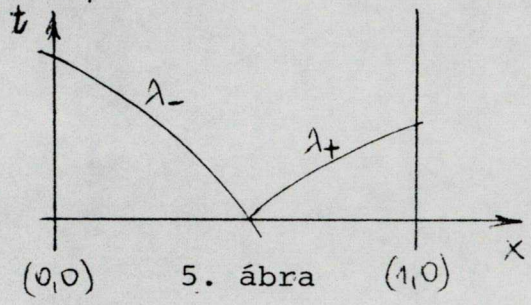
4. ábra

Tegyük fel, hogy a megoldást ismerjük egy derékszögü rácson az $\overline{R_1 R_3}$ szakaszt tartalmazó egyenesig. A rács következő, P pontjában ugy kapjuk meg a függvényértékeket, hogy megkeressük a P-n átmenő karakterisztikák és az előző rácsvonal $Q_1, Q_2, \dots, Q_n$ metszéspontjait. Ezekben a pontokban a függvényértékeket interpolációval nyerjük az R_i rácspontokban kapott értékekből. Az integrálást ezután az előzőekhez hasonlóan végezzük az /1.4/ és /1.5/ egyenletek közelitett alakjával.

Ennek a módszernek az az előnye, hogy könnyebben programozható, mintha tisztán karakterisztika hálót alkalmaznánk, s a 3 térdimenziós feladatokra is egyszerübben kiterjeszthető.

A karakterisztikák segitségével meg tudjuk vizsgálni, hogy milyen peremfeltételeket kell megadni ahhoz, hogy a kezdeti érték feladat korrekt kitüzésü legyen.

Az /1.1/ rendszer értelmezési tartománya általában legalább két oldalról zárt. Legyen ez a két perem az x=0 és a t=0 egyenes, és tekintsük az I. siknegyedet. Gyakran adott még egy perem az x irányban, legyen ez x=1 és a tartomány nyitott a pozitiv t irányban./5. ábra/



5. ábra

Tegyük fel, hogy $\underline{v}$ értéke adott a t=0-n /kezdeti feltétel/, és a másik két egyenesen adott peremfeltétel a következő alaku:

$$S\cdot\underline{v}=g \qquad x=0\text{-n}$$

$$T\cdot\underline{v}=h \qquad x=1\text{-en}$$

Ha ez az információ elég ahhoz, hogy mindenütt egyértelmüen meghatározzuk a megoldást, akkor meg kell tudnunk hatérozni $\underline{v}$-t x=0-n és x=1-en is.
Tegyük fel, hogy a karakterisztikus egyenletnek, /1.3/-nak, k pozitiv és /n-k/ negativ gyöke van. Ekkor az x=0-n k, az x=1-en pedig /n-k/ feltételt kell megadni. Ezeknek a feltételeknek és a karakterisztikákon érvényes differenciálegyenleteknek együttesen meg kell határozniuk a v_i értékeket a peremeken.
Az /1.1/ egyenletrendszer karakterisztikus alakja /1.2/ alapján a következő:

$$D\frac{\partial \underline{w}}{\partial x}+\frac{\partial \underline{w}}{\partial t}=M\underline{c},$$

ahol $D=\mathrm{diag}/\lambda_i/$ és $\underline{w}=MB\underline{v}$. Feltéve,hogy D első k eleme pozitiv $\underline{w}$ első k komponensének a $T\underline{v}=h$ feltétellel együtt minden $\underline{v}$ értéket meg kell határoznia x=1-en. Legyen az M mátrix első k sorából képzett mátrix M_1, akkor ha T egy /n-k/xn-es mátrix, a szükséges feltétel az, hogy x=1-re az $\begin{bmatrix} M_1B \\ T \end{bmatrix}$ mátrix ne legyen szinguláris. Hasonló feltétel nyerhető x=0-ra. /Az M mátrix sorai az /1.3/ általánositott sajátérték feladat baloldali sajátvektorai./

A vizsgálatban feltettük, hogy az /1.1/ rendszer lineáris. Ha nem az, akkor fel kell tenni, hogy a λ_i-k /melyek $\underline{v}$-től is függenek/ előjele nem változik.

A karakterisztikák elmélete kiterjeszthető 3 térdimenzióra is,

de ekkor a numerikus módszer olyan bonyolulttá válik, hogy elveszti előnyét más módszerekkel szemben.

A gyakorlatban sokszor előfordul, hogy a rendszer nem teljesen hiperbolikus. Ilyenkor külön megfontolást igényel, hogy mikor lesz a feladat korrekt kitüzésü és a megoldási módszer stabil. Nincs olyan általános elmélet, amely minden esetben alkalmazható lenne. A szükséges peremfeltételek meghatározása általában a fenti módszer segitségével történik azokra a karakterisztikákra, melyek valósak. A hiányzó feltételek megadásában az eddigi számitási tapasztalatok adnak segitséget.

1.2. Véges differencia módszerek hiperbolikus egyenletekre

A hiperbolikus egyenletek megoldásáról nehéz általánosan beszélni, mivel nagyon sokféle fizikai jelenség huzódik mögöttük. Pl. a meteorológiában kis sebességü kompresszibilis áramlással foglalkoznak és hosszu időn át lezajló nem-lineáris hatásokat vizsgálnak. Ugyanakkor a repüléssel kapcsolataos problémákban a stacionárius áramlás áll az érdeklődés középpontjában, a sebesség nagy, az áramlás turbulens és lökéshullámok terjednek benne, továbbá nagyon fontos a peremek szerepe, a repülőgépszárnyak vagy a turbinalapátok alakja. Ez a nagyfoku változatosság azt jelenti, hogy általában az adott probléma megoldására alkalmas, apeciális módszert kell kidolgozni.

A másik nehézséget az jelenti, hogy a hiperbolikus egyenletek analitikus elmélete sem teljes, nem beszélve az olyan rendszerekről, melyek nem is teljesen hiperbolikusak. Nem mindig lehet egzakt módon meghatározni, hogy milyen feltételek szükségesek ahhoz, hogy a feladat korrekt kitüzésü legyen.

A gyakorlati számitásokban legelterjedtebb és legáltalánosabban használható numerikus megoldási módszer a véges differenciák módszere. Ennek alkalmazásakor a feladat értelmezési tartományát derékszögü ráccsal fedjük le. A megoldást a rácspontokban keressük ugy, hogy a deriváltakat a rácson vett véges differenciákkal közelitjük. Ezzel a feladatot algebrai egyenletrendszer megoldására vezetjük vissza.

Hiperbolikus egyenletek esetén az értelmezési tartomány legalább egy oldalról nyitott /általában ha az egyik független változó az idő, akkor $t \geq 0$/, s a kezdeti és peremfeltételek egyaránt fellépnek.

A véges differenciák alkalmazásával különböző hibákat követünk el. Kérdés, hogy milyen feltételek mellett tudjuk megfelelő pontossággal közeliteni a differenciálegyenlet megoldását a véges differenciaegyenlet megoldásával. Ezzel kapcsolatban merül fel a kon-

vergencia és stabilitás kérdése. A következőkben ezeket tekintem át,ismertetem a differencia sémák stabilitásának vizsgálatára kidolgozott főbb módszereket.Bemutatok néhány alapvető véges differencia sémát, megadom stabilitásuk feltételét és pontosságukat.

1.2.1. Pontosság, stabilitás, konvergencia

Legyen a vizsgált parciális differenciálegyenlet

$$Lu=f,$$

ahol L a differenciáloperátor, f pedig ismert függvény.
A véges differencia módszer alkalmazásakor a feladat Ω értelmezési tartományát lefedjük egy ráccsal. A differenciálegyenletet a rácspontokra felirt differenciaegyenlettel helyettesitjük. Jelölje ezt a véges differencia operátort L_h , amely olyan rácson van értelmezve, melynek lépéshosszai a h paraméterrel arányosak. Legyen U a parciális differenciálegyenlet, u a véges differenciaegyenlet egzakt megoldása, N pedig a véges differenciaegyenlet numerikus megoldása.

Definició: Az L_h véges differencia operátor konzisztens az L differenciál operátorral, ha a $\tau_h = L_hU-LU$ lokális képlethiba nullához tart, ha $h\to 0$. /A lokális képlethiba azon pontokban értelmezett, ahol L_h/

A numerikus számitásból eredő u-N különbséget kerekitési hibának nevezzük.

Definició: A véges differenciaegyenlet megoldása konvergál a differenciálegyenlet megoldásához, ha $u/P/\to U/P/$, $P\in\Omega$és $h\to 0$-ra. /Itt Ω az integrálás tartományát jelenti a határával együtt./

A stabilitás fogalma arra vonatkozik, hogy az u-N különbség hogyan viselkedik az integrálás teljes tartományában.
Tegyük fel, hogy a P_o pontban az $u/P_o/$ érték helyett az $u/P_o/+\varepsilon/P_o/$ értékkel számolunk. Ez az ε a P_o pontbeli hiba. Ha a megoldást ezzel az uj értékkel folytatjuk anélkül, hogy a továbbiakban ujabb hibát követnénk el, akkor az $u^*/P/$ megoldáshoz jutunk. Az $u^*/P/-u/P/$ eltérés a P_o pontbeli hibából ered. Ha több pontban is követünk el hibát, akkor az ezek által együttesen okozott eltérésről beszélünk. Legyen $\delta=\max_{P\in\Omega}|\varepsilon/P/|$, a legnagyobb abszolut értékü pontbeli hiba. Az ideális az lenne, ha $\delta\to 0$ és $h\to 0$-ra a megoldásban együttesen okozott eltérés nullához tartana. Ez azonban lineáris esetben nem lehetséges, mert az elkövetett hibák hatása összegződik a megoldás során.
A stabilitás definiálására egy adott tartományon, adott δ és h esetén fellépő legnagyobb abszolut értékü eltérés szolgál.

Definició: A véges differencia séma stabil, ha

a, rögzitett rács esetén a legnagyobb abszolut értékü eltérés nullához tart, ha $\delta\to 0$,

b, a rács finomitásakor /$h\to 0$/ ez az eltérés nem nő gyorsabban a megoldás során, mint h^{-1} valamilyen hatványa.
Ha ez az eltérés h^{-1} -ben exponenciálisan nő, akkor a séma instabil. [1]

Az, hogy egy véges differenciaegyenlet eleget tesz-e a stabilitás és konvergencia követelményének az egyenlet alakjától, valamint a kezdeti és peremfeltételektől is függ. A gyakorlati esetek nagy részében az eltérés nagyságrendje vagy h^{-1} alacson rendü hatványa, vagy h^{-1} exponenciális függvénye, tehát lényeges különbség van a stabil és az instabil módszerek viselkedésében.

A legtöbb esetben U-t és u-t nem ismerjük, vagy csak jóval nagyobb erőfeszitéssel tudnánk előállitani, mint N-et. A parciális differenciálegyenletek numerikus megoldásának fő feladata N meghatározása ugy, hogy U-N kisebb legyen egy előre megadott hibakorlátnál az egész vizsgált tartományon.

Az $U-N \equiv |U-u| + |u-N|$ különbség akkor lesz kicsi, ha a numerikus számitást elegendően finom rácson végezzük stabil és konvergens séma segitségével. A képlethiba és a kerekitési hiba azonban a rács finomitásakor ellentétesen változik, ezért a pontosság nem növelhető tetszőlegesen.

A konvergenciát általában nehéz vizsgálni, mivel a képlethibában az ismeretlen függvények deriváltjai szerepelnek, melyek korlátait nem mindig tudjuk megbecsülni. Lineáris egyenletek esetében azonban a konvergenciához elég a stabilitást és konzisztenciát vizsgálni. Erre vonatkozik a következő

Lax-féle ekvivalencia tétel: Ha egy korrekt kitüzésü lineáris kezdeti érték feladatot egy vele konzisztens véges differencia sémával közelitünk, akkor a séma konvergenciájának szükséges és elegendő feltétele, hogy stabil legyen. [2]

A stabilitás vizsgálatára leginkább elterjedt módszert Neumann dolgozta ki, s részletes leirása [3] -ban található. Az eljárás eredetileg lineáris, konstans együtthatós egyenletekre készült, a gyakorlatban azonban hasznos eredményeket nyernek vele változó együtthatós és nemlineáris esetekben is. Ilyenkor a megoldást egy pont körül linearizálják, s a vizsgált tartományt olyan kis részekre bontják, ahol az együtthatók elhanyagolható hibával konstansnak tekinthetők. Ezzel az un. lokális lineáris stabilitást vizsgálják, melynek eredményéből az eredeti rendszerre vonatkozóan vonnak le következtetéseket.

A Neumann-féle eljárás lényege, hogy a rács egy egyenesén elkövetett hibák terjedését vizsgáljuk. Ezeket a hibákat véges Fourier sorba fejtjük, majd vizsgáljuk egy általános tag terjedését az idő változó növekedésével.

Legyen a kezdeti egyenesen $/t = 0/$ elkövetett hiba $E/x/$. Ennek komplex Fourier sora

$$E(x) = \sum_n A_n e^{i\beta_n x}$$

Ennek az összegnek az egyenes rácspotjaiban éppen az elkövetett hibákat kell megadnia. Legyen a vizsgált intervallum hossza

x irányban L, a részintervallumok száma N, hossza Δx, azaz $L=N\Delta x$.

Állitás: A fenti összeg megadható ugy, hogy abban a tagok száma N+1 legyen /amennyi pontban hibát követhettünk el/. A β_n frekvenciák választhatók $\beta_n=\frac{n\pi}{N\Delta x}$ -nek /n=0,1,2,...,N/.

Bizonyitás: A fenti választás esetén a /$j\Delta x$,0/ pontbeli hiba a kezdeti egyenesen

$$E/j\Delta x/=\sum_{n=0}^{N} H_n e^{i\beta_n j\Delta x} \quad , \; j=0,1,\ldots,N$$

Ez N+1 lineárisan független egyenlet, melyben az A_0, $A_1,\ldots,A_N$ együtthatók az ismeretlenek. Ez az N+1 egyenletből álló lineáris egyenletrendszer meghatározza az $A_0,A_1,\ldots,A_N$ együtthatókat, tehát a kezdeti hibák tetszőleges eloszlása kifejezhető ilyen komplex exponenciális alakban.

A továbbiakban egy általános hibatag, az $e^{i\beta x}$ terjedését vizsgáljuk, ahol β a fenti $\{\beta_n\}$-ek bármelyike lehet. /Az A_n konstans, a vizsgálat szempontjából elhanyagolható./ A linearitás miatt a hiba terjedését ugyanaz a véges differenciaegyenlet irja le, mint ami megadja a közelitést. A véges differenciaegyenletnek olyan megoldását keressük, amely t=0-ra $e^{i\beta x}$-re redukálódik. Ilyen megoldás az

$$e^{\alpha t}\, e^{i\beta x} \quad , \text{ ahol } \alpha \text{ komplex.}$$

$\{e^{\alpha t}\, e^{i\beta x}\}$ alaku megoldások megadhatók minden homogén lineáris konstans együtthatós parciális differenciaegyenletre, melynek független változói x és t. Ha az egyenlet t-ben N-edrendü, akkor minden β-ra N db α található.

Az $\{e^{\alpha t}\, e^{i\beta x}\}$ függvények ilyen egyenlet esetén a megoldások egy alaprendszerét képezik abban az értelemben, hogy tetszőleges megoldás előállitható belőlük.

Az $e^{\alpha t}\, e^{i\beta x}$ alaku megoldás segitségével az /x,t/=/$j\Delta x$,$k\Delta t$/ pontbeli hiba:

$$E/j\Delta x,k\Delta t/=\sum_{n=0}^{N} e^{\alpha k\Delta t}\, e^{i\beta_n j\Delta x}=\sum_{n=0}^{N} \xi^k\, e^{i\beta_n j\Delta x}, \text{ ahol } \xi=e^{\alpha\Delta t}$$

A fentiekből következik az alábbi tétel.

Tétel: /Neumann-féle stabilitás feltétel/
Annak szükséges és elegendő feltétele, hogy a kezdeti egyenesen elkövetett hibák az idővel ne növekedjenek exponenciálisan az, hogy $|\xi| \leq 1$ legyen.

Ez a tétel két időlépést tartalmazó sémákra igaz. Három vagy annál több időlépéses sémák esetén ez a feltétel nem mindig elegendő, de szükséges.

Példaként alkalmazzuk a Neumann-féle stabilitás vizsgálatot a

$$u_{tt} = u_{xx}$$ parciális differenciálegyenletre.

Legyen a közelitő véges differenciaegyenlet a következő:

$$\frac{u_{j,k+1} - 2u_{jk} + u_{j,k-1}}{\Delta t^2} = \frac{u_{j+1,k} - 2u_{jk} + u_{j-1,k}}{\Delta x^2}$$

ahol $u_{jk} \equiv u(j\Delta x, k\Delta t)$

Ebben helyettesitsünk u_{jk} helyébe $\xi^k e^{i\beta j\Delta x}$-et, és legyen $r \equiv \frac{\Delta t}{\Delta x}$

Ekkor a következő egyenletet kapjuk:

$$\xi + \frac{1}{\xi} = 2 - 4r^2 \sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right)$$

Legyen $A \equiv 1 - 2r^2\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right)$. Ezzel a fenti egyenlet alakja:

$$\xi^2 - 2A\xi + 1 = 0$$

Ennek gyökei: $\xi_1 = A + \sqrt{A^2-1}$ és $\xi_2 = A - \sqrt{A^2-1}$

Ugyanakkor a ξ -re kapott első egyenletből látszik, hogy $\xi_1 = \frac{1}{\xi_2}$.
Ha $A > 1$, akkor $|\xi_1| > 1$. Ha $A < -1$, akkor $|\xi_2| > 1$.
Ha viszont $|A| \leqq 1$, akkor $|\xi_1| = |\xi_2| = 1$
A stabilitás feltétele tehát, hogy $-1 \leqq A \leqq 1$ legyen, azaz

$$-1 \leqq 1 - 2r^2\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right) \leqq 1$$

Ennek jobboldala triviálisan teljesül. A baloldal tetszőleges β -ra akkor és csak akkor áll fenn, ha $r \leqq 1$. Tehát a séma stabilitásának az a feltétele, hogy $\Delta t \leqq \Delta x$ legyen.

Ha ezt az eljárást egyenletrendszerre alkalmazzuk, akkor a különböző egyenletekben elkövetett hibák időbeli növekedését az átmenet mátrix irja le. Ennek segitségével a Neumann-féle stabilitás feltétel azt követeli meg, hogy az átmenet mátrix sajátértékeinek abszolut értéke ne legyen nagyobb 1-nél. [2,7]

A stabilitás vizsgálatára használatos másik módszer a mátrix módszer. Alkalmazásakor a véges differenciaegyenleteket mátrix alakban irjuk fel.

Legyen a véges differenciaegyenlet alakja /két időlépéses módszer esetén/:

$$\underline{u}_k = A\underline{u}_{k-1} + \underline{b}_{k-1}$$

ahol $\underline{u}_k$ a $t = k\Delta t$ időpontbeli megoldást jelöli a rácspontokban.

Tétel: A stabilitás szükséges és elegendő feltétele, hogy

$\varrho(A) \leqq 1 + O(\Delta t)$ legyen, ahol $\varrho(A)$ jelöli az A mátrix legnagyobb abszolut értékü sajátértékét [6].

Ezekkel a módszerekkel elsősorban a lineáris, konstans együtthatós véges differenciaegyenletek stabilitása vizsgálható. A fizikai szempontból érdekes egyenletek többsége azonban nem lineáris, vagy változó együtthatós, vagy mindkettő. Ezek stabilitásának vizsgálatára javasol [8] egy heurisztikus módszert.

Az eljárás lényege, hogy a véges differenciaegyenletet differenciálegyenletre vezetjük vissza azáltal, hogy minden tagját Taylor-sorba fejtjük. A legalacsonyabb rendü tagoknak a kifejtésben magát a közelitendő differenciálegyenletet kell adniuk. Az összes többi tagot hibának tekintjük. A differenciaegyenlet stabilitása gyakran megállapitható ezeknek a képlethibáknak a vizsgálatával. Ezzel a módszerrel olyan instabilitások is felismerhetők, melyek a Neumann-félével nem.

1.2.2. Explicit és implicit véges differencia sémák

A véges differencia módszerek bevezetéséhez tekintsük az alábbi egyszerü elsőrendü konstans együtthatós egyenletet:

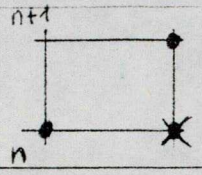
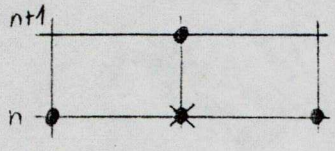
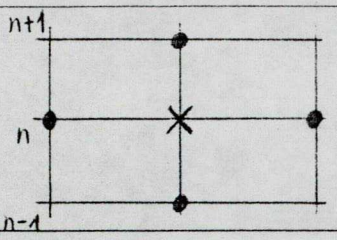
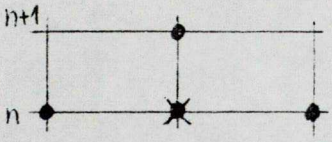
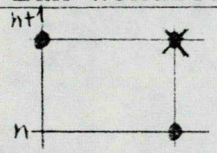
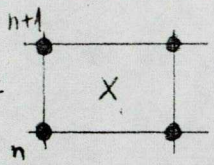
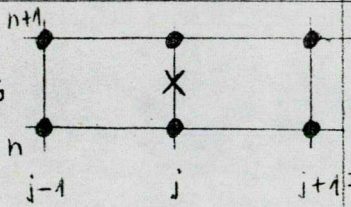
$$u_t + a u_x = f(x,t), \qquad a > 0 \qquad /1.6/$$

Az 1. táblázat tartalmazza az erre az egyenletre leggyakrabban használatos differencia sémákat a hozzájuk tartozó Neumann-féle stabilitás feltétellel és a lokális képlethiba rendjével. A diagramok a felhasznált rácspontok elhelyezkedését mutatják, a közelités középpontját kereszt jelöli. A lokális képlethibák főtagjainak meghatározása az A függelékben található.

A közelitések alapvetően két csoportra oszthatók, explicit és implicit módszerekre. Az explicit módszerek alkalmazásakor időlépésenként előrehaladva közvetlenül meg tudjuk határozni a megoldást az adott időponthoz tartozó rácspontokban a már kiszámitott pontok és a perem pontjainak segitségével. Mivel iterációra nincs szükség, ezért ezek a módszerek gyorsak, viszont stabilitásuk biztositása általában erősen korlátozza a megengedhető időlépéseket.

Az implicit eljárások egy-egy időlépés számitásánál a már ismert értékeken és a peremeken felvett értékeken kivül még eddig ki nem számitott függvényértékeket is felhasználnak, ezért iterációra van szükség. Ez lassitja a számitást, ugyanakkor a hozzájuk tartozó séma általában feltétel nélkül stabil. Ez azt jelenti, hogy a stabilitás biztositásához nincs szükség az időlépés korlátozására.

A táblázatból kitünik, hogy az explicit sémák stabilitásának feltétele $0 \leq ra \leq 1$ vagy $|ra| \leq 1$, ahol $r \equiv \frac{\Delta t}{\Delta x}$.

		differencia séma és a stabilitás feltétele	lokális képlethiba főtagja
A		$(u_j^{n+1} - u_j^n) + ra(u_j^n - u_{j-1}^n) = \Delta t f_j^n$ stabil, ha $0 \leqq ra \leqq 1$	$\frac{1}{2}\left(\Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - a\Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)$
B		$u_j^{n+1} - u_j^n + \frac{1}{2} ra(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) = \Delta t f_j^n$ stabil, ha $\lvert ra \rvert \leqq 1$	$\frac{1}{2}\left(\Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{1}{3} a\Delta x^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)$
C		$(u_j^{n+1} - u_j^{n-1}) + ra(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) = 2\Delta t f_j^n$ stabil, ha $\lvert ra \rvert \leqq 1$	$\frac{1}{3}\left(\Delta t^2 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + a\Delta x^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)$
D	 Lax-Wendroff	$(u_j^{n+1} - u_j^n) + \frac{1}{2} ra(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) -$ $- \frac{1}{2} r^2 a^2 (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) =$ $= \Delta t f_j^n + \frac{1}{2}\Delta t^2 \left[\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_j^n - a\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_j^n\right]$ stabil, ha $\lvert ra \rvert \leqq 1$	$\frac{1}{6}\left(\Delta t^2 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + a\Delta x^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)$
E		$(u_j^{n+1} - u_j^n) + ra(u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}) = \Delta t f_j^n$ stabil, ha $ra \geqq 0$	$\frac{1}{2}\Delta t\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + 2a\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}\right) -$ $- \frac{1}{2} a\Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$
F		$(1+ra)u_{j+1}^{n+1} + (1-ra)u_j^{n+1} - (1-ra)u_{j+1}^n -$ $-(1+ra)u_j^n = 2\Delta t f_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}$ feltétel nélkül stabil	$\frac{1}{12}\Delta t^2\left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + 3a\frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2}\right) +$ $+ \frac{1}{12}\Delta x^2\left(3\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} + a\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)$
G	 Crank-Nicolson	$(u_j^{n+1} - u_j^n) +$ $+ \frac{1}{4} ra(u_{j+1}^{n+1} + u_{j+1}^n - u_{j-1}^{n+1} - u_{j-1}^n) = \Delta t f_j^{n+\frac{1}{2}}$ feltétel nélkül stabil	$\frac{1}{6} a\Delta x^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} +$ $+ \frac{1}{8}\Delta t^2\left(a\frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2} + 2\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right)$

Jelölések: $u_j^n \equiv u(x_j, t_n) \equiv u(j\Delta x, n\Delta t)$, $r \equiv \frac{\Delta t}{\Delta x}$

1. táblázat

Véges differencia sémák az $u_t + a u_x = f(x,t)$ egyenletre

Az ilyen alaku feltételek szükségességére először Courant, Friedrichs és Lewy mutatott rá [9].
A függési tartomány fogalmának bevezetésével vizsgálták a konvergencia feltételét.

Definició: Az /x,t/ pont függési tartományának a t=0 egyenes azon pontjainak halmazát nevezzük /kezdeti értékek/, melyek befolyásolják a megoldás értékét ebben a pontban.

Állitás: /Courant-Friedrichs-Lewy feltétel/
Annak szükséges feltétele, hogy a véges differenciaegyenlet megoldása a differenciálegyenlet megoldásához konvergáljon az, hogy a véges differenciaegyenlet megoldásának függési tartománya magába foglalja a differenciálegyenlet megoldásának függési tartományát.

Különben a kezdeti feltételek egy részének megváltozása módositaná ez utóbbi megoldást anélkül, hogy éreztetné hatását a differenciaegyenlet megoldásában.

Az /1.6/ egyenlet karakterisztikái az x-at=konstans egyenesek, igy az $/x_0,t_0/$ pont függési tartománya az $/x_0-at_0,0/$ pont. A táblázat A módszere esetében ennek a pontnak a függési tartománya az

$$(x_0 - \frac{t_0}{r}, 0), \ldots, (x_0 - \Delta x, 0), (x_0, 0)$$

pontok halmaza. A Courant-Friedrichs-Lewy feltétel teljesüléséhez az utóbbi halmaznak tartalmaznia kell az $/x_0-at_0,0/$ pontot. Ebből adódik, hogy $ra \leq 1$ a konvergencia feltétele az A módszerre. Mivel ez a módszer konzisztens a felirt differenciálegyenlettel, a Lax-féle ekvivalencia tétel miatt ez egyben a stabilitás feltétele is.

A táblázat módszerei könnyen kiterjeszthetők változó együtthatós rendszerre is [10].
Legyen az egyenletrendszer alakja a következő:

$$\underline{u}_t + A(x,t)\,\underline{u}_x = \underline{f}(x,t),$$

ahol $\underline{u}$ az ismeretlen függvényeket tartalmazó q komponensü vektor, A pedig qxq-s mátrix.

A D módszer kivételével mind triviális módon kiterjeszthető erre a rendszerre, ha u helyébe $\underline{u}$-t és "a" helyébe A-t irunk. Kicsit bonyolultabb lesz a D /Lax-Wendroff/ módszer alakja. $\underline{f} \equiv 0$-ra felirva:

$$\underline{u}_j^{n+1} = \left[I - \frac{1}{2} r A_j^{n+\frac{1}{2}} (\Delta_x + \nabla_x) + \frac{1}{4} r^2 \left(A_j^{n+\frac{1}{2}} \Delta_x A_j^{n+\frac{1}{2}} \nabla_x + A_j^{n+\frac{1}{2}} \nabla_x A_j^{n+\frac{1}{2}} \Delta_x\right)\right] \underline{u}_j^n$$

ahol I az egységmátrix, $\Delta_x \underline{u}_j^n = \underline{u}_{j+1}^n - \underline{u}_j^n$ és $\nabla_x \underline{u}_j^n = \underline{u}_j^n - \underline{u}_{j-1}^n$

A Neumann-féle stabilitás feltételt ebben az esetben rögzitett együtthatókra kell vizsgálni, azaz A/x,t/ helyett egy fix $A/\bar{x},\bar{t}/$ értékkel számolva.
A stabilitás feltétele, hogy $|r\lambda_s(\bar{x},\bar{t})| \leq 1$ legyen s=1,2,...,q-ra, ahol $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_q$ az $A/\bar{x},\bar{t}/$ mátrix sajátértékei. A változó együtthatós feladatra ezután azt követeljük meg, hogy ez a feltétel

a vizsgált tartomány minden /x,t/ pontjára teljesüljön.

A nem-lineáris egyenleteknek egy fontos osztálya megmaradási törvények alakjában irható fel. Pl. a folyadékáramlás elméletében a tömeg-, impulzus- és energia-megmaradás egyenletei s következő alakuak:

$$\underline{u}_t + \left[\underline{f}(\underline{u})\right]_x = \underline{0}$$

$\underline{f}(\underline{u})_j^n$ -et $\underline{F}_j^n$ -nel jelölve az 1. táblázat A módszere erre az egyenletrendszerre:

$$\left(\underline{u}_j^{n+1} - \underline{u}_j^n\right) + r\left(\underline{F}_j^n - \underline{F}_{j-1}^n\right) = \underline{0}$$

Ugyanilyen egyszerüen felirható a többi módszer is. Valamivel bonyolultabb lesz a Lax-Wendroff módszer, melyben szükség van az $\underline{f}$-nek az $\underline{u}$-ra vonatkozó Jacobi mátrixának bevezetésére. Jelölje ezt $A/\underline{u}/$, melynek elemeire: $A_{mn} \equiv \frac{\partial f_m}{\partial u_n}$

Ennek felhasználásával a séma a következő lesz:

$$\underline{u}_j^{n+1} = \underline{u}_j^n - \frac{1}{2} r\left(\underline{F}_{j+1}^n - \underline{F}_{j-1}^n\right) + \frac{1}{2} r^2 \left[A_{j+\frac{1}{2}}^n \left(\underline{F}_{j+1}^n - \underline{F}_j^n\right) - A_{j-\frac{1}{2}}^n \left(\underline{F}_j^n - \underline{F}_{j-1}^n\right)\right]$$

Az osztáspontok közti kiértékelés elkerülésére $A_{j+\frac{1}{2}}^n$-et $\frac{1}{2}\left(A_{j+1}^n + A_j^n\right)$ -nel, $A_{j-\frac{1}{2}}^n$ -et pedig $\frac{1}{2}\left(A_{j-1}^n + A_j^n\right)$ -nel szokás közeliteni.

A sémákat aszerint is osztályozhatjuk, hogy disszipativak vagy sem.

Definició: Egy séma akkor disszipativ, ha a Neumann-féle stabilitás feltételben szereplő λ-k kielégitik a következő egyenlőtlenséget valamilyen $\delta > 0$-ra és pozitiv egész m-re /rendszerint m=1/ [10]:

/1.7/

$|\lambda_s| \leq 1 - \delta |\beta\Delta x|^2 m$, minden $|\beta\Delta x| \leq \pi$ -re és minden s-re

Ha $|\lambda_s| = 1$ minden s-re és $\beta\Delta x$-re, akkor a séma nemdisszipativ.

Disszipativ séma esetén a közelitő megoldások normája fokozatosan csökken az idővel. Ez azt jelenti fizikailag, hogy a nekik megfelelő energia az idővel csökken, nem marad meg.

Nem-disszipativ séma esetén az energia szigoruan megmarad. Ezeket olyan problémák megoldására szokás használni, melyek hosszu időtartamot foglalnak magukba /pl. a meteorológiában/, és a rendszer kivülről nem kap energiát.
Nagy sebességgel lejátszódó jelenségek esetében viszont, ahol a rendszerbe sok energia jut kivülről, a disszipativ közelitések az alkalmasabbak, mert ezek bizonyos fokig simitják a megoldást. Különösen előnyös a használatuk, ha lökéshullámokat akarunk egyszerüen kezelni.

Az utóbbi két évtizedben széleskörü kutatás folyt és folyik lehetőleg általános és a gyakorlati igényeket kielégitő véges differencia sémák kifejlesztésére a folyadékáramlás problémáira. [11] -ben szerepel a tranziens és stacioner áramlásra használatos alapvető véges differencia sémák vizsgálata, összehasonlitása. A különböző sémák pontosságát és stabilitását a numerikus és az analitikus megoldás összehasonlitásával vizsgálja a megoldások nagyságának és haladási sebességének segitségével. A két megoldás közti különbséget a numerikus sémákban fellépő "fals" haladási sebesség és "fals" diffuziós paraméter segitségével jellemzi. A vizsgálat eredménye az alábbiakban foglalható össze:

1. Az explicit kifejezések általában negativ "fals" diffuziót okoznak, ami az algoritmus stabilitásának csökkenésével jár. Ellenkező és stabilizáló hatása van az implicit formuláknak.
2. A hely szerinti deriváltakban a centrális differenciák használata általában negativ "fals" diffuziót okoz, amig az előre haladó differenciáké általában pozitivat.
3. Ha az előre haladó differenciák explicit kifejezésekben fordulnak elő, akkor ez növeli a numerikus megoldás haladási sebességét, ugyanakkor implicit kifejezésekben csökkenti.
4. A centrális differenciákra épülő formula általában pontosabb, mint az előre haladó differencia, ha stabil. Viszont stabilitási tartománya kisebb, mint az utóbbié.

Külön problémát vet fel a peremfeltételek kérdése.
Az egyszerü $u_t + au_x = 0$, $x \geqq 0$, $t \geqq 0$ feladat esetén a karakterisztikák, melyek mentén a megoldás ebben az esetben konstans, az $x-at=$konstans egyenesek. Nyilvánvaló, hogy $a > 0$ esetén ahhoz, hogy egyértelmü legyen a megoldás ismerni kell a függvény értékét mind a pozitiv x, mind a pozitiv t tengelyen. Ha viszont $a < 0$, akkor u értékét csak a pozitiv x tengelyen lehet előirni.

Tekintsük most az $\underline{u}_t - A\underline{u}_x = 0$, $0 \leqq x \leqq 1$, $t \geqq 0$ feladatot, amely q egyenletből áll. Ha az A mátrix diagonális és első s főátlóbeli eleme pozitiv, a többi /q-s/ negativ, akkor a karakterisztikák elméletéből következik, hogy u/x,0/ értékét meg kell adni minden a [0,1] intervallumba eső x-re, valamint u/0,t/ első s és u/1,t/ utolsó /q-s/ komponensét minden $t > 0$-ra.
Ha A nem diagonális, akkor hasonló megfontolások vonatkoznak a pozitiv és negativ sajátértékekhez tartozó sajátvektorokra, de nehezebb a helyes feltételeket megállapitani.
$x=0$-ban s, $x=1$-ben pedig /q-s/ lineárisan független feltételt kell megadni.

Az eddigiekben a véges differenciákat az értelmezési tartomány belső pontjaira irtuk fel. Amikor a peremfeltételeket közelitjük arra kell vigyázni, hogy ne rontsuk el a rendszer stabilitását és pontosságát.

A peremfeltételek közelitésének elméletét az utóbbi időben kezdték kidolgozni. Az eddigi eredmények elsősorban a lineáris egyenletekre korlátozódnak, azon belül is főleg a konstans együtthatós esetre.

A vizsgálatok alapja a Neumann-féle Fourier analizis, melyet a peremfeltételekre is kiterjesztenek. A lineáris konstans együtthatós kezdeti és peremérték feladat véges differencia közelitésére a stabilitás szükséges és elegendő feltételét [12] adja meg. Ennek felhasználásával vizsgálja a különböző közelitések pontosságát és stabilitását [13,14]. [15]-ben olyan stabil közelitést ad meg a szerző, amely kiterjeszthető nem-lineáris feladatokra is. Nem-lineáris esetben azonban nem bizonyitott elméletileg a stabilitás.

Ezeknek a kutatásoknak az eredménye azt mutatja, hogy körültekintően kell kezelni a peremfeltételeket, mert közelitésük elronthatja a teljes séma stabilitását. Ugyanakkor stabil közelités esetén sokszor elég alacsonyabb rendü sémával közeliteni a peremfeltételeket, mint a belső pontokat. A teljes séma pontossága a belső pontok közelitésére használt séma pontosságának fog megfelelni.

1.2.3. Az egyenesek módszere

A parciális differenciálegyenletek numerikus megoldásának egy másik csoportjában a tér szerinti független változót diszkretizáljuk, az idő folytonos marad. A térbeli deriváltakat véges differenciákkal helyettesitjük, majd az igy kapott időre vonatkozó közönséges differenciálegyenlet-rendszert oldjuk meg.

Numerikus számitás esetén ez azt jelenti, hogy ebben az irányban is diszkretizáljuk a feladatot, s alkalmazzuk valamelyik, a közönséges differenciálegyenletekre vonatkozó numerikus integrálási módszert. Igy az egyenesek módszere is tulajdonképpen a véges differencia módszerek közé tartozik.

Ilyen módszerek összefoglalása található [16]-ban. A térbeli deriváltak közelitésére negyedrendü véges differenciákat alkalmaz a szerző olyan megfontolások alapján, hogy a pontosság rendjének további növelése már nem okoz jelentősebb különbséget az egész séma pontosságában. Az igy kapott közönséges differenciálegyenlet-rendszer megoldására fix és változtatható lépéshosszu módszerek egyaránt alkalmazhatók /Runge-Kutta, Adams, prediktor-korrektor módszerek/. Ezek hatékonyságát hasonlitja össze [16].

Optimális séma itt sem adható meg általánosságban, a konkrét feladat jellege döntően befolyásolja a differencia séma megválasztását.

1.3. Összefüggés a karakterisztikák és a stabilitás között

A dolgozat második részében tárgyalom a kétfázisu folyadékáramlás matematikai modelljeit. Ezek egy része nem teljesen hiperbolikus parciális differenciálegyenlet-rendszert alkot, az egyenletrendszer karakterisztikái között komplexek is előfordulnak.

Lineáris esetben ennek az a következménye, hogy a kezdeti érték feladat nem korrekt kitüzésü, mert a megoldás nem függ folytonosan a kezdeti értékektől.

A következő vizsgálat célja annak megállapitása, hogy az egyenletrendszer karakterisztikái és stabilitása között mi a kapcsolat.

Tétel: Tekintsük a következő n egyenletből álló elsőrendü kvázilineáris parciális differenciálegyenlet-rendszert:

$$A(\underline{u})\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + B(\underline{u})\frac{\partial \underline{u}}{\partial x} + \underline{c}(\underline{u}) = \underline{0} \qquad /1.8/$$

ahol $\underline{u}=(u_1,u_2,\ldots,u_n)$ a függő változók n dimenziós oszlopvektora, A és B n×n-es mátrixok, $\underline{c}$ n dimenziós vektor, az un. forrásvektor. A, B elemei és $\underline{c}$ komponensei az $\underline{u}$ komponenseinek függvényei. Ha az /1.8/ egyenletrendszernek vannak komplex karakterisztikái, akkor a megoldás nem stabil, a kezdeti értékekben elkövetett kis hiba a megoldás során korlátlanul nőhet.

Bizonyitás:

Jelöljük az /1.8/ egyenletrendszer karakterisztikus gyökeit μ-vel. Ezeket a

$$\det(A - \mu B) = 0 \qquad /1.9/$$

egyenlet határozza meg.

Vizsgáljuk /1.8/ lokális lineáris stabilitását, azaz vizsgáljuk, hogy ha a megoldást egy időpontban kis $\delta\underline{u}$ értékkel perturbáljuk, akkor ez a perturbáció hogyan terjed a megoldás során.

Ehhez /1.8/-ban irjunk $\underline{u}$ helyébe $(\underline{u}+\delta\underline{u})$ -t, s a kapott eredményt linearizáljuk $\delta\underline{u}$-ra vonatkozóan. Igy az alábbi egyenletrendszerhez jutunk, amely az $\underline{u}$, $\frac{\partial \underline{u}}{\partial t}$ és $\frac{\partial \underline{u}}{\partial x}$ pillanatnyi értékéhez tartozó perturbáció nélküli megoldás körüli kis $\delta\underline{u}$ perturbációt irja le:

$$A(\underline{u})\frac{\partial}{\partial t}(\delta\underline{u}) + B\frac{\partial}{\partial x}(\delta\underline{u}) + \left(\delta\underline{u}\frac{\partial A}{\partial \underline{u}}\right)\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + \left(\delta\underline{u}\frac{\partial B}{\partial \underline{u}}\right)\frac{\partial \underline{u}}{\partial x} + \delta\underline{u}\frac{\partial \underline{c}}{\partial \underline{u}} = \underline{0} \qquad /1.10/$$

Ezeket a pillanatnyi értékeket konstansoknak tekintve a $\delta\underline{u}$ per-

turbációra a következő alaku megoldást keressük:

$$\delta \underline{u} = \delta \underline{u}_0 \exp\left[i(kx - \omega t)\right] \qquad /1.11/$$

Ezt /1.10/-be irva kapjuk, hogy

$$-i\omega A(\underline{u})\delta\underline{u}_0 + ik\,B(\underline{u})\delta\underline{u}_0 + \left(\delta\underline{u}_0 \frac{\partial A}{\partial \underline{u}}\right)\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} +$$

$$+\left(\delta\underline{u}_0 \frac{\partial B}{\partial \underline{u}}\right)\frac{\partial \underline{u}}{\partial x} + \delta\underline{u}_0 \frac{\partial C}{\partial \underline{u}} = \underline{0} \qquad /1.12/$$

Ennek a $\delta\underline{u}_0$-ban homogén lineáris egyenletrendszernek akkor van nem-triviális megoldása, ha

$$\det\left(-i\omega A + ikB + D\right) = 0, \qquad /1.13/$$

ahol

$$D = \left(\frac{\partial A}{\partial \underline{u}}\cdot\frac{\partial \underline{u}}{\partial t}\right)^T + \left(\frac{\partial B}{\partial \underline{u}}\cdot\frac{\partial \underline{u}}{\partial x}\right)^T + \left(\frac{\partial C}{\partial \underline{u}}\right)^T \qquad /1.14/$$

Ha $\omega = \omega(k) \neq 0$, akkor /1.13/ a következő alakba irható:

$$\det\left(A - \frac{k}{\omega}B + \frac{i}{\omega}D\right) = 0 \qquad /1.15/$$

Adott valós k értékhez különböző $\omega(k)$ komplex gyökök tartoznak. Az /1.11/ összefüggés alapján a stabilitásnak az a feltétele, hogy minden $\omega(k)$ gyökre $\mathrm{Im}(\omega) \leqq 0$ legyen. Ekkor lesz a perturbáció időbeli növekedése korlátos.

Ha D=0, akkor az ω értékek /1.9/ és /1.15/ összevetéséből a

$\mu = \frac{k}{\omega}$ összefüggésből meghatározhatók. Ha minden μ gyök valós, akkor ezzel minden ω is valós lesz, tehát teljesül, hogy minden ω -ra $\mathrm{Im}(\omega) \leqq 0$.
Ha van komplex gyök, akkor az konjugáltjával együtt szerepel, s ekkor az egyik $\omega(k)$ -ra $\mathrm{Im}(\omega) > 0$ lesz, vagyis a perturbáció korlátlanul nő.

Ha $D \neq 0$, akkor vizsgáljuk a $k \to \infty$ és $\omega \to \infty$ esetet. Feltesszük, hogy $\frac{k}{|\omega(k)|}$ határértéke véges, ha $k \to \infty$./A valóságban mindig ez áll fenn./ Ekkor Osztrovszkij tételéből következik [17] , hogy

$$\lim_{k\to\infty}\left|\mu - \frac{k}{\omega}\right| = 0 \qquad /1.16/$$

Ha μ komplex, azaz $\mu = \mu_R + i\mu_I$, $\mu_I \neq 0$
akkor /1.16/-ból következik, hogy

$$\lim_{k\to\infty}\left[\frac{-\mathrm{Im}(\omega)\,k}{|\omega|^2}\right] = \mu_I \qquad /1.17/$$

Mivel $\frac{k}{|\omega|}$ -nak véges a határértéke /méghozzá pozitiv vagy nulla/ ha $k \to \infty$, ezért $\frac{|\omega|^2}{k} \to +\infty$, ha $k \to \infty$.

Mivel a komplex karakterisztikák konjugáltjukkal együtt fordulnak elő, ezért feltehetjük, hogy $\mu_I < 0$. Ekkor /1.17/-ből az következik, hogy $Im(\omega) \to +\infty$, ha $k \to \infty$.

Ezzel kaptuk, hogy nagyon kis hullámhosszakra instabilitás lép fel. A növekedés nem korlátos, ha $k \to \infty$.

Az eddigiekben összefoglaltam a hiperbolikus egyenletek numerikus megoldásának főbb kérdéseit. Ismertettem a karakterisztikák módszerét, néhány alapvető véges differencia sémát, s a különböző tipusu közelitések hatását a közelités pontosságára, stabilitására. Bemutattam, hogyan határozhatók meg a hiperbolikus egyenletekhez szükséges peremfeltételek a karakterisztikák segitségével ugy, hogy a feladat egyértelmüen megoldható legyen. Végül pedig vizsgáltam az egyenletrendszer karakterisztikái és stabilitása közti kapcsolatot.

A dolgozat második részében először ismertetem a kétfázisu áramlás különböző fizikai és a hozzájuk tartozó matematikai modelljeit. Az egyszerübb modellek tiszta hiperbolikus parciális differenciálegyenlet-rendszert alkotnak, a hozzájuk tartozó kezdeti és peremfeltételekkel együtt korrekt kitüzésü feladatok. Az egyértelmüséghez szükséges peremfeltételek a karakterisztikák segitségével meghatározhatók. Az általánosabb, bonyolultabb matematikai modellekről kiderül, hogy nem korrekt kitüzésüek, a kezdeti értékektől nem függnek folytonosan. E tekintetben a kutatók véleménye két részre oszlik. Az egyik csoport szerint a feladat azért nem korrekt kitüzésü, mert valamilyen fizikai jelenséget elhanyagoltunk. Ezzel kapcsolatban vizsgálok egy olyan modellt, amely magábanfoglal egy olyan hatást, mellyel a feladat korrekt kitüzésüvé válik. Mások szerint a nem korrekt kitüzésü feladatra is meg lehet adni olyan véges differencia sémát, amely a közelités különböző stabilizáló hatásait kihasználva jó gyakorlati eredményeket ad.

Ezeken az elméleti vizsgálatokon alapul a második rész végén ismertetett két modell numerikus megoldása.

II. Rész

2.1 A tranziens folyadékáramlást leiró fizikai és matematikai modellek általános jellemzése

A folyadékhütéses nukleáris reaktorok zónájában lejátszódó jelenségek leirásához sok komplex folyamat hely- és időfüggő modellezésére van szükség. A kétfázisu áramlási modellek a forrásban levő folyadék /vizhütéses reaktorok esetén a viz és gőz keverék/ áramlását próbálják leirni.

A nyomottvizes energetikai reaktorok megjelenése nagy lendületet adott a kétfázisu áramlás kutatásának. A meglévő bizonytalanságokat meg kell szüntetni ahhoz, hogy gazdaságosan és biztonságosan müködő reaktorokat lehessen üzemeltetni. Bár nagyon kicsi a valószinüsége, de előfordulhat, hogy a primerkörben eltörik az egyik hütőközeget tartalmazó cső. Mivel az ilyen balesetnek sulyos kár lenne a következménye, ismerni kell a lejátszódó folyamatokat, hogy biztositthassuk a reaktor zónájának megfelelő hütését. A törés mentén kétfázisu folyadék áramlik ki a primerkörből. Ennek állapotát kell leirni az idő függvényében.

A gyakorlatban több folyadékáramlási modell is ismeretes, de ezek egyike sem egzakt. Felirásuknál a természeti törvények mellett tapasztalati eredményekre is támaszkodni kell. A kiválasztott modell helyességét kisérleti eredményekkel való összehasonlitás utján tudjuk ellenőrizni.

Az atomreaktorok termohidraulikai analizisére kidolgozott nagyméretü számitógépes programrendszerek eleinte egy viszonylag egyszerü, un. homogén egyensulyi modellt alkalmaztak a reaktorok zónájában történő folyadékáramlás leirására. Ez a modell feltételezi, hogy a két fázis azonos sebességgel halad, s mindkettő telitési állapotban marad. Azonban a reaktorokban olyan tranziens jelenségek is lejátszódnak, melyekben ezek a feltételezések nem érvényesek. Ennek ellenére bizonyos paraméterek változó alakulásának leirására még ekkor is alkalmas lehet ez a modell, melynek előnye egyszerüségében, s az aránylag kis számitásigényében rejlik.

A folyadék állapotának pontos leirásához szükség van olyan jelenségek figyelembe vételére, mint a két fázis relativ mozgása, vagy bizonyos nem-egyensulyi termohidraulikai folyamatok, pl. fázisátalakulás. Az ujabb programrendszerek már ilyen, fejlettebb modellekkel számolnak, melyek nem tartalmazzák a homogén egyensulyi modell megszoritásait.

Az áramlást leiró matematikai modell egy egyenletrendszer, amely a tömeg, az impulzus és az energia megmaradásának törvényeit fejezi ki.

A matematikai modell felállitásához a következő lépésekre van szükség:

1. a megmaradási egyenlet kiválasztása;
2. az áramló közeg állapotegyenleteinek felirása /ezek irják le a folyadék jellemzői közti kapcsolatot/;
3. segédegyenletek felállitása /hő-, impulzus-átadás, surlódás, stb./;
4. kezdeti és peremfeltételek megadása.

A megmaradási törvényeket parciális differenciál egyenletek irják le. Ezek száma a fizikai modelltől függ.A homogén egyensulyi modell a legegyszerübb, ez 3 megmaradási egyenletet tartalmaz, a keverék tömegének, impulzusának és energiájának megmaradására. Legbonyolultabbak a két-közeg modellek, amelyek a két fázis mindegyikére tartalmazzák a 3 megmaradási egyenletet.Ezek nem kivánják meg, hogy az egyes fázisok azonos sebességgel mozogjanak, vagy azonos legyen a hőmérsékletük. Viszont szükség van olyan matematikai összefüggésekre, melyek a fázisok közti tömeg, impulzus és energia átadást irják le. Éppen ez az egyik nehézsége ennek az általános modellnek, mert ezek az átadási folyamatok még nem eléggé ismertek.

Az egyenletek felállitása mindig a fizikai rendszer idealizálásának, egyszerüsitésének eredménye, ez korlátozza a modell érvényességi körét. A kapott parciális differenciál egyenletek megoldására gyakorlatilag csak numerikus módszerek jöhetnek számitásba. Igy az eredményt a továbbiakban az is befolyásolja, hogy milyen a kiválasztott megoldási módszer. Külön problémát jelent annak vizsgálata, hogy a számitás eredményében jelentkező esetleges instabilitás, oszcilláció a fizikai folyamatot tükrözi-e, a leirásra használt egyenletrendszer pontatlanságának következménye, vagy a rosszul megválasztott numerikus módszer eredménye. Mivel az eredmény vizsgálata a legtöbb esetben nem oldható meg minden kétséget kizáróan matematikai diszkusszióval, feltétlenül szükséges megbizható mérésekkel való összehasonlitásuk.

Az alkalmazandó numerikus módszer kiválasztásánál döntő szempont, hogy az a lehető legmegbizhatóbban müködjön a várható alkalmazások esetén. Ezért a módellek és módszerek kiválasztása előtt meg kell határozni, hogy milyen esetekben akarjuk felhasználni. Pl. ha az egész zónát modellezzük és a numerikus számitásokhoz elemi térfogatokra osztjuk, akkor a zónabeli kétfázisu áramlás alkotórészei /gőzbuborékok, folyadékcseppek/ méretének kicsinek kell lenni az elemi térfogatokhoz képest. A változók értékei nagyszámu buborék, ill. folyadékcsepp egy-egy ilyen térfogatra vonatkozó átlagaiból adódnak. Ilyen modellen az elemi térfogatok méreténél finomabb jelenségek nem oldhatók meg.

A megoldásra használt numerikus módszerek szinte kizárólag véges differencia módszerek. Bár a homogén modellt leiró egyenletrendszer hiperbolikus, igy a karakterisztikák módszerével is megoldható. A gyakorlatban azonban ma már ezt nemigen használják, mert fejlesztése nehézkes, több dimenzióra bonyolult kiterjeszteni.

A konkrét differencia séma megválasztásánál több szempontot is figyelembe kell venni. Ha a vizsgált tranziens jelenség gyorsan változó áramlás modellje, szükség lehet arra, hogy nagyon kis időlépéssel számoljunk a pontosság érdekében. Másrészt gyakran kívánatos a nagy időlépés, ha a tranziens jelenség lassan megy végbe és csökkenteni akarjuk a számitásigényt. Az időlépést általában a $\left|(v \pm c)\frac{\Delta t}{\Delta x}\right| < 1$ összefüggés /Courant-kritérium/korlátozza,

ahol: v - a folyadék áramlási sebessége,
Δt - az időlépés és
Δx - a rácspontok távolsága.

Ez a korlát a numerikus stabilitás követelményéből ered. Ha azonban a hangsebességet tartalmazó kifejezéseket implicit módon differenciáljuk, akkor ez a korlát jelentősen növelhető. A fázisok közti átadási összefüggésekhez is rövid időkonstansok tartoznak, ezért ezeket is érdemes implicit módon kezelni. Ugyanakkor a teljesen implicit egyenletek megoldása nagyon számitásigényes, egynél több térdimenzióban különösen bonyolult. Az előbbi kifejezések implicit számitása esetén a numerikus stabilitás feltétele $\left|v\frac{\Delta t}{\Delta x}\right| < 1$ -re változtatható.

Ez mát nem jelent tul erős megszoritást az időlépés nagyságára. /pl. 4 m/sec tengely irányu áramlás és 0.3 m távolságra levő osztáspontok esetében a $\Delta t < 0.075$ sec lépéskorlát elfogadható érték nyomottvizes reaktorokra/. Az ujabb programrendszerek már ilyen, un. szemi-implicit véges differencia módszereket használnak.

2.2 Homogén egyensulyi modell

Ez a modell olyan közeg áramlásának leirására alkalmas, amely mechanikai és termikus egyensulyban van, azaz egy adott keresztmetszetben a sebesség mindenütt, mindkét fázisnál azonos és a közeg telitési hőmérsékleten van. A keverékre három megmaradási egyenletet tudunk felirni:

Tömegmegmaradás:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v)}{\partial x} = 0 \qquad /2.1/$$

Impulzus-megmaradás:

$$\frac{\partial (\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v^2)}{\partial x} + \frac{\partial P}{\partial x} = -g_x \rho - \tau \qquad /2.2/$$

Energia-megmaradás:

$$\frac{\partial (\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v e)}{\partial x} = \frac{\partial P}{\partial t} + v\frac{\partial P}{\partial x} + q \qquad /2.3/$$

Az egydimenziós modellben a reaktor zónáját elemi térfogatokra osztjuk az x tengely mentén, s a változók értékét egy-egy

ilyen elemi térfogatra vett átlag adja. /2.1/-ben az első tag egy elemi térfogatban levő közeg sürüségének időbeli változását irja le, a 2. tag pedig az ebbe a térfogatba be- és kiáramló közeg által okozott sürüségváltozást.

/2.2/-ben a baloldal első tagja egy elemi térfogatban levő közeg impulzusának időbeli változását irja le, a 2. tagja a be- és kiáramló közeg által okozott impulzusváltozást, a 3. tagja pedig az elemi térfogat két végén fellépő nyomáskülönbséget. A jobboldal első tagja a gravitáció miatt fellépő nyomásváltozásnak, 2. tagja pedig a surlódás okozta nyomásváltozásnak felel meg.

/2.3/-ban a baloldal első tagja jelenti az elemi térfogatban levő közeg teljes energiájának időbeli változását, a 2. tag pedig a belépő és kilépőközeg által okozott energia-változást. A jobboldal első tagja az elemi térfogat két végén fellépő nyomáskülönbségből származó időbeli energiaváltozást adja meg, 2. tagja a be- és kiáramló közeg nyomáskülönbsége miatti energia-változást, 3. tagja pedig a közeggel közölt energiát /hővezetéssel, hősugárzással, hőátadással/.

A keverék állapotegyenlete a fázisok fizikai állapotegyenleteiből könnyen előállitható a $\rho = \alpha\rho_v + (1-\alpha)\rho_l$ összefüggés felhasználásával. A fázisok állapotegyenletei $\rho_v = \rho_v(P, e_v)$ és $\rho_l = \rho_l(P, e_l)$ alakuak.

A modell előnye egyszerüségében rejlik, s különösen jól irja le az áramlást, ha az egyik fázis domináns / $\alpha < 0.1$ vagy $\alpha > 0.9$/. A gyakorlatban akkor használható, ha nem várható jelentősebb sebességkülönbség a fázisok között. Lassu tranziensek leirására alkalmas, amikor kicsi a nyomásgradiens és nincs csőtörés /pl. a teljesitmény változtatása esetén/.

Az állapotegyenletek hozzávételével a /2.1/ - /2.3/ egyenletrendszer már zárt lenne. A megoldás előtt azonban célszerü átalakitani,mert a forrás kezdetekor ρ és e értéke hirtelen, nagy mértékben megváltozik, a $\frac{\partial \rho}{\partial P}$ derivált nem lesz folytonos, s ez a numerikus számitást megzavarja. Ezért célszerübb a $G = \rho v$ fajlagos tömegfluxust és a $V = \frac{1}{\rho}$ átlag fajtérfogatot használni [19] . Ezek segitségével a /2.1/ és /2.3/ egyenletrendszer alakja a következő lesz:

$$\frac{\partial G}{\partial x} - \frac{1}{V^2}\left(\frac{\partial V}{\partial e}\frac{\partial e}{\partial t} + \frac{\partial V}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial t}\right) = 0 \qquad /2.4/$$

$$\frac{1}{G}\frac{\partial G}{\partial t} + 2V\frac{\partial G}{\partial x} + G\left(\frac{\partial V}{\partial e}\frac{\partial e}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial P}\frac{\partial P}{\partial x}\right) + \frac{1}{G}\frac{\partial P}{\partial x} = -\frac{g_x}{GV} - \frac{\tau}{G} \qquad /2.5/$$

$$\frac{1}{V}\frac{\partial e}{\partial t} + G\frac{\partial e}{\partial x} - \frac{\partial P}{\partial t} - GV\frac{\partial P}{\partial x} = q \qquad /2.6/$$

A /2.4/-/2.6/ egyenletrendszert a V = V/P,e/ állapotfüggvény teszi zárttá. Az alapváltozók a P, G és e függvények. Ezekre nézve a rendszer hiperbolikus.

A megoldásra használt véges differencia sémát Turner dolgozta ki [20].
Jelölje az x irányban az egymást követő rácspontokhoz tartozó változók értékét j index, t irányban pedig n. Ekkor a $Q\frac{\partial R}{\partial x}$ alaku tagok közelitésére használt kifejezés $\frac{Q_j^n + Q_{j+1}^n}{\Delta x}\cdot\frac{R_{j+1}^{n+1} - R_j^{n+1}}{\Delta x}$ a $Q\frac{\partial R}{\partial t}$ alaku tagokra pedig $\frac{Q_j^n\left(R_j^{n+1} - R_j^n\right) + Q_{j+1}^n\left(R_{j+1}^{n+1} - R_{j+1}^n\right)}{2\Delta t}$
Itt R jelöli a P, G, e változókat, Q pedig a megfelelő együtthható. Az igy felirt differencia séma az alapváltozókban implicit, lokális stabilitásának bizonyitása [20]-ban megtalálható. Ez szükséges feltétele a stabilitásnak. A fenti közelitések alkalmazásával /2.4/-/2.6/ véges differencia közelitése a következő:

$$\frac{G_{j+1}^{n+1} - G_j^{n+1}}{\Delta x} - \frac{\left(\frac{1}{V^2}\frac{\partial V}{\partial e}\right)_j^n\left(e_j^{n+1} - e_j^n\right) + \left(\frac{1}{V^2}\frac{\partial V}{\partial e}\right)_{j+1}^n\left(e_{j+1}^{n+1} - e_{j+1}^n\right)}{2\Delta t} -$$

$$- \frac{\left(\frac{1}{V^2}\frac{\partial V}{\partial P}\right)_j^n\left(P_j^{n+1} - P_j^n\right) + \left(\frac{1}{V^2}\frac{\partial V}{\partial P}\right)_{j+1}^n\left(P_{j+1}^{n+1} - P_{j+1}^n\right)}{2\Delta t} = 0 \qquad /2.7/$$

$$\frac{\left(\frac{1}{G}\right)_j^n\left(G_j^{n+1} - G_j^n\right) + \left(\frac{1}{G}\right)_{j+1}^n\left(G_{j+1}^{n+1} - G_{j+1}^n\right)}{2\Delta t} - \frac{\left(V_j^n + V_{j+1}^n\right)\left(G_{j+1}^{n+1} - G_j^{n+1}\right)}{\Delta x} +$$

$$+ \frac{\left[\left(G\frac{\partial V}{\partial e}\right)_j^n + \left(G\frac{\partial V}{\partial e}\right)_{j+1}^n\right]\left(e_{j+1}^{n+1} - e_j^{n+1}\right)}{2\Delta x} + \frac{\left[\left(G\frac{\partial V}{\partial P} + \frac{1}{G}\right)_j^n + \left(G\frac{\partial V}{\partial P} + \frac{1}{G}\right)_{j+1}^n\right]\left(P_{j+1}^{n+1} - P_j^{n+1}\right)}{2\Delta x} =$$

$$= -\frac{2g_x}{(GV)_j^n + (GV)_{j+1}^n} - \frac{2\tau}{G_j^n + G_{j+1}^n} \qquad /2.8/$$

$$\frac{\left(\frac{1}{V}\right)_j^n\left(e_j^{n+1} - e_j^n\right) + \left(\frac{1}{V}\right)_{j+1}^n\left(e_{j+1}^{n+1} - e_{j+1}^n\right)}{2\Delta t} + \frac{\left(G_j^n + G_{j+1}^n\right)\left(e_{j+1}^{n+1} - e_j^{n+1}\right)}{2\Delta x} -$$

$$- \frac{\left(P_j^{n+1} - P_j^n\right) + \left(P_{j+1}^{n+1} - P_{j+1}^n\right)}{2\Delta t} - \frac{\left[(GV)_j^n + (GV)_{j+1}^n\right]\left(P_{j+1}^{n+1} - P_j^{n+1}\right)}{2\Delta x} = q \qquad /2.9/$$

Ez a séma az I. rész 1. táblázatában összefoglalt véges differencia módszerek közül az F-nek felel meg, amely feltétel nélkül stabil.
Ha a P, G, e függő változókat egy $\underline{u}$ vektorba foglaljuk össze, akkor a /2.7/-/2.9/ véges differenciaegyenlet-rendszer az alábbi mátrix alakba irható:

$$A_j^n \underline{u}_j^{n+1} + B_j^n \underline{u}_{j+1}^{n+1} = \underline{c}_j^n \qquad j=1,2,\ldots,N-1, \quad \underline{u}_j^{n+1} \equiv (P_j^{n+1}, G_j^{n+1}, e_j^{n+1}) \qquad /2.10/$$

ahol A_j^n és B_j^n a változók uj időpontbeli értékeihez tartozó 3x3-as együttható mátrixok, $\underline{c}_j^n$ egy 3 komponensü vektor, N az x irányu osztáspontok száma.

A_j^n, B_j^n és $\underline{c}_j^n$ nem függnek az alapváltozók n+1 időpontbeli értékeitől. /2.10/-ből az ismeretlen $\underline{u}_{j+1}^{n+1}$ vektor kifejezhető:

$$\underline{u}_{j+1}^{n+1} = \left(B_j^n\right)^{-1} \left(\underline{c}_j^n - A_j^n \underline{u}_j^{n+1}\right) \qquad /2.11/$$

Ezzel algebrai egyenletrendszer megoldására vezettük vissza a feladatot.

Hátra van még a kezdeti és peremfeltételek megadása. Esetünkben csőben áramló folyadékról van szó. A kezdeti értékek az $\underline{u}$ függvény eloszlását jelentik a cső mentén a t=0 időpontban /j=0/. Peremfeltételként P, G és e értékét kell megadni a cső két végén az idő függvényében.

A karakterisztikák elmélete szerint /1.1 fejezet/ az egyértelmüséghez szükséges peremfeltételek a karakterisztikák előjelétől függnek. Esetünkben két karakterisztika előjele egyezik meg, a harmadiké különböző. Ezért a cső egyik végén kettő, a másikon egy feltételt kell megadni.

A megoldás ugy történik, hogy a cső mentén felveszünk valamilyen /általában konstans/ eloszlást $\underline{u}$-ra. Ezután konstans peremfeltételekkel több, hosszu időlépéssel számitást végzünk a rendszerre. Ekkor a nevezőben levő Δt nagy, ezért az instacioner /időfüggő/ tagok értéke a stacioner /időben állandó/ tagokhoz képest elhanyagolható. Az igy előállitott stacioner eloszlás lesz a tranziens számitás kezdeti értéke $\underline{u}$-ra.

A tranziens megoldás kezdeti eloszlásának meghatározása után a /2.10/ lineáris véges differenciaegyenlet-rendszer megoldása a peremfeltételek felhasználásával az alábbi tételben vázolt eljárás alapján történik.

Tétel: A /2.10/ egyenletrendszer az $\underline{u}_1^{n+1}$ és $\underline{u}_N^{n+1}$ vektorok bármely 3 komponensének ismeretében egyértelmüen megoldható.

Ha tehát a cső végein 3 peremfeltétel adott /azaz a P, G és e változók értéke az idő függvényében valamelyik csővégen/, akkor a /2.7/-/2.9/ véges differenciaegyenlet-rendszernek létezik egyértelmüen meghatározott megoldása.

Bizonyitás:

Definiáljuk a D mátrixot és a $\underline{v}$ vektort az alábbiak szerint:

$$\underline{u}_j^{n+1} + D_{j-1}\,\underline{u}_1^{n+1} = \underline{v}_{j-1}\,, \quad j=2,3,\ldots,N \qquad /2.12/$$

Eliminálják $\underline{u}_j^{n+1}$ -et /2.10/ és /2.12/ felhasználásával

$$\underline{u}_{j+1}^{n+1} - (B_j^n)^{-1} A_j^n D_{j-1}\,\underline{u}_1^{n+1} = (B_j^n)^{-1}\left(\underline{c}_j^n - A_j^n \underline{v}_{j-1}\right)$$

Ebből következik, hogy

$$\left.\begin{aligned} D_j &= -(B_j^n)^{-1} A_j^n D_{j-1} \\ \text{és} \quad \underline{v}_j &= (B_j^n)^{-1}\left(\underline{c}_j^n - A_j^n \underline{v}_{j-1}\right) \end{aligned}\right\} \; j=2,3,\ldots,N-1 \qquad /2.13/$$

továbbá /2.10/ és /2.12/ összevetéséből j=2-re:

$$\begin{aligned} D_1 &= (B_1^n)^{-1} A_1^n \\ \underline{v}_1 &= (B_1^n)^{-1} \underline{c}_1^n \end{aligned} \qquad /2.14/$$

/2.13/ és/2.14/ felhasználásával D_{N-1} és $\underline{v}_{N-1}$ meghatározható. Ennek és a 3 ismert peremfeltételnek a segitségével /2.12/-t j=N-re megoldva megkapjuk $\underline{u}_1^{n+1}$ és $\underline{u}_N^{n+1}$ mindhárom komponensét. Ezután/2.12/-ből már minden közbülső $\underline{u}_j^{n+1}$ meghatározható.

Ezzel az eliminációs módszerrel egy-egy időlépés számitásigénye 2N mátrix szorzás éa /N-1/ inverzió 3×3-as mátrixokra.

A homogén modellel végzett számitások és mérési eredmények összehasonlitására [20]-ban és [19]-ben található példa. A számitások eredménye alátámasztja a módszer stabilitását. A mérések és számitások jó egyezést mutatnak.

2.3. Véges differencia módszer egy egydimenziós, 4 egyenletes modellre

A homogén egyensulyi modell alkalmazhatóságát nagyban korlátozzák a benne szereplő megszoritások. Ha a folyadék állapotának pontosabb leirására törekszünk, akkor szükség van a két fázis relativ sebességének és bizonyos nem-egyensulyi folyamatoknak a figyelembe vételére, mint pl. a fázisátalakulás. Az ilyen hatásokat is magukba foglaló modellek közül talán a legegyszerübb a [21]-ben leirt un. "drift" modell.

A modell 4 alapegyenletből áll, 3 megmaradási egyenlet a két fázis keverékére egy pedig külön a gőzfázisra vonatkozik. A relativ sebességet és a fázisátalakulást megadó összefüggések a segédegyenletek között szerepelnek.

A megoldásra használt véges differencia séma a különböző áramlási problémák numerikus számitása során szerzett tapasztalatokon alapszik. [22, 23, 24]

A módszer előnye, hogy pontossága kielégiti a gyakorlati követelményeket, stabil, könnyen programozható és egyszerüen kiterjeszthető két vagy három dimenziós geometriára is. Ez a módszer az alapja a később ismertetendő két-közeg modellekre kifejlesztett módszereknek is.

A matematikai modell 4 alapegyenlete a következő:

Tömegmegmaradás a keverékre

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} = 0 \qquad /3.1/$$

Tömegmegmaradás a gőzfázisra

$$\frac{\partial(\alpha \rho_v)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha \rho_v v)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\alpha \rho_v (1-\alpha)\rho_l v_r}{\rho}\right] = \Gamma \qquad /3.2/$$

Impulzus-megmaradás a keverékre

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v^2) + \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{(1-\alpha)\rho_l \alpha \rho_v v_r^2}{\rho}\right] + \frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + \tau = 0 \qquad /3.3/$$

Energia-megmaradás a keverékre

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho e v) + \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{(1-\alpha)\rho_l \alpha \rho_v (e_v - e_l) v_r}{\rho}\right] +$$

$$+ P\frac{\partial v}{\partial x} + P\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\alpha(1-\alpha)(\rho_l - \rho_v) v_r}{\rho}\right] = q \qquad /3.4/$$

Ha még beszámitjuk a T_l, T_v és T_s változókat, melyeket a fenti egyenletrendszer implicit módon tartalmaz, akkor 17 változó szerepel a 4 egyenletben. A g_x gravitációs erő csak az x független változó függvénye, és ismertnek tételezzük fel.
Két összefüggés adódik a keverék sürüségének és belső energiájának alábbi definiciójából:

$$\rho = \alpha \rho_v + (1-\alpha)\rho_l \qquad /3.5/$$

$$e = \frac{\alpha \rho_v e_v + (1-\alpha)\rho_l e_l}{\rho} \qquad /3.6/$$

A hiányzó 10 összefüggést a négy állapotegyenlet és a segéd-egyenletek adják. Az állapotegyenletek a következő alakuak:

$$\rho_\ell = \rho_\ell(P, e_\ell) \qquad /3.7/$$

$$T_\ell = T_\ell(P, e_\ell) \qquad /3.8/$$

ill. feltesszük,hogy ebből kifejezhető $e_\ell = e_\ell(P, T_\ell)$

$$\rho_v = \rho_v(P, e_v) \qquad /3.9/$$

$$T_v = T_v(P, e_v) \qquad /3.10/$$

ill. az ebből kifejezhető $e_v = e_v(P, T_v)$

A segédegyenletek adják meg a q hőforrás, a $\Im$ falsurlódás, a v_r relativ sebesség, a Γ fázisátalakulás, a $T_s = T_s/P/$ telítési görbe számításához szükséges összefüggéseket.
Ezeken kivül szükség van még egy termikus megszoritásra ahhoz, hogy a keverék energiáját feloszthassuk a két fázis között. Ilyen megszoritás lehet pl. a fázisok közti termikus egyensuly feltételezése. Másik lehetőség, hogy vagy csak a gőz, vagy csak a folyadék telitési állapotban van attól függően, hogy párolgás vagy lecsapódás játszódik le.

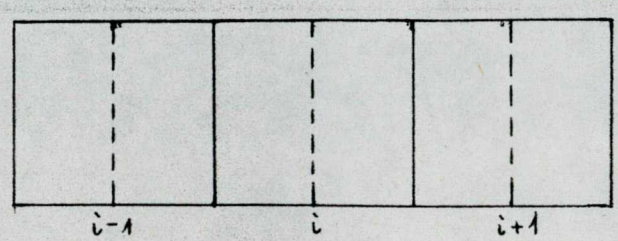
Ezekkel az összefüggésekkel márt zárt a megmaradási rendszer.

A differencia séma felirása előtt a /3.3/ egyenletet a számitás szempontjából kényelmesebb alakra hozzuk. Részben elvégezve a deriválásokat /3.1/ felhasználásával a következő egyenletet kapjuk:

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{(1-\alpha)\rho_\ell \alpha \rho_v v_r^2}{\rho}\right] + \frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x} + g_x + \frac{\Im}{\rho} = 0 \qquad /3.11/$$

A differencia sémát a /3.1/,/3.2/,/3.11/ és /3.4/ egyenletekre irjuk fel. Az egydimenziós modellben a reaktor zónáját /a feladat értelmezési tartományát/ elemi térfogatokra osztjuk az x tengely mentén, s a változók értékeit egy-egy ilyen térfogaton vett átlag adja. Az elemi térfogatok elrendezését a 6. ábra szemlélteti. A térfogatokat a folytonos vonalak jelentik, a szaggatott vonal a középpontjukon át huzódik.

A tömeg és energia egyenleteket a folytonos vonallal jelölt térfogatok fölött differenciáljuk, az impulzus egyenletet pedig a szaggatott vonalakkal jelzettek fölött. Ezt az elrendezést korábbi szerzők is sikeresen alkalmazták. [22, 24]



6. ábra

A differenciaegyenleteket [21] alapján a következő alakban irjuk fel:

$$\frac{\rho_i^{n+1} - \rho_i^n}{\Delta t} - \frac{\rho_{i+\frac{1}{2}}^n v_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \rho_{i-\frac{1}{2}}^n v_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta x} = 0 \qquad /3.12/$$

$$\frac{(\alpha\rho_v)_i^{n+1} - (\alpha\rho_v)_i^n}{\Delta t} + \frac{(\alpha\rho_v)_{i+\frac{1}{2}}^n v_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - (\alpha\rho_v)_{i-\frac{1}{2}}^n v_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta x} +$$

$$- \frac{1}{\Delta x}\left\{\left[\frac{(1-\alpha)\rho_l\alpha\rho_v v_r}{\rho}\right]_{i+\frac{1}{2}}^n - \left[\frac{(1-\alpha)\rho_l\alpha\rho_v v_r}{\rho}\right]_{i-\frac{1}{2}}^n\right\} = \Gamma \qquad /3.13/$$

$$\frac{v_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - v_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta t} + v_{i+\frac{1}{2}}^n \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x} + \frac{1}{\rho_{i+\frac{1}{2}}^n} \frac{p_{i+1}^{n+1} - p_i^{n+1}}{\Delta x} +$$

$$+ \frac{1}{\rho_{i+\frac{1}{2}}^n \Delta x}\left\{\left[\frac{(1-\alpha)\rho_l\alpha\rho_v v_r^2}{\rho}\right]_{i+1}^n - \left[\frac{(1-\alpha)\rho_l\alpha\rho_v v_r^2}{\rho}\right]_i^n\right\} + (g_x)_{i+\frac{1}{2}} + \left(\frac{J}{\rho}\right)_{i+\frac{1}{2}} = 0 \qquad /3.14/$$

$$\frac{(\rho e)_i^{n+1} - (\rho e)_i^n}{\Delta t} + \frac{(\rho e)_{i+\frac{1}{2}}^n v_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - (\rho e)_{i-\frac{1}{2}}^n v_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta x} +$$

$$+ \frac{1}{\Delta x}\left\{\left[\frac{(1-\alpha)\rho_l\alpha\rho_v(e_v - e_l)v_r}{\rho}\right]_{i+\frac{1}{2}}^n - \left[\frac{(1-\alpha)\rho_l\alpha\rho_v(e_v - e_l)v_r}{\rho}\right]_{i-\frac{1}{2}}^n\right\} +$$

$$+ \frac{p_i^n}{\Delta x}\left\{\left[\frac{\alpha(1-\alpha)(\rho_l - \rho_v)v_r}{\rho}\right]_{i+\frac{1}{2}}^n - \left[\frac{\alpha(1-\alpha)(\rho_l - \rho_v)v_r}{\rho}\right]_{i-\frac{1}{2}}^n\right\} + \qquad /3.15/$$

$$+ p_i^{n+1} \frac{v_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - v_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta x} = q$$

A fenti egyenletekben az n és n+1 indexek jelölik a változók értékeit az egymást követő időpontokban, Δt és Δx az /x,t/ derékszögü rács rácsvonalainak távolsága az idő és a helykoordináták irányában. Δx-ről feltesszük, hogy konstans, bár a módszer szempontjából ez nem lényeges megszoritás.

A /3.12/-/3.15/ egyenletek szemi-implicit rendszert alkotnak, mivel egyes változóknak explicit, másoknak pedig implicit differencia hányadosuk szerepel benne. A tömeg és energia egyenletekben a keverék sebességét tartalmazó tagok, az impulzus egyenletben a nyomásgradienst tartalmazó tag, az energia egyenletben a kompressziómunkát kifejező tag tartalmaz olyan változót, melynek értékét az uj időpontban vesszük. Az összes többi tag értékét a régi időpontban adjuk meg.

A Γ fázisátalakulás, $\mathcal{T}$ falsurlódás és a q hőforrás mindegyike a folyadék állapotának bonyolult függvénye lehet. Ha ez adott, akkor általában lehetséges bizonyos részüket az uj időpontban venni. Mivel ezek a kifejezések fontos, esetleg domináns jelenségeket /forrásokat, nyelőket/ jelölnek, ezért minél inkább implicit módon kell kezelni őket. A fenti módszerben alkalmazott explicit és implicit kifejezések megválasztását a következő szempontok indokolják:

1. Mivel azokban az atomreaktorok biztonságával kapcsolatos problémákban, melyekre ezt a módszert alkalmazni akarjuk a folyadék sebessége nagyon nagy határok között mozoghat /5-120 m/sec/, olyan módszerre van szükség, melyben az időlépés nagyságát nem korlátozza a stabilitás feltételéből származó klasszikus $\left|(v+c)\frac{\Delta t}{\Delta x}\right| < 1$ feltétel, ahol c a hangsebesség. A /3.12/-/3.15/ egyenletekkel végzett számitások szerint a rendszer stabilitásának feltétele közelitőleg $\left|v\,\frac{\Delta t}{\Delta x}\right| < 1$ feltéve, hogy a fázisok közti relativ sebesség kisebb, mint a keverék sebessége. Ez már nem jelent tul erős korlátozást a megengedhető időlépésnagyságra.

2. A fenti differencia séma a lehető legtöbb implicit kifejezést tartalmazza, amely mellett még aránylag egyszerüen megoldható. A kapott nemlineáris algebrai egyenletrendszerre megadható egy könnyen programozható, gyorsan konvergáló megoldási módszer.

3. A pontosság rendje alacson ugyan, de nagy valószinüséggel még elegendő a reaktor biztonsági problémákra, melyekben a segédegyenletek egyébként is pontatlanok. /Különösen sok a bizonytalanság Γ és v_r kifejezésének megadásában./

A ρ, ρ_l, ρ_v, e, e_l, e_v és α változók értékeit az elemi térfogatok középpontjaiban ismerjük, v és v_r értékét pedig a térfogatok határán. A fenti differenciaegyenletekben azonban a változók egy része olyan pontokban is szerepel, ahol nincs definiálva az értéke. Ahhoz, hogy az egyenletek minden rácspontban értelmezve legyenek meg kell adni olyan összefüggéseket, melyek a változóknak az egyes elemi térfogatok középpontjában és a határán felvett értékeit kapcsolják össze. Erre a célra szolgál az alábbi összefüggés.

Definició: Az f változó értékét a rácspontok felezőpontjaiban a következő, un. donor összefüggés adja meg:

$$f_{i+\frac{1}{2}} = \begin{cases} f_{i+1}, & \text{ha } v_{i+\frac{1}{2}} < 0 \\ f_i, & \text{ha } v_{i+\frac{1}{2}} \geq 0 \end{cases}$$

Az elnevezést az indokolja, hogy ilyenkor a változó értékét ab-

ban az elemi térfogatban felvett értéke határozza meg, amely felől a közeg áramlik, vagyis az előző térfogat donorként viselkedik.

A /3.12/-/3.15/ differenciaegyenletek a donor összefüggésekkel és a segédegyenletekkel egy nemlineáris algebrai egyenletrendszert alkotnak a változóknak az uj időpontbeli értékeire vonatkozólag. Ennek megoldására a [21]-ben kifejlesztett módszer a Newton és a Gauss-Seidel módszer felhasználásán alapszik. /Ennek megfelelően rövid elnevezése NBGS: Newton és blokk-Gauss-Seidel/

Az NBGS módszer két egymásba kapcsolódó iterációból áll. Először végrehajtunk egy Newton iterációt az eredeti nemlineáris rendszeren, majd az igy kapott lineáris rendszert blokk-Gauss-Seidel iterációval oldjuk meg.
A blokk inverziós eljárás használata azért kivánatos, mert az alapegyenletek közt nagyon szoros a kapcsolat. Az egyik legszorosabb kapcsolatot a Γ fázisátalakulás jelenti, mivel ez adja meg a gőz keletkezését, amely nagyságrendekkel is megváltoztathatja a keverék kompresszibililtását, s ezzel jelentősen befolyásolja a folyadék mozgását.
A blokk inverziós eljárás lehetővé teszi Γ kifejezésének viszonylag nagyfoku implicit kezelését.

Az NBGS eljárás az alábbi négy lépésből áll:

1. Minden egyenletet - a differencia- és segédegyenleteket egyaránt - linearizálunk az ismeretlenek legutóbbi értéke körül.
2. A differencia-egyenletekben szereplő minden változót eliminálunk α, P, v és e_ℓ kivételével a linearizált segédegyenletek és definiciók segitségével. Igy egy lineáris egyenletrendszert kapunk az α, P, v és e_ℓ változókra minden rácspontban.
3. Ezekből az egyenletekből meghatározzuk α, P, v és e_ℓ uj időpontbeli értékeit minden rácspontban.
4. A többi változó értékét α, P, v és e_ℓ segitségével határozzuk meg a definiciókból és segédegyenletekből. Ebben a lépésben ismét az eredeti nem-lineáris egyenleteket használjuk fel.

A fenti eljárásban a négy parciális differenciálegyenletre négy alapváltozót választottunk ki. Ez a kiválasztás sokféleképpen történhet. Választhattuk volna például a két sürüséget a nyomás és térfogattört helyett. A fenti választást a következők indokolják:

a./ a nyomás a távolságnak akkor is folytonos függvénye lehet, amikor a sürüség nem az /pl. a két fázis érintkezésénél/;

b./ a nyomás állapotegyenlete a sürüségnek nagyon érzékeny függvénye, ha a rendszer csak folyadékból áll. Ha a sürüség lenne alapváltozó, akkor ennek kis hibája a nyomásban nagy hibát eredményezne, ez csökkentené az algoritmus stabilitását.

c./ a termodinamikai összefüggések egyszerübben kezelhetők, ha a nyomás és az egyik energia vagy hőnérséklet rendelkezésre áll.

Az eljárás első két lépésének végrehajtását példaképpen vizsgáljuk meg a /3.12/ egyenleten. Ez az egyenlet már lineáris a ϱ_i^{n+1} és $v_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}$ változókban. A feladat az, hogy a ϱ_i^{n+1} sürüséget fejezzük ki a négy alapváltozóval. Ehhez a definiciók és a segédegyenletek állnak rendelkezésre.

A /3.5/,/3.7/-/3.10/ egyenletekből és a termikus megszoritásból a ϱ, ϱ_ℓ, ϱ_v, e_v, T_ℓ, T_v változók kifejezhetők α, P és e_ℓ segitségével. Tegyük fel, hogy a segédegyenletek közt szereplő termikus megszoritás a hőmérsékletek egyenlőségét fejezi ki, azaz

$$T_v = T_\ell \qquad /3.16/$$

Az állapotegyenletek alakjától függően az összefüggések nagyon bonyolultak lehetnek. Mivel a ϱ sürüség és az alapváltozók között analitikus összefüggést akarunk felállitani, ezért a fenti 6 egyenletet linearizáljuk, s ezután eliminálunk a ϱ_ℓ, ϱ_v, e_v, T_ℓ és T_v változókat. Jelölje $\sim$ azt a pontot, ami körül a linearizálás történik. A kiválasztott egyenletek linearizált alakja a következő:

$$\varrho = \tilde{\varrho} + (\tilde{\varrho}_v - \tilde{\varrho}_\ell)(\alpha - \tilde{\alpha}) + (1-\tilde{\alpha})(\varrho_\ell - \tilde{\varrho}_\ell) + \alpha(\varrho_v - \tilde{\varrho}_v) \qquad /3.17/$$

$$\varrho_\ell = \tilde{\varrho}_\ell + \frac{\partial \tilde{\varrho}_\ell}{\partial P}(P - \tilde{P}) + \frac{\partial \tilde{\varrho}_\ell}{\partial e_\ell}(e_\ell - \tilde{e}_\ell) \qquad /3.18/$$

$$\varrho_v = \tilde{\varrho}_v + \frac{\partial \tilde{\varrho}_v}{\partial P}(P - \tilde{P}) + \frac{\partial \tilde{\varrho}_v}{\partial e_v}(e_v - \tilde{e}_v) \qquad /3.19/$$

$$T_v = T_\ell \qquad /3.20/$$

$$e_\ell = \tilde{e}_\ell + \frac{\partial \tilde{e}_\ell}{\partial P}(P - \tilde{P}) + \frac{\partial \tilde{e}_\ell}{\partial T_\ell}(T_\ell - \tilde{T}_\ell) \qquad /3.21/$$

$$e_v = \tilde{e}_v + \frac{\partial \tilde{e}_v}{\partial P}(P - \tilde{P}) + \frac{\partial \tilde{e}_v}{\partial T_v}(T_v - \tilde{T}_v) \qquad /3.22/$$

Az egyenletekben szereplő deriváltak az állapotfüggvények deriváltjai, melyeket a /3.7/-/3.10/ egyenletek jobboldalai definiálnak, s értéküket a $(\tilde{P}, \tilde{e}_v)$, illetve a $(\tilde{P}, \tilde{e}_\ell)$ pontokban vesszük.

A /3.20/-/3.22/ egyenletek és a $\tilde{T}_v = \tilde{T}_\ell$ feltételezés felhasználásával az alábbi összefüggést kapjuk e_ℓ és e_v között:

$$\frac{\partial \tilde{e}_v}{\partial T_v}\left[e_\ell - \tilde{e}_\ell - \frac{\partial \tilde{e}_\ell}{\partial P}(P-\tilde{P})\right] = \frac{\partial \tilde{e}_\ell}{\partial T_\ell}\left[e_v - \tilde{e}_v - \frac{\partial \tilde{e}_v}{\partial P}(P-\tilde{P})\right] \qquad /3.23/$$

/3.18/ és /3.19/ behelyettesitésével /3.17/-be kapjuk, hogy

$$\rho = \tilde{\rho} + (\tilde{\rho}_v - \tilde{\rho}_\ell)(\alpha - \tilde{\alpha}) + (1-\tilde{\alpha})\left[\frac{\partial \tilde{\rho}_\ell}{\partial P}(P-\tilde{P}) + \frac{\partial \tilde{\rho}_\ell}{\partial e}(e_\ell - \tilde{e}_\ell)\right] +$$

$$+ \tilde{\alpha}\left[\frac{\partial \tilde{\rho}_v}{\partial P}(P-\tilde{P}) + \frac{\partial \tilde{\rho}_v}{\partial e_v}(e_v - \tilde{e}_v)\right]$$

/3.24/

Végül /3.24/-ből eliminálju e_v-t /3.23/ segitségével:

$$\rho = \tilde{\rho} + (\tilde{\rho}_v - \tilde{\rho}_\ell)(\alpha - \tilde{\alpha}) + (1-\tilde{\alpha})\left[\frac{\partial \tilde{\rho}_\ell}{\partial P}(P-\tilde{P}) + \frac{\partial \tilde{\rho}_\ell}{\partial e_\ell}(e_\ell - \tilde{e}_\ell)\right] +$$

$$+ \tilde{\alpha}\left\{\frac{\partial \tilde{\rho}_v}{\partial P}(P-\tilde{P}) + \frac{\partial \tilde{\rho}_v}{\partial e_v}\frac{\partial \tilde{T}_\ell}{\partial e_\ell}\frac{\partial \tilde{e}_v}{\partial T_v}\left[(e_\ell - \tilde{e}_\ell) - \frac{\partial \tilde{e}_\ell}{\partial P}(P-\tilde{P})\right] + \frac{\partial \tilde{\rho}_v}{\partial e_v}\frac{\partial \tilde{e}_v}{\partial P}(P-\tilde{P})\right\}$$

/3.25/

Ezzel megkaptuk a keresett lineáris összefüggést a keverék ρ sürüsége és a három alapváltozó, α, P és e_ℓ között. Az NBGS eljárás 2. lépésénél befejezéseként a /3.25/ összefüggés segitségével eliminálju a /3.12/ egyenletben szereplő ρ_i^{n+1} keverék sürüséget.

Jelölje k és k+1 a változók két egymást követő iterációját az uj időpontban, és a $\sim$ vel jelölt változók értéke legyen a k-adik iterált érték. Ekkor /3.25/ felhasználásával /3.12/ az alábbi alakba irható:

$$\rho_i^k - \rho_i^n + \left[(\rho_v)_i^k - (\rho_\ell)_i^k\right](\alpha_i^{k+1} - \alpha_i^k) +$$

$$+\left[(1-\alpha_i^k)\frac{\partial \rho_\ell^k}{\partial P} + \alpha_i^k\left(\frac{\partial \rho_v^k}{\partial P} - \frac{\partial \rho_v^k}{\partial e_v}\frac{\partial e_v^k}{\partial T_v}\frac{\partial T_\ell^k}{\partial e_\ell}\frac{\partial e_\ell^k}{\partial P} + \frac{\partial \rho_v^k}{\partial e_v}\frac{\partial e_v^k}{\partial P}\right)\right](P_i^{k+1} - P_i^k) +$$

$$+\left[(1-\alpha_i^k)\frac{\partial \rho_\ell^k}{\partial e_\ell} + \alpha_i^k\frac{\partial \rho_v^k}{\partial e_v}\frac{\partial T_\ell^k}{\partial e_\ell}\frac{\partial e_v^k}{\partial T_v}\right]\left[(e_\ell)_i^{k+1} - (e_\ell)_i^k\right] +$$

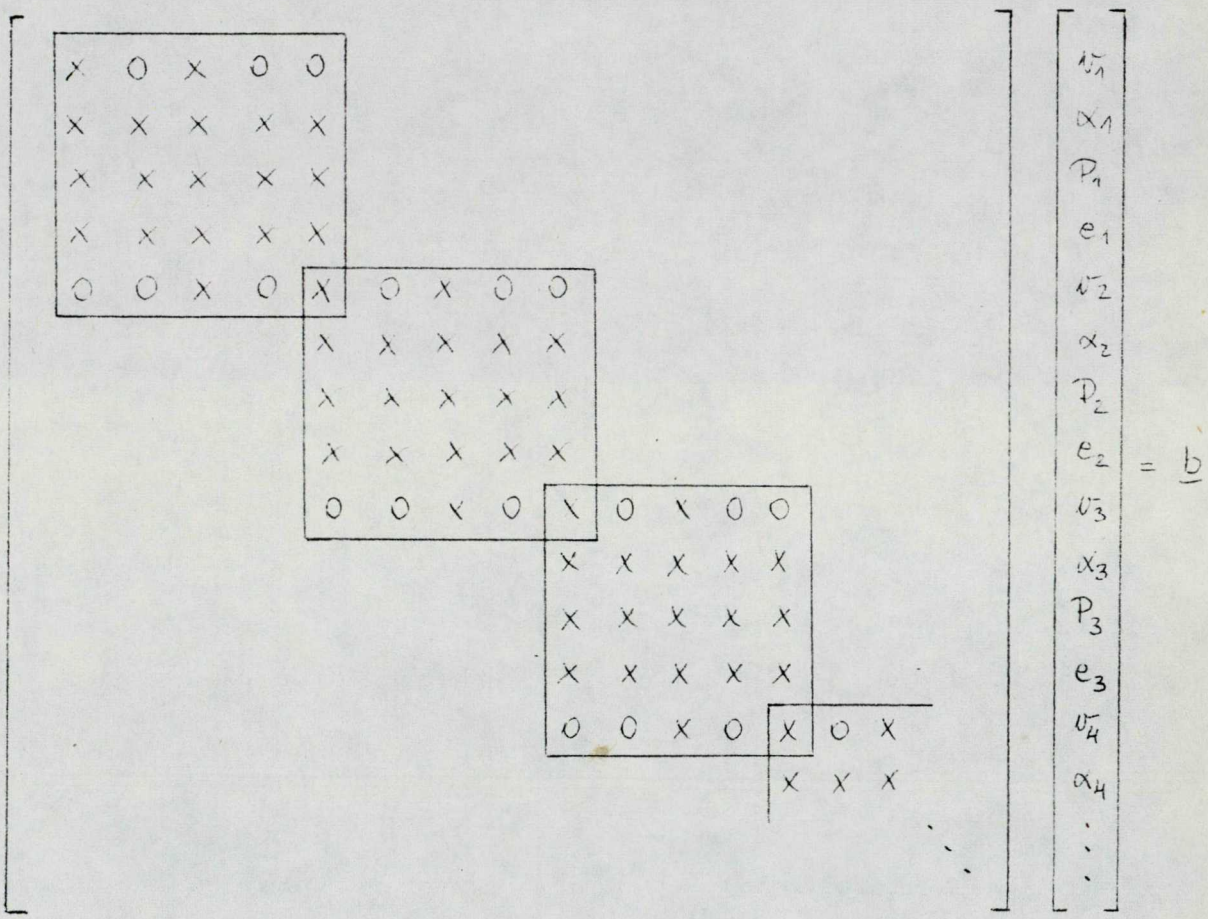
$$+\frac{\Delta t}{\Delta x}\left(\rho_{i+\frac{1}{2}}^n v_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} - \rho_{i-\frac{1}{2}}^n v_{i-\frac{1}{2}}^{k+1}\right) = 0$$

/3.26/

Az egyszerüség kedvéért az $u^{n+1,k+1} = u^{k+1}$ jelölést használtuk, mivel az iterációt mindig az uj időlépésben hajtjuk végre.

A /3.26/ egyenlet lineáris az α_i^{k+1}, P_i^{k+1}, $(e_\ell)_i^{k+1}$, $v_{i+\frac{1}{2}}^{k+1}$ és $v_{i-\frac{1}{2}}^{k+1}$ változókban. Ezt az eljárást megismételve a megmaradt három differenciaegyenletre, /3.13/-/3.15/-re, minden rácspontban kapunk egy lineáris algebrai egyenletrendszert a négy alapváltozóra.

Az NBGS eljárás 3. lépésének végrehajtásához vizsgáljuk meg ennek az egyenletrendszernek a szerkezetét egy adott időpontban az összes rácspontra felirva. /7. ábra/



7. ábra

A nemzéró együtthatókat x jelöli. Ezek egymásba kapcsolódó 5×5-ös blokkokat alkotnak a főátló mentén. Minden egyes blokk egy elemi térfogathoz tartozó változók együtthatóit tartalmazza, beleértve a két határon vett sebességeket. A blokk első és ötödik sora az impulzus egyenleteknek, a többi az energia és a tömeg egyenleteknek felel meg. Az impulzus egyenletek révén minden elemi térfogat kapcsolatban van a szomszédaival a nyo-

mason keresztül. Egy adott elemi térfogat öt változója igy a szomszédos térfogatok változói közül csak a nyomásoktól függ, a többitől nem. Ezért ha a szomszédos térfogatokban rögzitjük a nyomásokat, akkor az adott térfogathoz tartozó öt alapváltozó értékét meg tudjuk határozni egy olyan 5x5-ös lineáris egyenletrendszer megoldásával, melynek szerkezetét a 7. ábrán szereplő mátrix egy blokkja szemlélteti.

Az NBGS eljárás 3. lépését a következő módon hajtjuk végre. Kiválasztunk egy haladási irányt /ez az egymás utáni iterációkban változhat/. Az első elemi térfogathoz tartozó öt változó értékét kiszámitjuk a fenti módon a 2. elemi térfogathoz tartozó nyomás előző iterációból származó értékének felhasználásával. Ezután a 2. térfogatra végezzük el a számitást az 1-ben számitott uj és a 3-beli régi nyomás értékek segitségével. Közben a térfogatok közös határán vett sebességet kétszer is felülirjuk, először az 1.,utána a 2. térfogat számitásakor. Az eljárást addig folytatjuk, amig minden alapváltozó értékét minden elemi térfogatban ujra számoljuk.

Az NBGS eljárás 4. lépésében az igy kapott alapváltozók segitségével az összes többi változó értékét meghatározzuk. Ehhez a definiciók és a segédegyenletek eredeti alakját használjuk fel.

Miután igy minden változó uj értékét kiszámitottuk ellenőrizni kell, hogy teljesül-e a konvergencia feltétele, s szükség esetén ujabb iterációt kell végrehajtani.

A fenti eljárás további egyszerüsitésére van még egy lehetőség. Az impulzus egyenletek segitségével a sebességek eliminálhatók a rendszerből ugy, hogy helyettük csak nyomások maradnak. Ezt elvégezve a kapott egyenletrendszer szerkezetét a 8. ábra szemlélteti.

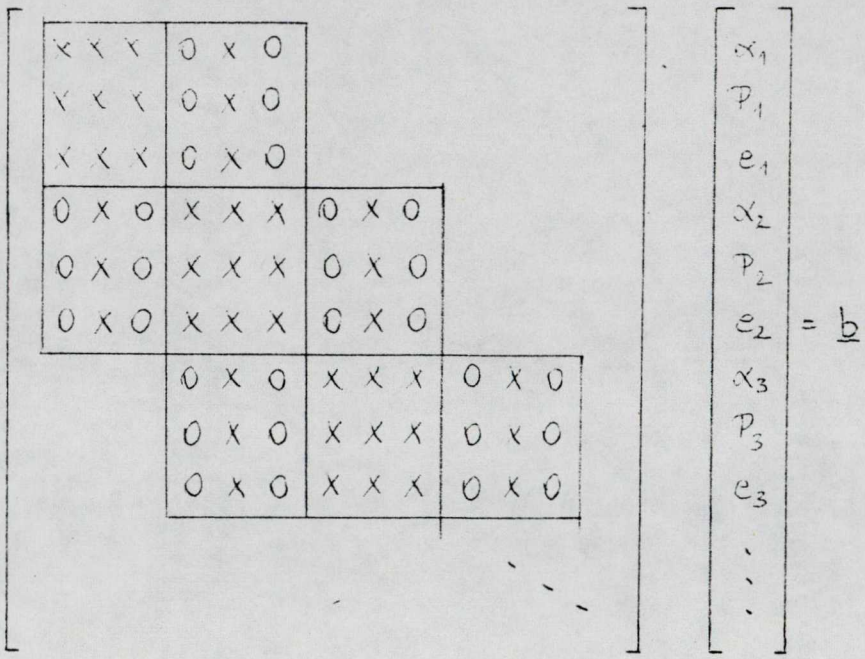
Az együttható mátrix blokk-tridiagonális 3x3-as blokkokkal. Ha M-mel jelöljük a mátrixot, akkor elvégezhető a következő faktorizáció:

$$M = L + D + U, \qquad /3.27/$$

ahol L alsó, U felső blokk-trianguláris mátrixok, D pedig az M diagonális blokkjaiból áll.
Az NBGS eljárás 3. lépése a következő egyenlet megoldását jelenti:

$$(L + D)\ \underline{w}^{k+1} = U\ \underline{w}^{k} + \underline{b}, \qquad /3.28/$$

ahol $\underline{w}$ a 8. ábrán szereplő változókból álló vektor. Az itt szereplő L + D mátrixot különösen egyszerü invertálni, mert csak a 3x3-as diagonális blokkokat kell invertálni az egyes elemi térfogatokra.



8. ábra

Lehetne invertálni az egész M mátrixot az iteráció minden lépésében egy blokk-tridiagonális mátrixot invertáló rutin segitségével. Több térdimenzióban azonban, vagy bonyolult áramlási kép esetén az M mátrix bonyolultabbá válik, s a direkt invertálás nehezebben végezhető el.

Az NBGS eljárás előnye, hogy könnyen kiterjeszthető több dimenzióra is. Két dimenzióban pl. az M mátrix blokk-blokk-tridiagonális lesz 3×3-as blokkokkal és felbontható /3.27/-hez hasonlóan. Az L + D mátrixot ekkor is könnyen lehet invertálni elemi térfogatonként egy 3×3-as rendszer megoldásával.

A gyakorlatban az állapotegyenleteket általában gőztáblázat formájában adják meg. Ezekre kell függvényeket illeszteni. A ρ és e_ℓ függvényeknek folytonosaknak kell lenniük, de az első deriváltjuk már lehet szakadásos bizonyos pontokban. Néhány deriváltnak nullától különbözőnek kell lennie ahhoz, hogy egy- és kétfázisu esetben egyaránt legyen megoldás. Ebben a modellben egyfázisu áramlás esetén $\alpha=0$ vagy $\alpha=1$, és pl. egyfázisu folyadék esetében /$\alpha=0$/ ennek sürüsége nem lehet P-től és e_ℓ-től független állandó.

A mátrixok vizsgálata azt mutatja, hogy a rendszer rosszul kondicionálttá válik, ha $\rho_\ell \rightarrow \rho_v$. Ez a termodinamikai kritikus ponthoz közeli vagy afölötti helyzetnek felelne meg. Fizikailag azt jelentené, hogy térfogattörtet próbálunk számitani olyan keverékben, amely egymástól megkülönböztethetetlen alkotórészekből áll. A reaktorokkal kapcsolatos problémákban azon-

ban ez nem fordulhat elő, mert a rendszer mindig a kritikus pont alatt van.

Az ismertetett numerikus módszert a kétfázisu áramlások széles skálájára alkalmazták mind egy, mind több térdimenzióban. Ez a módszer az alapja az ujabb rendszerprogramokba foglalt modellek megoldásának. Alacsony rendü pontossága ellenére a gyakorlat számára megfelelő pontosságot biztosit, s előnye, hogy gyorsan konvergál. Általában 2-3 iterációt elég végezni időpontonként. A [21]-ben ismertetett két példában kapott eredmények jól egyeznek az elméleti számitásokkal, illetve a mérési eredményekkel.

2.4.1. Két-közeg modellek

Az utóbbi néhány évben jelentős erőfeszitések történtek a kétfázisu áramlás minél pontosabb modellezésére. Olyan modellt próbáltak létrehozni, amely a lehető legkevesebb megszoritást tartalmazza az áramlásra vonatkozóan és jól leirja a lejátszódó jelenségeket. Pl. ha egy kisérletben olyanok a körülmények, melyek mellett mindkét fázis ugyanazzal a sebességgel halad, akkor a matematikai modellnek fel kellene ismernie ezt a kényszeritő körülményt. Általában, ha a fázisok valamilyen egyensulyba jutnak, akkor ne legyen szükség arra, hogy ezt előre feltételezzük.

Egy teljes két-közeg modellnek le kell tudni irnia a teljes nem-egyensulyi állapotot, azaz a mechanikai, termikus és kémiai nem-egyensulyt.

Az eddig kidolgozott különböző két-közeg modellek alapvető tipusait [25] foglalja össze. Teljesen kielégitő modellt azonban még nem sikerült létrehozni. Az eddigieknek legalább három hiányosságuk vagy gyengéjük van.
Az egyik, hogy szükség van a fázisok közti kölcsönhatás függvények megadására. Ehhez előre rögziteni kell az áramlási képet, amivel szükül a modell érvényességi köre /bár még mindig nem jelent olyan megszoritást, mint pl. a sebesség korrelációk felállitása a 2.3. fejezetbeli modellben/.
A másik, hogy a modell egyenleteinek származtatásakor egyes változók bizonyos átlagolás eredményei, mások értékét pedig egyes pontokban ismerjük. A kétfajta mennyiség közti összefüggések felállitásával hibákat követünk el a rendszerben.
A harmadik probléma akkor jelentkezik, amikor egyensulyi áramlást próbálunk leirni. Általában ugyanis az egyensulyi állapot nem megoldása a nem-egyensulyi egyenleteknek.

A két-közeg egyenleteknek az a megfigyelés az alapja, hogy bár mikroszkopikus szinten az áramlási tartomány monden pontjában csak az egyik fázis található meg egy adott pillanatban, mégis közelitésként hasznos lehet az egyes fázisok mozgását olyan folytonos sebességmezővel leirni, amely minden pontban definiálva van. Ezért az egyenletek származtatása a mikroszkopikus mozgásegyenletek átlagolásával történik a térben kicsi, de véges tartományok és időbeli intervallumok fölött. Ez az átlagolás a tér-idő minden pontjában folytonos sebességmezőt eredményez mindkét fázisra.

A két-közeg modellek közös vonása, hogy hat parciális differenciálegyenletet tartalmaznak /egy dimenzióban/: mindkét fázisra a tömeg, az impulzus és az energia megmaradását kifejező egyenleteket. Abban az esetben, amikor a fázisoknak különböző a sebességmezőjük a legáltalánosabban használt modellek egyenletei nem teljesen hiperbolikus rendszert alkotnak, a karakterisztikák között előfordulnak komplexek is. Ez azt jelenti, hogy a kezdeti érték feladat nem korrekt kitüzésü. Hiába megalapozottak fizikailag az egyenletek, megoldásuk instabil, nem függ folytonosan a kezdeti értékektől.Ennek a problémának az okait és a megszüntetés lehetőségeit az utóbbi néhány évben próbálják megtalálni. [18, 26, 27, 28, 29]

A kérdés tisztázása lényeges feltétele annak, hogy stabil és fizikailag értelmes reaktor biztonsági számitásokat lehessen végezni. A kezdeti értékektől való folytonos függésnek a gyakorlat szempontjából nagy a jelentősége. Ez ugyanis azt jelenti, hogy az adatok pontatlansága nem fog ellenőrizhetetlen hibákat okozni a megoldás folyamán.

A gyakorlatban a kisérleti adatok megadásakor legalább kétféle hibát követünk el: az egyik a mérésekből adódik, a másik a számitógépes számábrázolás pontosságának korlátjából. Ezért lényeges az adatoktól való folytonos függés követelménye.

Az egyenletek és a nekik megfelelő fizikai jelenségek komplexitása miatt gyakorlatilag csak numerikus megoldási módszerek jöhetnek szóba. Véges differenciák alkalmazása esetén, ha a kezdeti érték feladat nem korrekt kitüzésü, akkor a feladattal konzisztens differencia sémák nem lesznek stabilak [29]. A vélemények megoszlanak arra nézve, hogy hogyan lehet mégis fizikailag értelmes eredményeket kapni.

A valóságos áramlásokban mindig fellép csillapitás /pl. a folyadékok viszkozitása miatt/. Ez egy másodrendü tag figyelembe vételét jelenti a mozgásegyenletben, mellyel a karakterisztikák valósakkáválnak. A kutatók egy része szerint ilyen és ehhez hasonló jelenségek /pl. felületi feszültség [18] vagy virtuálistömeg hatás [30] / figyelembe vételével a feladat korrekt kitü-

zésüvé tehető, tehát azok a modellek, melyekben ezek nem szerepelnek hiányosak, pontatlanok. Ez okozza instabilitásukat.

Mások szerint a nem korrekt kitüzésü feladattal is végezhetők jó eredményt adó számitások a véges differenciák módszerével. [26] Ennek oka, hogy a véges differenciák alkalmazásával bizonyos mesterséges csillapitást viszünk a rendszerbe a donor differenciálás formájában.

A differencia sémák stabilitása klasszikus értelemben finom rácsokra vonatkozik. Megadhatók azonban olyan sémák, melyek durva rácson stabilak.

Ezekkel a problémákkal kapcsolatban vizsgálom a következőkben, hogy hogyan lehet korrekt kitüzésüvé tenni a két-közeg modelleket, illetve hogyan lehet stabil differencia módszert megadni a nem korrekt kitüzésü két-közeg modellekre.

2.4.2. A két-közeg egyenletek stabilitásának vizsgálata

Az 1.3 fejezetből kiderült, hogy a valós karakteriszták létezése szükséges feltétele az egyenletrendszer stabilitásának. A komplex karakterisztikáju egyenletek esetén a problémát a megoldás nagyfrekvenciáju Fourier komponenseinek instabilitása okozza. Ezek a megoldás során korlátlanul növekedhetnek. A hullámhossz csökkenésével /azaz a frekvencia növekedésével/ az eredmények egyre nagyobb hibát fognak tartalmazni. Az ilyen instabilitások tisztán matematikai eredetüek.

Ahhoz, hogy a két-közeg modell jól irja le a folyamatokat olyan fizikai hatások beépitésére van szükség, melyek legnagyobbrészt elhanyagolhatók, de a rövid hullámhosszaknál fontosakká válnak. Ezek nem változtatják meg az alap-egyenletrendszer viselkedését nagy hullámhosszaknál, amikor az jól irja le a fizikai rendszer viselkedését. Ilyen rövid hullámhosszu fizikai hatás a felületi feszültség vagy a viszkozitás. Ezek figyelembe vételével a karakterisztikák valósakká válnak, a rövid hullámhosszu Fourier komponensek stabilizálódnak, a kezdeti érték feladat korrekt kitüzésü lesz.

A következőkben [18] alapján a felületi feszültség hatását vizsgálom az alapvető két-közeg modell egyenleteire.

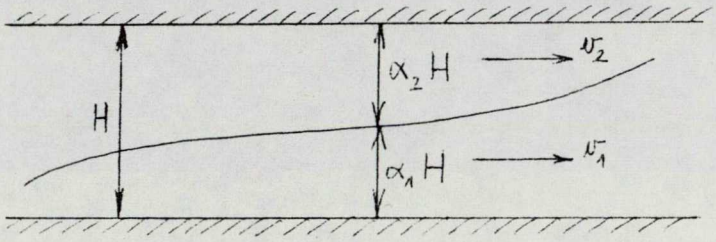
Az alap-egyenletrendszer a következő:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_i \rho_i v_i) = 0, \qquad i = 1,2 \qquad /4.1/$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i v_i) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_i \rho_i v_i^2) + \alpha_i \frac{\partial P}{\partial x} = 0, \qquad i = 1,2 \qquad /4.2/$$

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1 \qquad /4.3/$$

A fenti egyenletek a szeparált kétfázisu áramlást irják le párhuzamos sikok között zéró gravitációs erő mellett. Az egyszerüség kedvéért feltettük, hogy nincs viszkozitás és ezért surlódási nyomásesés, valamint nincs fázisátalakulás sem. Az áramlás szerkezetét a 9. ábra szemlélteti.



9. ábra

A /4.1/-/4.3/ egyenletrendszernek vannak komplex karakterisztikái. Ha azonban figyelembe veszzük a felületi feszültséget, akkor ezek valósakká válnak.

A felületi feszültség beépitéséhez arra van szükség, hogy a fázisok nyomása kissé különböző legyen. /4.2/ helyett ekkor a következő egyenlet fog szerepelni:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i v_i) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_i \rho_i v_i^2) + \alpha_i \frac{\partial P_i}{\partial x} = 0, \qquad i=1,2 \qquad /4.4/$$

ahol P_i az i fázis nyomása. A felületi feszültséget megadó egyenlet pedig [18] szerint:

$$P_1 - P_2 = \frac{\sigma}{R}, \qquad /4.5/$$

ahol σ a felületi feszültség, R a fázisok közös határának görbületi sugara. Erre az alábbi összefüggés ismeretes a párhuzamos sikok H távolságának felhasználásával: $\frac{1}{R} \approx -H \frac{\partial^2 \alpha_1}{\partial x^2}$

Ezt /4.5/-be helyettesitve kapjuk, hogy

$$P_1 - P_2 = -\sigma H \frac{\partial^2 \alpha_1}{\partial x^2} \qquad /4.6/$$

A /4.1/,/4.3/,/4.4/ és /4.6/ egyenletekre a továbbiakban σ-egyenletrendszer néven hivatkozunk.

Állitás: A σ-egyenletrendszer karakterisztikus gyökei valósak.

Bizonyitás:

A karakterisztikus gyökök meghatározásához a σ-egyenletrendszert először elsőrendüvé alakitjuk a $\beta = \frac{\partial \alpha_1}{\partial x}$ változó bevezetésével. Ezzel a /4.5/ egyenlet helyett az alábbi két egyenlet lép fel:

$$p_1 - p_2 + \sigma H \frac{\partial \beta}{\partial x} = 0 \qquad /4.7/$$

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial x} - \beta = 0 \qquad /4.8/$$

Feltesszük, hogy a sürüségek csak a nyomás függvényei, azaz

$$\rho_1 = f_1(p_1) \quad \text{és} \quad \rho_2 = f_2(p_2) \qquad /4.9/$$

ahol az f_1 és f_2 függvény ismert. Ezek segitségével α_2, ρ_1 és ρ_2 eliminálható a rendszerből.

Ezzel az egyenletrendszert felirhatjuk az alábbi mátrix alakban:

$$A \frac{\partial u}{\partial t} + B \frac{\partial u}{\partial x} + \underline{d} = \underline{0} \qquad /4.10/$$

ahol $\underline{u}$ a függő változók oszlopvektora, $\underline{u} = (p_1, p_2, v_1, v_2, \alpha_1, \beta)^T$

az A és B mátrixok elemei pedig a következők:

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\alpha_1}{c_1^2} & 0 & 0 & 0 & \rho_1 & 0 \\ 0 & \frac{\alpha_2}{c_2^2} & 0 & 0 & -\rho_2 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_1\rho_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_2\rho_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} \frac{\alpha_1 v_1}{c_1^2} & 0 & \alpha_1\rho_1 & 0 & \rho_1 v_1 & 0 \\ 0 & \frac{\alpha_2 v_2}{c_2^2} & 0 & \alpha_2\rho_2 & -\rho_2 v_2 & 0 \\ \alpha_1 & 0 & \alpha_1\rho_1 v_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_2 & 0 & \alpha_2\rho_2 v_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sigma H \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

c_i jelöli az i fázisban terjedő hang sebességét, amely /4.9/-ből meghatározható a $c_i^{-2} = \frac{d\rho_i}{dp_i}$ összefüggés alapján.

A $\underline{d}$ forrásvektor alakja: $\underline{d} = (0,0,0,0,P_1 - P_2, -\beta)^T$

A karakterisztikus gyököket a $\det(A - \mu B) = 0$ egyenletből kapjuk. Ezek a következők:

$$0/\text{kétszer}/,\ (v_1 \pm c_1)^{-1} \text{ és } (v_2 \pm c_2)^{-1}$$

Tehát $\sigma \neq 0$ esetén a karakterisztikák valósak. /A $\sigma = 0$ esetet a következő pontban vizsgálom. Ekkor a gyökök csak a $\rho_1, \rho_2 = \text{konst.}$, azaz inkompresszibilis esetben határozhatók meg analitikusan, egyébként numerikusan kell megoldani a karakterisztikus egyenletet. A gyökök között mindkét esetben lesz komplex is./

Ezzel beláttuk, hogy a felületi feszültség beépitése a karakterisztikákat valósakká tette.

Vizsgáljuk most meg a σ-egyenletrendszer lineáris stabilitását. Ezt analitikusan arra az esetre tudjuk elvégezni, amikor az áramlás inkompresszibilis / ρ_i nem függ a nyomástól/ és a perturbáció nélküli megoldás hely és idő szerinti deriváltjai nullák /azaz stacionárius és izotróp az áramlás/. Ekkor a σ-egyenletrendszer alakja a következő lesz:

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + v_i \frac{\partial \alpha_i}{\partial x} + \alpha_i \frac{\partial v_i}{\partial x} = 0, \qquad i = 1,2 \qquad /4.11/$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_i \frac{\partial v_i}{\partial x} + \frac{\partial \bar{P}_i}{\partial x} = 0, \qquad i = 1,2 \qquad /4.12/$$

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1 \qquad /4.13/$$

$$\rho_1 \bar{P}_1 - \rho_2 \bar{P}_2 = -\sigma H \frac{\partial^2 \alpha_1}{\partial x^2} \qquad /4.14/$$

ahol $\bar{P}_i = \frac{P_i}{\rho_i}$. A lineáris stabilitás vizsgálathoz, minden u változó helyébe $u + \delta u \exp[i(kx - \omega t)]$ -t irunk, s a kapott egyenletrendszert linearizáljuk a δu perturbációra vonatkozóan. Az izotróp és stacionárius perturbáció nélküli megoldás azt jelenti, hogy u nem függ x-től és t-től, ezért a következő eredményt kapjuk:

$$(-i\omega + ikv_1)\delta\alpha_1 + ik\alpha_1 \delta v_1 = 0 \qquad /4.15/$$

$$-(-i\omega + ikv_2)\delta\alpha_1 + ik\alpha_2 \delta v_2 = 0 \qquad /4.16/$$

$$(-i\omega + ikv_1)\delta v_1 + ik\delta\bar{P}_1 = 0 \qquad /4.17/$$

$$(-i\omega + ikv_2)\delta v_2 + ik\delta\bar{P}_2 = 0 \qquad /4.18/$$

$$-k^2 \sigma H \delta\alpha_1 + \rho_1 \delta\bar{P}_1 - \rho_2 \delta\bar{P}_2 = 0 \qquad /4.19/$$

A /4.15/-/4.19/ homogén lineáris egyenletrendszer a $\delta\bar{P}_1$, $\delta\bar{P}_2$, $\delta\bar{v}_1$, $\delta\bar{v}_2$ és $\delta\bar{\alpha}_1$ változókban. Ahhoz, hogy legyen a triviálistól különböző megoldása az együttható mátrix determinánsának nullának kell lennie. Ez $\omega=\omega(k)$-ra a következő egyenletet adja:

$$\alpha_1\rho_2(kv_2-\omega)^2+\alpha_2\rho_1(kv_1-\omega)^2-\alpha_1\alpha_2\sigma H k^4=0 \qquad /4.20/$$

Adott k-ra /4.20/-ból az $\omega(k)$gyökök a következők:

$$\omega=\frac{k\alpha_1\alpha_2}{\alpha_2\rho_1+\alpha_1\rho_2}\left\{\frac{\rho_1 v_1}{\alpha_1}+\frac{\rho_2 v_2}{\alpha_2}\pm\left[\frac{\sigma H k^2}{\alpha_1\alpha_2}(\alpha_2\rho_1+\alpha_1\rho_2)-\frac{\rho_1\rho_2}{\alpha_1\alpha_2}(v_1-v_2)^2\right]^{\frac{1}{2}}\right\} \qquad /4.21/$$

A stabilitás feltétele, hogy $\mathrm{Im}(\omega)\leqq 0$ legyen minden ω gyökre. Ekkor nem fog a perturbáció korlátlanul nőni. Mivel jelen esetben az ω-k egymás komplex konjugáltjai, ezért ez a feltétel azt jelenti, hogy ω -nak valósnak kell lennie, azaz

$$\sigma H k^2(\alpha_2\rho_1+\alpha_1\rho_2)\geqq\rho_1\rho_2(v_1-v_2)^2 \qquad /4.22/$$

Ez az eredmény σ tetszőleges értékére, tehát $\sigma=0$-ra is érvényes. Ennek a vizsgálatnak az eredményei tehát mind az alap, mind a σ-egyenletrendszerre fennállnak.

A $v_1=v_2$ esetben minden $\sigma\geqq 0$ értékre teljesül /4.22/ bármely hullámhosszra. A továbbiakban ezért feltesszük, hogy $v_1\neq v_2$.

$\sigma=0$-t irva /4.22/-be a stabilitás feltétele semmilyen hullámhosszra sem teljesül, tehát az alap-egyenletrendszer minden perturbációra nézve instabil.

A σ-egyenletrendszerre /$\sigma>0$/ a /4.22/ feltételből az derül ki, hogy a rövid hullámhosszakra /nagy k/ stabil lesz, a nagyon nagy hullámhosszakra /kis k/ azonban instabil. Jelöljük k_c-vel a kritikus hullámszámot. Ennek értéke /4.22/-ben az egyenlőség teljesülésekor:

$$k_c=|v_1-v_2|\left[\frac{\rho_1\rho_2}{\sigma H(\alpha_2\rho_1+\alpha_1\rho_2)}\right]^{\frac{1}{2}} \qquad /4.23/$$

Ezek szerint a $\frac{2\pi}{k_c}$-nél hosszabb hullámhosszakra a σ-egyenletrendszer instabil, az ennél nem hosszabbakra stabil. /A hosszu hullámhosszakra kapott instabilitás a fizikailag értelmezett Helmholtz-féle instabilitás./

A /4.21/ egyenletből látható, hogy $k\ll k_c$ esetén az alap és a σ-egyenletrendszer lényegében azonosan viselkedik, mivel ekkor a szögletes zárójelben levő első tag elhanyagolható a 2.-hoz képest ugyanugy, mintha $\sigma=0$ lenne. Ezért a $\frac{2\pi}{k_c}$-hez képest hosszu hullámhosszakhoz tartozó fizikai instabilitások mindkét

rendszerrel helyesen számithatók, vagyis a komplex karakterisztikáju rendszer is alkalmas ezek leirására.
A hullámhossz csökkentésével azonban a /4.21/-ben megadott ω egyre inkább különböző lesz $\sigma > 0$ és $\sigma = 0$ esetén, $\frac{2\pi}{k_c}$-nél kisebb hullámhosszakra pedig teljesen más eredményt ad a két egyenletrendszer. Amig a σ-egyenletrendszer stabil viselkedést ir le, addig az alap-egyenletrendszer instabil megoldást számol. A valósághoz természetesen a σ-egyenletrendszer áll közelebb, mert a felületi feszültség egy ténylegesen fellépő fizikai hatás, melyet egy pontosra törekvő fizikai modellezésnél figyelembe kell venni. Ez azt mutatja, hogy az alap-egyenletrendszer pontatlan, nem fizikai viselkedést tükröz rövid hullámhosszakra. Ez a tény és a komplex karakterisztikák megjelenése annak következménye, hogy elhanyagoltuk a felületi feszültséget /vagy más olyan jelenséget, mely a rövid hullámhosszakra gyakorol jelentősebb hatást/.

A /4.21/-beli ω-nak megfelelő növekedési tényező:

$$G(k,t) \equiv \left| \exp\left[-i\omega(k)t\right] \right| = \exp\left[\mathrm{Im}(\omega)t\right] \qquad /4.24/$$

Ha ω komplex, akkor /4.21/-ben a pozitiv előjel felel meg a növekedésnek. σ =0-t irva /4.21/-be az alap-egyenletrendszerre kapjuk, hogy

$$\mathrm{Im}(\omega) = \frac{k\,|v_1 - v_2|}{\alpha_2\rho_1 + \alpha_1\rho_2} \left(\alpha_1\rho_1\alpha_2\rho_2\right)^{\frac{1}{2}} \qquad /4.25/$$

A σ-egyenletrendszerre pedig $(\sigma > 0)$

$$\mathrm{Im}(\omega) = \begin{cases} 0, & \text{ha } k \geq k_c \\ k\left[\frac{\alpha_1\alpha_2\sigma H}{\alpha_2\rho_1 + \alpha_1\rho_2}\left(k_c^2 - k^2\right)\right]^{\frac{1}{2}}, & \text{ha } k < k_c \end{cases} \qquad /4.26/$$

A feladat akkor korrekt kitüzésü, ha adott t időpontban G(k,t) k-ra nézve korlátos a $0 \leq k < \infty$ intervallumban, azaz, ha $\mathrm{Im}(\omega)$ korlátos k-ra vonatkozólag.
Ez igaz /4.26/-ra, de nem igaz /4.25/-re. Az alap-egyenletrendszer tehát nem korrekt kitüzésü, a σ-egyenletrendszer viszont az.

Ezekután tegyük fel, hogy a véges differenciák segitségével akarunk numerikus megoldást keresni hosszu hullámhosszakra. Ha a hullámhossz $\frac{2\pi}{k_c}$-hez képest hosszu, akkor elvileg közömbös, hogy melyik egyenletrendszert használjuk a fenti kettő közül, mert ebben a tartományban azonosan viselkednek. Ez azonban csak akkor igaz, ha más hullámhosszakra nem viszünk a rendszerbe olyan perturbációt, melynek növekedési sebessége nagyobb, mint a viszgált hullámhosszé. A véges differenciák

felirásával azonban a Δx nagyságrendjének megfelelő hullámhosszu perturbációt viszünk a rendszerbe, ezért ilyen hullámhosszakra nem engedhető meg az instabilitás.
Az alap-egyenletrendszerben minden hullámhossz instabil, ezért a hosszu hullámhosszu instabilitások sem számithatók vele helyesen, hacsak be nem vezetünk valamilyen mesterséges stabilizálást a Δx nagyságrendü hullámhosszakra.

A σ-egyenletrendszerben a Δx nagyságrendü hullámhosszak Δx, σ és a /4.22/-ben szereplő többi változó értékétől függően lehetnek stabilak vagy instabilak. A gyakorlatban előforduló tipikus értékek mellett ez a hullámhossz még instabil, a stabil hullámhosszak Δx-nél lényegesen kisebb hullámhosszaknál kezdődnek. Ezt a problémát ugy lehetne megoldani, ha le lehetne csökkenteni Δx-et ugy, hogy közel $\frac{2\pi}{k_c}$ legyen. Ez viszont lényegesen megnövelné a számitásigényt. Ezért általában a σ-egyenletrendszer használatakor is szükség van mesterséges stabilizáló hatás bevezetésére a Δx nagyságrendü hullámhosszakra. Mivel a rácson felvehető legkisebb hullámhossz $2\Delta x$, a

$k \cong \frac{\pi}{\Delta x}$ választással /4.22/ alapján megadott

$$\sigma^* = C \frac{(\Delta x)^2}{\pi^2 H} \left(\frac{\rho_1 \rho_2}{\alpha_2 \rho_1 + \alpha_1 \rho_2} \right) (v_1 - v_2)^2 \qquad /4.27/$$

mesterséges felületi feszültség megfelel erre a célra. /C egy dimenzió nélküli konstans, értéke 1 körül van./ Ez a σ^* általában sokkal nagyobb, mint a felületi feszültség tényleges értéke.

Természetesen nem ez az egyetlen módja a stabilizálásnak. Más fizikai hatások /viszkozitás, fázisátalakulás, impulzus-átadás, virtuális-tömeg hatás/ figyelembe vétele is hasonló eredményhez vezethet. Ezenkivül bizonyos differenciálási módszerek /különösen a 2.3 pontban ismertetett donor differenciálás/ önmagukban is mesterséges stabilizáló hatással rendelkeznek anélkül, hogy külön stabilizáló tagot irtunk volna explicit módon az egyenletekbe.

A most ismertetett vizsgálatnak elsősorban elméleti jelentősége van a karakterisztikák, a stabilitás és a rövid hullámhosszu jelenségek kapcsolatának elemzésében a kétfázisu áramlás terén. Fizikailag indokoltabb a viszkozitás figyelembe vétele, mint a felületi feszültségé, mert az nemcsak stabilizáló, hanem csillapitó hatással is rendelkezik. A viszkozitást tartalmazó egyenletrendszer a fizikai valóságnak jobb közelitését adja, gyakorlati számitásokra alkalmasabb. Ennek alkalmazásakor figyelembe kell venni, hogy a numerikus stabilitáshoz gyakran lényegesen nagyobb viszkozitási együtthatóra van szükség, mint amekkora a valóságban fellép. A viszkozitásra [28]-ban javasolt érték $\nu \approx v\Delta x$, ahol v a folyadék sebessége, Δx a rácstávolság.

Ez a vizsgálat azt támasztotta alá, hogy a kétfázisu áramlás két-közeg modelljét leiró egyenletek numerikus instabilitása megszüntethető, ha alkalmas fizikai jelenségeket beépitünk a modellbe. Ezekkel a karakterisztikák valósakká válnak, s rövid hullámhosszak stabilizálódnak.

A következő fejezetben azt vizsgálom, hogy a nem korrekt kitüzésü feladatra hogyan lehet jó numerikus megoldást kapni.

2.4.3. Stabil differencia séma megadásának feltételei a két-közeg modellekre

Annak ellenére, hogy a nem korrekt kitüzésü feladatra felirt véges differencia sémák a szokásos értelemben nem lehetnek stabilak széles körben használják őket a két-közeg modellek megoldására.

Ebben a fejezetben azt vizsgálom [26] alapján, hogy milyen körülmények között várható, hogy egy adott véges differencia sémával elfogadható numerikus eredményeket kapjunk annak ellenére, hogy a hozzá tartozó differenciálegyenlet-rendszer nem korrekt kitüzésü kezdeti érték feladatot alkot.

Az egyszerüség kedvéért a továbbiakban az egydimenziós két-közeg modell egyenletei közül csak a tömeg- és impulzus-megmaradási egyenleteket tekintjük /hasonlóan az előző fejezethez/. Ezek tartalmazzák a vizsgálat szempontjából lényeges jellemzőket.
Az impulzus egyenletekben vizsgáljuk az impulzusátadás szerepét a stabilitás növelésében. A modellre a 2.3 pontban ismertetett numerikus sémát irjuk fel, s vizsgáljuk a stabilitását az impulzusátadást tartalmazó és nem tartalmazó egyenletekre.

A következő egyenletrendszer az egyenes csőben történő izotermikus kétfázisu áramlást irja le, s a /4.1/-/4.3/ alap-egyenletrendszertől csak annyiban különbözik, hogy az impulzus egyenletek jobboldalai tartalmazzák a fázisok közti impulzusátadás kifejezését. /Ezek egyenlő nagyságuak, de ellenkező előjelüek./

Tömegmegmaradás a gőzfázisra:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha \rho_v) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha \rho_v v_v) = 0 \qquad /4.28/$$

Tömegmegmaradás a folyadékfázisra:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[(1-\alpha)\rho_l\right] + \frac{\partial}{\partial x}\left[(1-\alpha)\rho_l v_l\right] = 0 \qquad /4.29/$$

Impulzus-megmaradás a gőzfázisra:

$$\alpha\rho_v\left(\frac{\partial v_v}{\partial t} + v_v\frac{\partial v_v}{\partial x}\right) + \alpha\frac{\partial P}{\partial x} = K(v_\ell - v_v) \qquad /4.30/$$

Impulzus-megmaradás a folyadékfázisra:

$$(1-\alpha)\rho_\ell\left(\frac{\partial v_\ell}{\partial t} + v_\ell\frac{\partial v_\ell}{\partial x}\right) + (1-\alpha)\frac{\partial P}{\partial x} = K(v_v - v_\ell) \qquad /4.31/$$

Az egyenletek felirása azzal a feltételezéssel történt, hogy az egyes fázisok különálló folyadékként viselkednek, közös nyomásmező hat rájuk és kitöltik a rendelkezésre álló térfogatot. Az egyenletek baloldalainak első tagjai a tömeg, illetve az impulzus időbeli változását adják meg egy adott pontban. A 2. tagok a tömeg, illetve impulzus konvekcióját jelentik ugyanabból a pontból. Az impulzus egyenletekben a 3. tagok azokat a nyomásból származó erőket foglalják magukba, melyek a fázisokat gyorsitják.

A karakterisztikus gyökök meghatározásához fel kell irni az egyenletrendszer karakterisztikus determinánsát. Az egyszerüség kedvéért feltesszük, hogy a folyadék összenyomhatatlan a gőzfázishoz képest. Ekkor a μ karakterisztikus gyököknek a következő egyenletet kell kielégiteniük:

$$\alpha\rho_\ell(\mu - v_\ell)^2 + (1-\alpha)\rho_v(\mu - v_v)^2 - \alpha\rho_\ell c_v^{-2}(\mu - v_v)^2(\mu - v_\ell)^2 = 0 \qquad /4.32/$$

ahol $c_v^{-2} = \frac{\partial\rho_v}{\partial P}$. Beszorozva c_v^2 -tel és átrendezve azt kapjuk, hogy két valós gyök van: az egyik kevéssel kisebb, mint $v_v - c_v$, a másik kicsit nagyobb, mint $v_v + c_v$. A polinom vizsgálata azt mutatja, hogy ha lenne még valós gyök, akkor annak ezek közé kellene esnie. Ez azonban $v_v \neq v_\ell$ esetén nem lehetséges, tehát a másik két gyök komplex, méghozzá egymás konjugáltjai. Ha $v_v, v_\ell \ll c_v$, akkor a komplex gyökök közelitőleg:

$$\mu \cong \frac{v_\ell + \varepsilon^2 v_v}{1+\varepsilon^2} \pm i\,\frac{\varepsilon}{1+\varepsilon^2}(v_v - v_\ell), \quad \text{ahol} \quad \varepsilon^2 \equiv \frac{(1-\alpha)\rho_v}{\alpha\rho_\ell}$$

Vizsgáljuk meg egy külön egyenleten a komplex karakterisztikus sebességeknek a véges differenciaegyenletre gyakorolt hatását. Legyen ez az egyenlet:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v(1+\varepsilon i)\frac{\partial u}{\partial x} + Ku = 0 \qquad /4.33/$$

Feltesszük, hogy v, ε és K nemnegativ konstansok.
Közelitsük /4.33/-at az alábbi differenciaegyenlettel:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v(1+\varepsilon i)\frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} + K u_j^{n+1} = 0 \qquad /4.34/$$

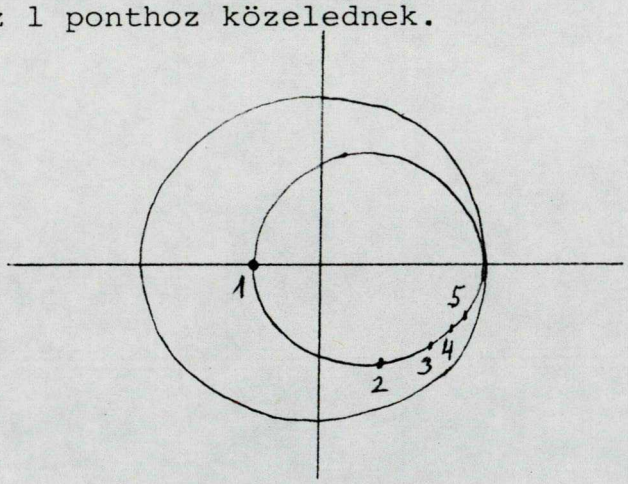
Ez a differenciaegyenlet donor differenciálást tartalmaz az explicit konvektiv tagra, a Ku csillapitó tag kifejezése implicit.
Az 1.2.1 pontban ismertetett Neumann-féle lineáris stabilitás vizsgálathoz tekintsük u-nak egy Fourier komponensét $\lambda^n \exp(ikj\Delta x)$-et, ahol $k=\frac{\pi}{m\Delta x}$, N a rácsintervallumok száma és m= 1,2,...,N. Ennek nagysága egy időpontról a következőre lépve λ-szorosára nő, ahol

$$\lambda = (1+K\Delta t)^{-1}\left[1 - \frac{v\Delta t}{\Delta x}(1+\varepsilon i)(1-\exp(-ik\Delta x))\right]$$

Ha $|\lambda| > 1$, akkor a megfelelő Fourier komponens u-ban korlátlanul növekszik, mig ha $|\lambda| \leqq 1$ minden k-ra, akkor a megoldás korlátos marad minden időlépésre.
Ezért a stabilitás feltétele, hogy $|\lambda| \leqq 1$ legyen minden k-ra.

Ha K= ε =0, akkor $\lambda = 1 - \frac{v\Delta t}{\Delta x}\left[1 - \exp(-ik\Delta x)\right]$

vagyis a λ értékek minden m-re a komplex sikbeli $1 - v\frac{\Delta t}{\Delta x}$ középpontu, v $\frac{\Delta t}{\Delta x}$ sugaru körön helyezkednek el. A kör érinti az 1 pontba huzott függőlegest, s ha v $\frac{\Delta t}{\Delta x} < 1$, akkor az egységkörön belül fekszik.
A 10. ábra szemlélteti a λ pontok mértani helyét. Növekvő m-re a pontok az 1 ponthoz közelednek.



10. ábra

Ebben az esetben /4.33/ megoldásai haladó hullámok, a közelitő megoldásnak nem lehet korlátlanul növekvő komponense. A stabilitás feltétele $|\lambda| \leqq 1$, azaz $v\frac{\Delta t}{\Delta x} \leqq 1$

Ha K=0, de $\varepsilon \neq 0$ /azaz a sebesség komplex és nincs csillapitás/, akkor az előző kört $(1+\varepsilon^2)^{\frac{1}{2}}$ -szeresére nagyitjuk és arctan ε szöggel elforgatjuk az 1 pont körül. Ha ε negativ lenne a kapott eredmény még mindig az egységkörön belül lehetne, de ha ε akármilyen kis pozitiv szám, akkor biztosan lesz olyan m, mely-

nek megfelelő λ már az egységkörön kivülre esik /még akkor is, ha $v\frac{\Delta t}{\Delta x}<1$/. Ilyen m-re a megfelelő Fourier komponens korlátlanul fog nőni. A numerikus megoldás viszont nem tartalmazza szükségképpen ezeket a komponenseket, ha csak néhány osztáspontot veszünk fel, azaz ha elég durva a rács.

Végül, ha $K>0$, akkor a kör tovább módosul az origó körüli $(1+K\Delta t)^{-1}$-szeres kicsinyitéssel. Ha K elég nagy, akkor a teljes kör az egységkörön belül lehet /még nagy m-re is/.

Ez az egyszerü példa szemlélteti a két-közeg modellekben felléphő jelenségeket. Azoknak a konvektiv tagoknak a donor differenciálása, melyekre $v\frac{\Delta t}{\Delta x}<1$ stabilizáló hatással van a legnagyobb frekvenciáju komponensekre akkor is, ha a hozzájuk tartozó sebesség komplex. A komplex sebességnek az alacsony frekvenciáju /nagy hullámhosszu/ komponensekre gyakorolt destabilizáló hatását adott rácsméret mellett elegendően nagy csillapitás beiktatásával lehet ellensulyozni.

Ha a rácsot finomitjuk, azaz $m\to\infty$, $\Delta x\to 0$, $\Delta t\to 0$ és $1+K\Delta t\to 1$, akkor a véges differencia módszer szükségképpen ad korlátlanul növekvő komponenseket is. Ha $v\frac{\Delta t}{\Delta x}<1$, akkor az ilyen komponensek először azoknál a hullámhosszaknál jelennel meg, melyek Δx-nek nagyszámu többszörösei.

A két-közeg egyenletekben a csillapitás szerepét a fázisok közötti impulzusátadás játssza. A stabilitást nem a szokásos matematikai értelemben vesszük, amely bizonyos "jó viselkedést" kiván meg $\Delta x, \Delta t\to 0$ estén. Ilyen értelemben a komplex karakterisztikáju két-közeg egyenletek nem lehetnek stabilak. Fizikailag jól viselkedő megoldást kapunk adott rácsra, ha a lokális stabilitás vizsgálat eredménye $|\lambda|\leq 1$ minden komponensre.

A következőkben a /4.28/-/4.31/ egyenletekre felirt véges differencia közelitést vizsgáljuk meg. A séma alapja a 2.3 pontban ismertetett szemi-implicit módszer, melyben a hang terjedésével kapcsolatos hatások kezelése implicit, a konvektiv jelenségeké pedig explicit. Igy a Δt időlépés korlátja:

$$\Delta t \leq \min\left(\left|\frac{\Delta x}{v_v}\right|, \left|\frac{\Delta x}{v_e}\right|\right)$$

A változók definiálása itt is a 6. ábra szerint történik: a sebességeké a fél osztáspontokban, a többi változóé az egészekben. A hely szerinti differenciákban a donor összefüggéseket alkalmazzuk.

A differencia séma alakja $v_v, v_\ell > 0$ esetén:

$$\frac{\alpha_j^{n+1}(\rho_v)_j^{n+1} - \alpha_j^n(\rho_v)_j^n}{\Delta t} + \frac{\alpha_j^n(\rho_v)_j^n(w_v)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} - \alpha_{j-1}^n(\rho_v)_{j-1}^n(w_v)_{j-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta x} = 0 \qquad /4.35/$$

$$\frac{(1-\alpha_j^{n+1})(\rho_\ell)_j^{n+1} - (1-\alpha_j^n)(\rho_\ell)_j^n}{\Delta t} + \frac{(1-\alpha_j^n)(\rho_\ell)_j^n(w_\ell)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} - (1-\alpha_{j-1}^n)(\rho_\ell)_{j-1}^n(w_\ell)_{j-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta x} = 0 \qquad /4.36/$$

$$\alpha_j^n(\rho_v)_j^n\left[\frac{(w_v)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} - (w_v)_{j+\frac{1}{2}}^n}{\Delta t} + (w_v)_{j+\frac{1}{2}}^n \frac{(w_v)_{j+\frac{1}{2}}^n - (w_v)_{j-\frac{1}{2}}^n}{\Delta x}\right] +$$

$$+\alpha_j^n \frac{p_{j+1}^{n+1} - p_j^{n+1}}{\Delta x} = K_{j+\frac{1}{2}}\left[(w_\ell)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} - (w_v)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}\right] \qquad /4.37/$$

$$(1-\alpha_j^n)(\rho_\ell)_j^n\left[\frac{(w_\ell)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} - (w_\ell)_{j+\frac{1}{2}}^n}{\Delta t} + (w_\ell)_{j+\frac{1}{2}}^n \frac{(w_\ell)_{j+\frac{1}{2}}^n - (w_\ell)_{j-\frac{1}{2}}^n}{\Delta x}\right] +$$

$$+(1-\alpha_j^n)\frac{p_{j+1}^{n+1} - p_j^{n+1}}{\Delta x} = K_{j+\frac{1}{2}}\left[(w_v)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1} - (w_\ell)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}\right] \qquad /4.38/$$

A tömeg egyenleteket a rácspontok felezőpontjai körül, az impulzus egyenleteket pedig a rácspontok körül differenciáltuk. A tömegmegmaradási egyenletekben a sebességet tartalmazó tagok, az impulzus egyenletekben a nyomásgradienst és az impulzusátadást tartalmazó tagok tartalmaznak olyan változót, melynek értékét az uj időpontban vesszük.
A következőkben a felirt numerikus séma stabilitását vizsgáljuk.

Tekintsük először a K=0 esetet.
A Neumann-féle lokális lineáris stabilitás vizsgálathoz kifejezzük a /4.35/-/4.38/ egyenletekben előforduló differenciákat a ρ_v, α, v_v, v_ℓ négy alapváltozó differenciái segitségével. Ezután az együtthatókat konstansnak tekintve vizsgáljuk egy Fourier komponens növekedését. Ezt a következő átmenet mátrix irja le:

$$\begin{bmatrix} \alpha(\lambda - 1 + \tilde{w}_v) & \rho_v(\lambda - 1 + \tilde{w}_v) & \lambda\frac{\Delta t}{\Delta x}\alpha\rho_v ik' & 0 \\ 0 & -\rho_\ell(\lambda - 1 + \tilde{w}_\ell) & 0 & \lambda\frac{\Delta t}{\Delta x}(1-\alpha)\rho_\ell ik' \\ \lambda\frac{\Delta t}{\Delta x}c_v^2 ik' & 0 & \rho_v(\lambda - 1 + \tilde{w}_v) & 0 \\ \lambda\frac{\Delta t}{\Delta x}c_v^2 ik' & 0 & 0 & \rho_\ell(\lambda - 1 + \tilde{w}_\ell) \end{bmatrix} \qquad /4.39/$$

Az oszlopok balról jobbra a ρ_v, α, v_v és v_ℓ változóknak felelnek meg,

$k = \frac{\pi}{m\Delta x}$, $k' = 2\sin\frac{1}{2} k\Delta x$, $\tilde{v}_v = v_v \frac{\Delta t}{\Delta x}\left[1-\exp(-ik\Delta x)\right]$, $\tilde{v}_\ell = \frac{v_\ell}{v_v}\tilde{v}_v$

/4.39/ λ sajátértékei kielégitik a következő egyenletet:

$$\lambda^2 C_m\left[(\lambda-1+\tilde{v}_\ell)^2 + (1-\alpha)\frac{\rho_v}{\alpha\rho_\ell}(\lambda-1+\tilde{v}_v)^2\right] + (\lambda-1+\tilde{v}_v)^2(\lambda-1+\tilde{v}_\ell)^2 = 0, \quad /4.40/$$

ahol $C_m = c_v \frac{\Delta t}{\Delta x} 2\sin\frac{\pi}{2m}$

Vizsgáljuk először a rendszer viselkedését nagy frekvenciákra /kis m-re/. A fenti differencia séma használata akkor előnyös elsősorban, ha Δt megközeliti felső korlátját, azaz

$$\Delta t \cong \min\left(\left|\frac{\Delta x}{v_v}\right|, \left|\frac{\Delta x}{v_\ell}\right|\right)$$

és lényegesen nagyobb, mint $\Delta x/c_v$, vagyis $v_v, v_\ell \ll c$. Ekkor $c_v\frac{\Delta t}{\Delta x} \gg 1$ és kis m-re $C_m \gg 1$. Ekkor /4.40/ két gyöke közel $C_m^{-1} \ll 1$ nagyságu, másik két gyöke pedig közelitőleg kielégiti az alábbi összefüggést:

$$\lambda - 1 + \tilde{v}_\ell \cong \pm i\varepsilon(\lambda - 1 + \tilde{v}_v), \quad \text{ahol} \quad \varepsilon^2 \equiv \frac{(1-\alpha)\rho_v}{\alpha\rho_\ell}$$

Ebből adódik, hogy $\lambda \cong 1 - \tilde{v}_\ell\left(1 \pm i\varepsilon\frac{v_v}{v_\ell}\right)(1 \pm i\varepsilon)^{-1}$

Ezek a pontok a $v_\ell \frac{\Delta t}{\Delta x}$ sugaru és az 1 pontot érintő körön helyezkednek el a komplex sikon, mely az 1 pont körül el van forgatva $\pm \arctan\left(\varepsilon\frac{v_v}{v_\ell}\right)$ szöggel, majd visszafelé $\mp \arctan\varepsilon$ szöggel. A pont körüli nagyitás $1 + \left|\frac{v_v}{v_\ell}\right|$ -szeres. Kis m-re /azaz az 1-től legtávolabb eső pontokra/ az ezen a körön levő pontok nem esnek az egységkörön kivülre, ha $\left|v_\ell \frac{\Delta t}{\Delta x}\right| < 1$ és $\left|v_v \frac{\Delta t}{\Delta x}\right| < 1$. Tehát ha az időlépés nem nagyobb, mint az ebből eredő $\Delta t < \min\left(\left|\frac{\Delta x}{v_\ell}\right|, \left|\frac{\Delta x}{v_v}\right|\right)$ korlát, akkor a legnagyobb frekvenciáju komponensek /azok, melyek hullámhossza Δx-nek kisszámu többszöröse/ nem nőnek exponenciálisan. /Még az impulzusátadás nélküli nem korrekt kitüzésü két-közeg feladat esetén sem./

Az alacsony frekvenciáju komponensek vizsgálatához tekintsük /4.40/-et nagy m-ekre. Mivel $m \to \infty$ esetén $C_m \to 0$, ezért a gyökök $\lambda = 1 - \tilde{v}_v$-hez tartanak /kétszer/ és $\lambda = 1 - \tilde{v}_\ell$-hez /kétszer/. Pontosabb vizsgálathoz legyen $\lambda = 1 - \tilde{v}_\ell + \delta$ és közelitsük δ-t nagy m-re ugy, hogy /4.40/-et átirjuk δ kifejezéseként, s csak azokat a tagokat hagyjuk meg, melyek δ-ban legfeljebb másodfokuak. Az igy kapott δ-ban másodfoku polinom gyökei a következő összefüggést elégitik ki:

$$\frac{\delta}{(1-\tilde{v}_\ell)(\tilde{v}_v - \tilde{v}_\ell)} \cong \frac{\varepsilon^2 \pm i\varepsilon\left[1-(v_v - v_\ell)^2/c_v^2\right]^{\frac{1}{2}}}{1+\varepsilon^2-(v_v-v_\ell)^2/c_v^2}$$

Mivel /4.35/-/4.38/ használatakor feltehetjük, hogy $|\tilde{v}_v - \tilde{v}_e| \ll c_v$ igy

$$\lambda \approx (1-\tilde{v}_e)\left[1 - i(\tilde{v}_v - \tilde{v}_e)\frac{\pi \Delta t}{m \Delta x}\,\varepsilon\,\frac{\varepsilon \pm i}{1+\varepsilon^2}\right]$$

Mivel $|1 - \tilde{v}_e| = 1 - \mathcal{O}(m^{-2})$ és azt szorozzuk egy olyan mennyiséggel, melynek nagysága $1+\mathcal{O}(m^{-1})$, ahol $\mathcal{O}(m^{-1})$ pozitiv lesz a fenti $\pm$ egyike esetén, ezért egy λ gyök szükségképpen az egységkörön kivülre esik nagy m-re.
Hasonló eredményre jutunk a $\lambda = 1 - \tilde{v}_v + \delta$ helyettesitéssel. Ezért a /4.35/-/4.38/ séma $K = 0$ esetén nagy m-ekhez tartozó hullámhosszakra instabil lesz.

A rácsintervallumok N számát kétféleképpen növelhetjük. Az egyik, hogy növeljük a fizikai hosszat, miközben Δx-et rögzitjük. $K = 0$ esetén az egyenletek invariánsak a tér- és időbeli azonos arányu nagyitással szemben, ezért N növelésének másik módja lehet, hogy a fizikai hosszuság megtartása mellett Δt-t és Δx-et arányosan csökkentjük, azaz finomitjuk a rácsot.

$K = 0$ -ra tehát azt kaptuk, hogy a /4.35/-/4.38/ sémával végzett numerikus számitások kevés térbeli osztáspont esetén jól viselkedő megoldást adnak. A rács finomitásával azonban instabilitások lépnek fel, várhatólag Δx-nek nagyszámu többszöröseinek megfelelő hullámhosszakra.

Vizsgáljuk meg ezután a $K > 0$ esetet.
A /4.37/ és /4.38/ egyenletekben a sebességek implicit módon szerepelnek, hogy ne legyen szükség Δt további korlátozására az impulzusok közti szoros kapcsolat miatt. A lineáris stabilitás vizsgálathoz felirt átmenet mátrix /4.39/-től a jobb alsó 2x2-es sarokban különbözik, melynek alakja most:

$$\begin{matrix} \rho_v\left[\lambda(1+\kappa) - 1 + \tilde{v}_v\right] & -\lambda\rho_v\kappa \\ -\lambda\rho_v\kappa & \rho_e(\lambda - 1 + \tilde{v}_e) + \lambda\rho_v\kappa \end{matrix}$$

ahol $\kappa = K\frac{\Delta t}{\rho_v}$ /A sebességeket akkor ajánlatos implicit módon felirni, ha $\kappa > 1$./ Az igy kapott karakterisztikus polinomot ismét meg kell vizsgálni, hogy teljesül-e rá a $|\lambda| \leqq 1$ feltétel.

Tekintsük most is először a magas frekvenciákat, azaz legyen m kicsi. Feltéve, hogy $\kappa \gg 1$ és mint az előzőekben $C_m \gg 1$, a polinom két gyöke közelitőleg C_m^{-1} nagyságu, egy közel κ^{-1} nagyságu, a negyedik pedig közelitőleg

$$1 - \frac{\tilde{v}_e + \varepsilon^2 \tilde{v}_v}{1+\varepsilon^2}$$

Ez is az egységkörön belülre esik, ha

$$\Delta t \leqq \min\left(\left|\frac{\Delta x}{v_v}\right|, \left|\frac{\Delta x}{v_e}\right|\right)$$

Kis m-re és nagyon kis $\varkappa$-ra is mind a 4 gyök belül van az egységkörön, mert $\varkappa = 0$ -ra ezt az előbbiekben beláttuk / a $K = 0$ eset/ és a gyökök folytonosan függnek $\varkappa$-tól. Ezzel nagy és nagyom kis $\varkappa$-ra bizonyitottuk, de jogosan feltételezhetjük a közbülső $\varkappa$-kra is, hogy a kis m-nek megfelelő hullámhosszak nem növekszenek, mivel az implicit módon kezelt csillapitást tartalmazó egyenletek megoldásai nyilván még kevésbé növekednek, mint a csillapitás nélküli egyenleteké.

A kis frekvenciáju viselkedést most is az $m \to \infty$ eset vizsgálatából kapjuk. Az $N \to \infty$ különböző értelmezése most különböző megoldáshoz vezet a $K(v_v - v_\ell)$ tag jelenléte miatt. Ha N növelése a rács finomitását jelenti, akkor $\varkappa = K\frac{\Delta t}{\rho_v}$-nek nullához kell tartania. A $K(v_v - v_\ell)$ tag implicit módon tartalmazza a fizikai hosszat.
Vizsgáljuk először az $m \to \infty$ esetet ugy, hogy közben megtartjuk $\varkappa$ értékét. Ez értelmezhető ugy, hogy finomitjuk a rácsot és feltesszük, hogy egy bizonyos pontnál $(\Delta x)^{-1}$ és $(\Delta t)^{-1}$ minden magasabb rendü kifejezése elhanyagolható $\varkappa$ kivételével. Vagy ugy, hogy Δx-et rögzitjuk és a fizikai hosszat növeljük. Fix $\varkappa$-ra és $m \to \infty$ -re határértékként a következő egyenletet kapjuk:

$$(\lambda - 1 + \tilde{v}_v)(\lambda - 1 + \tilde{v}_\ell)\left[(\varkappa\lambda + \lambda - 1)(\rho_\ell(\lambda - 1) + \lambda\rho_v\varkappa) + \lambda^2\rho_v\varkappa^2\right] = 0$$

A szögletes zárójelben levő másodfoku polinom gyökeiről megmutatható, hogy valósak, pozitivak és egynél kisebbek, ezért elég nagy m-re a megfelelő gyököknek az egységkörön belülre kell esniük. A másik két gyök vizsgálatához az előbbiekhez hasonlóan legyen $\lambda = 1 - \tilde{v}_v + \delta$, ezt helyettesitsük az eredeti polinom egyenletébe, s csak a δ-ban elsőfoku tagokat hagyjuk meg. Az m^{-1} magasabb rendü kifejezéseinak elhanyagolásával és a

$$\rho_\ell|\tilde{v}_\ell - \tilde{v}_v| \ll 2\rho_v\varkappa \qquad /4.41/$$

feltételezéssel a gyök értéke közelitőleg $\lambda = (1 - \tilde{v}_v)\frac{\varkappa + c_m^2}{\varkappa + 2c_m^2}$

amely az egységkörön belül van. Ugyanezt kapjuk $\lambda = 1 - \tilde{v}_\ell + \delta$ helyettesitéssel, tehát a nagy hullámhosszu komponensek is jól viselkednek.

A /4.41/ feltétel teljesülése fontos ahhoz, hogy nagy hullámhosszakra is jó viselkedést kapjunk. Jelentése az, hogy az impulzusátadás mértékének meg kell haladnia egy bizonyos értéket ahhoz, hogy elkerüljük a koráltanul növekvő hosszu hullámhosszu komponenseket. Ez a minimális érték a rácsméret és az impulzusátadás fizikailag értelmezhető kapcsolatából adódik. Nagy m-re /4.41/ a következő összefüggéssel ekvivalens:

$$\frac{K(m\Delta x)}{\rho_v} \gg |v_v - v_\ell|\frac{\rho_\ell}{\rho_v} \qquad /4.42/$$

A K-ra [26]-ban javasolt alak: $K \cong C_D \varrho_v \frac{|v_v - v_e|}{r}$, ahol r a folyadékcsepp vagy a buborék sugara, C_D pedig a közegellenállási tényező. Ennek felhasználásával a /4.41/ feltétel a következő formába irható:

$$m\Delta x \gg \frac{\varrho_e}{\varrho_v C_D} r,$$

azaz az $m\Delta x$ hullámhosszhoz tartozó komponens nem fog korlátlanul nőni, ha ez a hullámhossz nagyobb, mint az egyes buborékok vagy folyadékcseppek sugarának bizonyos számu többszöröse.

Ezzel beláttuk, hogy a /4.35/-/4.38/ differenciaegyenleteken alapuló számitásokban a nagy frekvenciáju komponensek nem növekvők és azok a nagy m-hez tartozó kis frekvenciáju komponensek, melyek kielégitik /4.42/-t egy adott rács esetén szintén jól viselkednek.
Ez azonban még nem biztositja, hogy egyáltalán ne legyen növekvő komponens. Ugy tünhet, hogy ehhez /4.42/ teljesülését kellene megkövetelni egyészen m=1-től. Ekkor áthidalnánk a kis és a nagy frekvenciák közti rést. De /4.42/ kifejezetten csak nagy m-re érvényes. Viszont beláttuk, hogy ha $K\Delta x$ elég nagy, akkor az impulzusátadás stabilizálja azokat a nagy hullámhosszakat, melyekhez egyébként növő komponensek tartoznának.

A gyakorlatban a /4.35/-/4.38/ sémákhoz hasonló sémákkal végzett számitások azt mutatják, hogy minden hullámhosszra jól viselkedő /azaz nem korlátlanul növekvő/ megoldást kapunk. Ha azonban K értékét csökkentjük, akkor a hosszu hullámhosszu tartományban növekvő osszcilláció léphet fel. [26]

Összegezve tehát megmutattuk, hogy a kétfázisu áramlás két-közeg modelljével végzett véges differencia számitások jól viselkedő megoldást adnak, ha a fázisok közt fellépő impulzusátadás elég nagy és a térbeli rács nem tul finom. Ez annak ellenére igaz, hogy a két-közeg modell differenciálegyenleteinek vannak komplex karakterisztikái, tehát a kezdeti érték feladat nem korrekt kitüzésü és az elegendően finom rácson végzett számitások szükségképpen insatbilak. Származtattunk egy fizikailag értelmezhető kritériumot a rács méretére vonatkozóan: a buborék vagy folyadékcsepp áramlásán alapuló impulzusátadási modellben a kritikus rácsméret a buborék vagy folyadékcsepp sugarának többszöröse. Ez azt jelenti, hogy a közelitő számitások mindaddig jók lehetnek, amig nem próbáljuk olyan jelenségekre alkalmazni, melyek finomabbak, mint az impulzusátadási törvényben implicit módon tartalmazott méret. Ez fizikailag elfogadható, mivel a két-közeg modell nagy mennyiségü folyadék és buborék együttes áramlását vizsgálja az egyes buborékok vagy folyadékcseppek által okozott fluktuációk elhanyagolásával.
Igy a kétfázisu áramlás durva modellezése esetén annak ellenére is jó a közelitő számitások eredménye, hogy a matematikai modell nem korrekt kitüzésü, ha nem próbálunk tul finom megoldást

keresni.
Másrészt viszont abban az esetben, ha nincs impulzusátadás /azaz szeparált áramlás modellezésekor/ a térfogattörtek változása a fázisok érintkezési felületének mozgását tükrözi. Ezért K=0 esetén minden olyan közelitő megoldás, amely megengedi a térfogattörtek változását szükségképpen finom megoldás. Ebben az esetben az előző pontban leirtak szerint a felületi feszültség figyelembe vételével a feladat korrekt kitüzésü lesz. Finom modellezés esetén tehát a megfelelő modell más, matematikailag korrekt kitüzésü kezdeti érték feladat.

A /4.28/-/4.31/ modell akkor alkalmas a számitásokhoz, ha durva modellezés is elegendő. Az, hogy a modell mennyire tükrözi a fizikai valóságot a kisérleti eredményekkel való összevetésből derül ki.

A következő fejezetben egy olyan két-közeg modellt ismertetek, amely ilyen durva modellezés céljéra készült [31].

2.4.4. Egy 3-dimenziós két-közeg modell numerikus megoldása

Az előző fejezet vizsgálataiból kiderült, hogy a komplex karakterisztikáju két-közeg modellekkel is kaphatunk jó eredményeket, ha nem akarunk tul finom jelenségeket modellezni és a közelitéshez megfelelő véges differencia sémát használunk.

Ebben a pontban egy olyan 3-dimenziós két-közeg modellt irok le, melynek numerikus megoldása ezeken az eredményeken alapul.

A modell a [31] számitógépes program része, amely a vizhütéses reaktorok zónájában lejátszódó kétfázisu áramlást és hőátadást irja le derékszögü koordináta rendszerben. A hirtelen nagy nyomáscsökkenéssel járó balesetek leirása nem tartozik a fő alkalmazásai közé. A rendszer nyomása az üzemi szinten van, ezért a benne történő kétfázisu áramlás szerkezete /buborékok, cseppek, egy részük összeolvadva/ finom az egész zóna szerkezetéhez képest. A modell célja az egész zóna leirása, amihez ezt elemi térfogatokra osztjuk. Ezek méreténél finomabb jelenségek nem oldhatók meg vele. A folyadékot leiró változók értékét nagyszámu buborék, folyadékcsepp átlagából számitjuk.

A modell 6 alapegyenletből áll: külön-külön parciális differenciálegyenletek az egyes fázisok tömegének, impulzusának és energiájának megmaradására. A problémát a tömeg, impulzus és energiaátadást leiró matematikai összefüggések megadása jelenti, mert ezek az átadási folyamatok jelenleg még nem egészen tisztázottak fizikailag sem. A [31]-beli modell ezekre olyan összefüggéseket tartalmaz, melyek a tapasztalat szerint jól leirják a folyamatokat olyan körülmények között, melyek vizsgálatára a modell készült. A kutatás fejlődésével ezek pontosabb összefüg-

gésekre cserélhetők ki.

A numerikus módszer kiválasztását több szempont határozza meg. Mivel az alap-egyenletrendszerhez tartozó kezdeti érték feladat nem korrekt kitüzésü a klasszikus értelemben, ezért a felhasznált rácsot nem lehet tetszőlegesen finomitani.

Gyorsan változó tranziens esetén kis időlépésekre van szükség, hogy az áramlás alakulását minél pontosabban leirhassuk. Másrészt viszont lassu folyamatoknál csökkenthetjük a számitási igényt, ha lehetőség van nagy időlépések vételére.

Olyan módszerre van tehát szükség, amely kis és nagy időlépésekkel egyaránt tud számolni. Erre a célra szolgál a 2.3. pontban ismertetett szemi-implicit véges differencia séma. Ennek alkalmazásával a stabilitás követelményéből adódó

$\left|(v \pm c)\frac{\Delta t}{\Delta x}\right| < 1$ időlépés korlát $\max\left(\left|v_1\frac{\Delta t}{\Delta x}\right|, \left|v_2\frac{\Delta t}{\Delta x}\right|\right) < 1$-re

növelhető, ha azokat a kifejezéseket implicit módon differenciáljuk, melyek magukba foglalják a hang terjedését. Ugyancsak implicit módon történik az átadási tagok számitása, mivel ezek szoros kapcsolatot teremtenek a fázisok állapotváltozói közt, s ezzel csökkentik a lehetséges időlépés nagyságát.

A differencia séma felirása után egy nemlineáris algebrai egyenletrendszert kapunk, melynek időlépésenkénti megoldása adja az áramlást leiró változók értékét az uj időpontokban. A megoldásra kidolgozott eljárás két iterációs ciklusból áll. Az első egy Newton-iteráció, melyhez minden lépésben meg kell határozni a Jacobi mátrixot és meg kell oldani a kapott linearizált egyenletrendszert. Ez a lineáris egyenletrendszer átalakitható ugy, hogy minden változót eliminálunk a nyomások kivételével. A kapott együtthatómátrix blokk-tridiagonális lesz, melyet a 2.3. pontban leirt blokk-Gauss-Seidel iterációval meg lehet oldani. Ez a második iteráció, melyet nyomás-iterációnak nevezünk.

Ennek a magoldási módszernek az az előnye, hogy a Newton-iteráció általában legfeljebb 3 ciklus után már konvergál, mig minden egyes Newton-iterációban szükség lehet közel 100 nyomás-iterációra is. Ez utóbbinak azonban nem tul nagy a számitásigénye.

A Newton-iteráció fontos tulajdonsága, hogy minden olyan kezdőérték esetén, amely elég közel van a tényleges értékhez konvergál, ha a Jacobi mátrixot pontosan, elhanyagolás nélkül számitjuk. A gyakorlatban kezdőértékként vehetjük a régi időponban kapott értékeket. Ha esetleg nem konvergálna az eljárás, akkor az időlépés csökkentésével már biztosan jó kezdőértékek lesznek a régi időponthoz tartozó értékek. /Ha a differencia egyenletek pontos megoldása folytonosan függ az időtől, akkor az uj értékek a régihez tartanak, ha $\Delta t \to 0$./ A konvergenciának ez az el-

méleti biztositéka nagyon megbizhatóvá teszi a módszert szemben másokkal, ahol esetleg rejtett fizikai feltevéseken mulik a konvergencia, s ha váratlanul nem konvergál, akkor nehéz a hiba eredetét megtalálni.

A két-közeg modellt 3 dimenzióban a következő skalár és vektor egyenletek irják le:

Tömegmegmaradás az egyes fázisokra:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha \rho_v) + \nabla(\alpha \rho_v \vec{v}_v) = \Gamma \qquad /5.1/$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[(1-\alpha)\rho_l\right] + \nabla\left[(1-\alpha)\rho_l \vec{v}_l\right] = -\Gamma \qquad /5.2/$$

Impulzus-megmaradás a fázisokra:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha \rho_v \vec{v}_v) + \nabla(\alpha \rho_v \vec{v}_v \vec{v}_v) + \alpha \nabla P = -\vec{F}_{wv} - \vec{F}_i - \alpha \rho_v \vec{g}_z \qquad /5.3/$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[(1-\alpha)\rho_l \vec{v}_l\right] + \nabla\left[(1-\alpha)\rho_l \vec{v}_l \vec{v}_l\right] + (1-\alpha)\nabla P = -\vec{F}_{wl} + \vec{F}_i - (1-\alpha)\rho_l \vec{g}_z \qquad /5.4/$$

A fázisok energiájának megmaradása:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha \rho_v e_v) + \nabla(\alpha \rho_v e_v \vec{v}_v) + P\nabla(\alpha \vec{v}_v) + P\frac{\partial \alpha}{\partial t} = Q_{wv} + Q_i \qquad /5.5/$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[(1-\alpha)\rho_l e_l\right] + \nabla\left[(1-\alpha)\rho_l e_l \vec{v}_l\right] + P\nabla\left[(1-\alpha)\vec{v}_l\right] - P\frac{\partial \alpha}{\partial t} = Q_{wl} - Q_i \qquad /5.6/$$

ahol $\nabla \equiv \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}$

Az egyenletek felirása azzal a feltételezéssel történt, hogy az egyes fázisok különálló folyadékként viselkednek, közös nyomásmező hat rájuk, s kitöltik a rendelkezésre álló térfogatot.

Az egyenletek baloldalainak első tagjai a tömeg, az impulzus, illetve az energia időbeli változását adják meg egy adott pontban. A 2. tagok a tömeg, impulzus, energia konvekcióját jelentik ugyanabba, vagy ugyanabból a pontból. Az impulzus egyenletekben a 3. tagok a nyomásból származó erőket foglalják magukba, melyek a fázisokat gyorsitják. Az energia egyenletek 3. tagjai a belső energia csökkenését vagy növekedését fejezik ki a megfelelő fázis tágulásának vagy összenyomásának eredményeképpen. Ugyanitt a 4. tagok annak a munkának az eredményei, melyet az egyik fázis tágulása végez a másikon.

Az egyenletek jobboldalai a fázisok közti tömeg, impulzus és energiaátadást fejezik ki, illetve az impulzusátadást a folyadék és a tartály fala között. Ezekről feltételezzük, hogy nem tartalmazzák az ismeretlen függvények deriváltjait. A fázisok közti átadási tényezők azonos nagyságuak és ellentétes előjelüek, mert a megfelelő egyenletek összeadásával a teljes folyadékra érvényes megmaradási egyenleteket kell kapni.

Az /5.3/ és /5.4/ impulzus egyenletek vektor egyenletek, s ténylegesen 6 skalár egyenletet jelentenek a sebesség 3 komponensére mindkét fázisban. Ezek az egyenletek egyszerüsithetők, ha részben elvégezzük a deriválást és felhasználjuk az /5.1/, /5.2/ egyenleteket:

$$\alpha\rho_v \frac{\partial \vec{v}_v}{\partial t} + \alpha\rho_v \vec{v}_v \nabla \vec{v}_v + \alpha \nabla P = -\vec{F}_{wv} - \vec{F}_{iv} - \alpha\rho_v \vec{g}_z \qquad /5.7/$$

$$(1-\alpha)\rho_l \frac{\partial \vec{v}_l}{\partial t} + (1-\alpha)\rho_l \vec{v}_l \nabla \vec{v}_l + (1-\alpha)\nabla P = -\vec{F}_{wl} - \vec{F}_{il} - (1-\alpha)\rho_l \vec{g}_z \qquad /5.8/$$

ahol az $\vec{F}_{iv}$ és $\vec{F}_{il}$ átadási tagokra: $\vec{F}_{iv} = \vec{F}_i + \Gamma \vec{v}_v$

$$\vec{F}_{il} = -\vec{F}_i - \Gamma \vec{v}_l$$

A kapott egyenletrendszerben az x, y, z és t független változók mellett a következő 12 függő változó szerepel:
az α térfogattört, a P nyomás, a ρ_v és ρ_l sürüségek, az e_v és e_l fajlagos belső energiák és a $\vec{v}_v$ és $\vec{v}_l$ sebességek 3-3 komponense. Az átadási tagok ezeken kivül még a T_v és T_l hőmérsékletektől is függenek. Ezt a 14 ismeretlen függvényt tekintjük alapváltozónak. Valójában az átadási tényezők a folyadéknak még egyéb jellemzőit is tartalmazzák, pl. a telitési hőmérsékletet, a viszkozitást, de ezekről feltételezzük, hogy a fenti 14 változó ismert függvényei, s belőlük meghatározhatók.
Eddig 10 egyenletet irtunk fel. A zártsághoz szükséges további 4 összefüggést az állapotegyenletek adják, melyek alakja a következő:

$$\rho_v = \rho_v(P, T_v) \qquad /5.9/$$

$$\rho_l = \rho_l(P, T_l) \qquad /5.10/$$

$$e_v = e_v(P, T_v) \qquad /5.11/$$

$$e_l = e_l(P, T_l) \qquad /5.12/$$

A modellt leiró parciális differenciálegyenleteknek vannak komplex karakterisztikái, tehát a velük felirt kezdet érték feladat matematikailag nem korrekt kitüzésü. A komplex karakterisz-

tikák miatt tetszőlegesen kis perturbáció a kezdeti adatokban a megoldás során tetszőlegesen nagy hibát eredményezhet egy bizonyos idő után. Fizikai csillapitó kifejezések stabilizálhatják a megoldásnak egy bizonyos frekvencia alatti Fourier komponenseit, azaz a hosszu hullámhosszu komponenseket. A nagy frekvenciáju komponensek azonban erősen instabilak. A komplex karakterisztikák miatt a komponensek frekvenciájukkal arányosan növekednek, vagyis a nagyobb frekvenciáju komponensek abszolut értéke gyorsabban nő, mint a kisebb frekvenciájuaké. A csillapitás csak az alacsony frekvenciáju komponensek növekedését tudja megakadályozni, egy bizonyos frekvencia fölött minden komponens nőni fog.
Ha a satbilizált komponensek megfelelő frekvencia tartományt képviselnek ahhoz, hogy a kivánt jelenséget leirjuk, akkor a feladatot meg tudjuk oldani ezek segitségével. Ez történik a véges differenciák alkalmazásakor: adott rács esetén a numerikus megoldásban szereplő legrövidebb hullámhossz nem lehet rövidebb, mint a rácstávolság kétszerese, azaz a megfelelő frekvencia nem lehet ennél nagyobb. Ezzel a korlátlanul növő komponenseket kizárjuk a megoldásból, ha a rács elég durva. Tehát a rács finomságának és a csillapitásoknak együttes hatásaként jó numerikus közelitést tudunk kapni. A kettő közt a következő az összefüggés: erősebb csillapitás magasabb frekvenciáju komponenseket is stabilizál, tehát valamivel finomabb rácson is jó megoldást kapunk és megforditva.

Az /5.1/-/5.6/ két-közeg modellben a csillapitást az átadási tagok jelentik. Ha a zónában levő két fázis nagymértékben keveredik, akkor az impulzusátadás különösen nagy. Erről az előző fejezetben kimutattuk, hogy erősen stabilizálja az alacsony frekvenciáju komponenseket. Eredményként azt kaptuk, hogy az $m\Delta x$ hullámhosszu komponens $m \gg 1$ esetén jól viselkedik, ha

$$m\Delta x \gg \frac{\rho_l}{\rho_v} r,$$ ahol r az impulzusátadásban implicit módon szereplő hosszuság, adott esetben a buborék vagy folyadékcsepp sugara.

Emellett a 2.3. pontban ismertetett donor differenciálásnak is van stabilizáló hatása azokra a komponensekre, melyek hullámhossza a rácstávolság kisszámu többszöröse. Ez azt jelenti, hogy még csillapitás nélkül is kaphatnánk jó eredményeket, ha csak néhány osztáspontot vennénk fel. Nagyobb hibák csak azokban a komponensekben lépnének fel, melyek hullámhossza lényegesen nagyobb, mint a rácstávolság.

Külön problémát jelent a helyes peremfeltételek megválasztása. Teljesen hiperbolikus rendszer esetén /mint amilyen a 2.2. pontban ismertetett homogén modell/ a megfelelő peremfeltételek száma és tipusa meghatározható a karakterisztikáknak az értelmezési tartomány határán való vizsgálatából. Az olyan peremen, ahol a folyadék befelé áramlik két értéket kell megadni /p. a sebességet és hőmérsékletet/, az olyanon, ahol kifelé áramlik csak egy információra van szükség /pl.a kilépő nyomásra/, ahol pedig nincs áramlás, ott ez maga a feltétel. /áramlás=0/

A nem korrekt kitüzésü két-közeg modell esetén nem ilyen egyszerü a helyzet. Ekkor a karakterisztikák valós részének vizsgálatából tudunk levonni következtetéseket.

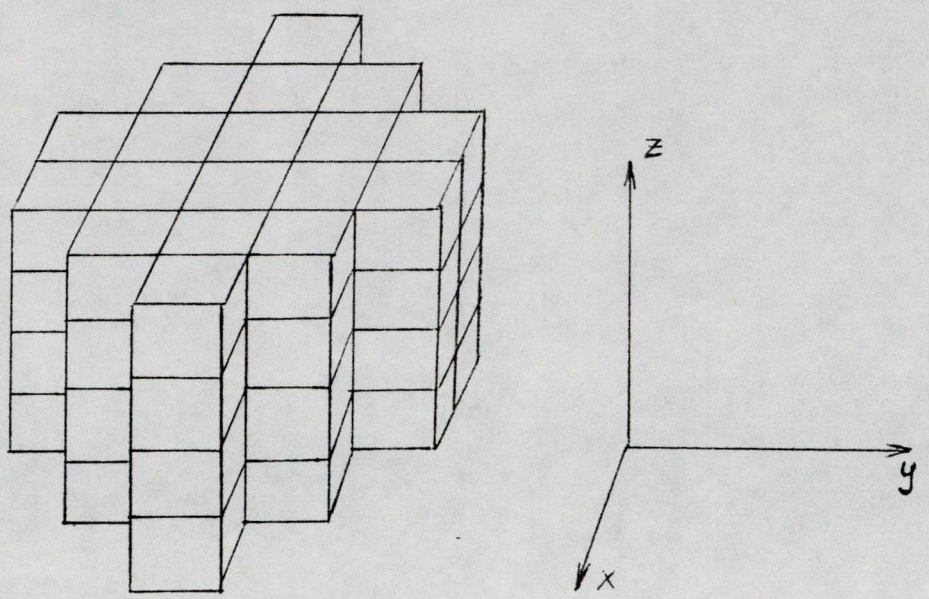
Az /5.1/-/5.6/ egyenletrendszer karakterisztikus gyökei a következők: 2 valós gyök egyenlő az egyes fázisok sebességével /v_v, v_ℓ/
2 valós gyök közel egyenlő $v_v \pm c_v$ -vel,
2 komplex gyök egymás konjugáltja, valós részük v_v és v_ℓ közé esik.
Abban az esetben, amikor mindkét fázis kifelé áramlik a határon /azaz a zóna tetején/ csak egy sebesség, a hangsebességet tartalmazó pár egyike irányulhat vissza az értelmezési tartomány belsejébe. Ez azt mutatja, hogy kétfázisu kiáramlás esetén a határon csak egy értéket kell megadni. Mivel a befelé irányuló karakterisztika a hangsebességet foglalja magába, ezért a nyomás megadása látszik alkalmasnak.

A zónában lejátszódó legtöbb tranziens egyfázisu áramlásként lép be a zónába, erre pedig ismertek a korrekt peremfeltételek. Kétfázisu áramlás általában csak kifelé történik. Egy általános modellben azonban lehetővé kell tenni a kétfázisu beáramlás számitását is. Tovább bonyolitja a kérdést, hogy a numerikus megoldási módszerhez még további információkra is szükség lehet a peremen. /Ez független attól, hogy a feladat korrekt kitüzésü-e vagy sem./ Ebből a szempontból meg lehet különböztetni a lényeges /a karakterisztikák vizsgálatából adódó/ és a nem lényeges /a numerikus sémához szükséges/ peremfeltételeket.

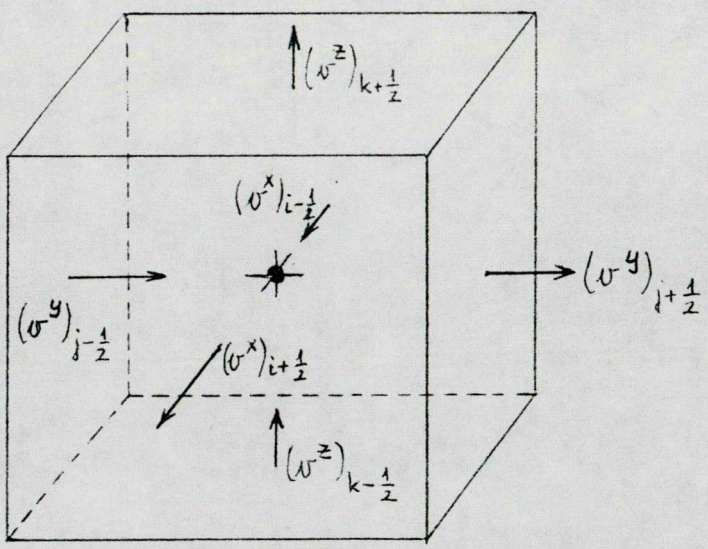
Kétfázisu beáramlás esetén öt karakterisztika valós része mutat az értelmezési tartomány belseje felé. Ez azt jelzi, hogy öt változó értékét kell megadni a megfelelő peremen.

A gyakorlatban kétféle peremfeltételt szokás megadni.
Az egyikben a két fázis sebessége rögzitett /sebesség-feltétel/. Ekkor még további 3 lényeges peremfeltételt kell megadni, pl. a térfogattörtet és a fázisok hőmérsékletét.
A másikban a bemeneti nyomás a rögzitett /nyomás-feltétel/, ekkor további 4 feltétel megadására van szükség. Ebből 3 az előzőhöz hasonlóan lehet a térfogattört és a fázisok hőmérséklete, a 4. pedig a két fázis sebessége közti összefüggés a bemenetnél, ami abból adódik, hogy az impulzus egyenleteket a perem körül differenciáljuk és az impulzusátadás meghatároz egy ilyen összefüggést.
A numerikus módszer még két másik feltételt is felhasznál /a peremen kivüli sebességeket/, de ezek nem lényeges peremfeltételek.

A differenciaegyenletek felirásához térbeli és időbeli diszkretizációra van szükség. Meg kell adni egy térbeli rácsot, melyen a változókat és a differenciákat értelmezni kell. Az időbeli diszkretizációnál azt kell eldönteni, hogy az egyes változók értékeit a régi, vagy az uj időpontban vesszük-e, azaz implicit vagy explicit kifejezéssel számolunk.



11. ábra



✷ az (i,j,k) elemi térfogat középpontja
itt vannak értelmezve az $\alpha, P, \rho_v, \rho_\ell, e_v, e_\ell, T_v, T_\ell$ változók

A v_v^x és v_ℓ^x x-irányu sebesség komponensek az elemi térfogatoknak azon a lapjain vannak értelmezve, melyek merőlegesek az x tengelyre. Hasonló az y és z-irányu komponensek értelmezése.

12. ábra

A térbeli diszkretizáció elvileg sokféle lehet. A választást általában az dönti el, hogy a tapasztalat szerint melyik bizonyult kényelmesnek, könnyen kezelhetőnek. Arra kell vigyázni, hogy az explicit kifejezésekben szereplő térbeli differenciák felirásakor biztositsuk a numerikus stabilitást /ezt a célt szolgálja a donor összefüggések használata/.

A térbeli diszkretizációhoz a 3 dimenziós értelmezési tartományt /a reaktor zónát/ derékszögü rács segitségével bontjuk fel. /A z tengely párhuzamos a zóna hossztengelyével./ Szabálytalan határokat csak az x-y sikban engedünk meg. Egy ilyen rács látható a 11. ábrán.
A változók értelmezése a 2.3. pontban leirtakhoz hasonlóan történik. A sebességek komponenseit a határoló lapokon értelmezzük, a többi változót pedig a kapott elemi térfogatok középpontjában. A változók értelmezését a 12. ábra szemlélteti.

A továbbiakban az egyszerüség kedvéért az indexek közül a középpontra utalókat elhagyjuk, igy pl. $\alpha_{i+\frac{1}{2}}$ fogja jelenteni α értékét az $(i+\frac{1}{2},j,k)$ pontban. Az i,j,k indexek sorrendben az x,y és z tengelyek menti elhelyezkedést jelentik.

Először a tömeg és energia egyenletek véges differencia alakját irjuk fel. Ezekben a differenciákat az elemi térfogatok középpontja körül vesszük. Az n és n+1 indexek az egymást követő időpontokat jelölik. Az átadási tagokban szereplő $n+\frac{1}{2}$ index arra utal, hogy ezekkel az értékekkel történik a megoldás számitása az n-edik időlépésről az n+1-edikre. Ezek a tagok általában az alapváltozók régi és uj időpontbeli értékeinek bonyolult függvényei.
Az egyenletekben A jelöli az áramlási keresztmetszetet az adott elemi térfogat megfelelő falán, V pedig benne a folyadék áramlására rendelkezésre álló térfogatot. /A és V általában kisebb, mint az adott térfogat egy lapjának területe, illetve a térfogata, mivel a rendelkezésre álló tér egy részét szerkezeti anyagok töltik ki./

Az /5.1/-nek megfelelő differenciaegyenlet:

$$\frac{(\alpha\rho_v)^{n+1}-(\alpha\rho_v)^n}{\Delta t}+\frac{1}{V}\left\{\left[A(\alpha\rho_v)^n(w_v^x)^{n+1}\right]_{i+\frac{1}{2}}-\left[A(\alpha\rho_v)^n(w_v^x)^{n+1}\right]_{i-\frac{1}{2}}+\right.$$

$$+\left[A(\alpha\rho_v)^n(w_v^y)^{n+1}\right]_{j+\frac{1}{2}}-\left[A(\alpha\rho_v)^n(w_v^y)^{n+1}\right]_{j-\frac{1}{2}}+$$

$$\left.+\left[A(\alpha\rho_v)^n(w_v^z)^{n+1}\right]_{k+\frac{1}{2}}-\left[A(\alpha\rho_v)^n(w_v^z)^{n+1}\right]_{k-\frac{1}{2}}\right\}=\Gamma^{n+\frac{1}{2}} \qquad /5.13/$$

/5.2/-nek ugyanilyen egyenlet felel meg, csak α helyett $1-\alpha$, Γ helyett $-\Gamma$ és a v index helyett l szerepel.

Az /5.5/ egyenlet véges differencia alakja:

$$\frac{(\alpha\rho_v e_v)^{n+1} - (\alpha\rho_v e_v)^n}{\Delta t} + \frac{1}{V}\Big\{\Big[P^n + (\rho_v e_v)^n_{i+\frac12}\Big]\Big[A\,\alpha^n (w_v^x)^{n+1}\Big]_{i+\frac12} -$$
$$- \Big[P^n + (\rho_v e_v)^n_{i-\frac12}\Big]\Big[A\alpha^n (w_v^x)^{n+1}\Big]_{i-\frac12} + \Big[P^n + (\rho_v e_v)^n_{j+\frac12}\Big]\Big[A\alpha^n (w_v^y)^{n+1}\Big]_{j+\frac12} -$$
$$- \Big[P^n + (\rho_v e_v)^n_{j-\frac12}\Big]\Big[A\alpha^n (w_v^y)^{n+1}\Big]_{j-\frac12} + \Big[P^n + (\rho_v e_v)^n_{k+\frac12}\Big]\Big[A\alpha^n (w_v^z)^{n+1}\Big]_{k+\frac12} -$$
$$- \Big[P^n + (\rho_v e_v)^n_{k-\frac12}\Big]\Big[A\alpha^n (w_v^z)^{n+1}\Big]_{k-\frac12}\Big\} + P^n\frac{\alpha^{n+1} - \alpha^n}{\Delta t} = Q^{n+\frac12}_{wv} + Q^{n+\frac12}_{i} \qquad /5.14/$$

Az /5.6/-nak megfelelő egyenlet ugyanilyen, csak α helyett $1-\alpha$, Q_i helyett $-Q_i$ és a v index helyett l áll.

A 2.3. pontban leirt modellhez hasonlóan itt is előfordulnak változók olyan helyen vett értékükkel, melyet a 12. ábra nem definiál. Pl. az $(\alpha\rho_v)$ szorzat /5.13/-ban az elemi térfogatok falán veszi fel az értékét, de az α és ρ_v változókat eddig csak a térfogat középpontjában értelmeztük. Ezeknek az értékeknek a meghatározására ismét a donor összefüggéseket használjuk. A definició mindig az adott falra merőleges sebességkomponens segitségével törénik. Mindig annak a fázisnak a sebességét vesszük figyelembe, amelyre az adott egyenlet vonatkozik. Igy pl. előfordulhat, hogy $\alpha_{i+\frac12} = \alpha_i$ a gőz egyenleteiben /ha $(v_v^x)_{i+\frac12} \geqq 0$/, a folyadékban viszont $\alpha_{i+\frac12} = \alpha_{i+1}$ /ha $(v_l^x)_{i+\frac12} < 0$/. A donor összefüggések a fenti egyenletekben mindig a régi időpontban szerepelnek, ahol a sebességek már ismertek, tehát a definició egyértelmü.

Az impulzus egyenletek differencia közelitése valamivel bonyolultabb. Csak az /5.7/ egyenlet egyik komponensére irjuk fel, a többi a tengelyek és az indexek permutációjával nyerhető.
Az impulzus egyenleteket az elemi térfogatok falainak középponja körül differenciáljuk. Az x irányu komponensek esetén az x tengelyre merőleges, az y és z komponensek esetén pedig az y és z tengelyre merőleges falakat használjuk fel. Igy minden egyenlethez más középpontot használunk, s ezek mindegyike különbözik a tömeg és energia egyenletekben használt középpontoktól is.

Tekintsük az /5.7/ egyenlet x irányu komponensét:

$$\alpha\rho_v\frac{\partial w_v^x}{\partial t} + \alpha\rho_v\left(w_v^x\frac{\partial w_v^x}{\partial x} + w_v^y\frac{\partial w_v^x}{\partial y} + w_v^z\frac{\partial w_v^x}{\partial z}\right) + \alpha\frac{\partial P}{\partial x} = -F^x_{wv} - F^x_{iv} \qquad /5.15/$$

Ezt az egyenletet az $\left(i+\frac{1}{2},j,k\right)$ pont körül differenciáljuk:

$$(\alpha\rho_v)^n_{i+\frac{1}{2}} \frac{(v_v^x)^{n+1}_{i+\frac{1}{2}} - (v_v^x)^n_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + (\alpha\rho_v)^n_{i+\frac{1}{2}} \left[(v_v^x)^n_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{\Delta_x v_v^x}{\Delta x} \right)^n_{i+\frac{1}{2}} + \right.$$

$$\left. + (v_v^y)^n_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{\Delta_y v_v^x}{\Delta y} \right)^n_{i+\frac{1}{2}} + (v_v^z)^n_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{\Delta_z v_v^x}{\Delta z} \right)^n_{i+\frac{1}{2}} \right] +$$

$$+ \alpha^n_{i+\frac{1}{2}} \frac{p^{n+1}_{i+1} - p^{n+1}_i}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} = - \left(F^x_{wv} \right)^{n+\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2}} - \left(F^x_{iv} \right)^{n+\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2}} \qquad /5.16/$$

Az egyenletben szereplő $\left(\frac{\Delta_x v_v^x}{\Delta x} \right)_{i+\frac{1}{2}}$ alaku kifejezéseket még definiálni kell.
Itt is szerepelnek olyan helyen vett változók, ahol még nincs definiálva az értékük. Az α és ρ_v változók definiciója a következő:

$$\alpha_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\alpha_{i+1}\Delta x_{i+1} + \alpha_i \Delta x_i}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i} \qquad /5.17/$$

$$(\rho_v)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{(\rho_v)_{i+1}\Delta x_{i+1} + (\rho_v)_i \Delta x_i}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i} \qquad /5.18/$$

Ezek felhasználásával

$$(\alpha\rho_v)_{i+\frac{1}{2}} = \alpha_{i+\frac{1}{2}} (\rho_v)_{i+\frac{1}{2}} \qquad /5.19/$$

A sebességkomponensek közül az $\left(i+\frac{1}{2},j,k\right)$ pontban csak $(v_v^x)_{i+\frac{1}{2}}$ értéke ismert. A másik két komponenst átlagképzéssel nyerjük:

$$(v_v^y)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{4}\left[(v_v^y)_{j-\frac{1}{2}} + (v_v^y)_{j+\frac{1}{2}} + (v_v^y)_{i+1,j+\frac{1}{2}} + (v_v^y)_{i+1,j-\frac{1}{2}} \right] \qquad /5.20/$$

$$(v_v^z)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{4}\left[(v_v^z)_{k-\frac{1}{2}} + (v_v^z)_{k+\frac{1}{2}} + (v_v^z)_{i+1,k+\frac{1}{2}} + (v_v^z)_{i+1,k-\frac{1}{2}} \right] \qquad /5.21/$$

Végül a differencia közelitések definiciója:

$$\left(\frac{\Delta_x v_v^x}{\Delta x} \right)_{i+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \dfrac{(v_v^x)_{i+\frac{3}{2}} - (v_v^x)_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta x_{i+1}}, & \text{ha } (v_v^x)_{i+\frac{1}{2}} < 0 \\ \dfrac{(v_v^x)_{i+\frac{1}{2}} - (v_v^x)_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x_i}, & \text{ha } (v_v^x)_{i+\frac{1}{2}} \geqq 0 \end{cases} \qquad /5.22/$$

$$\left(\frac{\Delta_y\, w_v^x}{\Delta y}\right)_{i+\frac12} = \begin{cases} \dfrac{(w_v^x)_{i+\frac12,j+1} - (w_v^x)_{i+\frac12}}{\Delta y_{j+\frac12}}, & \text{ha } (w_v^y)_{i+\frac12} < 0 \\ \dfrac{(w_v^x)_{i+1} - (w_v^x)_{i+\frac12,j-1}}{\Delta y_{j-\frac12}}, & \text{ha } (w_v^y)_{i+\frac12} \geqq 0 \end{cases} \qquad /5.23/$$

$$\left(\frac{\Delta_z\, w_v^x}{\Delta z}\right)_{i+\frac12} = \begin{cases} \dfrac{(w_v^x)_{i+\frac12,k+1} - (w_v^x)_{i+\frac12}}{\Delta z_{k+\frac12}}, & \text{ha } (w_v^z)_{i+\frac12} < 0 \\ \dfrac{(w_v^x)_{i+\frac12} - (w_v^x)_{i+\frac12,k-1}}{\Delta z_{k-\frac12}}, & \text{ha } (w_v^z)_{i+\frac12} \geqq 0 \end{cases} \qquad /5.24/$$

A $\Delta y_{j+\frac12}$ és $\Delta z_{k+\frac12}$ rácstávolságok értelmezése a következő:

$$\Delta y_{j+\frac12} = \frac{\Delta y_j + \Delta y_{j+1}}{2}, \qquad \Delta z_{k+\frac12} = \frac{\Delta z_k + \Delta z_{k+1}}{2} \qquad /5.25/$$

Az egyenletek jobboldalain a különböző átadási tagok szerepelnek. Ezek közül legfontosabb a fal által a fázisoknak átadott hő, valamint a fázisátalakulást kifejező Γ. Ez határozza meg döntően, hogy a folyadéknak hányad része alakul gőzzé, s ezzel a nyomás és az összes többi változó értékét jelentősen befolyásolja.
Mivel a fázisok átalakulása gyorsan játszódik le, ezért ezt a tagot amennyire csak lehet implicit módon kell kezelni. Különben nagyon rövid időlépéseket kellene venni.
Γ általános alakja a következő: $\Gamma^{n+\frac12} = \Gamma(\alpha^{n+1}, p^{n+1}, T_\ell^{n+1}, T_v^{n+1}, \alpha^n, p^n, T_\ell^n, T_v^n, \vec{w}_\ell^n, \vec{w}_v^n)$

Γ-nak az első 4 változójában folytonos és differenciálható függvénynek kell lennie. A deriváltakra a Newton iterációban van szükség. Ha nincs rájuk zárt formula, akkor numerikusan kell differenciálni. A többi változójában nem kell folytonosnak lennie, csak lassan változónak.

A fázisok közti impulzusátadás határozza meg döntően a relativ sebességeket. Ha nagy az értéke, akkor közel azonos sebességeket kapunk. Több dimenzióban még nem sikerült megállapitani rá megfelelő összefüggést. Az egydimenziós két-közeg modellek többségében arányos a $|v_v - v_\ell|\cdot(v_v - v_\ell)$ mennyiséggel.
F_i általános alakja:

$$(F_{iv}^x)_{i+\frac12}^{n+\frac12} = F_{iv}^x\left((w_v^x)_{i+\frac12}^{n+1}, (w_\ell^x)_{i+\frac12}^{n+1}, \vec{w}_v^n, \vec{w}_\ell^n, \alpha^n, p^n, T_v^n, T_\ell^n\right)$$

Ennek is folytonosnak kell lennie az uj időpontban vett változóiban és meg kell tudni határozni a deriváltjait. Az egydimenziós modell alapján felirható egy kevésbé általános alakja:

$$(F_{iv}^x)_{i+\frac12}^{n+\frac12} = \left[(w_v^x)_{i+\frac12}^{n+1} - (w_\ell^x)_{i+\frac12}^{n+1}\right]\cdot \tilde{F}_{iv}^x\left(\vec{w}_v^n, \vec{w}_\ell^n, \alpha^n, p^n, T_v^n, T_\ell^n\right)$$

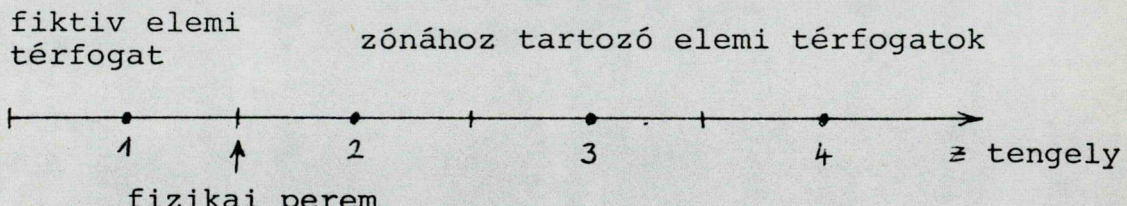
A fázisok közti Q_i enegiaátadás általános alakja Γ -hoz hasonlóan adható meg, az $\vec{F}_{wl}$ és $\vec{F}_{ww}$ falsurlódásoké pedig $\vec{F}_i$ -hez hasonlóan. A gyakorlatban $\vec{F}_{wl}$ főleg a $\vec{v}_l$, $\vec{F}_{ww}$ pedig főleg a $\vec{v}_w$ sebességtől függ.

Az eddigiekben a belső pontokra irtuk fel a differenciaegyenleteket. Mivel a modellt a rektorok zónájában lejátszódó folyadékáramlásra alkalmazzuk, ez meghatározza a peremfeltételeket is. A zóna oldalfalain keresztül nem történik áramlás. Ez azt jelenti, hogy az itt levő elemi tértfogatok külső falán definiált normális sebesség komponensek nullák. A tömeg és energia egyenletekben - /5.13/,/5.14/ - az ilyen külső falakra olyan összefüggések vonatkoznak, melyek a hely szerinti deriváltak részei. Ezekben a lapokon vett sebességet szorozzuk az ugyanitt vagy a szemközti oldalon vett valamilyen donor menynyiséggel. Mivel a sebességek nullák a külső lapokon, ezért a többi változó értéke lényegtelen. Tehát a differenciaegyenletek felirásához nincs szükség az oldallapokon kivül felvett értékekre, s itt az impulzus egyenleteket sem kell megadni.

Bonyolultabb a helyzet a zóna alján és a tetején. Itt kétféle peremfeltételt is meg lehet adni: a nyomás vagy a sebesség-feltételt.
A nyomás-feltétel esetén a peremen rögzitjük a nyomást, s meg kell határozni a sebességet. A sebesség-feltétel azt jelenti, hogy a sebességet valamilyen rögzitett értéken tartjuk a tranziens folyamán. Mindkét esetben ha a sebesség a zóna belsejébe irányul, akkor a folyadék jellemzőit meg kell adni a peremen, hogy a belépő folyadékot le lehessen irni. Ha az áramlás kifelé történik, akkor ezeknek a jellemzőknek a megadása felesleges.

Vizsgáljuk most meg ennek a kétféle peremfeltételnek a hatását a zóna alján és tetején elhelyezkedő elemi térfogatokra felirt differenciaegyenletekre vonatkozólag.

Először tekintsük a sebesség-feltételt. Az /5.13/ és /5.14/ tömeg és energia egyenletekben kiáramlás esetén a donor differenciáláshoz csak a belső térfogatok középpontjaiban felvett értékek szükségesek. A gyakorlatban azonban a megadott sebesség általában befelé mutat. Ilyenkor fiktiv elemi térfogatot is fel kell venni a zónán kivül, melynek a középpontja egy fél lépésközre van a fizikai peremtől. Ezt szemlélteti a 13. ábra.



13. ábra

Ha a fizikai határon levő ténylegesen létező elemi térfogatot 2-vel jelöljük, akkor a fizikai perem indexe $1\frac{1}{2}$, a fiktiv térfogat külső lapjáé pedig $\frac{1}{2}$.
Ha a $(v_v^z)_{1\frac{1}{2}}$ sebesség befelé mutat, akkor a 2 pont körül differenciált tömeg és energia egyenletekhez ismerni kell $(\alpha\varrho_v)$ -t és $(\alpha\varrho_v e_v)$ -t 1-ben. Ezek értékét a fiktiv térfogatokra meg kell adni.
Nyomás-feltétel esetén is szükség van további információra attól függően, hogy az áramlás befelé vagy kifelé történik a határon. Kiáramlás esetén az a legegyszerübb, ha a nyomást a fizikai peremen fél lépéssel kivül elhelyezkedő fiktiv elemi tértfogatok középpontjában, azaz a 13. ábra szerinti 1 pontban adjuk meg. Ekkor ugyanis a fázisok impulzus egyenleteit a peremen levő térfogatok külső lapja /$1\frac{1}{2}$ index/ körül ugy tudjuk differenciálni, hogy közben csak az értelmezési tartomány belsejéből vesszük az értékeket. /Kivételt csak az /5.20/ és /5.21/ átlagsebességek jelentenek, melyeket a donor differenciáláshoz használunk. Az átlagképzésből viszont kihagyhatók a fiktiv x és y-irányu sebességek./ Ilyen nyomás-feltétellel tehát kiáramlás esetén nincs szükség további információra.

Ha azt akarjuk, hogy a rendszer az áramlás megfordulását is kezelni tudja, akkor befelé történő áramlás esetén is ugyanazon a helyen /az 1 pontban/ kell megadni a nyomást. Ellenkező esetben a peremfeltétel helyét minden esetben meg kellene változtatni, valahányszor megfordul az áramlás iránya. Az impulzus egyenleteket most is a peremen levő elemi térfogatok külső fala körül differenciáljuk /$1\frac{1}{2}$ index/. Ekkor 3 dologra kell vigyázni:

1. A tömeg, az energia és az impulzus egyenletek a peremen levő térfogatokra megkivánják a beáramló folyadék jellemzőinek leirását. Ehhez α, P, T_v és T_ℓ értékét ismerni kell az 1 pontban ugyanugy, mint a sebesség-feltétel esetén.
2. A peremre felirt impulzus egyenletek z irányu komponenseihez szükség van a fizikai határtól egy teljes lépésre kivül /az $\frac{1}{2}$ indexnél/ definiált z irányu sebességekre a donor differenciálás miatt. /A zónában történő áramlás számitásakor a zónán kivüli nyomás-feltétel megadása a gyakorlatban azt jelenti, hogy ott a z tengely irányu sebesség deriváltak kicsik, ezért feltehetjük, hogy az $\frac{1}{2}$ pontban a z irányu sebességek megegyeznek az $1\frac{1}{2}$ pontbeli értékekkel./
3. A 2 indexü térfogatokra felirt keresztirányu impulzus egyenletekhez szükség van az 1 indexü térfogatokon definiált keresztirányu sebességekre. /ezekről feltehetjük, hogy nullák/

A gyakorlatban ritkán fordul elő, hogy tisztán nyomás-feltételt adnának meg a zóna alján és tetején egyaránt.

A differenciaegyenletek és a peremfeltételek felirása után vizsgáljuk meg a megoldás menetét. A differencia séma részben explicit, részben implicit. Egy adott időlépés számitására egy teljesen explicit módszer lenne a leggyorsabb, de a stabilitás követelményéből eredő korlátok miatt csak nagyon kis időlépéseket lehetne venni. Ezzel szemben a teljesen implicit módszerek nagyobb időlépéseket tesznek lehetővé, viszont jelentősen megnő a lépésenkénti számitásigény a szükséges iteráció miatt, s a program is bonyolultabbá válik.
A felirt egyenletrendszer átmenet e két szélsőséges eset között. A stabilitás feltétele elfogadható korlátot jelent, s a lépésenkénti számitásigény sem tul nagy. A modell által leirt jelenségek 3 fő csoportra oszthatók.
Az elsőbe a lokális jelenségek tartoznak. Ilyenek az átadási folyamatok, melyeket nem-differenciális összefüggések irnak le. A második a nyomás által okozott zavarok terjedése a folyadékban. Ez már magába foglal bizonyos differenciális tagokat is. A harmadik pedig a tömeg, energia és impulzus konvekciója a folyadék mozgása során.

Adott rácsméret esetén ezek minegyikének van egy jellemző válaszideje. Ez a lokális jelenségeknél a legrövidebb, valamivel hosszabb a hangsebességgel kapcsolatos jelenségeknél, s a leghosszabb a folyadék áramlásánál /ez a folyadéknak az egyik térfogatból a következőbe jutásához szükséges idő/.

A felirt differnecia séma az első két csoportba tartozó folyamatokra implicit, a harmadikra explicit. Ez a módszer akkor jó, ha a folyadék sebességek lényegesen alatta maradnak az egy-egy fázisban terjedő hang sebességének. Az explicit tagokból eredő stabilitási feltétel:

$$\max\left(\left|v_v \frac{\Delta t}{\Delta x}\right|, \left|v_l \frac{\Delta t}{\Delta x}\right|\right) < 1$$

A séma felirásával minden elemi térfogatra kapunk egy bonyolult nemlineáris algebrai egyenletrendszert. A feladat az, hogy az n időpontbeli változóértékek ismeretében határozzuk meg őket az n+1-edik időpontban.

Az /5.13/ és /5.14/ tömeg és energia egyenletekből az derül ki, hogy a bennük szereplő α^{n+1}, P^{n+1} és e^{n+1} változók csak a v^{n+1} uj időpontbeli változókkal vannak kapcsolatban. Az impulzus egyenletekben, melyekre példa az /5.16/ egyenlet, ezek a sebességek ugyanezen és a szomszádos hat térfogaton vett nyomásokkal függnek össze. Az n+1-edik időpontban tehát az egyes elemi térfogatokon definiált változók közti kapcsolatot a nyomás jelenti. Ha minden térfogatban ismernénk a nyomást, akkor az összes többi változó meghatározható lenne egyszerüen egy néhány egyenletből álló rendszer megoldásával térfogatonként.

Az egyenletrendszernek ez a tulajdonsága teszi lehetővé, hogy a 2.3. pontban leirtakhoz hasonlóan egyszerüsitsük a megoldást.

A nemlineáris egyenletrendszer bonyolultsága és nagy mérete miatt csak iterativ megoldás jöhet szóba.
Az /5.9/-/5.12/ állapotegyenletek felhasználásával először eliminálják a ϱ_v^{n+1} , ϱ_ℓ^{n+1} , e_v^{n+1} , e_ℓ^{n+1} változókat, majd az igy kapott egyenletrendszeren Newton-iterációt hajtunk végre.
Jelölje az eliminációval kapott egyenletrendszert

$$F(x) = 0,$$

ahol x a 10 alapváltozóból álló vektor a különböző rácspontokban. Az egyenletrendszert linearizáljuk az uj időpontban az m-edik iterációban kapott x^m értékek körül:

$$F(x) \cong F(x^{m+1}) = F(x^m) + J(x^m)(x - x^m) = 0,$$

ahol $J(x^m)$ a Jacobi mátrix /vagyis $\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_{x^m}$

Ezután a következő lineáris rendszert megoldjuk x^{m+1}-re:

$$J(x^m)\,x^{m+1} = J(x^m)\,x^m - F(x^m)$$

Az uj időpontbeli első iteráció kezdőértékét az előző időpontban kapott változóértékek adják. Röviden ez az eljárás a változók n+1-edik időpontbeli értékének meghatározására.
A hatékonyság növelésére a linearizált egyenletrendszer tovább redukálható olyan rendszerré, melyben már csak a nyomások szerepelnek ismeretlenként.

Az impulzus egyenletek segitségével az /5.13/-/5.14/ egyenletekből ki tudjuk küszöbölni a sebességeket. Mivel a fázisok közti impulzusátadást implicit kifejezésként adtuk meg, ezért a két fázis sebessége egymástól is függ. Az elemi térfogatok egyes falain az impulzus egyenletek az alábbi formában irhatók fel:

$$\begin{bmatrix} x & x \\ x & x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_v^{m+1} \\ v_\ell^{m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a\Delta P^{m+1} + f \\ b\Delta P^{m+1} + g \end{bmatrix}$$

ahol a ΔP nyomáskülönbséget az adott falon keresztül vesszük.
/Ha F_{iv} , F_{wv} és $F_{w\ell}$ kifejezésében a v_v^{n+1} és v_ℓ^{n+1} változók lineáris összefüggése szerepel, akkor a fenti alak előállitásához nincs szükség linearizációra./
Ezt a 2×2-es egyenletrendszert megoldva a sebességeket fel tudjuk irni a nyomáskülönbségekkel:

$$v_v^{m+1} = c\Delta P^{m+1} + f'$$

$$v_\ell^{m+1} = d\Delta P^{m+1} + g'$$

Itt az együtthatók csak az n időpontbeli változóértékektől függnek. Az impulzus egyenleteknek ezzel az alakjával kiküszöbölhetők a sebességek az /5.13/,/5.14/ egyenletekből. Végül a megmaradt 4 egyenletben szereplő átadási tagokat linearizáljuk a megmaradt P, α, T_ℓ, T_v változókban. Ezzel egy 4 egyenletből álló 4 ismeretlenes egyenletrendszert kapunk minden elemi térfogatra, melyekben az adott térfogat középpontjában definiált P, α, T_ℓ, T_v, valamint a szomszédos 6 térfogat középpontjében definiált nyomások szerepelnek. Egy térfogatra az egyenletrendszer alakja a következő:

$$\begin{bmatrix} x & x & x & x \\ x & x & x & x \\ x & x & x & x \\ x & x & x & x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P \\ \alpha \\ T_v \\ T_\ell \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x & x & x & x & x & x \\ x & x & x & x & x & x \\ x & x & x & x & x & x \\ x & x & x & x & x & x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_1 \\ P_2 \\ P_3 \\ P_4 \\ P_5 \\ P_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ x \\ x \\ x \end{bmatrix}$$

ahol az 1-6 indexek a szomszédos térfogatokra utalnak. A fenti 4×4-es mátrix invertálásával kapjuk a következő alakot:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P \\ \alpha \\ T_v \\ T_\ell \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x & x & x & x & x & x \\ x & x & x & x & x & x \\ x & x & x & x & x & x \\ x & x & x & x & x & x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_1 \\ P_2 \\ P_3 \\ P_4 \\ P_5 \\ P_6 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} x \\ x \\ x \\ x \end{bmatrix}$$

Ebben a rendszerben az első egyenlet már csak az adott térfogathoz és a szomszédaihoz tartozó nyomásokat tartalmazza. A másik 3 egyenlet a térfogattörtet és a hőmérsékleteket adja meg a nyomások segitségével. A nyomásokra kapott egyenleteket felirva minden térfogatra olyan lineáris algebrai egyenletrendszert kapunk az összes térfogatban definiált nyomásra, melynek együtthatói egy szalagmátrixot alkotnak. Ennek a főátló mellett még 6 átlója van.
Ezzel a feladatot egy N egyenletből álló rendszer megoldására vezettük vissza /N az elemi térfogatok száma/ ugy, hogy közben egy 2×2-es és egy 4×4-es mátrixot invertáltunk N-szer.
Az N elemi térfogat közti kapcsolatot a nyomásokra felirt egyenletrendszer fejezi ki. Ez általában tul nagy ahhoz, hogy direkt eljárással oldjuk meg, ezért iterativ módszerre van szükség. Ilyen lehet pl. egy előre haladó elimináció és visszahelyettesités egymás utáni alkalmazása. Ez a nyomás-iteráció általában gyors, nem sok a számitás igénye.
A nyomások meghatározása után a többi változó értékét behelyettesitéssel nyerjük.

2.4.5. Egy egydimenziós, 5 egyenletes két-közeg modell numerikus megoldása

Ebben a fejezetben egy valamivel egyszerübb két-közeg modellt ismertetek. A modell egydimenziós és 5 alapegyenletet tartalmaz. Vizhütéses reaktorok tranziens analizisére készült a [32] progremrendszer részeként.

A RELAP program család fontos szerepet tölt be a reaktor biztonsági számitásokban. A korábbi RELAP4 rendszerkódok [33,34] még a homogén egyensulyi modellt alkalmazták a hidrodinamikai számitásokra, az utóbbi néhány évben kifejlesztett RELAP5 változatok azonban már a fejlettebb két-közeg modelleket tartalmazzák.
A RELAP5 programok célja gazdaságos és könnyen kezelhető kód létrehozása a vizhütéses reaktorok hütéskiesésből eredő feltételezett balesetének /LOCA - Loss Of Coolant Accident/ és a nem LOCA tranzienseknek a lehető legpontosabb számitása.

A [32]-beli RELAP5 egy fejlett, egydimenziós, gyorsan futó rendszerkód. Alapja egy nem-homogén, nem-egyensulyi hidrodinamikai modell. Kifejlesztésében az uj elméleti eredmények mellett nagy szerepet játszottak a RELAP4 programcsalád fejlesztése és felhasználása során szerzett tapasztalatok.

A Three Mile Island-en történt baleset óta /1979/ a vizhütéses reaktorok biztonsági számitásában a hangsuly a nagy töréses LOCA balesetekről a kicsire helyeződött át. Az ilyen kisérletek tranziens számitása több ezer másodperces időtartamra is kiterjedhet, ezért különösen megnőtt a számitási sebesség jelentősége. Ez a program a sebesség és a modellezés pontossága tekintetében lényeges előrelépést jelent elődeihez képest.

A hidrodinamikai modell egy ötegyenletes két-közeg modell. Tartalmazza a két tömeg- és két impulzus-megmaradási egyenletet külön-külön a fázisokra és egy energia egyenletet a keverékre. Két cseretag megadására van szükség: a fázisok közti tömeg- és az impulzusátadásra. Egy további feltétel /nevezetesen az, hogy az egyik fázis lokális telitési állapotban van/ szükségtelenné teszi az energiaátadást. Sem a fázisok közti, sem a fázisok és a fal közti energiaátadásra nincs szükség. Elég azt megadni, hogy a kisebb tömegben jelen levő fázis telitési állapotban van, azaz éppen keletkezik, vagy eltünik. Igy csak egy fázishőmérsékletet kell definiálni, s ez lényegesen csökkenti a pótlólagosan szükséges információk számát. Minden energiaátadási mechanizmust implicit módon a gőzgenerálás modellje foglal magába. Igy egy korreláció helyettesiti az összes energiaátadással kapcsolatos jelenségeket leiró összefüggéseket.

A numerikus megoldás egy szemi-implicit véges differencia módszerrel történik. Az implicit kifejezéseket ugy adjuk meg, hogy biztositjuk a stabilitást aránylag nem tul kicsi időlépésekre is, és az uj időpontbeli alapváltozókra lineáris összefüggést kapunk, ami lehetővé teszi a direkt megoldást időben. Ez a két tényező eredményezi a gyors számitási sebességet.
A módszer stabilitását numerikusan tesztelték ugy, hogy a kódot olyan feladatokra alkalmazták, melyeknek ismert az analitikus stacioner megoldásuk, s bebizonyitották, hogy a tranziens számitás ehhez a stacioner eredményhez konvergál.
A stabilitást ugy is tesztelték számos esetben, hogy a peremen hirtelen változásokat adtak meg. Ekkor sem jelentkezett numerikus instabilitás a tranziens számitások eredményében.

A megmaradási egyenletek felirásakor feltételezzük, hogy az áramlás szimmetrikus az x tengelyre merőleges sikokon. Az ismeretlen változók értékei elemi térfogatokon és időben vett átlagértékek.

Az 5 alapegyenlet a következő:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha_v \rho_v\right) + \frac{1}{A}\frac{\partial}{\partial x}\left(\alpha_v \rho_v \bar{v}_v A\right) = \Gamma \qquad /6.1/$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha_\ell \rho_\ell\right) + \frac{1}{A}\frac{\partial}{\partial x}\left(\alpha_\ell \rho_\ell \bar{v}_\ell A\right) = -\Gamma \qquad /6.2/$$

$$\alpha_v \rho_v A \frac{\partial \bar{v}_v}{\partial t} + \frac{1}{2}\alpha_v \rho_v A \frac{\partial \bar{v}_v^2}{\partial x} = -\alpha_v A \frac{\partial P}{\partial x} + \Gamma A\left(\bar{v}_I - \bar{v}_v\right) - A F_v \qquad /6.3/$$

$$\alpha_\ell \rho_\ell A \frac{\partial \bar{v}_\ell}{\partial t} + \frac{1}{2}\alpha_\ell \rho_\ell A \frac{\partial \bar{v}_\ell^2}{\partial x} = -\alpha_\ell A \frac{\partial P}{\partial x} - \Gamma A\left(\bar{v}_I - \bar{v}_\ell\right) - A F_\ell \qquad /6.4/$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha_v \rho_v e_v + \alpha_\ell \rho_\ell e_\ell\right) + \frac{1}{A}\frac{\partial}{\partial x}\left(\alpha_v \rho_v e_v \bar{v}_v A + \alpha_\ell \rho_\ell e_\ell \bar{v}_\ell A\right) =$$

$$= -\frac{1}{A}\frac{\partial}{\partial x}\left(\alpha_v \bar{v}_v P A + \alpha_\ell \rho_\ell P A\right) + Q \qquad /6.5/$$

A numerikus séma felirása előtt átalakitjuk az egyenleteket. /6.1/ és /6.2/ összeadásával a keverékre kapunk tömegmegmaradást:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{A}\frac{\partial}{\partial x}\left(\alpha_v \rho_v \bar{v}_v A + \alpha_\ell \rho_\ell \bar{v}_\ell A\right) = 0, \qquad /6.6/$$

ahol $\rho = \alpha_v \rho_v + \alpha_\ell \rho_\ell$

Ezután /6.6/-ot végigszorozzuk $X = \frac{\alpha_v \rho_v}{\rho}$-val és kivonjuk /6.1/-ből:

$$\rho \frac{\partial X}{\partial t} + \frac{1-X}{A} \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_v \rho_v v_v A) - \frac{X}{A} \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_l \rho_l v_l A) = \Gamma \qquad /6.7/$$

/6.3/ és /6.4/ összeadásával az A-val való osztás után kapjuk, hogy:

$$\alpha_v \rho_v \frac{\partial v_v}{\partial t} + \alpha_l \rho_l \frac{\partial v_l}{\partial t} + \frac{1}{2}\alpha_v \rho_v \frac{\partial v_v^2}{\partial x} + \frac{1}{2}\alpha_l \rho_l \frac{\partial v_l^2}{\partial x} = -\frac{\partial P}{\partial x} - F - \Gamma(v_v - v_l) \qquad /6.8/$$

Itt felhasználtuk, hogy $\alpha_v + \alpha_l = 1$. Ezután /6.3/-at osztjuk $\alpha_v \rho_v A$-val, /6.4/-et $\alpha_l \rho_l A$-val és kivonjuk őket egymásból:

$$\frac{\partial v_v}{\partial t} - \frac{\partial v_l}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial v_v^2}{\partial x} - \frac{1}{2}\frac{\partial v_l^2}{\partial x} = -\left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_l}\right)\frac{\partial P}{\partial x} - F' + \Gamma' \qquad /6.9/$$

A teljes energiára felirt /6.5/ egyenletet termikus energia egyenletté alakitjuk. Ehhez az impulzus egyenletek felhasználásával mechanikai egyenleteket irunk fel, melyet kivonunk /6.5/-ből. Az igy kapott egyenlet:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho U) + \frac{1}{A}\frac{\partial}{\partial x}(\alpha_v \rho_v v_v U_v A + \alpha_l \rho_l v_l U_l A) =$$
$$= -\frac{P}{A}\frac{\partial}{\partial x}(\alpha_v \rho_v A + \alpha_l \rho_l A) + Q + DISS \qquad /6.10/$$

ahol DISS az energia disszipációs tagok összegét jelenti.

A termikus energia egyenlet használata azért előnyösebb a teljes energia egyenletnél, mert nem tartalmazza a kinetikus energia idő szerinti deriváltjait, ezért a numerikus közelitésben kevesebb változó értékét kell megadni az uj időpontban.

A modell alapegyenletei tehát /6.6/-/6.10/, az alapváltozók pedig ρ, X, v_v, v_l és U.

Ahhoz, hogy az egyenletrendszer zárt legyen meg kell adni az állapotfüggvényeket, melyek a fázisok jellemzőit fejezik ki P, X és U segitségével. A rendszer állapota azonban nem irható le csupán ezzel a 3 változóval, mivel a fázisok hőmérséklete általában különböző. A határozatlanság oka, hogy csak egy energia egyenletet irtunk fel, de megszüntethető, ha feltételezzük, hogy az egyik fázis telitési állapotban van. A gyakorlatban ezt mindig a kisebb tömegben jelen levő fázisról tesszük fel.

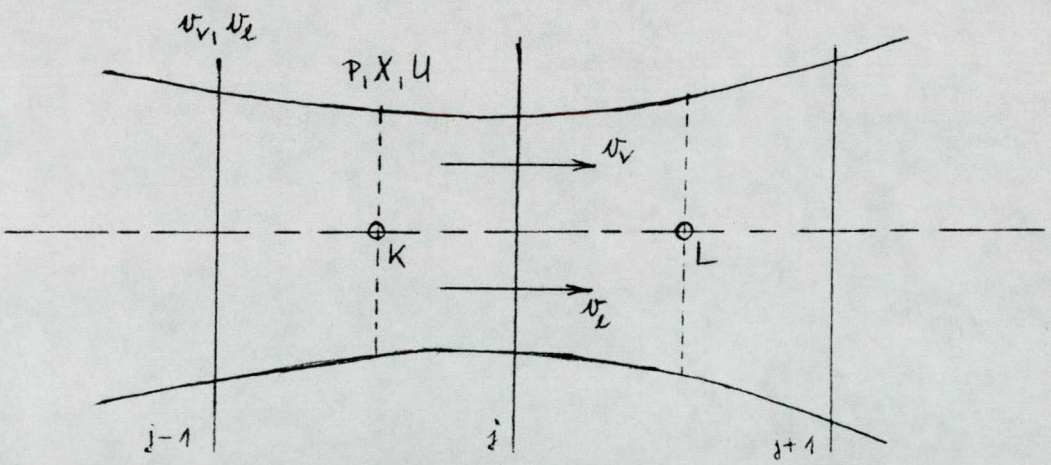
Ezek miatt viszont kevesebb segédegyenletre van szükség. A 4 segédegyenlet a gőzgenerálást, a fázisok közti impulzusátadást, a falsurlódást és a fal hőátadását irja le. Ezek az összefüg-

gések alapvetően empirikusak az alapegyenletekkel ellentétben. Pontosságuk nagyban befolyásolja a modell egyezését a fizikai folyamatokkal.

A numerikus megoldás során a differenciálegyenleteket olyan véges differenciaegyenletekkel helyettesitjük, melyek részben implicitek, hasonlóan a 2.3. és 2.4.4. pontban leirt módszerekhez. Az implicit kifejezéseket ugy választjuk meg, hogy az uj időpontbeli változó értékekre lineáris algebrai egyenletrendszert kapjunk. Igy az egyes időlépésekhez tartozó együtthatómátrix direkt módon invertálható egy ritka mátrixot invertáló rutinnal. További egyszerüsitésre ad lehetőséget az implicit kifejezések olyan megválasztása, amely mellett az elemi térfogatonkénti 5 differenciaegyenlet egy olyan egyenletre redukálható, amely csak a nyomásokat tartalmazza. Ekkor minden lépésben egy N×N-es rendszert kell megoldani.

Ez a két-közeg modell sem alkot korrekt kitüzésü feladatot hasonlóan az előző fejezetben ismertetett modellhez. Ahhoz, hogy a felirt numerikus sémával jó eredményeket lehessen kapni az előző fejezetbeli megfontolásokat kell alkalmazni a séma megadásakor, vagyis bizonyos összefüggéseket implicit módon kell kiértékelni és fel kell használni a donor differenciálás stabilizáló hatását. Az igy kapott véges differencia séma stabilitását és pontosságát numerikus teszteléssel bizonyitották.

A térbeli diszkretizációhoz itt is a gyakorlatban jól bevált elemi térfogatokra osztást használjuk, ahol az áramlás skaláris jellemzőit /nyomás,energia, gőztartalom/ a térfogatok középpontjában, a vektor mennyiségeket pedig /sebességek/ a határoló lapjukon adjuk meg. A kapott egydimenziós térbeli felosztást a 14. ábra szemlélteti.



14. ábra

A véges differenciaegyenleteket ugy kapjuk, hogy a tömeg és energia egyenleteket integráljuk az x változóra vonatkozóan a

folytonos vonallal jelzett térfogatok fölött, az impulzus egyenleteket pedig a szaggatott vonallal jelzettek fölött. Ezzel olyan differenciálegyenleteket kapunk első lépésben, melyekben az elemi térfogatokon vett átlagértékek szerepelnek.

A hely szerinti integrálással kapott egyenletek a következők: /6.6/-/6.10/-ből

$$V\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \left[\alpha_v \varrho_v \bar{v}_v A\right]_{x_j}^{x_{j+1}} + \left[\alpha_\ell \varrho_\ell \bar{v}_\ell A\right]_{x_j}^{x_{j+1}} = 0 \qquad /6.11/$$

$$V\varrho\frac{\partial X}{\partial t} + (1-X)\left[\alpha_v \varrho_v \bar{v}_v A\right]_{x_j}^{x_{j+1}} - X\left[\alpha_\ell \varrho_\ell \bar{v}_\ell A\right]_{x_j}^{x_{j+1}} = V\Gamma \qquad /6.12/$$

$$\frac{V}{A}\left(\alpha_v \varrho_v \frac{\partial \bar{v}_v}{\partial t} + \alpha_\ell \varrho_\ell \frac{\partial \bar{v}_\ell}{\partial t}\right) + \frac{1}{2}\alpha_v \varrho_v \left[v_v^2\right]_{x_K}^{x_L} + \frac{1}{2}\alpha_\ell \varrho_\ell \left[v_\ell^2\right]_{x_K}^{x_L} =$$

$$= -\left[P\right]_{x_K}^{x_L} - F(x_L - x_K) - \Gamma(\bar{v}_v - \bar{v}_\ell)(x_L - x_K) \qquad /6.13/$$

$$\frac{V}{A}\left(\frac{\partial \bar{v}_v}{\partial t} - \frac{\partial \bar{v}_\ell}{\partial t}\right) + \frac{1}{2}\left[v_v^2\right]_{x_K}^{x_L} - \frac{1}{2}\left[v_\ell^2\right]_{x_K}^{x_L} = -\left(\frac{1}{\varrho_v} - \frac{1}{\varrho_\ell}\right)\left[P\right]_{x_K}^{x_L} - (F' - \Gamma')(x_L - x_K) \qquad /6.14/$$

$$V\frac{\partial}{\partial t}(\varrho u) + \left[\alpha_v \varrho_v \bar{v}_v u_v A\right]_{x_j}^{x_{j+1}} + \left[\alpha_\ell \varrho_\ell \bar{v}_\ell u_\ell A\right]_{x_j}^{x_{j+1}} =$$

$$= -P\left[\alpha_v \varrho_v A + \alpha_\ell \varrho_\ell A\right]_{x_j}^{x_{j+1}} + Q\cdot V + DISS\cdot V \qquad /6.15/$$

A fenti egyenletekben a szögletes zárójelben levő kifejezések értékét a jelzett pontokban kell meghatározni, a többi kifejezés értéke a megfelelő elemi térfogaton vett átlag.

A számitási sebesség növelése érdekében a /6.11/-/6.15/ egyenletek numerikus közelitésekor az alábbi szempontokat vesszük figyelembe:

- Csak ott alkalmazunk implicit közelitést, ahol ezt a numerikus stabilitás és a hang terjedési sebességéből származó időlépés korlát megszüntetése megköveteli, valamint a kis időkonstanst tartalmazó jelenségekben. Ezek: a tömeg és az enegia egyenletekben a sebességek, az impulzus egyenletekben a nyomásgradiens, valamint a fázisok közti tömeg- és impulzusátadási tagok.
- Ugy adjuk meg az uj időpontbeli értékeket, hogy az implicit kifejezések lineárisak legyenek rájuk nézve. Ahol ez nem oldható meg, ott a régi időpont körüli Taylor-sorba fejtéssel és a magasabb rendü tagok elhanyagolásával linearizálunk. Igy nincs szükség a nemlineáris egyenletrendszer időigényes iterativ megoldására.

A véges differenciaegyenletek a következők:

$$V_L(\rho_L^{n+1} - \rho_L^n) + \left\{\left[\dot{\alpha}_v^n \dot{\rho}_v^n (w_v)_{j+1}^{n+1} + \dot{\alpha}_\ell^n \dot{\rho}_\ell^n (w_\ell)_{j+1}^{n+1}\right] A_{j+1} - \right.$$

$$\left. - \left[\dot{\alpha}_v^n \dot{\rho}_v^n (w_v)_j^{n+1} + \dot{\alpha}_\ell^n \dot{\rho}_\ell^n (w_\ell)_j^{n+1}\right] A_j \right\} \Delta t = 0 \qquad /6.16/$$

$$V_L \rho_L^n (X_L^{n+1} - X_L^n) + (1 - X_L^n)\left[\dot{\alpha}_v^n \dot{\rho}_v^n (w_v)_{j+1}^{n+1} A_{j+1} - \dot{\alpha}_v^n \dot{\rho}_v^n (w_v)_j^{n+1} A_j\right]\Delta t -$$

$$- X_L^n\left[\dot{\alpha}_\ell^n \dot{\rho}_\ell^n (w_\ell)_{j+1}^{n+1} A_{j+1} - \dot{\alpha}_\ell^n \dot{\rho}_\ell^n (w_\ell)_j^{n+1} A_j\right]\Delta t = V \Gamma_j^{n+1} \qquad /6.17/$$

$$(\alpha_v \rho_v)_j^n (w_v^{n+1} - w_v^n)_j \Delta x_j + (\alpha_\ell \rho_\ell)_j^n (w_\ell^{n+1} - w_\ell^n)_j \Delta x_j +$$

$$+ \tfrac{1}{2}(\alpha_v \rho_v)_j^n \left[(w_v^2)_L^n - (w_v^2)_K^n\right]\Delta t + \tfrac{1}{2}(\alpha_\ell \rho_\ell)_j^n \left[(w_\ell^2)_L^n - (w_\ell^2)_K^n\right]\Delta t =$$

$$= -(P_L - P_K)^{n+1}\Delta t - \left[F_j^n + \Gamma_j^n (w_v - w_\ell)_j^n\right]\Delta x_j \Delta t \qquad /6.18/$$

$$\left[(w_v^{n+1} - w_v^n) - (w_\ell^{n+1} - w_\ell^n)\right]_j \Delta x_j + \tfrac{1}{2}\left[(w_v^2)_L^n - (w_v^2)_K^n\right]\Delta t - \tfrac{1}{2}\left[(w_\ell^2)_L^n - (w_\ell^2)_K^n\right]\Delta t =$$

$$= -\left(\frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_\ell}\right)_j^n (P_L - P_K)^{n+1}\Delta t - (F' - \Gamma')_j^n \Delta x_j \Delta t \qquad /6.19/$$

$$V_L\left[(\rho u)_L^{n+1} - (\rho u)_L^n\right] + \left[\dot{\alpha}_v^n \dot{\rho}_v^n \dot{u}_v^n (w_v)_{j+1}^{n+1} + \dot{\alpha}_\ell^n \dot{\rho}_\ell^n \dot{u}_\ell^n (w_\ell)_{j+1}^{n+1}\right] A_{j+1}\Delta t -$$

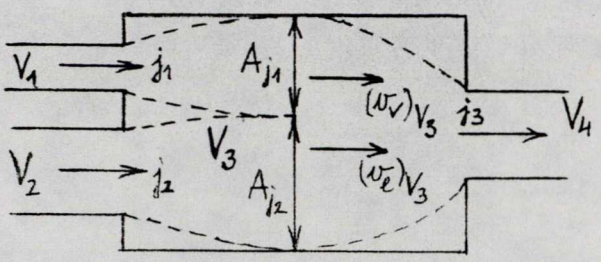
$$- \left[\dot{\alpha}_v^n \dot{\rho}_v^n \dot{u}_v^n (w_v)_j^{n+1} + \dot{\alpha}_\ell^n \dot{\rho}_\ell^n \dot{u}_\ell^n (w_\ell)_j^{n+1}\right] A_j \Delta t = (Q_L^n + DISS_L^n) V_L \Delta t -$$

$$- P_L^n\left[(\alpha_v^n \rho_v^n + \alpha_\ell^n \rho_\ell^n)_{j+1} A_{j+1} - (\alpha_v^n \rho_v^n + \alpha_\ell^n \rho_\ell^n)_j A_j\right]\Delta t \qquad /6.20/$$

A /6.16/,/6.17/ és /6.20/ egyenletekben pontokkal jelzett változók elemi térfogatokon vett átlag skalár mennyiségek, melyek értékét az alábbi donor összefüggések adják meg a megfelelő sebességek ismeretében:

$$\dot{u} = \tfrac{1}{2}(u_K + u_L) + \tfrac{1}{2}\frac{v}{|v|}(u_K - u_L), \text{ ha } v \neq 0 \quad \text{és} \quad \dot{u} = \tfrac{1}{2}(u_K + u_L), \text{ ha } v = 0$$

Ahol nincsenek megadva a donor összefüggések, ott a változók értékét a szomszédos térfogatok közti lineáris interpolációval határozzuk meg.
A /6.18/ és /6.19/ impulzus egyenletekben a térfogatokon vett átlagmennyiségeket a térfogatok határán a szomszédos értékekből lineáris interpolációval kapjuk. Szükség van a térfogatokon vett átlagsebességekre is. Konstans keresztmetszetü elemi térfogatok esetén erre a célra megfelel a ki- és bemeneti sebesség számtani közepe. Az olyan térfogatoknál azonban, amelyek elágazásnál helyezkednek el és igy több kimenetük vagy bemenetük is van, vagy gyorsan változik a keresztmetszetük a számtani közép nem felel meg a fizikai folyamatoknak. Ilyen térfogatot szemléltet a 15. ábra.



15. ábra

Ilyenkor sulyozott bemeneti és kimeneti sebességeket definiálunk, s ezek számtani közepe lesz a térfogatokhoz tartozó átlagsebesség. Ha K a megfelelő térfogat indexe, akkor a definició a következő:

$$(v_i)_K^n = \frac{1}{2}\left[\frac{\sum_j (\alpha_i \rho_i v_i)_j^n A_j}{\sum_j (\alpha_i \rho_i)_j^n A_j} \cdot \frac{\sum_j A_j}{A_K}\right]_{\text{bemenetek}} +$$

$$+ \frac{1}{2}\left[\frac{\sum_j (\alpha_i \rho_i v_i)_j^n A_j}{\sum_j (\alpha_i \rho_i)_j^n A_j} \cdot \frac{\sum_j A_j}{A_K}\right]_{\text{kimenetek}} \qquad /6.21/$$

, ahol i=v,l

A /6.16/-/6.20/ alapegyenletekben 6 változó fordul elő az uj időpontban felvett értékekkel: P, ρ, X, U /a ρU szorzatban/, v_v és v_l. A zártsághoz szükséges 6. összefüggést az állapotegyenlet adja, mely a ρ sürüséget fejezi ki P, X és U függvényeként. Ez az összefüggés nem lineáris, ezért a régi időpont körül Taylor-sorba fejtjük:

$$\rho^{n+1} = \rho^n + \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{X,U}^n (P^{n+1} - P^n) + \left(\frac{\partial \rho}{\partial X}\right)_{P,U}^n (X^{n+1} - X^n) + \left(\frac{\partial \rho}{\partial U}\right)_{P,X}^n (U^{n+1} - U^n)$$

Az egyenletekben U a ρU szorzat formájában szerepel, ezért a sorfejtésben U helyébe ρU-t helyettesitünk. A láncszabály alkalmazásával a következő összefüggést kapjuk:

$$\rho^{n+1} = \rho^n + \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{X,\rho U}^n (P^{n+1} - P^n) + \left(\frac{\partial \rho}{\partial X}\right)_{P,\rho U}^n (X^{n+1} - X^n) + \left[\frac{\partial \rho}{\partial (\rho U)}\right]_{P,X}^n \left[(\rho U)^{n+1} - (\rho U)^n\right] \qquad /6.22/$$

ahol a P, X és ρU-ra vonatkozó deriváltak felirhatók a P, X és U-ra vonatkozó deriváltakkal:

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{X,\rho U}^n = \rho^n \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{X,U}^n \cdot B^n, \qquad \text{ahol} \quad B^n = \frac{1}{\rho^n + U^n \left(\frac{\partial \rho}{\partial U}\right)_{P,X}^n} \qquad /6.23/$$

$$\left(\frac{\partial \varrho}{\partial x}\right)^n_{P,\varrho U} = \varrho^n \left(\frac{\partial \varrho}{\partial x}\right)^n_{P,U} \cdot B^n \qquad /6.24/$$

$$\left[\frac{\partial \varrho}{\partial(\varrho U)}\right]^n_{P,X} = \left(\frac{\partial \varrho}{\partial U}\right)^n_{P,X} \cdot B^n \qquad /6.25/$$

Ezek felhasználásával /6.22/ segitségével az n+1 időpontban vett ϱ sürüség eliminálható a /6.16/-/6.20/ egyenletekből. Igy egy 5 egyenletből álló rendszert kapunk minden térfogatra a következő 5 változóra: P, X, (ϱU), v_v és v_ℓ. Ez az 5N×5N-es lineáris algebrai egyenletrendszer az implicit kifejezések speciális megválasztása miatt redukálható egy olyan N×N-es rendszerré, amely már csak a különböző térfogatokon vett nyomásokat tartalmazza.

Az impulzus egyenletek csak a sebességeket és a nyomásokat tartalmazzák. Ezekből kifejezzük a sebességeket az egymás melletti térfogatokhoz tartozó nyomásokkal, majd ezzel az összefüggéssel eliminálju k a sebességeket a tömeg és energia egyenletekből. Ezzel térfogatonként 3 egyenletet kapunk, melyek a nyomásokon kivül csak az adott térfogathoz tartozó U-t és X-et tartalmazzák. Ezért ezek egyetlen lineáris egyenletre redukálhatók, amely már csak a nyomásokra vonatkozik.
Ezt az eljárást minden elemi térfogatra megismételve egy N×N-es egyenletrendszerhez jutunk. Ennek megoldása után a többi változó értékét visszahelyettesitéssel kapjuk.

Az alapegyenletekben csak a ϱU szorzat szerepel, viszont az állapotegyenletekhez szükség van külön a ϱ és külön az U ismeretére. A nyomások ismeretében a ϱ sürüség meghatározható a tömegmegmaradási egyenletből, /6.16/, s az $U^{n+1} = \frac{(\varrho U)^{n+1}}{\varrho^{n+1}}$ összefüggésből kapjuk U uj értékét. Ezután az állapotegyenletből határozzuk meg a keverék $\bar{\varrho}$ sürüségét a már ismert P, X és U változók segitségével.

Az igy kétféle módon számitott sürüség értéke általában nem egyezik meg. A kettő különbsége a /6.21/ Taylor-sorfejtés képlethibájának mértéke. Ez a hiba érzékeny a /6.22/-/6.24/ sürüség deriváltak változására. Kétfázisu rendszerben a sürüség deriváltak nagymértékben szakadásosak lehetnek az egy- és kétfázisu tartományok találkozásánál. Emiatt az ilyen pontokban nagy lesz a numerikus séma képlethibája hacsak nincsenek alkalmas ugrásfeltételek megadva, vagy az időlépés nem elég kicsi ott, ahol az átmenet történik.

A kétféleképpen számolt sürüség közti különbség felhasználható automatikus lépés ellenörzés bevezetésére. A hiba mértékét az alábbi összefüggés adja meg:

$$\varepsilon = \left(\left| \frac{\bar{\varrho}_i - \varrho_i}{\varrho_i} \right| \right)_{max} \qquad i=1,2,3,\ldots,N$$

Az időlépést ugy választjuk meg, hogy ez a hiba előre megadott korlátok közé essék. Ha egy Δt időlépéssel előre haladva a kapott hiba átlépi ezt a korlátot, akkor kisebb időlépéssel megismételjük a számitást. Ha ez kisebb, mint az alsó korlát, akkor a következő lépésben növeljük Δt-t.
Emellett még az alábbi korlátok befolyásolják az időlépés nagyságát:

1. Δt-nek ki kell elégitenie a Courant-féle feltételt, azaz

$$\Delta t < \left[\frac{\Delta x_i}{(|w_{v_i}|, |w_{z_i}|)_{max}} \right]_{min} \qquad i=1,2,3,\ldots,N$$

2. Ha gyors fázisátalakuláskor a folyadék jellemzőinek extrapolálása negativ vagy nulla sürüséghez vezet, akkor csökkenteni kell az időlépést.

3. Ha P, X vagy U értéke olyan termodinamikai állapotnak felel meg, amely a folyadék jellemzőit számitó szubrutinok értelmezési tartományán kivül esik, akkor is meg kell ismételni az utolsó lépést csökkentett Δt-vel.

A peremfeltételek megadása van még hátra. A szükséges peremfeltételek száma és megengedhető kombinációja általában fizikai megfontolásokból és a karakterisztikák vizsgálatából állapitható meg. Mivel ez a differenciálegyenlet-rendszer nem teljesen hiperbolikus, a karakterisztikák nem alkalmazhatók közvetlenül. Szükség van az egyfázisu modellel végzett tapasztalatokra. A lehetséges peremfeltétel-kombinációk meghatározása a 2.4.4. pontban ismertetett modellhez hasonlóan történik.

Zárt végen itt is az a feltétel, hogy mindkét fázis sebessége nulla. Ilyen peremen nincs szükség az impulzus egyenletekre.

Ha nyomás-feltétel adott, akkor beáramlás esetén meg kell adni a térfogathoz tartozó változókat, hogy X és U értéke ismert legyen a belépésnél. Kiáramlás esetén elég csak a nyomást megadni. Az impulzus egyenletekben szükség van az adott térfogat mindkét szomszédján definiált sebességekre a /6.21/ összefüggésekhez. Ezért ki- és beáramlás esetén egyaránt szükség van a peremen kivüli információkra is. Ez a numerikus feltétel lehet az, hogy a sebességek deriváltja a peremen kivül nulla /azaz konstansok a sebességek/.

Sebesség-feltétel esetén ha a sebességek nem nullák, akkor beáramlásra definiálni kell a folyadék jellemzőit. Ha P, X és U

mellett mindkét sebesség adott, akkor a feladat tuldefiniált, mivel csak 5 egyenlet van. Öt feltételt csak szuperszonikus áramlás esetén lehet magadni. Általában azonban az áramlás sebessége ennél kisebb. Egy sebességet elég megadni, a másik az impulzus összefüggésekből számitható.
A numerikus sémához azonban további peremfeltételek is szükségesek a /6.21/ összefüggés kiszámitásához. Ezért lehetséges mindkét sebességet megadni az állapotjelzők mellett, s igy is elfogadható eredményeket számolni.

2.5. A kétfázisu áramlás számitásának alkalmazási köre

Az atomerőmüvek növekvő száma miatt egyre több ember él müködő erőmüvek közelében, s ez a tendencia fokozódni fog.

Az erőmü müködtetésének legfőbb kritériuma a biztonságos üzemelés, azaz akármilyen baleset, vagy üzemzavar történik, az a lakosságot ne érintse. A lakosságot csak akkor éri rádioaktiv sugárzás, ha az erőmü rádioaktiv fütőanyagot tartalmazó zónája megolvad, s ezt a sérülésen, törésen át távozó, forrásban levő hütőközeg magával viszi.

A reaktorbiztonsági kérdéseknek ezen tulmenően gazdasági hatása is van: baleset esetén a reaktor évekre, vagy örökre leáll, ami gazdaságilag hatalmas veszteség.

Mindezek miatt a reaktor üzemelésével és feltételezett meghibásodásával kapcsolatos jelenségeket, folyamatokat ismerni kell. A baleset alatt és után lejátszódó folyamatokat a költség és biztonsági kihatások miatt nem lehet kisérlettel szimulálni, csak számitásokat lehet végezni. Laboratóriumi méréseket csak egy-egy jelenség megismerésére lehet végezni. A gyakorlatban előforduló baleseti állapotban sok jelenség és folyamat egyidejü kölcsönhatását kell vizsgálni, s ezt csak számitással lehet elvégezni.

A reaktorbaleseteket leiró korszerü számitógépi programrendszer ma a technikában használt egyik legbonyolultabb program, mert rengeteg hatást kell egyidejüleg követni számitásokkal.

Csőtöréses baleset esetén pl. a hütőközeg forrásba jön, s egyszerre kell a folyadék és a gőz áramlását számitani, miközben hőátadási és hidrodinamikai hatások sokaságát kell szimulálni.

Nemcsak baleseteknél, hanem a tervezésnél és a müködési engedély megadásához is el kell végezni az ilyen számitásokat, megvizsgálva feltételezett üzemzavari állapotok következményeit. A tervezésnél azért fontos a baleseti folyamatok ismerete, mert ma már a szigoru biztonsági követelmények miatt az erőmü beruházási költségének kb. 30%-át forditják biztonsági berendezésekre. A folyamatok pontos ismerete lehetővé teszi a tulbiztositás elkerülését.

Magyarországon az üzemzavari szimulációs számitásokat a KFKI Termohidraulikai Osztályán végzik, ahol ez a dolgozat készült. A számitások céljára felhasznált programok elsősorban az amerikai eredetü RELAP kódcsalád tagjai. Az Idaho National Laboratoryban sok kutató évtizedes munkájával kifejlesztett programcsalád első publikált tagja [33]. Ezt több javitott változat követte. A ma nemzetközileg legelterjedtebben alkalmazott változat a RELAP4/MOD6 [34] 1978 óta áll rendelkezésre. A RELAP4 kódok áramlási modellje egydimenziós, homogén és egyensulyt feltételez. Az ezekkel folytatott hazai számitások áttekintése [35]-ben található.

A nem-egyensulyi hatások figyelembe vételének igénye inditotta el a RELAP5 programcsalád fejlesztését. Ennek 1981 óta már két változata is ismert /a MODØ és a MOD1 [32]/, de a fejlesztése és tesztelése még nem fejeződött be. Hazai számitásokat ezekkel még nem végeztek, egyelőre csak az Egyesült Államokban és Ny-Európában állnak rendelkezésre.

A programokban felhasznált fizikai összefüggések és matematikai módszerek ismerete nélkül az eredmények megbizhatóságát nem lehet értékelni. Hibás vagy gyanus, fizikailag nem magyarázható eredmények esetén a matematikus feladata, hogy a hibát megkeresse.

A megoldás pontossága függ a reaktort modellező séma finomságától, a rácsosztás nagyságától, az alkalmazott időlépéstől, a programban felhasznált fizikai modelltől. A megfelelő input adatok kiválasztása nem egyszerü feladat.

Mivel a programok leirásában az input adatok viszonylag tág határok közt mozognak, ezért szükség van egy olyan optimális bemenő adatrendszer megválasztására, melyre az eredmény konvergens és stabil, de a futási idő nem tul nagy és a memória igény sem tul sok. Ezeknek az ellentmondó követelményeknek a kielégitéséhez ismerni kell a programba foglalt matematikai modell viselkedését.

A müszaki haladás mind nagyobb követelményeit ujabb és ujabb biztonsági kódok hivatottak kielégiteni. Ezekben ujra és ujra meg kell vizsgálni a különböző fizikai jelenségek szimulálására felhasznált egyenletrendszert, annak matematikai sajátságaiból adódó problémákat, mint ez pl. a régebbi programváltozatokban használt

homogén modellről a két-közeg modell használatára való áttéréskor történik.

Ma az intézetünk birtokában levő programokban különféle matematikai megoldási módszerek vannak beépitve. A megoldást, az input adathalmaz összeállitását, a futás közbeni módositást ezek figyelembe vételével kell elvégezni.

Jelölések

x, y, z	független változók /hely/
t	független változó /idő/
$\varrho, \varrho_v, \varrho_\ell$	sürüség
v, v_v, v_ℓ	sebesség
e, e_v, e_ℓ	entalpia /teljes energia/
T, T_v, T_ℓ	hőmérséklet
α	térfogattört
P	nyomás
G	tömegfluxus
V	fajtérfogat
X	gőztartalom
U	belső energia
g_x, g_z	gravitációs erő a megfelelő irányban
$\mathcal{F}, F_{wv}, F_{w\ell}$	falsurlódás
q	hőforrás
Γ	tömegátadás /fázisátalakulásnál/
A	áramlási keresztmetszet
K, F_i	fázisok közti impulzusátadás
$Q_{wv}, Q_{w\ell}$	fal hőátadása
Q_i	fázisok közti energiaátadás
c	hangsebesség

Indexek:

v	gőz
l	folyadék
s	telitési állapot

A/ függelék

A lokális képlethibák főtagjainak meghatározásához először Taylor sorba fejtjük az u függvényt a közelitések középpontjai körül, s ennek segitségével irjuk fel a felhasznált rácspontokban felvett függvényértékeket.
Az (x_j, t_n) pont körüli sorfejtésből az $u_j^n \equiv u(x_j, t_n)$ jelöléssel:

$$u_j^{n+1} \equiv u(x_j, t_n+\Delta t) = u(x_j, t_n) + \Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!}\Delta t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{1}{3!}\Delta t^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + \dots$$

$$u_{j-1}^{n} \equiv u(x_j - \Delta x, t_n) = u(x_j, t_n) - \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{2!}\Delta x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{3!}\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \dots$$

$$u_{j+1}^{n} \equiv u(x_j + \Delta x, t_n) = u(x_j, t_n) + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{2!}\Delta x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{3!}\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \dots$$

$$u_j^{n-1} \equiv u(x_j, t_n - \Delta t) = u(x_j, t_n) - \Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!}\Delta t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{1}{3!}\Delta t^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + \dots$$

$$u_{j-1}^{n+1} \equiv u(x_j - \Delta x, t_n + \Delta t) = u(x_j, t_n) - \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!}\left(\Delta x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) - \Delta x \Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} +$$

$$+ \frac{1}{2!}\left(\Delta t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right) + \frac{1}{3!}\left(-\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + 3\Delta x^2 \Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial x^2 \partial t} - 3\Delta x \Delta t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t^2} + \Delta t^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right) + \dots$$

Az $(x_{j+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}})$ pont körüli sorfejtésből:

$$u_{j+1}^{n+1} \equiv u\left(x_j + \frac{\Delta x}{2}, t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2}\right) = u\left(x_{j+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}}\right) + \frac{\Delta x}{2}\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!}\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} +$$

$$+ \frac{1}{2!}\left[2\frac{\Delta x}{2}\cdot\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right] + \frac{1}{3!}\left[\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + 3\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} + 3\frac{\Delta x}{2}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2} + \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right] + \dots$$

$$u_j^{n+1} \equiv u\left(x_{j+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta x}{2}, t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2}\right) = u\left(x_{j+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}}\right) - \frac{\Delta x}{2}\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!}\left[\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 2\frac{\Delta x}{2}\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}\right] +$$

$$+ \frac{1}{2!}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{1}{3!}\left[\left(-\frac{\Delta x}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + 3\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} - 3\frac{\Delta x}{2}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2} + \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right] + \dots$$

$$u_{j+1}^{n} \equiv u\left(x_j + \frac{\Delta x}{2}, t_{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2}\right) = u\left(x_{j+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}}\right) + \frac{\Delta x}{2}\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!}\left[\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 2\frac{\Delta x}{2}\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}\right] +$$

$$+ \frac{1}{2!}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{1}{3!}\left[\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} - 3\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} + 3\frac{\Delta x}{2}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2} - \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right] + \dots$$

$$u_j^{n} \equiv u\left(x_{j+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta x}{2}, t_{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2}\right) = u\left(x_{j+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}}\right) - \frac{\Delta x}{2}\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!}\left[\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2\frac{\Delta x}{2}\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}\right] +$$

$$+ \frac{1}{2!}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{1}{3!}\left[-\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} - 3\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} - 3\frac{\Delta x}{2}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2} - \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right] + \dots$$

Az $\left(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}\right)$ pont körüli sorfjtésből:

$$u_j^{n+1} \equiv u\left(x_j, t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2}\right) = u\left(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}\right) + \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial u}{\partial t} + \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + \dots$$

$$u_j^{n} \equiv u\left(x_j, t_{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2}\right) = u\left(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}\right) - \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial u}{\partial t} + \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + \dots$$

$$u_{j+1}^{n+1} \equiv u\left(x_j + \Delta x, t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2}\right) = u\left(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}\right) + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!}\left[\Delta x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2\Delta x \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}\right] +$$
$$+ \frac{1}{2!}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{1}{3!}\left[\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + 3\Delta x^2 \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} + 3\Delta x \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2} + \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right] + \dots$$

$$u_{j+1}^{n} \equiv u\left(x_j + \Delta x, t_{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2}\right) = u\left(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}\right) + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!}\left(\Delta x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \Delta x \Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}\right) +$$
$$+ \frac{1}{2!}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{1}{3!}\left[\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} - 3\Delta x^2 \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} + 3\Delta x \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2} - \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right] + \dots$$

$$u_{j-1}^{n} \equiv u\left(x_j - \Delta x, t_{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2}\right) = u\left(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}\right) - \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!}\left(\Delta x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Delta x \Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}\right) +$$
$$+ \frac{1}{2!}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{1}{3!}\left[-\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} - 3\Delta x^2 \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} - 3\Delta x \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2} - \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right] + \dots$$

$$u_{j-1}^{n+1} \equiv u\left(x_j - \Delta x, t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2}\right) = u\left(x_j, t_{n+\frac{1}{2}}\right) - \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!}\left(\Delta x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \Delta x \Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}\right) +$$
$$+ \frac{1}{2!}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{1}{3!}\left[-\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + 3\Delta x^2 \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} - 3\Delta x \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2} + \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right] + \dots$$

Ezek felhasználásával a lokális képlethibákat a következő módon irjuk fel az egyes sémákra:

Az A séma képlethibája az (x_j, t_n) pont körül felirt sorfejtésből:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!}\Delta t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \dots$$

$$+ a\left(u_j^n - u_{j-1}^n\right) = a\,\Delta t\left(\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{2}\Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) + \dots$$

Összeadva:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a\,\frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = \underbrace{\left(\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x}\right)}_{f_j^n} + \underline{\frac{1}{2}\left(\Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - a\,\Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)} + \dots$$

A B séma képlethibája az (x_j, t_n) pont körüli sorfejtésből:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2}\Delta t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \dots$$

$$\frac{1}{2} r a \left(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n\right) = \frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x} a \left(2\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{3}\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right) + \dots$$

Összeadva:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} a \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = \underbrace{\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x}}_{f_j^n} + \underline{\frac{1}{2}\left(\Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{1}{3} a \Delta x^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)} + \dots$$

A C sémára ugyanigy:

$$u_j^{n+1} - u_j^{n-1} = 2\Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{3}\Delta t^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + \dots$$

$$r a \left(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n\right) = \frac{\Delta t}{\Delta x} a \left(2\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{3}\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right) + \dots$$

Összeadva:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{\Delta t} + a \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 2\underbrace{\left(\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x}\right)}_{f_j^n} + \underline{\frac{1}{3}\left(\Delta t^2 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + a\Delta x^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)} + \dots$$

A D sémára hasonlóan:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2}\Delta t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{1}{3!}\Delta t^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + \dots$$

$$\frac{1}{2} r a \left(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n\right) = \frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x} a \left(2\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + 2\frac{1}{3!}\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right) + \dots$$

$$-\frac{1}{2} r^2 a^2 \left(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n\right) = -\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2 a^2 \, 2 \cdot \frac{1}{2!}\Delta x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dots$$

Összeadva:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} - a^2 \frac{\Delta t}{2} \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2} = \underbrace{\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x}}_{f_j^n} +$$

$$+ \frac{1}{2}\Delta t \underbrace{\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)}_{(f_t)_j^n - a(f_x)_j^n} + \underline{\frac{1}{6}\left(\Delta t^2 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + a\Delta x^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)} + \dots$$

Az E sémára:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2}\Delta t^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \cdots$$

$$ra\left(u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}\right) = \frac{\Delta t}{\Delta x} a\left(\Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} - \Delta t \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{1}{2}\Delta x^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Delta x \Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}\right) + \cdots$$

Összeadva:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a\,\frac{u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{\Delta x} = \underbrace{\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x}}_{f_j^n} + \underline{\frac{1}{2}\left(\Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - a\Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2a\Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t}\right)} + \cdots$$

Az F sémához az $(x_{j+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}})$ pont körüli sorfejtésekből:

$$u_{j+1}^{n+1} + u_j^{n+1} = 2u_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + \Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!}2\left[\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right] + \frac{1}{3!}\left[6\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} + 2\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right] + \cdots$$

$$ra\left(u_{j+1}^{n+1} - u_j^{n+1}\right) = \frac{\Delta t}{\Delta x} a\left\{\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + 2\frac{\Delta x}{2}\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + \frac{1}{3!}\left[2\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + 6\frac{\Delta x}{2}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2}\right]\right\} + \cdots$$

$$u_{j+1}^n + u_j^n = 2u_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - \Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2!}2\left[\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right] + \frac{1}{3!}\left[-6\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} - 2\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right] + \cdots$$

$$ra\left(u_{j+1}^n - u_j^n\right) = \frac{\Delta t}{\Delta x} a\left\{\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} - 2\frac{\Delta x}{2}\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + \frac{1}{3!}\left[2\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + 6\frac{\Delta x}{2}\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2}\right]\right\} + \cdots$$

Összeadva:

$$\frac{\left(u_{j+1}^{n+1} + u_j^{n+1}\right) - \left(u_{j+1}^n + u_j^n\right)}{\Delta t} + a\,\frac{u_{j+1}^{n+1} - u_j^{n+1} + u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x} = 2\left(\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} +$$

$$+ \underline{\frac{1}{12}\left(3\Delta x^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} + \Delta t^2 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + a\Delta x^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + 3a\Delta t^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2}\right)} + \cdots$$

A G sémához az $(x_j, t_{n+\frac{1}{2}})$ pont körüli sorfejtésekből:

$$u_j^{n+1} - u_j^n = \Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + 2\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^3 \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + \cdots$$

$$\frac{1}{4}ra\left(u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}\right) = \frac{1}{4}\frac{\Delta t}{\Delta x} a\left\{2\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} + \Delta x \Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + \frac{1}{3!}\left[2\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + 6\Delta x\left(\frac{\Delta t}{2}\right)\frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2}\right]\right\} +$$

$$\frac{1}{4}ra\left(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n\right) = \frac{1}{4}\frac{\Delta t}{\Delta x} a\left\{2\Delta x \frac{\partial u}{\partial x} - \Delta x \Delta t \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + \frac{1}{3!}\left[2\Delta x^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + 6\Delta x\left(\frac{\Delta t}{2}\right)\frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2}\right]\right\} + \cdots$$

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a\,\frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1} + u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{4\Delta x} = \underbrace{\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x}}_{f_j^{n+\frac{1}{2}}} + \underline{\frac{1}{6}a\Delta x^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}} +$$

$$+ \underline{\frac{1}{8}\Delta t^2\left(a\frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2} + 2\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right)} + \cdots$$

Irodalomjegyzék

[1] G. E. Forsythe, W. R. Wasow: Finite Difference Methods for Partial Difference Equations, Wiley, New York /1960/

[2] P. D, Lax, R. D. Richtmyer: Survey of the Stability of Linear Finite Difference Equations, Comm. Pure Appl. Math., 9 /1956/, 267-293

[3] G. G. O'Brien, M. A. Hyman, S. Kaplan: A Study of the Numerical Solution of Partial Differencial Equations, Journal of Mathematics and Physics, 29/1950/, 223-240

[4] P. D. Lax: Hyperbolic Sysytems of Conservation Laws II, Comm. Pure Appl. Math., 10/1957/, 537-566

[5] J. Von Neumann, R. D. Richtmyer: A Method for the Numerical Calculation of Hydrodynamic Shocks, Journal of Applied Physics, 21/1950/, 232-237

[6] G. D. Smith: Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods Oxford University Press, New York /1978/

[7] P. D. Lax: Differential Equations, Difference Equations and Matrix Theory, Comm. Pure Appl. Math., 11/1958/, 187

[8] C. W. Hirt: Heuristic Stability Theory for Finite-Difference Equations, Journal of Computational Physics, 2/1968/, 339-355

[9] R. Courant, K. O. Friedrichs, H. Lewy: Über die Partiellen Differenzengleichungen der Mathematischen Physik, Math. Ann., 100/1928/, 32-74

[10] J. Gladwell, R. Wait: Survey of Numerical Methods for Partial Differential Equations, Oxford Univ. Press, New York /1979/

[11] A. K. Runchal: Comparative Criteria for Finite-Difference Formulations for Problems of Fluid Flow, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 11/1977/, 1667-1679

[12] B. Gustafsson, H. O. Kreiss, A. Sundström: Stability Theory of Difference Approximation for Mixed Initial Boundary-Value Problems, Mathematics of Computation, 26/1972/, 649-686

[13] J. Gary: On Boundary Conditions for Hyperbolic Difference Schemes, Journal Comp. Phys., 26/1978/, 339-351

[14] D. M. Sloan: On Boundary Conditions for the Numerical Solution of Hyperbolic Differential Equations, International Journal for Numerical Meth. in Eng., 15/1980/, 1113-1127

[15] J. Oliger: Fourth Order Difference Methods for the Initial Boundary-Value Problem for Hyperbolic Equations, Mathematics of Computation, 28/1974/, 15-25

[16] J. Gary: The Method of Lines Applied to a Simple Hyperbolic Equation, Journal of Comp. Phys., 22/1976/, 131-149

[17] J. H. Wilkinson: The Algebraic Eigenvalue Problem, Oxford University Press, New York /1965/

[18] J. D. Ramshaw, J. A. Trapp: Characteristics, Stability and Short-Wavelength Phenomena in Two-Phase Flow Equation Systems, Nuclear Science and Engineering, 66/1978/, 93-102

[19] Egeli György: Csőtöréseknél fellépő tranziens jelenségek kétfázisu áramlás esetén, KFKI-1979-51

[20] W. J. Turner: A Stable Finite Difference Scheme for Transient Flow in a Boiling Channel, Energia Nucleare, 19/1972/, 317-324

[21] D. R. Liles, Wm. H. Reed: A Semi-Implicit Method for Two-Phase Fluid Dynamics, Journal of Comp. Phys., 26/1978/,320-407

[22] F. H. Harlow, A. A. Amsden: A Numerical Fluid Dynamics Calculation Method for All Flow Speed, Journal of Comp. Phys., 8/1971/, 197-213

[23] F. H. Harlow, A. A. Amsden: Numerical Calculation of Multiphase Fluid Flow, Journal of Comp. Phys., 17/1975/, 19-52

[24] F. H. Harlow, A. A. Amsden: Flow of Interpenetrating Material Phases, Journal of Comp. Phys., 18/1975/, 440-464

[25] B. Wendroff: Two-Fluid Modells - A Critical Survey Los Alamos Scientific Lab., LA-UR-79-291

[26] H. B. Stewart: Stability of Two-Phase Flow Calculation Using Two-Fluid Models, Journal of Comp. Phys., 33/1979/, 259-270

[27] H. B. Stewart: Continuous Dependence on Data for Interpenetrating Flows, Brookhaven National Lab., BNL-AMD-883

[28] J. R. Travis, F. H. Harlow, A. A. Amsden: Numerical Calculation of Two-Phase Flows, Nuclear Sci. and Eng., 61/1976/, 1-10

[29] R. W. Lyczkowski, D. Gidaspow, C. W. Solbrig, E. D. Hughes: Characteristics and Stability Analysis of Transient One-Dimensional Two-Phase Flow Equations and Their Finite Difference Approximations, Nuclear Science and Engineering, 66/1978/, 378-396

[30] R. T. Lahey, Jr., L. Y. Cheng, D. A. Drew, J. E. Flaherty: The Effect of Virtual Mass on the Numerical Stability of Accelerating Two-Phase Flows, Rensselaer Pol. Inst., Troy, New York /1981/, publikálás alatt

[31] W. H. Reed, H. B. Stewart: THERMIT - A Computer Program for Three-Dimensional Thermal-Hydraulic Analysis of Light Water Reactor Cores

[32] V. H. Ransom et al., RELAP5/MOD1 Code Manual, NUREG/CR-1826, EGG-2070, Idaho National Engineering Lab.,/1980/

[33] K. V. Moore, W. H. Retting: RELAP4 - a Computer program for Transient Thermal-Hydraulic Analysis.
ANCR-1127. Dec. 1973, March 1975.

[34] S. R. Fischer et al.: RELAP4/MOD6 - a Computer Program for Transient Thermal-Hydraulic Analysis for Nuclear Reactors and Related Systems.
User's Manual CDAP-TR003, January 1978.

[35] Perneczky László és tsai: A RELAP4 különböző változatainak alkalmazása a Paksi Atomerőműre, KFKI - 1983 - 19