UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
DEPARTMAN ZA MATEMATIKU I INFORMATIKU

Davor Kumozec

Numeričko rešenje transportne jednačine i LMNC modela pomoću metode karakteristika

Master rad

2018, Novi Sad

Sadržaj

POPIS SLIKA

POPIS TABELA

Predgovor

Matematika je za mene oduvek bila interesantan predmet jer vidim njene primene na najneočekivanijim mestima. Način na koji se prirodna pojava može opisati jednačinom u jednom redu privukla me je da izučavam i nadograđujem svoje znanje u oblasti parcijalnih diferencijalnih jednačina. Vidim ovu oblast kao most koji povezuje matematiku i druge prirodne nauke, fiziku, hemiju, biologiju... Zbog svega toga drago mi je što sam imao priliku da kombinujem teorijsko znanje sa primenom u numeričkom izračunavanju fizičkih veličina u nuklearnom reaktoru.

Prva glava rada se bazira na transportnoj jednačini i metodi karakteristika kao alata za numeričko rešavanje ove jednačine. Objašnjena je numerička šema u jednoj dimenziji, izvedena na ekvidistantnoj podeli prostornog intervala i tako da bude u saglasnoti sa principom maksimuma. Zatim je šema proširena na neekevidistantnu mrežu. Nakon toga predstavljeno je neprekidno i diskretno stabilno stanje i primeri koji potkrepljuju teorijske rezultate. Poslednji deo prve glave odnosi se na proširenje numeričke šeme sa jedne na dve dimenzije.

Druga glava odnosi se na LMNC model i njegovo numeričko rešenje putem metode karakteristika u jednoj dimenziji. Dat je uvod u sistem, objašnjenje fizičkih varijabli i zakona. Nakon toga predstavljena je numerička šema, prvo za sistem bez termalne difuzije, a zatim i sa difuzijom, data su neprekidna i diskretna stabilna stanja. Glava se završava primerima koji pokazuju validnost numeričke šeme i stabilnih stanja.

Na kraju rada dati su neki od kodova koji su korišćeni za numerička izračunavanja.

Želim da napomenem da je ovaj rad napisan u Parizu pod mentorstvom profesora Yohana Penela i Bérénice Grec, ali zbog lokalnih pravila oni ne mogu biti potpisani kao mentori.

Posebnu zahvalnost dugujem profesorima Yohanu Penelu i Bérénice Grec na prenesenom znanju i pomoći tokom boravka u Parizu, kao i na korisnim savetima i mentorstvu prilikom pisanja ovog rada.

Želim da se zahvalim i svim asistentima i profesorima Prirodno-matematičkog fakulteta u Novom Sadu koji su mi tokom studija mnogo pomogli da na poseban način zavolim i shvatim matematiku.
Želim da se zahvalim i nastavnici Miri Mijić na ideji i podršci da upišem studije matematike.
Želim da se zahvalim i metoru prof. Marku Nedeljkovu na podrsici i motivaciji.
Na kraju želim da se zahvalim svojoj porodici, devojci Ani, drugaricama Bojani i Martini na bezuslovnoj podršci.

Glava 1

Numeričko rešenje transportne jednačine

U ovoj glavi će biti predstavljena transportna jednačina i metod karakteristika kao alat za numeričko rešavanje ove parcijalne diferencijalne jednačine u jednoj i dve dimenzije.

1.1 Uvod

Metod karakteristika je veoma koristan kao alat pomoću kojeg se može pokazati postojanje rešenja linerane transportne jednačine. Međutim, ovde će biti korišćen kao metod za numeričko rešavanje, koji daje jako rešenje problema.

$Motivacija$: Posmatrajmo jednačinu oblika $\frac{\partial y}{\partial t} + u\frac{\partial y}{\partial x} = f$, gde je $y = y(t, x)$. Neka je x funkcija koja zavisi od vremena t, tj. $x = x(t)$. Sada koristimo pravilo za izvod složene funkcije: $\frac{dy(t,x(t))}{dt} = \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial y}{\partial x}\frac{dx}{dt}$ i biramo $\frac{dy(t,x(t))}{dt} = f$. Iz ovoga sledi da je $\frac{dx}{dt} = u$. Tako dolazimo do sistema dve obične diferencijalne jednačine, koje čine pozadinu metode karakteristika.

U ovoj glavi ćemo se baviti sledećim početnim i graničnim problemom na ograničenom i zatvorenom domenu $\Omega \in R^d$, gde je $d \in \{1, 2, 3\}$:

$$\begin{cases} \partial_t h(t, \mathbf{x}) + \mathbf{u}(t, \mathbf{x})\nabla h(t, \mathbf{x}) = f(t, \mathbf{x}), \\ h(0, \mathbf{x}) = h^0(\mathbf{x}), \\ h(t, \mathbf{0}) = h_e(t), \end{cases} \tag{1.1}$$

gde je $\mathbf{u}$ dovoljno glatko polje brzine, f ograničena funkcija, h^0 i h_e početni i granični uslovi, respektivno.

Kao što smo videli u motivaciji, metod se sastoji u rešavanju dve obične diferencijalne jednačine umesto parcijalne difrencijalne jednacine (1.1). Prva jednačina definiše tok χ po kojem se čestica kreće:

$$\begin{cases} \frac{d\chi}{d\tau}(\tau; s, \mathbf{x}) = \mathbf{u}(\tau; \chi(\tau; s, \mathbf{x})), \\ \chi(s; s, \mathbf{x}) = \mathbf{x}, \end{cases} \tag{1.2}$$

dok druga pokazuje ponašanje funkcije h po karakterističnoj krivoj χ:

$$\begin{cases} \frac{dH}{d\tau} = f(\tau, \chi(\tau; s, \mathbf{x})), \\ H(s) = h(s, \mathbf{x}), \end{cases} \tag{1.3}$$

gde je $H(\tau) = h(\tau, \chi(\tau; t, \mathbf{x}))$.
U suštini mi znamo kako se funkcija h ponaša duž karakterističnog toka χ:

$$h(t, \mathbf{x}) = h^0(\chi(0; t, \mathbf{x})) + \int_0^t f(\tau, \chi(\tau; t, \mathbf{x}))d\tau.$$

$\chi(\tau; s, \mathbf{x})$ odgovara poziciji čestice u vremenu τ koja je pod uticajem brzine $\mathbf{u}$ došla iz pozicije $\mathbf{x}$ gde je bila u trenutku s.
Na osnovu Pikard-Lindelef teoreme znamo da rešenje jednačine (1.2) postoji i da je jedinstveno pod pretpostavkom da je $\mathbf{u}$ dovoljno glatka funkcija (i Lipšicove klase). Šta više znamo da je karakteristični tok χ neprekidan u odnosu na $(s, \mathbf{x})$ i da zadovoljava osobinu polugrupe $\chi(t_1; t_2, \chi(t_2; t_3, \mathbf{x})) = \chi(t_1; t_3, \mathbf{x})$, koja je bitna za numeričku šemu.

1.2 Numerička šema u jednoj dimenziji

U ovom poglavlju će biti izvedena numerička šema za rešavanje transportne jednačine u jednoj dimenziji, prvo za ekvidistantnu podelu prostornog intervala, a zatim i za neekvidistantnu podelu. Jednačina u jednodimenzionalnom slučaju izgleda ovako:

$$\begin{cases} \partial_t h(t, x) + u(t, x)\partial_x h(t, x) = f(t, x), \\ h(0, x) = h^0(x), \\ h(t, 0) = h_e(t), \end{cases} \tag{1.4}$$

na domenu $[0, L]$, vremenskom intervalu $[0, T]$, sa dovoljno puta glatkom funkcijom $u > 0$, funkcijom f i početnim i graničnim uslovima h^0 i h_e, respektivno, koje su nam poznate. Dakle, tražimo rešenje funkcije h.
Prvo uvodimo oznake koje ćemo koriti prilikom izvođenja numeričke šeme. Neka su $N_t \in Z_+$ i $N_x \in Z_+$ brojevi čvornih tačaka u prostoru i vremenu, respektivno. Neka je zatim Δx dužina koraka određena sa:

$$\Delta x = \frac{L}{N_x - 1},$$

i neka je Δt^n dužina koraka u vremenu. Pravimo ekvidistantnu mrežu:

$$t^0 = 0, \quad t^{n+1} = t^n + \Delta t^n,$$

$$x_i = (i-1)\Delta x,$$

gde je $n \in \{0, ..., N_t\}$ i $i \in \{1, ..., N_x\}$, dakle nepoznate su vrednosti:

$$h_i^n \approx h(t^n, x_i).$$

Metod karakteristika kao numerička šema se sastoji iz tri koraka:

1. Izračunavanje podnožja karakteristične krive $\xi_i^n := \chi(t^n; t^{n+1}, x_i)$ koja kreće iz tačke (t^{n+1}, x_i);
2. Aproksimacija vrednosti funkcije $h(t^n, \xi_i^n)$
3. Ažuriranje vrednosti funkcije h_i^{n+1}

Teoretski, u prvom koraku imamo grešku koja nastaje diskretizacijom u vremenu, dok u drugom koraku imamo grešku kao posledicu diskretizacije u odnosu na prostornu promenljivu. To nam za posledicu daje bezuslovno stabilnu šemu u kojoj Δt i Δx biramo nezavisno jedno od drugog. Uprkos tome, mi ćemo koristiti CFL uslov koji govori o odnosu između Δt i Δx, a o kojem će više biti reči u delu koji se odnosi konvergenciju šeme.

1.2.1 Izračunavanje podnožja karakteristične krive

Zanima nas $\xi_i^n = \chi(t^n; t^{n+1}, x_i)$. Želimo da krenemo iz tačke (t^{n+1}, x_i) i pronađemo poziciju čestice u vremenu t^n (Slika 1.1). Kako nam vrednost karakterističnog toka u t^{n+1} nije poznata, koristimo Tejlorov razvoj u tački (t^n, x_i):

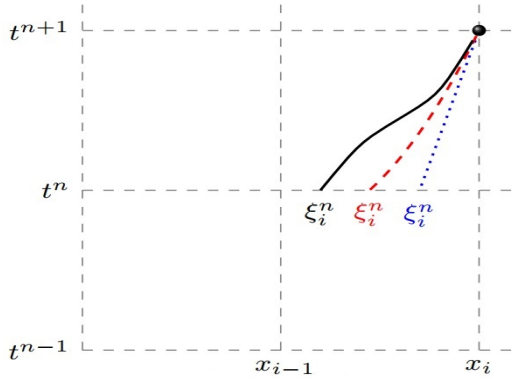
$$\xi_i^n = \chi(t^n; t^n, x_i) + \Delta t^n \frac{\partial \chi}{\partial s}(t^n; t^n, x_i) + \frac{(\Delta t^n)^2}{2} \frac{\partial^2 \chi}{\partial s^2}(t^n; t^n, x_i) + O((\Delta t^n)^3). \quad (1.5)$$

Sada navodimo izraze za izvode karakterističnog toka koje ćemo koristiti u izvođenju eksplicitnog izraza za podnožje karakteristike:

$$\partial_\tau \chi(\tau; s, x) = u(\tau, \chi(\tau; s, x)), \quad (1.6)$$

$$\partial_s \chi(\tau; s, x) = -\partial_x \chi(\tau; s, x) u(s, x), \quad (1.7)$$

$$\partial_x \chi(\tau; s, x) = exp(\int_s^\tau \partial_x u(\omega, \chi(\omega; s, x)) d\omega). \quad (1.8)$$



Slika 1.1: Aproksimacija prvog (plava) i drugog (crvena) reda podnožja karakteristične krive

Dokazi ovih izraza se nalaze u [3], [4] i [5].
Sada računamo izraz uz Δt^n:
Iz (1.7) imamo $\frac{\partial \chi}{\partial s}(t^n; t^n, x_i) = -\partial_x \chi(t^n; t^n, x_i) u(t^n, x_i)$, a iz (1.8) dobijamo $\partial_x \chi(t^n; t^n, x_i) = exp(\int_{t^n}^{t^n} \partial_x u(\omega, \chi(\omega; t^n, x_i)) d\omega) = 1$. Sledi $\frac{\partial \chi}{\partial s}(t^n; t^n, x_i) = -u(t^n, x_i)$.
Izraz uz $\frac{(\Delta t^n)^2}{2}$ se dobija:
Prvo računamo $\partial_{ss}\chi(t^n; t^n, x_i)$ tako što diferenciramo (1.7) po s:
$\partial_{ss}\chi(t^n; t^n, x_i) = -\partial_t u(t^n, x_i) - \partial_{\tau s}\chi(t^n; t^n, x_i)$, zatim diferencirajuci (1.6) po s dobijamo:
$\partial_{\tau s}\chi(t^n; t^n, x_i) = \partial_x u(t^n, \chi(t^n; t^n, x_i)) \partial_s \chi(t^n; t^n, x_i) = -\partial_x u(t^n, x_i) u(t^n, x_i)$.
Koristeći gore dobijene izraze možemo koristiti aproksimaciju prvog reda:

$$\xi_i^n = x_i - u(t^n, x_i), \tag{1.9}$$

ili aproksimaciju drugog reda, ukoliko su nam poznati izvodi funkcije u po x i t:

$$\xi_i^n = x_i - u(t^n, x_i)\Delta t^n + \frac{(\Delta t^n)^2}{2}(u(t^n, x_i)\partial_x u(t^n, x_i) - \partial_t u(t^n, x_i)), \tag{1.10}$$

ili ako nam izvodi nisu poznati, koristimo centralni diferencni količnik koji je reda tačnosti 2:

$$\xi_i^n = x_i - \frac{\Delta t^n}{2}(3u_i^n - u_i^{n-1}) + \frac{(\Delta t^n)^2}{2}(u_i^n \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x}), \tag{1.11}$$

gde je $u(t^n, x_i) = u_i^n$.

1.2.2 Aproksimacija $h(t^n, \xi_i^n)$

Kako su nama poznate samo vrednosti funkcije h u čvornim tačkama, a ξ_i^n ne mora nužno da pogodi čvor, prirodan način da izračunamo vrednost $h(t^n, \xi_i^n)$ je da koristimo

interpolaciju koja može biti linearna ili putem interpolacionog polinoma višeg reda, zbog veće tačnosti.
Prvo tražimo indeks j takav da $\xi_i^n \in [x_j, x_{j+1})$:

$$j = 1 + \lfloor \frac{\xi_i^n}{\Delta x} \rfloor, \tag{1.12}$$

ovo važi samo u ekvidistalnom slučaju. Ekvidistantan slučaj znači da je interval $[0, L]$ podeljen na jednake delove.
Sada uvodimo:

$$\theta_i^n = \frac{x_{j+1} - \xi_i^n}{\Delta x} \in (0, 1].$$

Interpolaciju ćemo koristiti tako da zadovoljimo princip maximuma (u slučaju kada je $f = 0$, jer inače ne možemo garantovati da je zadovoljen zbog trećeg koraka u numeričkoj šemi):

$$\forall t \in [0, T] h(t, \cdot) \in [min(h), max(h)]. \tag{1.13}$$

Kod linearne interpolacije princip maximuma je trivijalno zadovoljen i izraz izgleda ovako:

$$\hat{h}_i^n = \theta_i^n h_j^n + (1 - \theta_i^n) h_{j+1}^n. \tag{1.14}$$

Kada pričamo o kvadratnoj aproksimaciji imamo dva skupa tačaka koje možemo koristiti za interpolaciju: $\{x_{j-1}, x_j, x_{j+1}\}$ i $\{x_j, x_{j+1}, x_{j+2}\}$. Kada primenimo Langranžov oblik interpolacionog polinoma na ova dva skupa dobijamo:

$$H_l(\theta) = \frac{\theta^2}{2}(h_{j-1}^n - 2h_j^n + h_{j+1}^n) - \frac{\theta}{2}(h_{j-1}^n - 4h_j^n + 3h_{j+1}^n) + h_{j+1}^n \tag{1.15}$$

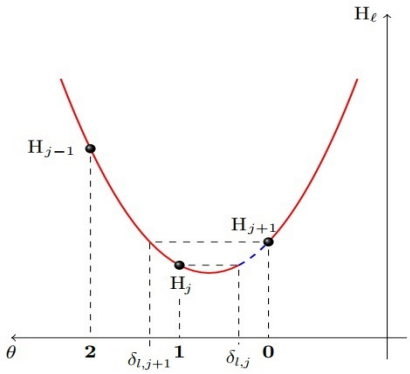
za prvi i

$$H_r(\theta) = \frac{\theta^2}{2}(h_{j+2}^n - 2h_{j+1}^n + h_j^n) - \frac{\theta}{2}(h_{j+2}^n - h_j^n) + h_{j+1}^n \tag{1.16}$$

za drugi skup. Postavlja se pitanje kako da izaberemo odgovarajući polinom. Želimo da zadovoljimo lokalni princip maximuma, tj.:

$$H_l(\theta_i^n), H_r(\theta_i^n) \in [min(h_j^n, h_{j+1}^n), max(h_j^n, h_{j+1}^n)]. \tag{1.17}$$

Može se desiti da su obe vrednosti u skladu sa principom maximuma, može se desiti da odgovara jedna ili nijedna vrednost. Strategija je sledeća: Ukoliko obe aproksimacije zadovoljavaju princip maximuma pravimo konveksnu kombinaciju ta dva polinoma i dobijamo polinom trećeg stepena, ukoliko je samo jedna vrednost dopustiva koristimo tu vrednost, a ukoliko nijedna ne zadovoljava princip maximuma vraćamo se na linearnu aproksimaciju.
Kada želimo da proverimo da li aproksimirana vrednost zadovoljava princip maximuma, dovoljno je da vidimo da li na intervalu $[0, 1]$ interpolacioni polinom dostiže ekstremnu



Slika 1.2: Dopustivost interpolacionog polinoma H_l

vrednost. Međutim, ovaj uslov je previše jak, jer se može desiti da polinom dostigne ekstrem ali da je naša vrednost ipak u dopustivom intervalu (Slika 1.2). Zbog toga uvodimo $\delta_{k,p}$ kao rešenja jednačina

$$H_k(\delta_{k,p}) = h_p^n, \quad k \in \{l, r\}, p \in \{j, j+1\}.$$

Trivijalna rešenja su $\theta = 1$ i $\theta = 0$ za $p = j$ i $p = j+1$, respektivno. Ostala rešenja su:

$$\delta_{l,j} = \frac{2(h_{j+1}^n - h_j^n)}{h_{j-1}^n - 2h_j^n + h_{j+1}^n}$$

$$\delta_{l,j+1} = \frac{h_{j-1}^n - 4h_j^n + 3h_{j+1}^n}{h_{j-1}^n - 2h_j^n + h_{j+1}^n}$$

$$\delta_{r,j} = \frac{2(h_{j+1}^n - h_j^n)}{h_j^n - 2h_{j+1}^n + h_{j+2}^n}$$

$$\delta_{r,j+1} = \frac{h_{j+2}^n - h_j^n}{h_j^n - 2h_{j+1}^n + h_{j+2}^n}.$$

Sada imamo:
$(1.17) \iff \theta_i^n \leq \delta_{k,j} \vee \theta_i^n \geq \delta_{k,j+1} \iff \Delta_{k,j}(\theta_i^n) \geq 0,$
gde je $\Delta_{k,j}(\theta) = (\theta - \delta_{k,j})(\theta - \delta_{k,j+1})$. U slučaju da nam je potreban i Lagranžov interpolacioni polinom trećeg stepena pomoću tačaka $\{x_{j-1}, x_j, x_{j+1}, x_{j+2}\}$ on izgleda ovako:
$H(\theta_i^n) = -\frac{h_{j+2}^n - 3h_{j+1}^n + 3h_j^n - h_{j-1}^n}{6}(\theta_i^n)^3 + \frac{h_{j+2}^n - 2h_{j+1}^n + h_j^n}{2}(\theta_i^n)^2 - \frac{2h_{j+2}^n + 3h_{j+1}^n - 6h_j^n + h_{j-1}^n}{6}\theta_i^n + h_{j+1}^n = \frac{1+\theta_i^n}{3}H_l(\theta_i^n) + (1 - \frac{1+\theta_i^n}{3})H_r(\theta_i^n).$

Sada ceo postupak možemo da napišemo kao:

$$\hat{h}_i^n = \vartheta_i^n h_j^+ + (1 - \vartheta_i^n) h_{j+1}^- \tag{1.18}$$

gde je

$$\vartheta_i^n = \begin{cases} \theta_i^n, & \text{ako} \quad \Delta_{r,j}(\theta_i^n) < 0 \quad \wedge \quad \Delta_{l,j}(\theta_i^n) < 0, \\ 0, & \text{ako} \quad \Delta_{r,j}(\theta_i^n) \geq 0 \quad \wedge \quad \Delta_{l,j}(\theta_i^n) < 0, \\ 1, & \text{ako} \quad \Delta_{r,j}(\theta_i^n) < 0 \quad \wedge \quad \Delta_{l,j}(\theta_i^n) \geq 0, \\ \frac{1+\theta_i^n}{3}, & \text{ako} \quad \Delta_{r,j}(\theta_i^n) \geq 0 \quad \wedge \quad \Delta_{l,j}(\theta_i^n) \geq 0, \end{cases}$$

$$h_j^+ = \begin{cases} h_j^n, & \text{ako} \quad \Delta_{r,j}(\theta_i^n) < 0 \quad \wedge \quad \Delta_{l,j}(\theta_i^n) < 0, \\ H_l(\theta_i^n), & \text{inače} \end{cases}$$

$$h_{j+1}^- = \begin{cases} h_{j+1}^n, & \text{ako} \quad \Delta_{r,j}(\theta_i^n) < 0 \quad \wedge \quad \Delta_{l,j}(\theta_i^n) < 0, \\ H_r(\theta_i^n), & \text{inače.} \end{cases}$$

1.2.3 Ažuriranje vrednosti h_i^{n+1}

Preostalo nam je da izračunamo vrednosti funkcije h u vremenu $n+1$. Karakteristična kriva koja kreće iz (t^{n+1}, x_i) u opštem slučaju može da dostigne granicu $x = 0$ (Slika 1.3). Tada moramo da aproksimiramo vreme $t^* = t^*(t^{n+1}, x_i)$ tako da je $\chi(t^*; t^{n+1}, x_i) = 0$. Koristimo Tejlorov razvoj u (t^n, x_i):

$$\chi(t^*; t^{n+1}, x_i) = \chi(t^n; t^n, x_i) + (t^* - t^n)\partial_t \chi(t^n; t^n, x_i) + \Delta t^n \partial_s \chi(t^n; t^n, x_i) + O(\Delta t^n),$$

pa aproksimaciju tačke t^* dobijamo rešavanjem sledeće jednačine(opet koristimo izraze (1.6), (1.7) i (1.8)):

$$x_i + (t^* - t^{n+1})u(t^n, x_i) = 0,$$

sledi

$$t^* = t^{n+1} - \frac{x_i}{u_i^n}. \tag{1.19}$$

Sada možemo da razdvojimo slučajeve kada karakteristična kriva ne dostigne granicu $x = 0$ i kada je dostigne. U prvom slučaju integralimo izraz (1.3) pa imamo:

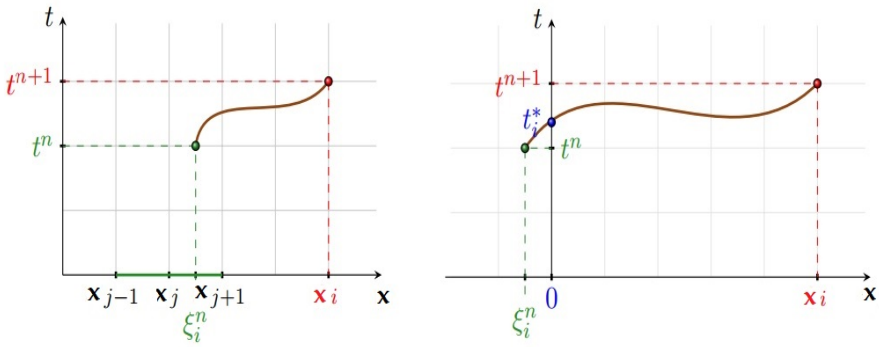
$$h(t, x) - h(\chi(t - \Delta t; t, x)) = \int_{t-\Delta t}^{t} f(\tau, \chi(\tau; t, x))d\tau. \tag{1.20}$$

Za potrebe numeričke šeme (ne moramo uvek da znamo primitivnu funkciju funkcije f) možemo koristiti kvadratnu formulu za numeričku integraciju:

$$h_i^{n+1} = \hat{h}_i^n + \Delta t^n f(t^{n+1}, x_i) \tag{1.21}$$

koja je reda tačnosti 1, ili trapeznu formulu koja je reda tačnosti 2:

$$h_i^{n+1} = \hat{h}_i^n + \Delta t^n \frac{f(t^n, \xi_i^n) + f(t^{n+1}, x_i)}{2}. \tag{1.22}$$



Slika 1.3: Karakteristična kriva ne dostiže granicu $x = 0$ (levo) i kada dostigne granicu $x = 0$ (desno)

U drugom slučaju imamo:

$$h(t,x) - h_e(t^*(t,x)) = \int_{t^*(t,x)}^{t} f(\tau, \chi(\tau; t, x))d\tau. \tag{1.23}$$

Integrale aproksimiramo kvadratnom i trapeznom formulom. Dobijamo:

$$h_i^{n+1} = h_e(t^*) + (t^{n+1} - t^*)f(t^{n+1}, x_i) \tag{1.24}$$

za kvadratnu i

$$h_i^{n+1} = h_e(t^*) + (t^{n+1} - t^*)\frac{f(t^*, 0) + f(t^{n+1}, x_i)}{2} \tag{1.25}$$

za trapeznu.
Kada za dobijanje numeričkog rešenja koristimo formule (1.9), (1.14), (1.21) i (1.24), šemu zovemo MOC1 (od engleskog-Method of characteristics), a kada koristimo formule (1.10) ili (1.11), (1.18), (1.22) i (1.25), šemu zovemo MOC2.

1.2.4 Neekvidistantna podela prostornog intervala

Sada ćemo se baviti izvođenjem šeme sa neekvidistantnom podelom prostornog 1D intervala, koja je mnogo prirodnija i ima više smisla kada se primenjuje u većim dimenzijama. Kao i u ekvidistantnom slučaju, metod karakteristika ćemo primeniti tako da zadovoljimo princip maksimuma. Posmatraćemo opet početni granični problem (1.4). Šema se opet sastoji iz tri koraka:

1. Izračunavanje podnožja karakteristike. Ovaj korak je isti kao u ekvidistantnom slučaju. Možemo koristiti aproksimaciju prvog, formula (1.9), ili drugog reda, formula (1.11) za ξ_i^n;

2. Izračunavanje $h(t^n, \xi_i^n)$, gde znamo samo numerička rešenja u čvornim tačkama x_i u vremenu t^n jer ξ_i^n u opštem slučaju nije čvorna tačka i

3. Ažuriranje vrednosti $h(t^{n+1}, x_i)$, koja je takođe ista kao u ekvidistantnom slučaju i možemo koristiti formule (1.21) ili (1.24) za aproksimaciju prvog reda, ili za aproksimaciju drugog reda (1.22) ili (1.25).

Zbog toga što se prvi i treći korak ne razlikuju od ekvidistantnog slučaja, bavićemo se samo drugim korakom. Uvešćemo sledeće oznake:
Neka je $t \in [0, T]$ i N_t broj čvornih tačaka u vremenu. Dalje, neka je $\Delta t = \frac{T}{N_t - 1}$, $t^0 = 0$, $t^{n+1} = t^n + \Delta t$, $n = 0, ..., N_t - 1$. X-osa će biti podeljena na sledeći način: vektor čvornih tačaka x$= (x_0, ..., x_{N_x})$, gde je N_x broj čvornih tačaka, $x_0 = 0$ i $x_{N_t} = L$. Sada dužina mrežnog koraka zavisi od i, $i = 0, ..., N_x - 1$, $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$. Očigledno važi: $\sum_{i=1}^{N_x} \Delta x_i = L$.
Prvo što treba da uradimo jeste da pronađemo indeks j takav da važi $\xi_i^n \in [x_j, x_{j+1}]$. Zatim definišemo θ_i^n:

$$\theta_i^n = \frac{x_{j+1} - \xi_i^n}{\Delta x_j} \in (0, 1].$$

Ponovo želimo da zadovoljimo princip maksimuma (1.13), kada je $f = 0$, jer inače ne znamo da li je zadovoljen posle trećeg koraka numeričke šeme. U slučaju linearne aproksimacije princip maksimuma je trivijalno zadovoljen:

$$\hat{h}_i^n = \theta_i^n h_j^n + (1 - \theta_i^n) h_{j+1}^n.$$

Ukoliko želimo interpolacioni polinom drugog stepena, imamo dve mogućnosti za tačke koje koristimo za interpolaciju: (x_{j-1}, x_j, x_{j+1}) ili (x_j, x_{j+1}, x_{j+2}). Polinomi izgledaju ovako:

$$H_l(\theta) = (h_j^n - h_{j+1}^n + \frac{h_{j-1}^n - h_{j+1}^n + (h_{j+1}^n - h_j^n) L_j^2}{L_j(L_j - 1)})\theta^2 - \frac{h_{j-1}^n - h_{j+1}^n + (h_{j+1}^n - h_j^n) L_j^2}{L_j(L_j - 1)}\theta + h_{j+1}^n,$$

gde je $L_j = 1 + \frac{\Delta x_{j-1}}{\Delta x_j}$ i

$$H_r(\theta) = (h_j^n - h_{j+1}^n - \frac{h_{j+2}^n - h_{j+1}^n - R_j^2(h_j^n - h_{j+1}^n)}{R_j(1 - R_j)})\theta^2 + \frac{h_{j+2}^n - h_{j+1}^n - R_j^2(h_j^n - h_{j+1}^n)}{R_j(1 - R_j)}\theta + h_{j+1}^n,$$

gde je $R_j = -\frac{\Delta x_{j+1}}{\Delta x_j}$.
U zavisnoti od toga koji od ova dva polinoma zadovoljava uslov (1.17), biramo onaj koji je dopustiv, ako nijedan od njih nije dopustiv koristimo linearnu aproksimaciju, a ako su oba dopustiva koristimo polinom trećeg reda. Dakle, strategija je ista kao u ekvidistantnom slučaju. Opet uvodimo jednačine:

$$H_k(\delta_{k,p}) = h_p^n, \quad k \in \{l, r\}, p \in \{j, j+1\}.$$

Trivijalna rešenja su za $p = j$: $\theta = 1$ i za $p = j+1$: $\theta = 0$, a ostala rešenja su:

$$\delta_{l,j} = \frac{(h_j^n - h_{j+1}^n)L_j(L_j - 1)}{h_{j+1}^n - h_{j-1}^n + L_j(h_j^n - h_{j+1}^n)},$$

$$\delta_{l,j+1} = \frac{h_{j-1}^n - h_{j+1}^n + L_j^2(h_{j+1}^n - h_j^n)}{h_{j-1}^n - h_{j+1}^n + L_j(h_{j+1}^n - h_j^n)},$$

$$\delta_{r,j} = \frac{(h_j^n - h_{j+1}^n)R_j(R_j - 1)}{h_{j+1}^n - h_{j+2}^n + R_j(h_j^n - h_{j+1}^n)},$$

$$\delta_{r,j+1} = \frac{h_{j+2}^n - h_{j+1}^n + R_j^2(h_{j+1}^n - h_j^n)}{h_{j+2}^n - h_{j+1}^n + R_j(h_{j+1}^n - h_j^n)}.$$

Sada nam uslov za dopustivost izgleda ovako:
$H_k(\theta_i^n)$ je dopustivo akko $\theta_i^n \leq \delta_{k,j}$ ili $\theta_i^n \geq \delta_{k,j+1}$, $k \in \{l, r\}$.
Kada nam je potreban i polinom trećeg reda on izgleda ovako:

$$H_3(\theta_i^n) = \alpha_4(\theta_i^n)^3 + \alpha_3(\theta_i^n)^2 + \alpha_2\theta_i^n + \alpha_1,$$

gde je:
$\alpha_1 = h_{j+1}^n$,
$\alpha_2 = \frac{-h_{j+2}^n(L_j-1)L_j^2+(h_j^nL_j^2(L_j-R_j)+h_{j-1}^n(R_j-1))R_j^2+h_{j+1}^n(-(R_j-1)R_j^2-L_j^3(R_j^2-1)+L_j^2(R_j^3-1))}{(L_j-1)(R_j-1)(L_j-R_j)L_jR_j}$,
$\alpha_3 = \frac{h_{j+2}^nL_j(L_j^2-1)+R_j(h_{j-1}^n-h_j^nL_j^3-h_{j-1}^nR_j^2+h_j^nL_jR_j^2)+h_{j+1}^n(L_j+L_j^3(R_j-1)-L_jR_j^3+R_j(R_j^2-1))}{(L_j-1)(R_j-1)(L_j-R_j)L_jR_j}$,
$\alpha_4 = \frac{-h_{j+2}^nL_j(L_j-1)-h_{j+1}^n(L_j-1)(R_j-1)(L_j-R_j)+R_j(h_j^nL_j(L_j-R_j)+h_{j-1}^n(R_j-1))}{(L_j-1)(R_j-1)(L_j-R_j)L_jR_j}$.
Možemo primetiti da je H_3 konveksna kombinacija polinoma H_l i H_r:

$$\frac{\theta_i^n - R_j}{L_j - R_j}H_l(\theta_i^n) + (1 - \frac{\theta_i^n - R_j}{L_j - R_j})H_r(\theta_i^n) = H_3(\theta_i^n),$$

jer imamo $0 < \frac{\theta_i^n - R_j}{L_j - R_j} \leq \frac{\Delta x_j + \Delta x_{j+1}}{\Delta x_{j-1} + \Delta x_j + \Delta x_{j+1}} < 1$.
Primetimo da kada su $L_j = 2$ i $R_j = -1$ imamo iste izraze kao u ekvidistantnom slučaju (tada je $\Delta x_{j-1} = \Delta x_j = \Delta x_{j+1}$). U nastavku rada u jednoj dimenziji koristićemo samo ekvidistantnu podelu.

1.3 Neprekidno i diskretno stabilno stanje

Kao što smo već rekli, metod karakteristika kao numerička šema je bezuslovno stabilna što znači da Δx i Δt biramo nezavisno jedno od drugog. Ipak, da bismo

dostigli dobar nivo tačnosti Δt treba da bude dovoljno malo. Koristićemo klasičan hiperbolični uslov (CFL-Courant–Friedrichs–Lewy):

$$\Delta t^n = \frac{C\Delta x}{max_i|u_i^n|}, \tag{1.26}$$

za bilo koje $C > 0$. Ovaj uslov nam omogućava da lakše nađemo indeks j iz formule (1.12), jer za $C = 1$ i pozitivne brzine $j = i - 1$, za svako i. U našim proračunima, kada koristimo ovaj uslov, uvek će biti $C = 1$.
Sada nas zanima rešenje kada $t \to \infty$. Neprekidno stabilno stanje je tačno rešenje kada $t \to \infty$, dok je diskretno stabilno stanje numeričko rešenje nakon beskonačno mnogo iteracija.

Teorema 1.1 (Neprekidno stabilno stanje). *Neka f, u i h_e ne zavise od vremena t i neka je $u(x) \neq 0$ za sve x iz domena $[0, L]$. Tada je stabilno rešenje početnog graničnog problema (1.4)*

$$h^\infty(x) = h_e + \int_0^x \frac{f(y)}{u(y)} dy. \tag{1.27}$$

Dokaz. Pod pretpostavkama ove teroeme u (1.4) imamo $\partial_t h = 0$. Sledi, $u(x)\partial_x h^\infty = f(x)$, sa uslovom $h^\infty(0) = h_e$. Integraljenjem prethodnog izraza dobijamo (1.27). □

Teorema 1.2 (Diskretno stabilno stanje). *MOC1 šema pod pretpostavkama kao u Teoremi 1.1 je u skladu sa sledećim diskretnim stabilnim stanjem:*

$$\widetilde{h}_i = h_e + \sum_{j=2}^{i} \frac{f(x_i)}{u_j} \Delta x. \tag{1.28}$$

Dokaz. Ako pretpostavimo $h_i^{n+1} = h_i^n$ i ako znamo da je $\theta_i = \frac{\Delta t u_i}{\Delta x}$, imamo:
$h_i^{n+1} = \theta_i^n h_{i-1}^n + (1 - \theta_i^n) h_i^n + f(x_i)\Delta t^n$,
pošto ne zavisimo od vremena, zanemarimo eksponente n:
$\widetilde{h}_i = \frac{\Delta t u_i}{\Delta x}\widetilde{h}_{i-1} + (1 - \frac{\Delta t u_i}{\Delta x})\widetilde{h}_i + f(x_i)\Delta t$,
$\frac{\Delta t u_i}{\Delta x}\widetilde{h}_i = \frac{\Delta t u_i}{\Delta x}\widetilde{h}_{i-1} + f(x_i)\Delta t$,
$\widetilde{h}_i = \widetilde{h}_{i-1} + \frac{f(x_i)\Delta x}{u_i}$.
Dalje imamo $\widetilde{h}_{i-1} = \widetilde{h}_{i-2} + \frac{f(x_{i-1})\Delta x}{u_{i-1}}$, kada zamenimo sve do $i = 1$ dobijamo izraz $\widetilde{h}_i = h_e + \sum_{j=2}^{i} \frac{f(x_i)}{u_j}\Delta x$. □

Možemo primetiti da suma u formuli (1.28) aproksimira integral u izrazu (1.27), što znači da kada pustimo $\Delta x \to 0$ diskretno stabilno stanje teži neprekidnom stabilnom stanju. S druge strane, kada fiksiramo Δx i pustimo $t \to \infty$ dobijamo da relativna greška između diskretnog stabilnog stanja i MOC1 šeme teži u nulu.

Napomenimo i da se može formalno pokazati konvergencija MOC1 šeme ka diskretnom stabilnom stanju kada t teži u nulu, ali mi ćemo u radu to pokazati numerički u narednom poglavlju gde ce biti predstavljeni konkretni primeri i napravljena poređenja među šemama kao i poređenja sa stabilnim stanjima.

1.4 Numerički primeri u jednoj dimenziji

Implementacija, kao i sva izračunavanja, poređenja i grafici urađeni su u programskom paketu MATLAB. Kodovi se nalaze u dodatku na kraju rada.

Primer 1:

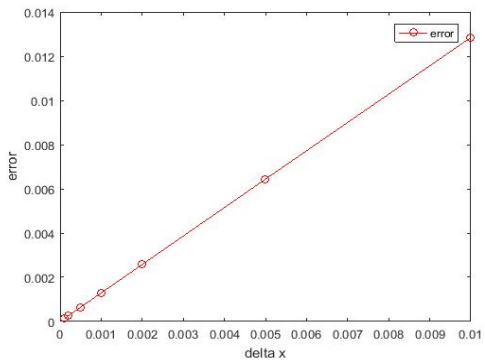
Pokazaćemo konvergenciju diskretnog stabilnog stanja iz Teoreme 1.2 ka neprekidnom stabilnom stanju, Teorema 1.1. Grešku računamo na sledeći način:

$$E = \frac{||h^{\infty} - \widetilde{h}||_2}{||h^{\infty}||_2}.$$

Neka je $L = 1$, $u(t,x) = 1$, $h^0 = h_e = 0$, $f = x$. Vidimo da greška teži ka nuli kako se broj čvornih tačaka povećava, odnosno, kako se Δx smanjuje (Tabela 1.1 i Slika 1.4).

Δx	$\frac{1}{100}$	$\frac{1}{200}$	$\frac{1}{500}$	$\frac{1}{1000}$	$\frac{1}{2000}$	$\frac{1}{10000}$
E	0.0128	0.0064	0.0026	0.0013	6.4534×10^{-4}	1.2909×10^{-4}

Tabela 1.1: Greška između neprekidnog i diskretnog stabilnog stanja



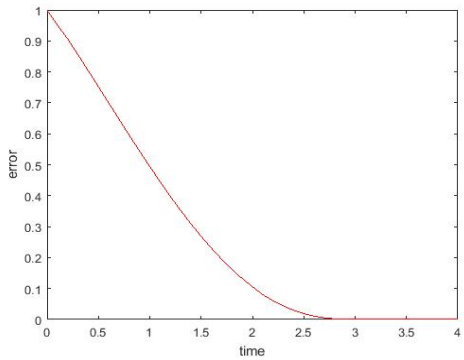
Slika 1.4: Konvergencija diskretnog ka neprekidnom stabilnom stanju

Primer 2:

Sada nas zanima konvergencija numeričkog rešenja šeme MOC1 ka diskretnom stabilnom stanju kada $t \to \infty$ uz CFL uslov. Neka je $L = 3$, $u(t,x) = 1$, $h^0 = h_e = 0$, $f = sin(x)$, $\Delta x = 3/300$. Grešku ćemo računati na sledeći način:
$E = \frac{||\widetilde{h}-h||_2}{||\widetilde{h}||_2}$, gde je h numeričko rešenje u vremenu t, a $\widetilde{h}$ diskretno stabilno stanje iz Teoreme 1.2. Možemo primetiti da se greška smanjuje kako se t povećava i teži u nulu (Tabela 1.2 i Slika 1.5). Sa stanovišta numeričkih proračuna, broj ka kojem konvergira greška nije tačno nula zbog greške koju pravi sam rašunar i ona je oko 10^{-16}.

t	0.5	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4
E	0.7520	0.4940	0.2685	0.1059	0.0191	0.0000	0.0000	0.0000

Tabela 1.2: Odnos grešaka E i vremena t za fiksirano Δx



Slika 1.5: Konvergencija greške između numeričke šeme MOC1 i diskretnog stabilnog stanja

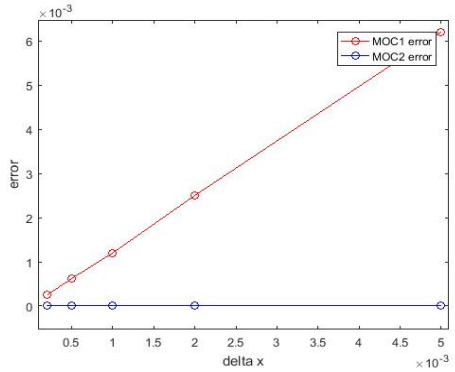
Primer 3:

U ovom primeru ćemo pokazati odnos MOC1 i MOC2 šeme kada se porede sa neprekidnim stabilnim stanjem. Videćemo da su aproksimacije drugog reda mnogo tačnije od onih prvog reda. Neka je $L = 1$, $u(t,x) = 1$, $h^0 = h_e = 0$, $f = sin(x)$, $T = 5$. Kada bismo imali f na primer linearnu funkciju MOC2 bi trebala da nam daje tačno rešenje jer je drugog reda tačnosti. U tom slučaju imamo samo grešku koju pravi računar na kojem pokrećemo računanje. Greške su izračunate na sledeće načine:
Za poređenje MOC1 šeme sa neprekidnim stabilnim stanjem $E1 = \frac{||h^\infty - H1||_2}{||h^\infty||_2}$ i za poređenje MOC2 šeme sa neprekidnim stabilnim stanjem $E2 = \frac{||h^\infty - H2||_2}{||h^\infty||_2}$, gde su $H1$

i $H2$ numerička rešenja u vremenu T. Možemo primetiti da se greške smanjuju kako se smanjuje Δx i takođe možemo primetiti da je MOC2 šema mnogo tačnija od šeme MOC1 (Tabela 1.3 i Slika 1.6).

Δx	$\frac{1}{200}$	$\frac{1}{500}$	$\frac{1}{1000}$	$\frac{1}{2000}$	$\frac{1}{5000}$
E1	0.0062	0.0025	0.0012	6.148×10^{-4}	2.4784×10^{-4}
E2	2.0833×10^{-6}	3.3333×10^{-7}	8.3333×10^{-8}	2.0833×10^{-8}	3.3333×10^{-9}

Tabela 1.3: Greške prilikom poređenja MOC1 i MOC2 šeme sa neprekidnim stabilnim stanjem



Slika 1.6: Konvergencija MOC1 i MOC2 šeme ka tačnom rešenju

1.5 MOC1 šema u dve dimenzije

U ovom poglavlju bavićemo se metodom karakteristika koja predstavlja proširenje prethodnog postupka sa jedne na dve dimenzije. Ideja se takođe zasniva na rešavanju dve obične diferencijalne jednačine (1.2) i (1.3), umesto parcijalne diferencijalne jednačine (1.1). Prostorni domen će biti pravougaonik, sa mrežom diskretizacije koja će takođe sadržati samo pravougaonike. Radićemo samo ekvidistantnu podelu u pravcu x i y ose. U dve dimenzije veliku ulogu igra način na koji je domen diskretizovan. Na primer, kada radimo na kružnom domenu, pravougaonici baš i nisu najbolja opcija. Bolji izbor su trouglovi, ali onda ne možemo govoriti o ekvidistantnoj podeli. U nastavku ćemo se baviti sledećim početnim graničnim problemom:

$$\begin{cases} \partial_t h(t,x,y) + \vec{u}(t,\vec{x})\nabla h(t,\vec{x}) = f(t,\vec{x}) \\ h(0,\vec{x}) = h^0(\vec{x}) \\ h(t,0,y) = h_{ey}(t,y) \\ h(t,x,0) = h_{ex}(t,x), \end{cases} \tag{1.29}$$

gde $(t,\vec{x}) \in R^+ \times [0,L]^2$, $\vec{u} = (u_1,u_2) \in R^2_+$ je polje brzine, $f \in R^+ \cup \{0\}$ nehomogeni deo i oni su nam poznati, a nepoznata nam je funkcija $h \in R^+$. Napomenimo da $h_{ey}(t,y)$ i $h_{ex}(t,x)$ treba da zadovoljavaju $h_{ex}(t,0) = h_{ey}(t,0)$.

Sada uvodimo oznake koje ćemo koristiti u izvođenju numeričke šeme.
Neka je $t \in [0,T]$ i N_t broj čvornih tačaka. Dalje neka je:

$$t^0 = 0, \qquad t^{n+1} = t^n + \Delta t^n.$$

Kada pričamo o prostornim promenljivama, možemo označiti $\vec{x} = (x,y) \in [0,L_x] \times [0,L_y]$. Neka je N_x i N_y broj čvornih tačaka kada delimo intervale $[0,L_x]$ i $[0,L_y]$, respektivno, dakle imamo $\Delta x = \frac{L_x}{N_x-1}$ i $\Delta y = \frac{L_y}{N_y-1}$ za dužine prostornih koraka. Mrežu pravimo na sledeći način:

$$x_i = (i-1)\Delta x, \qquad y_j = (j-1)\Delta y,$$

gde je $i \in \{1,...,N_x0\}$ i $j \in \{1,...,N_y\}$. Napomenimo da i ovde možemo koristiti CFL uslov za odabir dovoljno malog vremenskog koraka Δt^n da bismo obezbedili veću tačnost šeme, kao i u jednodimenzionalnom slučaju. U dvodimenzionalnom slučaju on izgleda ovako:

$$\Delta t^n = \frac{Cmin\{\Delta x, \Delta y\}}{max_{ij}\{|u^n_{1ij}|, |u^n_{2ij}|\}}, \qquad C > 0. \tag{1.30}$$

Metod karakteristika se sastoji iz ista tri koraka kao u jednodimenzionalnom slučaju.

1.5.1 Izračunavanje podnožja karakteristične krive

Prva stvar koju želimo da uradimo jeste da izračunamo podnožje karakteristične krive. Za aproksimaciju prvog reda koristićemo izraze (1.6), (1.7) i (1.8) u više dimenzija (izvedenini su u [3], [4] i [5]):

$$\partial_\tau \vec{\chi}(\tau; s, \vec{x_0}) = \vec{u}(\tau; \vec{\chi}(\tau; s, \vec{x_0})), \tag{1.31}$$

$$\partial_s \vec{\chi}(\tau; s, \vec{x_0}) = -\nabla_{\vec{x_0}} \vec{\chi}(\tau; s, \vec{x_0}) \vec{u}(s, \vec{x_0}), \tag{1.32}$$

$$det \nabla_{\vec{x}_0} \vec{\chi}(\tau; s, \vec{x}_0) = exp(\int_s^\tau \nabla \cdot \vec{u}(\omega, \vec{\chi}(\omega; s\vec{x}_0)) d\omega). \tag{1.33}$$

Koristeći Tejlorov razvoj kao u jednoj dimenziji dobijamo:

$$\vec{\xi}_{ij}^n = \vec{\chi}(t^n; t^{n+1}, x_i, y_j) =$$

$$= \vec{\chi}(t^n; t^n, x_i, y_j) + \Delta t \frac{\partial \vec{\chi}}{\partial s}(t^n; t^n, x_i, y_j) + O(\Delta t^2) =$$

$$= \vec{\chi}(t^n; t^n, x_i, y_j) + \Delta t[-\nabla_{(x_i, y_j)} \vec{\chi}(t^n; t^n, x_i, y_j) \vec{u}(t^n, x_i, y_j)] + O(\Delta t^2) =$$

$$= (x_i, y_j) - \Delta t \vec{u}(t^n, x_i, y_j) + O(\Delta t^2).$$

Koristili smo da je $\nabla_{(x_i, y_j)} \vec{\chi}(t^n; t^n, x_i, y_j) = I_d$.
Ako označimo $\vec{u}(t^n, x_i, y_j) = (u_1(t^n, x_i, y_j), u_2(t^n, x_i, y_j))$, aproksimacija prvog reda podnožja karakteristične krive je $(\xi_{xij}^n, \xi_{yij}^n)$ data sa:

$$\xi_{xij}^n = x_i - \Delta t u_1(t^n, x_i, y_j), \tag{1.34}$$

i

$$\xi_{yij}^n = y_j - \Delta t u_2(t^n, x_i, y_j). \tag{1.35}$$

1.5.2 Aproksimacija $h(t^n, \xi_{xij}^n, \xi_{yij}^n)$

Želimo da nađemo indekse m i k tako da $\xi_{xij}^n \in [x_m, x_{m+1})$ i $\xi_{yij}^n \in [y_k, y_{k+1})$:

$$m = 1 + \lfloor \frac{\xi_{xij}^n}{\Delta x} \rfloor \qquad \text{i} \qquad k = 1 + \lfloor \frac{\xi_{yij}^n}{\Delta y} \rfloor.$$

Sada uvodimo:

$$\theta_{xij}^n = \frac{x_{m+1} - \xi_{xij}^n}{\Delta x} \in (0, 1] \qquad \text{i} \qquad \theta_{yij}^n = \frac{y_{k+1} - \xi_{yij}^n}{\Delta y} \in (0, 1].$$

Ovo ćemo koristiti za interpolaciju, koja je komplikovanija u dve nego u jednoj dimenziji. Znamo da nam je za linearnu aproksimaciju dovoljno tri tačke (jer je tri tačke

dovoljno da definišu ravan ako nisu kolinearne), ali kako mi radimo na kvadratima koristićemo sve četiri. Napomenimo da je princip maksimuma trivijalno zadovoljen.
Mi jedino znamo vrednosti funkcije h_{ij}^n u čvornim tačkama, ali u opštem slučaju podnožje karakteristične krive nije čvor, zbog toga treba da aproksimiramo funkciju h u tački $(t^n, \xi_{xij}^n, \xi_{yij}^n)$.
Tačka $(\xi_{xij}^n, \xi_{yij}^n)$ je locirana u pravougaoniku $[x_m, x_{m+1}] \times [y_k, y_{k+1}]$, već znamo vrednosti h_{mk}^n, $h_{m+1,k}^n$, $h_{m,k+1}^n$ i $h_{m+1,k+1}^n$. Za interpolaciju $h(t^n, \xi_{xij}^n, \xi_{yij}^n)$ koristimo Langranžov interpolacioni polinom u dve dimenzije:

$$H(\theta_{xij}^n, \theta_{yij}^n) = h_{mk}^n \theta_{xij}^n \theta_{yij}^n + h_{m,k+1}^n \theta_{xij}^n (1-\theta_{yij}^n) + h_{m+1,k}^n \theta_{yij}^n (1-\theta_{xij}^n) + h_{m+1,k+1}^n (1-\theta_{xij}^n)(1-\theta_{yij}^n). \tag{1.36}$$

1.5.3 Ažuriranje vrednosti h_{ij}^{n+1}

Sada treba da rešimo običnu diferencijalnu jednačinu (1.3). Imamo dva slučaja:
1. Ako podnožje karakteristike ne dostigne granice h_{ex} i h_{ey} na intervalu $[t^n, t^{n+1}]$:

$$h(t, \vec{x}) - h(\vec{\chi}(t - \Delta t; t, \vec{x})) = \int_{t-\Delta t}^{t} f(\tau; \vec{\chi}(\tau; t, \vec{x}))d\tau,$$

možemo koristiti kvadratnu formulu za aproksimaciju integrala sa desne strane i koristeći dosadašnje oznake imamo:

$$h_{ij}^{n+1} = H(\theta_{xi}^n, \theta_{yj}^n) + \Delta t f(t^{n+1}, x_i, y_j). \tag{1.37}$$

2. Ako podnožje karakteristike dostiže granicu h_{ex} ili h_{ey} ili obe na intervalu $[t^n, t^{n+1}]$ u tački t^*. Prvo, neka karakteristika dostiže granicu h_{ey} i ne dostiže h_{ex} u isto vreme (kada dostiže h_{ex} priča je analogna):

$$(0, \xi_{yij}^*) = \vec{\chi}(t^n; t^n, x_i, y_j) + (t^* - t^n)\partial_t \vec{\chi}(t^n; t^n, x_i, y_j) + \Delta t \partial_s \vec{\chi}(t^n; t^n, x_i, y_j) + O(\Delta t^2)$$

Sada treba da rešimo dve jednačine da bismo dobili t^* i ξ_{yij}^*, vreme i podnožje karakteristike na granici h_{ey}. Aproksimacija prvog reda je:

$$(0, \xi_{yij}^*) = (x_i, y_j) + (t^* - t^n)\vec{u}(t^n, x_i, y_j) - \Delta t \vec{u}(t^n, x_i, y_j).$$

Dobijamo jednačine:

$$0 = x_i + (t^* - t^n)u_{1ij}^n - \Delta t u_{1ij}^n$$

i

$$\xi_{yij}^* = y_j + (t^* - t^n)u_{2ij}^n - \Delta t u_{2ij}^n.$$

Rešenja su:

$$t^* = t^{n+1} - \frac{x_i}{u_{1ij}^n} \tag{1.38}$$

i

$$\xi^*_{yij} = y_j - u^n_{2ij}(t^{n+1} - t^*). \tag{1.39}$$

Sada možemo ažurirati vrednost h^{n+1}_{ij} koristeći kvadratnu formulu za aproksimaciju integrala $\int_{t^*}^{t} f(\tau, \vec{\chi}(\tau; t, \vec{x}))d\tau$ pa dobijamo:

$$h^{n+1}_{ij} = h_{ey}(t^*, \xi^*_{yij}) + (t^{n+1} - t^*)f(t^{n+1}, x_i, y_j). \tag{1.40}$$

Kada dostižemo granicu h_{ex} i ne dostižemo h_{ey} u isto vreme, imamo:

$$(\xi^*_{xij}, 0) = \vec{\chi}(t^n; t^n, x_i, y_j) + (t^* - t^n)\partial_t\vec{\chi}(t^n; t^n, x_i, y_j) + \Delta t\partial_s\vec{\chi}(t^n; t^n, x_i, y_j) + O(\Delta t^2).$$

Tada, aproksimacija prvog reda izgleda:

$$t^* = t^{n+1} - \frac{y_j}{u^n_{2ij}} \tag{1.41}$$

i

$$\xi^*_{xij} = x_i - u^n_{1ij}(t^{n+1} - t^*). \tag{1.42}$$

Ažurirana vrednost h^{n+1}_{ij} je:

$$h^{n+1}_{ij} = h_{ex}(t^*, \xi^*_{xij}) + (t^{n+1} - t^*)f(t^{n+1}, x_i, y_j). \tag{1.43}$$

Kada imamo situaciju da karakteristika na intervalu $[t^n, t^{n+1}]$ dostiže granice h_{ex} i h_{ey} u isto vreme t^*, zbog pretpostavke $h_{ex}(t, 0) = h_{ey}(t, 0) = h_e(t)$, imamo sledeće:

$$h^{n+1}_{ij} = h_e(t^*) + (t^{n+1} - t^*)f(t^{n+1}, x_i, y_j), \tag{1.44}$$

gde $t^* = t^{n+1} - \frac{x_i}{u^n_{1ij}} = t^{n+1} - \frac{y_j}{u^n_{2ij}}$ (zbog pretpostavke da se granice dostižu u istom vremenu).

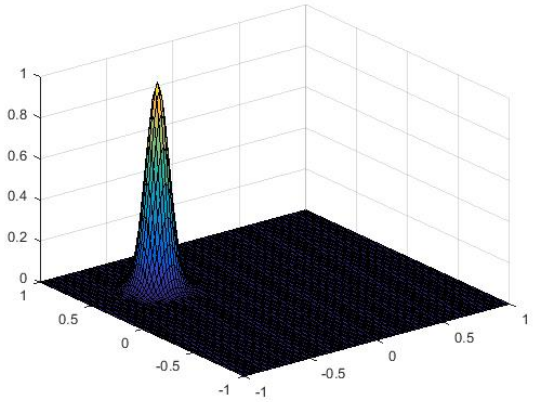
Napomenimo da su gore navezdeni izrazi dobro defenisani zbog pretpostavke $u \in R^2_+$.

U narednom poglavlju ćemo predstaviti jedan komplekasn primer transportne jednačine u dve dimenzije koji simulira kruženje balončića.

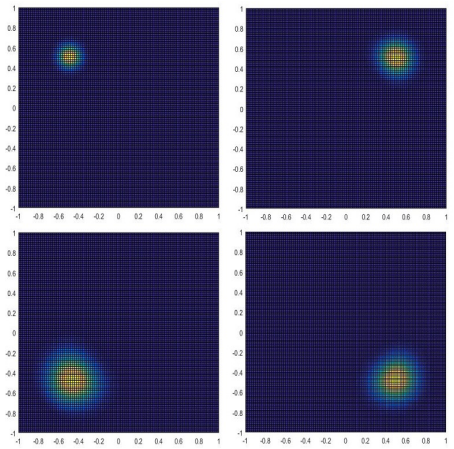
1.6 Numerički primer u dve dimenzije

Posmatraćemo domen $[-1, 1] \times [-1, 1]$, sa poljem brzine $\mathbf{u} = (-y, x)^T$, funkcijom $f = 0$ i početnim uslovom $h^0(x, y) = e^{-\frac{(x+0.5)^2+(y-0.5)^2}{0.01}}$, sa graničnim uslovom jednakim nuli na svim granicama. Ovaj primer je veoma kompleksan i simulira ponašanje balončića. Kako vreme prolazi balončinć se kreće u krug i kao što možemo primetiti

na Slici 1.8 prisutna je velika numerička disperzija kao posledica diskretizacije domena na pravougaonike koji loše aproksimiraju balon. Napomenimo i da se ovde radi samo sa aproksimacijama prvog reda. Zbog toga je u dve dimenzije prirodnije i mnogo bolje koristiti, na primer, diskretizaciju na trouglove, jer se pomoću trouglova lakše može aproksimirati krug. Taj slučaj je komplikovaniji, zbog izraza koji se dobijaju prilikom izvođenja šeme, kao i zbog odabira optimalnog položaja trouglova u mreži. Naravno i red tačnosti se može povećati na kvadratne aproksimacije kako bi se greška smanjila. Tom prilikom, izrazi su prilično komplikovani, postoji i mnogo više mogućnosti za odabir tačaka koje se koriste za interpolaciju, a kriterijum za zadovoljnost principa maximuma se ne može izvesti ili se vrlo teško izvodi.



Slika 1.7: Početni uslov



Slika 1.8: Pozicija balončića u vremenima T=0 (gore levo), T=pi/2 (gore desno), T=pi (dole desno) i T=3pi/2 (dole levo)

Glava 2

Numeričko rešenje LMNC modela

U ovoj glavi posvetićemo se modeliranju toka rashladne tečnosti u jezgru nuklearnog reaktora. LMNC (Low Mach Number Core) model se sastoji od tri jednačine koje opisuju ponašanje fizičkih veličina u reaktoru. Prvo ćemo dati uvod i definisati model, zatim predstaviti numeričku šemu i dati poređenja sa neprekidnim i diskretnim stabilnim stanjima.

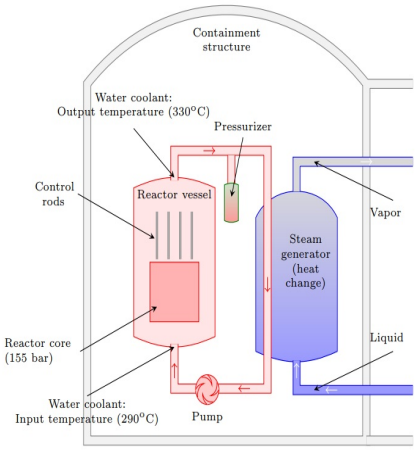
2.1 LMNC model

LMNC model je izveden kako bismo bolje razumeli ponašanje fizičkih varijabli u reaktoru za vodu pod pritiskom (PWR-Pressurized Water Reactor). Voda može da se pojavi u tečnom obliku, u obliku pare (u slučajnim režimima), ali i kao mešavina ove dve faze. Prvo ćemo objasniti funkcionisanje reaktora.

2.1.1 Uvod i jednačine

PWR se sastoji iz primarnog i sekundarnog toka (Slika 2.1). U primarnom toku, voda se upumpava pod velikim pritiskom u jezgro nuklearnog reaktora gde se zagreva energijom jezgra reaktora (energijom dobijenom fisijom jezgra atoma). Visoki pritisak (oko 155×10^5 Pa) ne dozvoljava da dođe do ključanja vode u reaktoru. Zatim zagrejana voda teče do generatora pare gde prenosi toplotnu energiju na sekundarni sistem. Tako se dobija para u sekundarnom toku koja pokreće turbine električnog generatora. Transfer topote između tokava se postiže bez mešanja dva fluida jer prvi moze postati radioaktivan. LMNC model se dobija iz Navijer-Stoksovih jednačina kada je Mahov broj mali, odnosno blizak nuli, jer fizičke veličine dobro opisuju tu sitaciju i akustični talasi se mogu filtrirati. Mahov broj

$$M = \frac{V}{c}$$



Slika 2.1: Funkcionisanje PWR-a

predstavlja odnos brzine tela V i brzine zvuka c kroz posmatrani fluid. Asimptotski razvoj u odnosu na Mahov broj, za koji pretpostavljamo da je mali, dovodi do LMNC modela, koji je prvi put izveden u [9]. LMNC model koji se sastoji iz tri jednačine izgleda ovako:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = -\frac{p_*'(t)}{\rho(h,p_*)c^2(h,p_*)} + \frac{\beta(h,p_*)}{p_*}[\phi + \nabla \cdot (\Lambda(h,p_*)\nabla h)], \tag{2.1a}$$

$$\rho(h,p_*)[\partial_t h + \mathbf{v} \cdot \nabla h] = \phi + \nabla \cdot (\Lambda(h,p_*)\nabla h), \tag{2.1b}$$

$$\rho(h,p_*)[\partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v}] + \nabla P - \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) + \eta(\nabla \cdot \mathbf{v})I_d] = \rho(h,p_*)\mathbf{g}, \tag{2.1c}$$

na ograničenom domenu Ω^d, gde je $d \in \{1,2,3\}$:

- $\Omega^1 = [0, L_y]$ sa granicama $\Gamma_e = \{0\}$ i $\Gamma_s = \{L_y\}$;
- $\Omega^2 = [0, L_x] \times [0, L_y]$ sa $\Gamma_e = [0, L_x] \times \{0\}$, $\Gamma_{lat} = (\{0\} \times [0, L_y]) \cup (\{L_x\} \times [0, L_y])$ i $\Gamma_s = [0, L_x] \times \{L_y\}$;
- $\Omega^3 = [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]$ sa $\Gamma_e = [0, L_x] \times \{0\} \times [0, L_z]$, $\Gamma_{lat} = (\{0\} \times [0, L_y] \times [0, L_z]) \cup (\{L_x\} \times [0, L_y] \times [0, L_z]) \cup ([0, L_x] \times [0, L_y] \times \{0\}) \cup ([0, L_x] \times [0, L_y] \times \{L_z\})$ i $\Gamma_s = [0, L_x] \times \{L_y\} \times [0, L_z]$.

Poznate su nam funkcije: $\phi(t, \mathbf{x})$, gde je $(t, \mathbf{x}) \in R_+ \times \Omega^d$, koja predstavlja energiju jezgra (power density), $\mathbf{g}$ vektor gravitacionog polja, granična gustina $\rho_e(t, \mathbf{x})$ i granična stopa protoka $\mathbf{D_e}(t, \mathbf{x})$ na granici Γ_e, gde je $\mathbf{D_e} = \rho_e \mathbf{v_e}$. Poznat nam je i atmosferski pritisak $p_*(t)$. Nepoznate su nam termodinamičke promenljive: h koja predstavlja

entalpiju i P koja predstavlja dinamički pritisak. Nepoznato nam je i polje brzine $\mathbf{v}$. Koeficijenti koji se računaju pomoću (h, p_*) su: gustina ρ, brzina zvuka c, koeficijent kompresibilnosti β, modifikovana termalna kondukcija Λ, koeficijenti viskoznosti μ i η.

Napomena: Sistem (2.1) se u jednodimenzionalnom slučaju rešava tako što se dobiju rešenja za entalpiju i brzinu iz prve dve jednačine, a zatim se rešanja ubace u treću jednačinu i dobije se dinamički pritisak.

U nastavku ćemo dati objašnjenja početnih i graničnih uslova, definisati termodinamičke varijable, uvesti jednačinu kontinuiteta i dati fizičke zakone koji važe u modelu.

2.1.2 Početni i granični uslovi

Počeni uslovi su dati za entalpiju h i stopu protoka $\mathbf{D}$:

$$h(0, \mathbf{x}) = h_0(\mathbf{x}) \quad \text{i} \quad (\rho\mathbf{v})(0, \mathbf{x}) = \mathbf{D_0}(\mathbf{x}).$$

Sada ćemo dati granične uslove. Fluid je ubrizgan na dnu reaktora Γ_e sa datom gustinom ρ_e i stopom protoka $\mathbf{D_e}$:

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma_e, \quad \rho(h(t, \mathbf{x}), p_*) = \rho_e(t, \mathbf{x}),$$

$$(\rho\mathbf{v})(t, \mathbf{x}) = \mathbf{D_e}(t, \mathbf{x}),$$

gde je $\mathbf{D_e} = D_e$ u jednoj dimenziji, $\mathbf{D_e} = (0, D_e)$ u dve dimenzije i $\mathbf{D_e} = (0, D_e, 0)$ u tri dimenzije. Ulazna entalpija h_e je implicitno definisana kao rešenje jednačine $\rho(h_e, p_*) = \rho_e$, a ulazna brzina se dobija iz $\mathbf{v_e} = \mathbf{D_e}/\rho_e$. Napomenimo da nametanje uslova na ρ_e ili h_e nije isto za sve jednačine kontinuiteta i da se stabilna stanja razlikuju u zavisnosti od toga koju jednačinu koristimo.
Na svim granicama, osim na ulazu Γ_e uvodimo adiabatske uslove, sto znači da nema prenosa toplote na ili sa fluida:

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma_{lat}, \quad \Lambda(h, p_*)\nabla h \cdot \mathbf{n}(t, \mathbf{x}) = 0, \qquad \text{za bocne ivice i}$$

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma_s, \quad \Lambda(h, p_*)\nabla h \cdot \mathbf{n}(t, \mathbf{x}) = 0, \qquad \text{za vrh reaktora.}$$

Na bočne ivice stavljamo Robinove uslove za brzinu:

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma_{lat}, \quad (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})(t, \mathbf{x}) = 0,$$

$$\sigma(\mathbf{v})\mathbf{n} \cdot \tau(t, \mathbf{x}) = 0.$$

Na vrh reaktora stavljamo uslov slobodnog izlaza:

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma_s, \quad [\sigma(\mathbf{v})\mathbf{n} - P\mathbf{n}](t, \mathbf{x}) = \mathbf{0}.$$

2.1.3 Definicija termodinamičkih varijabli u modelu

Prvo dajemo definicije termodinamičkih varijabli a u kasnijim delovima će biti objašnjeno kako ćemo ih računati prilikom numeričkog rešavanja modela:
Koeficijent kompresibilnosti β

$$\beta(h, p_*) = -\frac{p_*}{\rho(h, p_*)^2}\frac{\partial \rho}{\partial h}(h, p_*); \tag{2.2}$$

Brzina zvuka c

$$c(h, p_*) = [\frac{1}{\rho(h, p_*)}\frac{\partial \rho}{\partial h}(h, p_*) + \frac{\partial \rho}{\partial p}(h, p_*)]^{-1/2}; \tag{2.3}$$

Modifikovana termalna kondukcija Λ

$$\Lambda(h, p_*) = \frac{\lambda(h, p_*)}{c_p(h, p_*)}, \tag{2.4}$$

gde je λ koeficijent termalne kondukcije, a c_p dobijeno iz

$$\frac{1}{c_p(h, p_*)} = \frac{\partial T}{\partial h}(h, p_*), \tag{2.5}$$

gde je T temperatura.
Veze između termodinamičkih varijabli se dobijaju uvođenjem jednačine kontinuiteta i fizičkih zakona.

2.1.4 Jednačina kontinuiteta

Da bismo zatvorili sistem i imali vezu između varijabli u sistemu neophodno je da definišemo jednalčinu kontinuiteta i fizičke zakone koji su u saglasnosti sa mehanikom fluida. Treba da navedemo kako ćemo računati varijable iz skupa $\Xi = \{\rho, c, \beta, \lambda, c_p, \mu, \eta, T\}$.
Dovoljne su dve varijable da se opišu termodinamički zakoni. Mi smo odlučili da koristimo (h, p_*), odnosno da sve varijable iz skupa Ξ izrazimo kao funkcije od (h, p_*). Kako se u LMNC modelu dinamički pritisak p_* može smatrati konstantnim, značajno će nam smanjiti računanja. S obzirom na to da se voda u reaktoru može pojaviti u dva čista stanja (tečnom i gasovitom) i mešavini ta dva stanja, bilo koje $\zeta \in \Xi$ možemo definisati kao:

$$\zeta(h, p_*) = \begin{cases} \zeta_l(h, p_*), & \text{ako} \quad h \leq h_l^s(p_*) \\ \zeta_m(h, p_*), & \text{ako} \quad h_l^s \leq h \leq h_g^s(p_*) \\ \zeta_g(h, p_*), & \text{ako} \quad h \geq h_g^s(p_*). \end{cases} \tag{2.6}$$

Ovde h_l^s i h_g^s predstavljaju vrednosti zasićenja entalpije (na primer $h \leq h_l^s$ odgovara čistoj tečnoj fazi) koje mogu varirati od jedne do druge jednačine kontinuiteta.
U nastavku ćemo dati izraze za SG (Stiffened Gas), NASG (Nobel-Abel Stiffened Gas) zakone kao i NIST-p pristup jednačini kontinuiteta [6].

Jednačina kontinuiteta u tečnoj i gasovitoj fazi

Sada ćemo dati kratko objašnjenje SG i NASG zakona kao i NIST-p pristupa jednačini kontinuiteta u čistim fazama (tečnoj i gasu).

Kada govorimo o SG i NASG, oni se dobijaju istom procedurom iz kompletne jednačine kontinuiteta koja predstavlja odnos između specifične entropije S, specifične gustine $\tau = 1/\rho$ i specifične energije ϵ:

$$(\tau, \epsilon) \rightarrow S(\tau, \epsilon) = \bar{c_v}[ln(\epsilon - \bar{Q} - \bar{\pi}(\tau - \bar{b})) + (\bar{\gamma} - 1)ln(\tau - \bar{b})] + \bar{S_0},$$

gde šest parametara treba da bude podešeno: $\bar{c_v}$, $\bar{Q}$, $\bar{\pi}$, $\bar{\gamma}$, $\bar{S_0}$ i $\bar{b}$ ($\bar{b} = 0$ za SG zakon) u zavisnosti od raspona vrednosti entalpije i faze (tečna, mešavina ili gas). Više o ovoj kompletnoj jednačini kontinuiteta se nalazi u [6].
Dobijamo da SG i NASG imaju iste izraze za gustinu:

$$\frac{1}{\tilde{\rho}(h)} = \frac{\tilde{\beta}(h)}{p_*}(h - \tilde{q}(h)). \tag{2.7}$$

Ovde imamo da je $\tilde{\beta}$:

$$\tilde{\beta}(h) = \begin{cases} \bar{\beta}_l, & \text{ako} \quad h \leq h_l^s \\ \bar{\beta}_m, & \text{ako} \quad h_l^s < h < h_g^s \\ \bar{\beta}_g, & \text{ako} \quad h \geq h_g^s \end{cases} \tag{2.8}$$

i $\tilde{q}$:

$$\tilde{q}(h) = \begin{cases} \bar{q}_l, & \text{ako} \quad h \leq h_l^s \\ \bar{q}_m, & \text{ako} \quad h_l^s < h < h_g^s \\ \bar{q}_g, & \text{ako} \quad h \geq h_g^s. \end{cases} \tag{2.9}$$

$\bar{\beta}_m$ i $\bar{q}_m$ se računaju isto bez obzira koji tip jednačine koristimo, a izraze ćemo dati malo kasnije.
Vrednosti funkcija $\tilde{\beta}$ i $\tilde{q}$ za SG i NASG zakone su date u Tabeli 2.4.

Kada govorimo o NIST-p pristupu jednačini kontinuiteta, ona nam daje polinomnu funkciju u čistim fazama reda p. Tako na primer NIST-0 znači da imamo kontstantnu

funkciju slično kao i kod SG i NASG samo se način na koji se dolazi do vrednosti razlikuje. U čistim fazama koeficijent kompresibilnosti se može predstaviti kao

$$\beta = \frac{p}{\rho c^* \sqrt{T}} \sqrt{\frac{1}{c_v} - \frac{1}{c_p}} > 0,$$

gde je p pritisak, ρ gustina, T temperatura, c^* brzina zvuka, c_v izohorični toplotni kapacitet i c_p izobarični toplotni kapacitet. Ovaj zapis nam je koristan jer koristeći tablične vrednosti možemo izračunati vrednosti za β, a zatim fitovanjem dobiti funkciju. Tako nam je potrebno da nađemo koeficijente $b_{k,j}$ u polinomu:

$$\widetilde{\beta}_k(h) = \sum_{j=0}^{d_{\beta,k}} b_{k,j} (\frac{h}{10^6})^j, \tag{2.10}$$

gde je $d_{\beta,k}$ stepen polinoma u fazi $k \in \{l, g\}$. Više o ovom pristupu kao i tabele pomoću kojih se dolazi do vrednosti β pomoću kojih se interpolira, nalazi se u [6]. Gustina se dobija tako što integralimo $\widetilde{\beta}_k$ koristeći (2.7). Tako dobijamo da treba da izračunamo koeficijente $r_{k,j}$ u polinomu:

$$\frac{1}{\widetilde{\rho}_k(h)} = \sum_{j=0}^{d_{\rho,k}} r_{k,j} (\frac{h}{10^6})^j. \tag{2.11}$$

Koeficijenti se mogu računati na razičite načine. U Tabelama 2.1 i 2.2 se nalaze koeficijenti dobijeni metodom najmanjih kvadrata, stepen polinoma se povećavao sve dok relativna greška nije postala dovoljno mala.

	$k = l$	$k = g$
$d_{\beta,k}$	6	3
$b_{k,0}$	$6.129697412 \times 10^{-2}$	$-5.395575381 \times 10^{-1}$
$b_{k,1}$	$-1.378946053 \times 10^{-1}$	$3.591468350 \times 10^{-1}$
$b_{k,2}$	$8.329391618 \times 10^{-2}$	$9.759257397 \times 10^{-3}$
$b_{k,3}$	$6.045509171 \times 10^{-3}$	$-1.465520061 \times 10^{-2}$
$b_{k,4}$	$2.341456057 \times 10^{-2}$	
$b_{k,5}$	$-4.623916770 \times 10^{-2}$	
$b_{k,6}$	$1.637507485 \times 10^{-2}$	

Tabela 2.1: Koeficijenti za β kada koristimo NIST-p. Podaci su preuzeti iz [6]

	$k = l$	$k = g$
$d_{\rho,k}$	7	4
$r_{k,0}$	$-0.155983180 \times 10^{-3}$	$2.916351682 \times 10^{-2}$
$r_{k,1}$	$3.954643492 \times 10^{-3}$	$-3.481016375 \times 10^{-2}$
$r_{k,2}$	$-4.448213074 \times 10^{-3}$	$1.158538178 \times 10^{-2}$
$r_{k,3}$	$1.791267015 \times 10^{-3}$	$2.098765032 \times 10^{-4}$
$r_{k,4}$	$9.750821233622 \times 10^{-5}$	$-2.363742038 \times 10^{-4}$
$r_{k,5}$	$3.021233622 \times 10^{-4}$	
$r_{k,6}$	$-4.971953517 \times 10^{-4}$	
$r_{k,7}$	$1.509233489 \times 10^{-4}$	

Tabela 2.2: Koeficijenti za ρ kada koristimo NIST-p. Podaci su preuzeti iz [6]

Jednačina kontinuiteta u mešovitoj fazi

Koeficijent kompresibilnosti u mešovitoj fazi ne zavisi od jednačine kontinuiteta koja je korišćena u čistim fazama, samo se razlikuju vrednosti na granicama. U mešovitoj fazi β je konstantna funkcija i računa se na sledeći način:

$$\bar{\beta}_m = p_* \frac{1/\rho_g^s - 1/\rho_l^s}{h_g^s - h_l^s}. \tag{2.12}$$

Gustina u mešovitoj fazi se računa na sledeći način:

$$\rho_m(h) = \frac{\rho_g^s \rho_l^s (h_g^s - h_l^s)}{\rho_g^s h_g^s - \rho_l^s h_l^s - (\rho_g^s - \rho_l^s) h},$$

odnosno

$$\frac{1}{\rho_m(h)} = \frac{\bar{\beta}_m}{p_*}(h - \bar{q}_m), \tag{2.13}$$

gde je

$$\bar{q}_m = \frac{\rho_g^s h_g^s - \rho_l^s h_l^s}{\rho_g^s - \rho_l^s}. \tag{2.14}$$

Podaci koje ćemo koristiti za numerička izračunavanja i poređenje su data u tabelama 2.3 i 2.4.
Detaljnija objašnjenja za jednačine kontinuiteta se nalaze u [6].

Temperatura nije eksplicitno deo LMNC modela, ali jeste fizička varijabla koja nas zanima kada govorimo o analizi sistema. Daćemo objašnjenje samo za SG (slično je za NASG, a za NIST pristup se koriste polinomi dovoljno velikog reda u čistim fazama, a u mešavini je takođe konstantna) jednačinu kontinuiteta. Temperatura je definisana

	Stiffened Gas - SG	Nobel-Abel SG - NASG	NIST-p
h_l^s	$1.627 \times 10^6\ J \cdot kg^{-1}$	$1.596 \times 10^{-1}\ J \cdot kg^{-1}$	$1.630 \times 10^{-1}\ J \cdot kg^{-1}$
h_g^s	$3.004 \times 10^6\ J \cdot kg^{-1}$	$2.861 \times 10^6\ J \cdot kg^{-1}$	$2.596 \times 10^6\ J \cdot kg^{-1}$
ρ_l^s	$632.663\ kg \cdot m^{-3}$	$737.539\ kg \cdot m^{-3}$	$594.379\ kg \cdot m^{-3}$
ρ_g^s	$52.937\ kg \cdot m^{-3}$	$55.486\ kg \cdot m^{-3}$	$101.930\ kg \cdot m^{-3}$
T^s	$654.65\ K$	$636.47\ K$	$617.939\ K$

Tabela 2.3: Vrednosti zasićenja za $p_* = 15.5MPa$ u zavisnosti od jednačine kontinuiteta. Podaci su preuzeti iz [6]

	Stiffened Gas - SG	Nobel-Abel SG - NASG	NIST-p
$\bar{\beta}_l$	8.769×10^{-3}	4.803×10^{-3}	NaN
$\bar{\beta}_m$	1.949×10^{-1}	2.042×10^{-1}	1.303×10^{-1}
$\bar{\beta}_g$	3.007×10^{-1}	4.872×10^{-1}	NaN
$\bar{q}_l$	$-1.167 \times 10^6\ J \cdot kg^{-1}$	$-2.779 \times 10^6\ J \cdot kg^{-1}$	NaN
$\bar{q}_m$	$1.501 \times 10^6\ J \cdot kg^{-1}$	$1.493 \times 10^6\ J \cdot kg^{-1}$	$1.429 \times 10^6\ J \cdot kg^{-1}$
$\bar{q}_g$	$2.030 \times 10^6\ J \cdot kg^{-1}$	$2.287 \times 10^6\ J \cdot kg^{-1}$	NaN

Tabela 2.4: Vrednosti β i q za $p_* = 15.5MPa$ po fazama. Podaci su preuzeti iz [6]

po delovima u zavisnosti od faze u kojoj se nalazimo:

$$T(h) = \begin{cases} \frac{h-q_l}{\gamma_l c_{v_l}}, & \text{ako} \quad h \leq h_l^s, \\ T^s, & \text{ako} \quad h_l^s < h < h_g^s, \\ \frac{h-q_g}{\gamma_g c_{v_g}}, & \text{ako} \quad h \geq h_g^s. \end{cases} \tag{2.15}$$

Jedan od razloga zašto temperaturu ne koristimo u LMNC modelu je taj što nije invertibilna jer je konstantna u mešovitoj fazi. Vrednosti za izohorični toplotni kapacitet c_{v_k} i abiabatski koeficijent γ_k su dati u Tabeli (2.5). Za više informacija o načinu na koji se računaju ovi koeficijenti pogledati [2].

Faza	$c_v\ [J \cdot K^{-1}]$	γ
Tečna	1816.2	2.35
Gas	1040.14	1.43

Tabela 2.5: Vrednosti za c_v i γ po fazama za SG zakon. Podaci su preuzeti iz [2]

2.1.5 Fizički zakoni

Sada ćemo dati kratko objašnjenje koeficijenata viskoznosti, ali se nećemo previše baviti time kako se oni pojavljuju u trećoj jednačini sistema. μ se računa na sledći

način:

$$\mu(h) = \begin{cases} \bar{\mu}_l, & \text{ako} \quad h \leq h_l^s, \\ \alpha(h)\bar{\mu}_g + (1-\alpha(h))\bar{\mu}_l, & \text{ako} \quad h_l^s < h < h_g^s, \\ \bar{\mu}_g, & \text{ako} \quad h \geq h_g^s, \end{cases}$$

gde je α zapreminski udeo (volume fraction)

$$\alpha(h) = \rho_l^s \frac{h - h_l^s}{(\rho_g^s h_g^s - \rho_l^s h_l^s) - h(\rho_g^s - \rho_l^s)}.$$

Za koeficijent η pretpostavljamo Stoksov zakon

$$\eta = -\frac{2}{3}\mu.$$

Kada govorimo o termalnim efektima, zanimljivo nam je da poredimo slučaj kada ih uzimamo u obir i kada to ne radimo. Za modifikovanu termalnu kondukciju Λ, koju ćemo koristiti u slučaju kada difuzioni član figuriše u modelu, imamo:

$$\Lambda(h) = \begin{cases} \frac{\bar{\lambda}_l}{\bar{c}_{pl}}, & \text{ako} \quad h \leq h_l^s, \\ 0, & \text{ako} \quad h_l^s < h < h_g^s, \\ \frac{\bar{\lambda}_g}{\bar{c}_{pg}}, & \text{ako} \quad h \geq h_g^s. \end{cases} \tag{2.16}$$

Ovde se c_{p_k} dobija iz jednačine (2.5), a mi ćemo ga računati $c_{p_k} = \gamma_k c_{v_k}$, λ_k predstavlja termalnu kodukciju, $k \in \{l, g\}$. Λ je posledica izraza (2.4). Za numeričke proračune ćemo koristiti sledeće vrednosti za $\bar{\lambda}$:

$$\bar{\lambda}_l = 5.578 \times 10^{-1} \quad \text{i} \quad \bar{\lambda}_g = 1.008 \times 10^{-1} \tag{2.17}$$

koje su dobijene iz NIST tablica (formalna objašnjenja i izvođenja se nalaze u [6]). Zanimaće nas i šta se dešava sa rešenjem kada uzmemo fizički nerealno veliku termalnu kondukciju kako bi se videli njeni efekti, budući da je fizički realna toplotna kondukcija obično zanemarljiva u nuklearnim reaktorima.

2.1.6 Osnovne pretpostavke u modelu

Sada ćemo navesti osnovne pretpostavke kojih ćemo se držati u modelu. One nam garantuju da je model dobro postavljen, da dobro modelira stvarnu situaciju i da su rezultati realni u fizičkom smislu.
Očigledna pretpostavka je

$$h_l^s < h_g^s \qquad \text{i} \qquad \rho_l^s > \rho_g^s, \tag{P1}$$

koja važi za većinu fluida.
Zatim, gustina mora biti pozitivna veličina (osim u vakuumu), zbog toga u (2.7) imamo:

$$h_{min} > \widetilde{q}. \tag{P2}$$

Kada govorimo o poznatim funkcijama koje se nalaze u modelu, pretpostavljamo da:

$$(t, \mathbf{x}) \in R_+ \times \Omega^d \mapsto \Phi(t, \mathbf{x}) \quad \text{je nenegativna}, \tag{P3}$$

$$p_* \quad \text{je pozitivna}, \tag{P4}$$

$$(t, \mathbf{x}) \in R_+ \times \Gamma_e \mapsto \mathbf{D_e}(t, \mathbf{x}) \quad \text{je pozitivna}, \tag{P5}$$

$$(t, \mathbf{x}) \in R_+ \times \Gamma_e \mapsto \rho_e(t, \mathbf{x}) \text{ je pozitivna i lezi u } [\rho_l^s, \rho_l(h_{min})]. \tag{P6}$$

Šta više, početni uslovi $h(0, \mathbf{x}) = h_0(\mathbf{x})$ i $\mathbf{v}(0, \mathbf{x}) = \mathbf{x}_0(x)$ su takvi da zadovoljavaju

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma_e, \quad h_0(\mathbf{x}) = h_e(0, \mathbf{x}), \tag{P7}$$

$$\forall \mathbf{x} \in \Omega^d, \quad \nabla \cdot \mathbf{v}_0 = \frac{\beta(h_0, p_*)}{p_*}[\Phi(0, \mathbf{x}) + \nabla \cdot (\Lambda(h_0, p_*)\nabla h_0)]. \tag{P8}$$

Zbog modeliranja i iz matematičkih razloga zahtevamo

$$\forall \mathbf{x} \in \Gamma_s, \quad \mathbf{v}(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \geq 0. \tag{P9}$$

Kada koristimo SG jednačinu kontinuiteta (2.7) takođe zahtevamo i

$$\Im = \min\{\inf_{t \geq, \mathbf{x} \in \Gamma_e} h_e(t, \mathbf{x}), \min_{\mathbf{x} \in \Omega^d} h_0(\mathbf{x})\} > h_{min}. \tag{P10}$$

2.1.7 Uslovi skoka

Kada u modelu imamo termalni difuzioni član, priroda jednačina se menja. Kako je Λ definisana po delovima konstantnom funkcijom, koja je u mešovitoj fazi jednaka 0, jednačina (2.1b) kroz faze može biti parabolična ili hiperbolična. Šta više, difuzioni koeficijent je neprekidan duž granica između faza. Zbog toga uvodimo dve vrste skokova.
Prvo uvodimo oznake

$$\Omega_l^d(t) = \{\mathbf{x} \in \Omega^d : h(t, \mathbf{x}) < h_l^s\}, \quad \Omega_m^d(t) = \{\mathbf{x} \in \Omega^d : h_l^s < h(t, \mathbf{x}) < h_g^s\} \quad \text{i}$$

$$\Omega_g^d(t) = \{\mathbf{x} \in \Omega^d : h(t, \mathbf{x}) > h_g^s\}$$

koje predstavljaju domene određene faze i

$$\Gamma_l(t) = \{\mathbf{x} \in \Omega^d : h(t, \mathbf{x}) = h_l^s\} \quad \text{i} \quad \Gamma_g(t) = \{\mathbf{x} \in \Omega^d : h(t, \mathbf{x}) = h_g^s\}$$

koje predstavljaju granice među fazama. Neki od domena mogu biti i prazni u zavisnosti od entalpije h.
U nastavku, rešenje sistema (2.1) $(h, \mathbf{v}, P)$ treba da podrzumeva sledeće:

1. U svakom domenu faze $\Omega_k^d(t)$, $(h, \mathbf{v}, P)(t, \mathbf{x})$ je jako rešenje.
2. Kada se menja faza, uvodimo uslov skoka na $\Gamma_l(t)$ i $\Gamma_g(t)$

$$\begin{cases} [\![\Lambda(h, p_*)\nabla h]\!] \cdot \mathbf{n} = 0, \\ [\![\mu(h, p_*)(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) + \eta(h, p_*)(\nabla \cdot \mathbf{v})I_d - PI_d]\!]\mathbf{n} = 0. \end{cases} \tag{2.18}$$

3. Šta više, h zadovoljava uslov neprekidnosti

$$[\![h]\!] = 0 \tag{2.19}$$

samo kada se prelazi iz tečne u mešovitu fazu.

Drugi set uslova skoka može biti priodno primenjen na LMNC model, oni će se i koristiti kod izvođenja neprekidnog stabilnog stanja (mi se u radu nećemo baviti slučajem kada imamo prelaz iz mešovite faze u gasovitu), jer se uz pomoć uslova (2.18) i (2.19) ne može dobiti stabilno stanje u jednoj dimenziji.

$$\begin{cases} [\![\rho(h, p_*)\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}]\!] = 0, \\ [\![\rho(h, p_*)h\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - \Lambda(h, p_*)\nabla h]\!] \cdot \mathbf{n} = 0, \\ [\![\rho(h, p_*)\mathbf{v} \otimes \mathbf{v} - \mu(h, p_*)(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T) + \eta(h, p_*)(\nabla \cdot \mathbf{v})I_d + PI_d]\!]\mathbf{n} = 0. \end{cases} \tag{2.20}$$

Koji set uslova skoka će biti korišćen zavisi od numeričke strategije i mora biti pažljivo proučen i odabran.

2.2 Numerička šema u jednoj dimenziji

Nekonzervativna formulacija LMNC modela (nekonzervativna formulacija se odnosi na diferencijalne operatore a ne na jednačinu koja očigledno nije konzervativna zbog nehomogonih delova) u jednoj dimenziji izgleda ovako:

$$\partial_y v = -\frac{p_*'(t)}{\rho(h, p_*)c^2(h, p_*)} + \frac{\beta(h, p_*)}{p_*}[\phi + \partial_y(\Lambda(h, p_*)\partial_y h)], \tag{2.21a}$$

$$\rho(h, p_*)[\partial_t h + v\partial_y h] = \phi + \partial_y(\Lambda(h, p_*)\partial_y h), \tag{2.21b}$$

$$\rho(h, p_*)[\partial_t v + v\partial_y v] + \partial_y P - \partial_y[(2\mu + \eta)(h, p_*)\partial_y v] = -\rho(h, p_*)g, \tag{2.21c}$$

Kako se u jednoj dimnziji prve dve jednačine mogu rešiti bez poslednje po entalpiji h i brzini v, a potom uvrstiti rešenja i dobiti dinamički pritisak P, u nastavku ćemo se baviti samo podsistemom koji se sastoji od jednačina (2.21a) i (2.21b). Napomenimo da ovo važi samo u jednodimnzionalnom slučaju. Za numeričko rešavanje LMNC sistema ćemo koristiti metod karakteristika koji je predstavljen u prvoj glavi.

2.2.1 Slučaj bez difuzije

Kao što smo napomenuli, u jednodimenzionalnom slučaju je moguće sistem (2.21) razdvojiti na dva dela, prvo rešavajući sistem od prve dve jednačine po h i v, a zatim dobijene rezultate iskoristiti u rešavanju treće jednačine po P. Koristimo da nam je p_* konstanto. Mi ćemo se baviti samo sistemom od prve dve jednačine. Bez difuznog dela on izgleda ovako:

$$\partial_y v = \frac{\beta(h, p_*)}{p_*}\Phi, \tag{2.22a}$$

$$\rho(h, p_*)[\partial_t h + v\partial_y h] = \Phi. \tag{2.22b}$$

Sada želimo da primenimo metod karakteristika na drugu jednačinu. Pratićemo isti postupak kao u prvoj glavi ovog rada.
Neka nam je domen dat sa $[0, L_y]$ i podeljen ekvidistantnim čvorovima tako da $y_i = (i-1)\Delta y$, $i \in \{1, ..., N_y\}$, gde je N_y broj čvornih tačaka i $\Delta y = \frac{L_y}{N_y - 1}$. Neka je Δt^n pozitivan korak u vremenu tako da je $t^0 = 0$ i $t^{n+1} = t^n + \Delta t^n$. Ukratko, metod karakteristika primenjen na jednačinu (2.22b) se sastoji iz rešavanje dve obične diferencijalne jednačine:

$$\begin{cases} \frac{d\chi}{d\tau}(\tau; t^{n+1}, y_i) = v(\tau, \chi(\tau; t^{n+1}, y_i)), \\ \chi(t; t^{n+1}, y_i) = y_i. \end{cases} \tag{2.23}$$

i

$$\frac{d}{d\tau}[h(\tau, \chi(\tau; t^{n+1}, y_i))] = \frac{\Phi(\tau, \chi(\tau; t^{n+1}, y_i))}{\rho(h(\tau, \chi(\tau; t^{n+1}, y_i)))}. \tag{2.24}$$

Sistem rešavamo u tri koraka.
1) Izračunavanje podnožja karakteristike
Za v koje zadovoljava jednačinu (2.22a), aproksimacija prvog reda rešanja jednačine (2.23) $\xi(t^n; t^{n+1}, y_i)$ je

$$\xi_i^n = y_i - \Delta t^n v_i^n, \tag{2.25}$$

a aproksimacija drugog reda je

$$\xi_i^n = y_i - \Delta t^n[\frac{3}{2}v_i^n - \frac{1}{2}v_i^{n-1}] + \frac{(\Delta t^n)^2}{2}v_i^n\frac{\beta(h_i^n)\Phi(t^n, y_i)}{p_*}. \tag{2.26}$$

2) Izračunavanje entalpije h_i^{n+1}
Sada rešavamo jednačinu (2.24). Mogu se desiti dva slučaja. Ako je $\xi_i^n \geq 0$ karakteristična kriva ne dostiže granicu $y = 0$ između t^n i t^{n+1}.

$$h(t^{n+1}, y_i) \approx h(t^n, \xi_i^n) + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{\Phi(\tau, \chi(\tau; t^{n+1}, y_i))}{\rho(h(\tau, \chi(\tau; t^{n+1}, y_i)))}d\tau$$

Korisitimo kvadratnu kvadraturnu formulu za aproksimaciju integrala:

$$h(t^{n+1}, y_i) \approx h_i^{n+1} = \hat{h}_i^n + \Delta t^n \frac{\Phi(t^n, \xi_i^n)}{\rho(\hat{h}_i^n)}. \tag{2.27}$$

$\hat{h}_i^n$ nam predstavlja aproksimaciju $h(t^n, \xi_i^n)$, koja je u skladu sa principom maksimuma i može biti prvog reda ako koristimo (1.14) ili višeg reda ako koristimo postupak (1.18). Ako je $\xi_i^n \leq 0$ dostižemo granicu $y = 0$ između t^n i t^{n+1}. Aproksimacija prvog reda vremena t_i^* u kojem se dostiže granica je

$$t_i^* = t^{n+1} - \frac{y_i}{v_i^n}.$$

Sada entalpiju računamo:

$$h_i^{n+1} = h_e(t_i^*) + (t^{n+1} - t_i^*) \frac{\Phi(t_i^*, 0)}{\rho_e(t_i^*, 0)}. \tag{2.28}$$

3) Izračunavanje brzine v_i^{n+1}

Brzinu dobijamo integraljenjem jednačine (2.22a). Koristimo i entalpije izračunate u prethodnom koraku. Imamo $v_1^{n+1} = v_e(t^{t+1})$. Ako koristimo aproksimaciju integrala prvog reda dobijamo

$$v_i^{n+1} = v_{i-1}^{n+1} + \Delta y \frac{\beta(h_{i-1}^{n+1})\Phi(t^{n+1}, y_{i-1})}{p_*}, \tag{2.29}$$

ili ako koristimo aproksimaciju drugog reda

$$v_i^{n+1} = v_{i-1}^{n+1} + \Delta y \frac{\beta(h_{i-1}^{n+1})\Phi(t^{n+1}, y_{i-1}) + \beta(h_i^{n+1})\Phi(t^{n+1}, y_i)}{2p_*}. \tag{2.30}$$

Možemo primetiti da ako je koeficijent kompresibilnosti nezavisan od entalpije h (na primer ako koristimo SG zakon i ako imamo samo jednu fazu), brzina ne zavisi od vremena.

Moramo obratiti pažnju na to da je β prekidna funkcija i da prilikom izračunavanja v_i^{n+1} može doći do nestabilnosti u intervalu gde nastaje promena faze. Zbog toga ako $h_k^s \in (h_{i-1}^{n+1}, h_i^{n+1})$, uvodimo linearnu aproksimaciju $\widetilde{y}_k^s$ za y_k^s, $k \in \{l, g\}$:

$$\widetilde{y}_k^s = y_{i-1} + \Delta y \frac{h_k^s - h_{i-1}^{n+1}}{h_i^{n+1} - h_{i-1}^{n+1}}.$$

Sada računamo brzinu v_i^{n+1} na sledeći način:

$$v_i^{n+1} = v_{i-1}^{n+1} + (\widetilde{y}_k^s - y_{i-1}) \frac{\beta(h_{i-1}^{n+1})\Phi(t^{n+1}, y_{i-1})}{p_*} + (y_i - \widetilde{y}_k^s) \frac{\beta(h_i^{n+1})\Phi(t^{n+1}, y_i)}{p_*}. \tag{2.31}$$

U nastavku, kada se koristi numerička šema koja obuhvata samo linearne aproksimacije, tj. formule (2.25), (1.14) u (2.27) i (2.29) zvaćemo je LMNCmoc1, a kada koristimo i aproksimacije višeg reda, tj. formule (2.26), (1.18) u (2.27) i (2.30) zvaćemo je LMNCmoc2. Seme su izvedene u [7].
Napomenimo da ova šema može da se koristi bez obzira koju jednačinu kontinuiteta koristimo. U slučaju kada koristimo SG jednačinu kontinuiteta numerička šema može biti prilagođena specijalno za taj slučaj. Zvacemo je INTMOC1 ili INTMOC2 u zavisnosti od reda aproksimacija koje se koriste. Ova šema je izvedena u [2].

INTMOC šema

Kada koristimo SG jednačinu kontinuiteta, jednačinu (2.24) mozemo zapisati na sledeći način:

$$\frac{d}{d\tau}[R(h(\tau,\chi(\tau;t^{n+1},y_i)))] = \Phi(\tau,\chi(\tau;t^{n+1},y_i)),$$

gde je R definisano po fazama tako da je $R'_k = \rho_k$. Dakle,

$$R(h) = \begin{cases} \frac{p_*}{\bar{\beta}_l} ln(\frac{h-\bar{q}_l}{\Im-\bar{q}_l}), & \text{ako} \quad h \le h_l^s, \\ R_l^s + \frac{p_*}{\bar{\beta}_m} ln(\frac{h-\bar{q}_m}{h_l^s-\bar{q}_m}), & \text{ako} \quad h_l^s < h < h_g^s, \\ R_g^s + \frac{p_*}{\bar{\beta}_g} ln(\frac{h-\bar{q}_g}{h_g^s-\bar{q}_g}), & \text{ako} \quad h \ge h_g^s, \end{cases}$$

gde je $\Im$ definisano sa (P10), a

$$R_l^s = \frac{p_*}{\hat{\beta}_l} ln(\frac{h_l^s-\bar{q}_l}{\Im-\bar{q}_l}) \qquad \text{i} \qquad R_g^s = R_l^s + \frac{p_*}{\bar{\beta}_m} ln(\frac{h_g^s-\bar{q}_m}{h_l^s-\bar{q}_m}).$$

Možemo primetiti da je funkcija R monotono rastuća, a samim tim i invertibilna:

$$R^{-1}(r) = \begin{cases} \bar{q}_l + (\Im-\bar{q}_l)e^{\bar{\beta}_l r/p_*}, & \text{ako} \quad r \le R_l^s, \\ \bar{q}_m + (h_l^s-\bar{q}_m)e^{\bar{\beta}_m(r-R_l^s)/p_*}, & \text{ako} \quad R_l^s < r < R_g^s, \\ \bar{q}_g + (h_g^s-\bar{q}_g)e^{\bar{\beta}_g(r-R_g^s)/p_*}, & \text{ako} \quad r \ge R_g^s. \end{cases}$$

U suštini, postupak dobijanja rešenja je isti kao u prethodnoj šemi, osim što se h_i^{n+1} računa na malo drugačiji način:

$$h_i^{n+1} = R^{-1}(R(\hat{h}_i^n) + \Delta t^n \frac{\Phi(t^n,\xi_i^n)+\Phi(t^{n+1},y_i)}{2}), \qquad \text{ako} \quad \xi_i^n \ge 0,$$

odnosno

$$h_i^{n+1} = R^{-1}(R(h_e(t_i^*)) + (t^{n+1}-t_i^*)\frac{\Phi(t_i^*,0)+\Phi(t^{n+1},y_i)}{2}), \qquad \text{ako} \quad \xi_i^n < 0.$$

Možemo primetiti da je u INTMOC šemi korišćena kvadraturna formula za aproksimaciju integrala koja je drugog reda tačnosti. Šema je izvedena u [6].
U delu sa numeričkim primerima ćemo dati poređenja svih numeričkih šema.

2.2.2 Neprekidno i diskretno stabilno stanje u slučaju bez difuzije

Sada ćemo se baviti neprekidnim i diskretnim stabilnim stanjima, tj. rešinjima kada $t \to \infty$. Navodimo prvo neprekidno stabilno stanje.

Teorema 2.1 (Neprekidno stabilno stanje). *Neka ρ_e, D_e i Φ ne zavise od vremena. Tada sistem (2.22) zadovoljava jedinstveno stabilno stanje dato sa*

$$h^\infty(y) = h_e + \frac{1}{D_e}\int_0^y \Phi(z)dz \tag{2.32}$$

i

$$v^\infty(y) = \frac{D_e}{\rho(h^\infty(y))}, \tag{2.33}$$

gde je h_e jedinstveno rešenje $\rho(h_e) = \rho_e$.

Dokaz. Polazeći od sistema (2.22) i kombinujući njene stabilne verzije (kada ne zavise od t), dolazimo do činjenice da je $\partial_y(\rho v) = 0$, što dalje implicira da je $(\rho v)(y) = \rho_e v_e(y) = D_e$. Tu smo koristili (2.2).
Sada imamo $D_e \partial_y h = \Phi$ pa integraljenjem dobijamo (2.32).
Izraz (2.33) dobijamo iz jednačine $\rho(h(y))v(y) = D_e$. □

Napomenimo da nam h^∞ zavisi od jednačine kontinuiteta samo preko h_e. Zbog toga nam je ovo tvrđenje bitno za proveru numeričke šeme.
Sada navodimo diskretno stabilno stanje za slučaj kada se pojavljuje samo jedna faza, tečna, za LMNCmoc1 šemu.

Teorema 2.2 (Diskretno stabilno stanje sa jednom fazom). *Posmatrajmo SG zakon za jednačinu kontinuiteta. Neka je $h_e + \frac{\Phi_*}{D_e}L_y < h_l^s$ (što znači da imamo samo tečnu fazu). Neka je dalje*

$$\Delta t^n \le \bar{\Delta t} = \frac{\Delta y}{\bar{V}}, \quad \bar{V} = v_e + \frac{\Phi_* \bar{\beta}_l}{p_*} L_y$$

i neka je Δy dovoljno malo

$$\Delta y \le \bar{\Delta y} = \frac{v_e p_*}{\Phi_* \bar{\beta}_l}. \tag{2.34}$$

Tada postoji diskretno stabilno stanje za LMNCmoc1 šemu:

$$\widetilde{h}_i = \frac{\theta_i[1 + \Delta t \hat{\Phi}_l]h_{i-1} - \Delta \hat{\Phi}_l \bar{q}_l}{\theta_i[1 + \Delta t \hat{\Phi}_l] - \Delta t \hat{\Phi}_l}, \qquad \hat{\Phi}_l = \frac{\bar{\beta}_l \Phi_*}{p_*} \tag{2.35}$$

i $h_1 = h_e$.

Dokaz. Da bismo došli do diskretnog stabilnog stanja, pretpostavljamo da nam važi $h_i^{n+1} = h_i^n$ za sve $i \in \{2, ..., N_y\}$ u LMNCmoc1 šemi. Tako dobijamo

$$h_i = \theta_i h_{i-1} + (1-\theta_i)h_i + \Delta t \frac{\Phi_*}{\rho(\theta_i h_{i-1} + (1-\theta_i)h_i)}, \qquad \theta_i = \frac{\Delta t}{\Delta y} v_i.$$

Sada koristimo relaciju za ρ (2.7) i dobijamo izraz (2.35). Imenilac nam je pozitivan pod pretpostavkom (2.34). Uslov na Δt^n implicira CFL uslov koji nam garantuje veću tačnost. □

Napomenimo da se može formalno pokazati i da numerička šema konvergira ka diskretnom stabilnom stanju kada $n \to \infty$. Mi ćemo konvergenciju pokazati kroz primere samo numerički.

2.2.3 Slučaj sa difuzijom

Sada ćemo dati objašnjenje numeričke šeme u difuzionom slučaju. Bavićemo se samo slučajem kada se pojavljuju najviše dve faze, tečna i mešavna, a sve zbog nedostatka informacija i nedovoljne istraženosti slučaja kada se pojavljuje i treća faza. Kako se u radu bavimo samo podsistemom LMNC modela u jednoj dimenziji koji se sastoji od prve dve jednačine, a rešenje treće se dobija nakon rešavanja prve dve, dodavanjem difuzionog člana imamo sledeći podsistem:

$$\partial_y v = \frac{\beta(h, p_*)}{p_*}[\Phi + \partial_y(\Lambda(h, p_*)\partial_y h)], \tag{2.36a}$$

$$\rho(h, p_*)[\partial_t h + v\partial_y h] = \Phi + \partial_y(\Lambda(h, p_*)\partial_y h). \tag{2.36b}$$

Numerička šema se bazira na metodi karakteristika i ima iste korake kao u bezdifuzionom slučaju, samo se način izračunavanja malo menja. Za predstavljanje šeme koristićemo iste oznake kao u bezdifuzionom slučaju.
Prvo izračunavamo podnožje karakteristične krive kao rešenje obične diferencijalne jednačine (2.23). Postupak je isti kada govorimo o linearnoj aproksimaciji i koristićemo formulu (2.25). Ukoliko želimo da pređemo na kvadratnu aproksimaciju, situacija je složenija. Moramo da uključimo i treću jednačinu sistema, a greška više ne zavisi samo od diskretizacije u vremenu Δt već i od diskretizacionog koraka u prostoru Δx. Ovde se nećemo baviti kvadratnom aproksimaijom.
Drugi korak predstavlja rešavanje druge obične diferencijalne jednačine, koja u difuzionom slučaju izgleda ovako:

$$\frac{d}{d\tau} h(\tau, \chi(\tau; t^{n+1}, y_i)) = \frac{\Phi(\tau; \chi(\tau; t^{n+1}, y_i))}{\rho(h(\tau; \chi(\tau; t^{n+1}, y_i)), p_*)} + [\frac{\partial_y(\Lambda(h, p_*)\partial_y h)}{\rho(h, p_*)}](\tau; t^{n+1}, y_i). \tag{2.37}$$

Kako znamo rešenja (h_i^n, v_i^n) u vremenu t^n, i kako smo aproksimirali podnožje karakteristične krive $\xi_i^n \approx \chi(t^n; t^{n+1}, y_i)$, koja u opštem slučaju ne mora biti čvorna tačka, koristili smo interpolaciju da izračunamo vrednost entalpije $h(t^n, \xi_i^n) \approx \hat{h}_i^n$. Da bismo bili u saglasnoti sa linearnom aproksimacijom ξ_i^n, koristićemo i linearnu interpolaciju da izračunamo $\hat{h}_i^n$ kao u formuli (1.14). Sada možemo dati diskretnu formulaciju jednačine (2.37)

$$\frac{h_i^{n+1} - \hat{h}_i^n}{\Delta t^n} = \frac{\Phi(t^n, \xi_i^n) + [\partial_y(\Lambda(h^n, p_*)\partial_y h^{n+1})]_{y_i}}{\rho(\hat{h}_i^n, p_*)}.$$

Difuzioni deo je diskretizovan na sledeći način:

$$[\partial_y(\Lambda(h^n, p_*)\partial_y h^{n+1})]_{y_i} = \frac{\Lambda(h^n_{i+\frac{1}{2}}, p_*)(h_{i+1}^{n+1} - h_i^{n+1})}{\Delta y^2} - \frac{\Lambda(h^n_{i-\frac{1}{2}}, p_*)(h_i^{n+1} - h_{i-1}^{n+1})}{\Delta y^2},$$

gde se $\Lambda(h^n_{i+\frac{1}{2}}, p_*)$ računa kao harmonijska sredina između $\Lambda(h^n_{i+1}, p_*)$ i $\Lambda(h^n_i, p_*)$. Konačno, numerička šema izgleda ovako:

$$(1+\frac{\Delta t^n}{\Delta y^2}\frac{\Lambda^n_{i+\frac{1}{2}} + \Lambda^n_{1-\frac{1}{2}}}{\rho(\hat{h}_i^n)})h_i^{n+1} - \frac{\Delta t^n}{\Delta y^2}\frac{\Lambda^n_{i+\frac{1}{2}}}{\rho(\hat{h}_i^n)}h_{i+1}^{n+1} - \frac{\Delta t^n}{\Delta y^2}\frac{\Lambda^n_{i-\frac{1}{2}}}{\rho(\hat{h}_i^n)}h_{i-1}^{n+1} = \hat{h}_i^n + \Delta t^n \frac{\Phi(t^n, \xi_i^n)}{\rho(\hat{h}_i^n)}.$$

U ovom izrazu, Δt^n i $\rho(\hat{h}_i^n)$ treba da se zamene sa $t^{n+1} - t_i^*$ i $\rho_e(t_i^*)$ kada karakteristika dostigne granicu $y = 0$ pre t^n, t_i^* se računa pomoću formule $t_i^* = t^{n+1} - y_i/v_i^n$. Ovo vodi do linearnog sistema

$$\mathcal{L}^n h^{n+1} = \mathcal{F}(\hat{h}^n, h_e). \tag{2.38}$$

Očigledno, $\mathcal{L}^n$ je tridiagonalna matrica, koja je ujedno i strogo dijagonalno dominantna, što znači da je invertibilna, pa sistem (2.38) može da se reši.
Napomenimo da se ovaj sistem može rešiti i bez traženja inverzne matrice korišćenjem Tomasovog algoritma.
Poslednji korak u rešavanju podsistema predstavlja ažuriranje brzine. Postupak se svodi na integraljenje jednačine (2.36a). Posebnu pažnju treba obratiti na interval u kojem dolazi do promene faze, kako su Λ i β neprekidne, može doći do nestabilnosti u rešenju ako se to ne uradi. Primenjuje se slična strategija kao u (2.31). Koristićemo samo linearne aproksimacije. Dakle treba da aproksimiramo integral

$$\int_{y_{i-1}}^{y_i} \frac{\beta(h, p_*)}{p_*}\partial_y(\Lambda(h, p_*)\partial_y h)dy \tag{2.39}$$

i dodamo ga na (2.30) kada nemamo promenu faze u intervalu (y_{i-1}, y_i), odnosno na (2.31) kada imamo. U prvom slucaju, koristeći da su β i Λ konstantne u svakoj pojedinačnoj fazi (pretpostavljamo SG zakon na primer), integral aproksimiramo sa:

$$\frac{\beta(h_i^{n+1})\Lambda(h_i^{n+1})}{p_*}\frac{h_i^{n+1} - h_{i-1}^{n+1}}{\Delta y} - \frac{\beta(h_{i-1}^{n+1})\Lambda(h_{i-1}^{n+1})}{p_*}\frac{h_{i-1}^{n+1} - h_{i-2}^{n+1}}{\Delta y}, \tag{2.40}$$

a kada imamo promenu faze:

$$\frac{\beta(h_i^{n+1})\Lambda(h_i^{n+1})}{p_*}\frac{h_i^{n+1}-h_l^s}{y_i-\widetilde{y}_l^s}-\frac{\beta(h_l^{s+})\Lambda(h_l^{s+})}{p_*}\frac{h_l^s-h_{i-1}^{n+1}}{\widetilde{y}_l^s-y_{i-1}}+$$
$$+\frac{\beta(h_l^{s-})\Lambda(h_l^{s-})}{p_*}\frac{h_l^s-h_{i-1}^{n+1}}{\widetilde{y}_l^s-y_{i-1}}-\frac{\beta(h_{i-1}^{n+1})\Lambda(h_{i-1}^{n+1})}{p_*}\frac{h_{i-1}^{n+1}-h_{i-2}^{n+1}}{\Delta y}, \tag{2.41}$$

gde se $\widetilde{y}_l^s$ računa kao i u slučaju bez difuzije.

2.2.4 Neprekidno stabilno stanje u slučaju sa difuzijom

Sada ćemo navesti i dokazati tvrđenje koje nam daje neprekidno stabilno stanje kada je difuzija uključena u model. Bavićemo se samo slučajem kada imamo samo tečnu ili tečnu i mešovitu fazu. Slučaj kada se pojavljuje i gasovita faza izostavljamo.

Teorema 2.3. *Neka je dat model (2.36) i neka se koristi SG zakon za jednačinu kontinuiteta i fizički zakon (2.16) za modifikovanu termalnu kondukciju. Neka su $\Phi(t,y)\equiv\Phi_*>0$, $\rho_e(t)\equiv\rho_e$ takva da zadovoljava (P6) i $D_e(t)\equiv D_e>0$ konstante. Neka je dalje $\delta_l=\frac{D_e}{\Lambda_l}$ i*

$$H_l(y)=h_e-h_l^s+\frac{\Phi_*}{D_e}[y-\frac{1-e^{-\delta_l L_y}}{\delta_l}].$$

Ako je $H(L_y)<0$, imamo samo tečnost u reaktoru i neprekidno stabilno stanje izgleda ovako:

$$h^\infty(y)=h_e+\frac{\Phi_*}{D_e}[y-\frac{e^{\delta_l y}-1}{\delta_l}e^{-\delta_l L_y}]. \tag{2.42}$$

Ako je $H_l(L_y)>0$, postoji jedinstveno $y_l^s\in(0,L_y)$ tako da je $H_l(y_l^s)=0$. Tada postoji stabilno rešenje u tečnom i mešovitom stanju koje zadovoljava uslove skoka (2.20) i (2.19):

$$h^\infty(y)=\begin{cases}h_e+\frac{\Phi_*}{D_e}[y-\frac{e^{\delta_l y}-1}{\delta_l}e^{-\delta_l y_l^s}], & 0\le y\le y_l^s\\ h_l^s+\frac{\Phi_*}{D_e}(y-y_l^s), & y_l^s\le y\le L_y.\end{cases} \tag{2.43}$$

Šta više, imamo $v^\infty(y)=\frac{D_e}{\rho(h^\infty(y))}$.

Dokaz. Prvo treba da napomenemo da, slično kao u bezdifuzionom slučaju, kombinovanjem (2.36a) i stabilne verzije (2.36b) dobijamo $\partial_y(\rho v)=0$ iz čega sledi

$$(\rho v)(y)=D_e$$

pa je prvi uslov u (2.20) automatski zadovoljen.
Iz stabilne formulacije jednačine (2.36b) dobijamo običnu diferencijalnu jednačinu

$$D_e h' - \Lambda_l h'' = \Phi_*$$

za $\Lambda_l \neq 0$, čije je rešenje

$$h(y) = \frac{\Phi_*}{D_e} y + \delta_l e^{\delta_l y} C_1 + C_2. \tag{2.44}$$

Sve dok je $H_l(y) < 0$ znamo da imamo samo tečnu fazu za sve $y \in [0, L_y]$. Konstante C_1 i C_2 dobijamo iz uslova $h_l(0) = h_e$ i $h_l'(L_y) = 0$. Tako dolazimo do (2.42).
Ukoliko je $H_l(y) \geq 0$, imamo jedinstveno rešenje y_l^s jednačine $H_l(y_l^s) = 0$. Uslov dva u (2.20) u našem slučaju izgleda ovako:

$$h(y_l^s)^+ - h(y_l^s)^- + \frac{h'(y_l^s)^-}{\delta_l} = 0$$

uz uslov (2.19) imamo $h(y_l^s)^+ = h(y_l^s)^-$ pa sledi da za $y \in (0, y_l^s)$, gde je predstavljena tečna faza imamo uslove $h'(y_l^s)^- = 0$ i $h(0) = h_e$ uz pomoć kojih računamo C_1 i C_2 u (2.44). Za $y \in (y_l^s, L_y)$ kako je $\Lambda_m = 0$ rešavamo jednačinu $D_e h' = \Phi_*$ uz uslov $h(y_l^s) = h_l^s$. Tako dobijamo rešenje (2.43).
Bitno je da pazimo na uslov

$$h^\infty(L_y) = h_l^s + \frac{\Phi_*}{D_e}(L_y - y_l^s) < h_g^s$$

kako ne bismo imali gasovitu fazu. □

Primetimo da kada $\Lambda_l \to 0$ stabilno stanje iz Teoreme 2.3 teži ka stabilnom stanju iz Teoreme 2.1. Više objašnjenja se nalazi u [8].

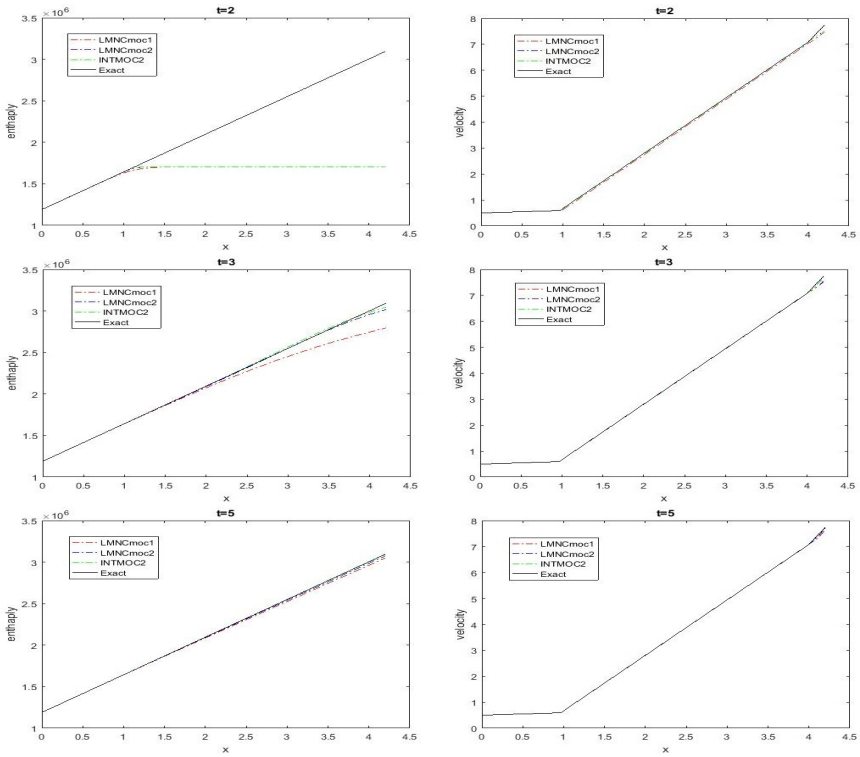
2.3 Numerički primeri u jednoj dimenziji

U ovom poglavlju će biti predstavljeno par primera koji će da potkrepe teorijske rezultate. Za izračunavanja je korišćen programski paket MATLAB.

Primer 1:

U prvom primeru ćemo predstaviti numerička rešenja u zavisnosti od vremenskog trenutka i pokazati da teže ka neprekidnom stabilnom stanju kako vreme prolazi. Neka je $L = 4.2$, $p_* = 155 \times 10^5$, $\Phi = 170 \times 10^6$, $h_0 = 1.190 \times 10^6$, $h_e = 1.190 \times 10^6$ i $v_0 = 0.5$. Broj čvornih tačaka je 100 odnosno $\Delta y = 4.2/100$. Korišćen je SG zakon

za jednačinu kontinuiteta, a podaci se nalaze u tabelama 2.3 i 2.4. U ovom slučaju predstavljene su sve tri faze. Na slici 2.2 možemo primetiti da šeme LMNCmoc1, LMNCmoc2 i INTMOC2 kako vreme prolazi teže ka neprekidnom stabilnom stanju. Za vreme $t = 5$ rešenja se više ne pomiču, a odstupanje od tačnog rešenja je posledica diskretizacije i predstavlja numeričku grešku. Kada bismo pustili da vreme teži u beskonacnost a korak diskretizacije Δy u nulu, šema bi konvergirala ka neprekidnom stabilnom stanju. Možemo primetiti i da je u ovom primeru INTMOC2 šema najbolja aproksimacija, zatim idu LMNCmoc2 i LMNCmoc1. Napomenimo i da je INTMOC šema specijano izvedena za SG zakon.

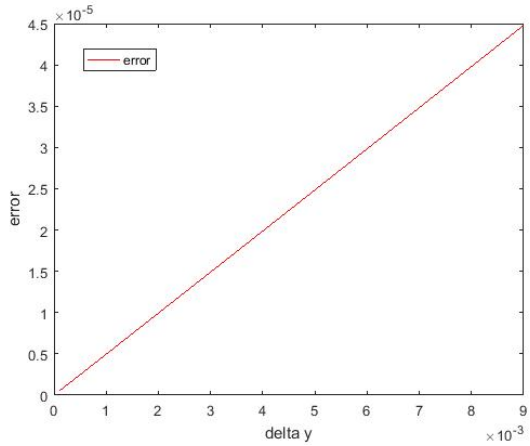


Slika 2.2: Poređenje LMNCmoc1, LMNCmoc2, INTMOC2 sa neprekidnim stabilnim stanjem

Primer 2:

Sada ćemo pokazati da relativna greška između neprekidnog stabilnog stanja (Teorema 2.1) i diskretnog stabilnog stanja (Teorema 2.2) teži u nulu kada korak diskretizacije $\Delta y \to 0$. Na slici 2.3 predstavljen je odnos Δy i greške koja je izračunata na sledeći način: $error = \frac{||h^{\infty} - \widetilde{h}||_2}{||h^{\infty}||_2}$. Korišćeni su isti podaci kao u prvom primeru osim

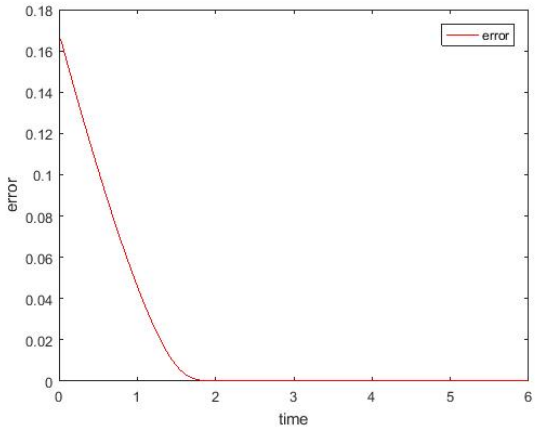
što je sada $L = 0.9$ kako ne bismo imali prelazak u mešovitu fazu.



Slika 2.3: Konvergencija diskretnog stabilnog stanja ka neprekidnom stabilnom stanju

Primer 3:

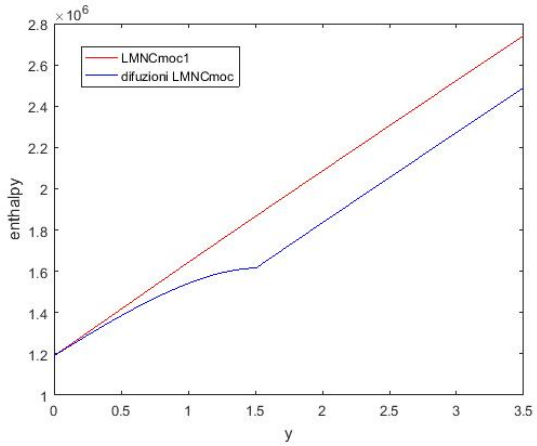
U ovom primeru ćemo pokazati da LMNCmoc1 šema konvergira ka diskretnom stabilnom stanju iz Teoreme 2.2 kada $t \to \infty$. Opet koristimo iste podatke kao u prvom primeru s tim što nam je $L = 0.9$ kako bismo imali samo tečnu fazu. Na Slici 2.4 vidimo da relativna greška $error = \frac{||h-\widetilde{h}||_2}{\widetilde{h}}$ teži u nulu kada vreme teži u beskonacnost.



Slika 2.4: Konvergencija LMNCmoc1 šeme ka diskretnom stabilnom stanju

Primer 4:

Sada ćemo uporediti LMNCmoc1 šemu sa šemom koja uključuje difuziju, prvo sa nefizički velikom termalnom kondukcijom $\bar{\lambda}_l = 10^6$, a zatim i sa fizički realnom (formula 2.17). Koristićemo iste podatke kao u prvom primeru, s tim što ćemo promeniti L da ne bismo imali gasovitu fazu. Neka je $L = 3.5$ i $\Delta y = 3.5/100$. Dobijeni rezultati su izračunati u vremenu $T = 10$. Na Slici 2.5 vidimo da su u mešovitoj fazi rešenja paralelna, a razlog je što je difuzija u mešovitoj fazi jednaka nuli.

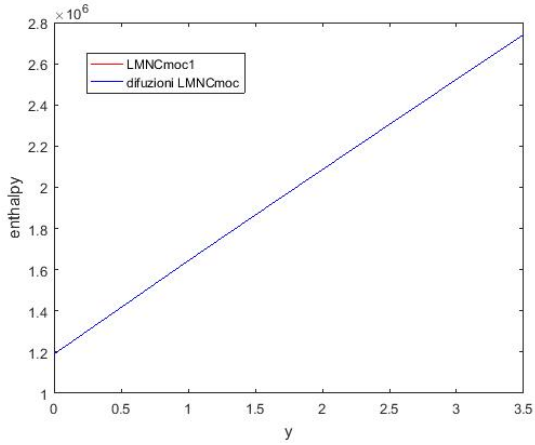


Slika 2.5: Odnos rešenja sa i bez difuzije kada je termalna kondukcija nerealno velika

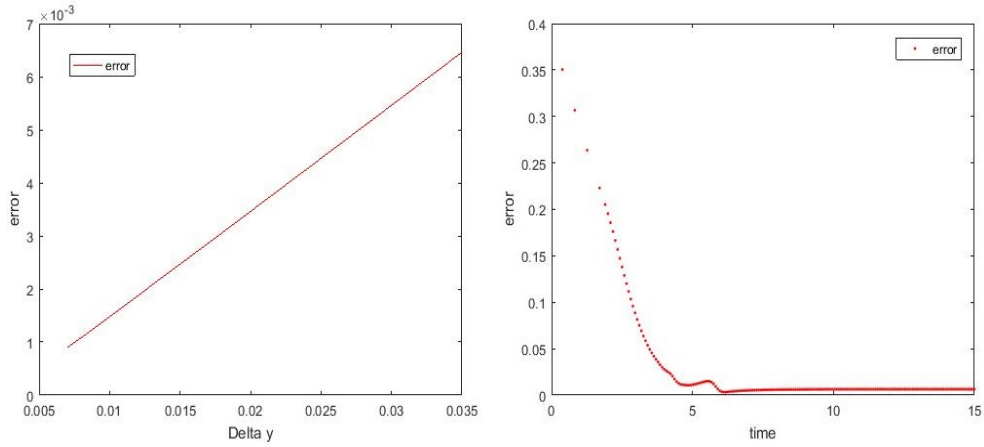
Kada poredimo bezdifuzioni i difuzioni slučaj sa fizički realnom termalnom kondukcijom iz formule (2.17) primećujemo da dodavanje difuzije ne utiče mnogo na rešenje. Zbog toga na Slici 2.6 ne vidimo nikakvu razliku u rešenjima. Relativna razlika između rešenja u ovom slučaju iznosi 10^{-8}.

Primer 5:

U ovom primeru ćemo porediti difuzionu MOC šemu sa neprekidnim stabilnim stanjem iz Teoreme 2.3. Koristićemo podatke kao iz prethodnog primera sa nerealno velikom termalnom kondukcijom $\bar{\lambda}_l = 10^6$ jer smo videli da mala kondukcija ne menja mnogo rešenje. Na Slici (2.7) levo, možemo primetiti da kada se Δy smanjuje greška se isto smanjuje. Rezultati su izračunati u vremenu $T = 15$. Na Slici (2.7) desno, vidimo da kada fiksiramo Δy i pustimo vreme da teče, greška se smanjuje i konvergira ka broju koji nije nula. Greška je posledica diskretizacije u prostoru. Da bismo dobili konvergenciju u broj nula numeričkog rešenja ka neprekidnom stabilnom stanju treba da $\Delta y \to 0$ i $t \to \infty$.



Slika 2.6: Odnos rešenja sa i bez difuzije kada je termalna kondukcija realna u fizičkom smislu



Slika 2.7: Levo: Greška se smanjuje kako se Δy samnjuje kada je T fiksirano; Desno: Greška kada se vreme povećava za fiksirano Δy

Dodatak-kodovi

Kod za MOC1 šemu

```
function H=cflMOC1(L,T,nx)    % f(i,j) i-time, j-space
%T-time, L-length, nx-number of nodal points in space
dx=L/nx; x=0:dx:L;
global u f h0 he
H0=h0(x); cfl=1;
H=zeros(nx+1,1);
v=max(u(0,x)); dt=cfl*dx/v;
t=[0 dt]; i=2;
while t(i)<T
    H(1)=he(t(i));
    for j=2:nx+1    % j goes through the space
        z=x(j)-dt*u(t(i-1),x(j));
        if i==2
            h=h0(z);
        else
            theta=(x(j)-z)/dx;
            h=theta*H0(j-1)+(1-theta)*H0(j);
        end
        H(j)=h+dt*f(t(i-1),z);
    end
    H0=H;
    v=max(u(t(i-1),x)); dt=cfl*dx/v;
    if t(i)+dt>=T
        dt=T-t(i);
    end
    t=[t t(i)+dt];
    i=i+1;
end
```

Kod za MOC1 šemu u dve dimenzije

```
function H=cfl_MOC1_2D(Lx1,Lx2,Ly1,Ly2,T,nx,ny)
global u1 u2 f
dx=(Lx2-Lx1)/nx; dy=(Ly2-Ly1)/ny;
x=Lx1:dx:Lx2; y=Ly1:dy:Ly2;
H=zeros(nx+1,ny+1); H0=zeros(nx+1,ny+1);
for i=1:nx+1
    for j=1:ny+1
        H0(i,j)=h0(x(i),y(j));
    end
end
cfl=1;
v=max(max(abs(u1(0,x,y)),abs(u2(0,x,y))));
dt=cfl*min(dx,dy)/v;
t=[0 dt]; n=2;
while t(n)<T
    for i=2:nx
        for j=2:ny
                zx=x(i)-dt*u1(t(n-1),x(i),y(j));
                zy=y(j)-dt*u2(t(n-1),x(i),y(j));
                if u1(t(n-1),x(i),y(j))>0
                    thetax=(x(i)-zx)/dx;
                else
                    thetax=(x(i+1)-zx)/dx;
                end
                if u2(t(n-1),x(i),y(j))>0
                    thetay=(y(j)-zy)/dy;
                else
                    thetay=(y(j+1)-zy)/dy;
                end
            if n==2
                h=h0(zx,zy);
            else
                %interpolation
                if u1(t(n-1),x(i),y(j))>0 && u2(t(n-1),x(i),y(j))>0
                    h=H0(i-1,j-1)*thetax*thetay+H0(i-1,j)*
                    thetax*(1-thetay)+H0(i,j-1)*thetay*(1-thetax)+
                    H0(i,j)*(1-thetax)*(1-thetay);
                elseif u1(t(n-1),x(i),y(j))>0 && u2(t(n-1),x(i),y(j))<=0
                    h=H0(i-1,j)*thetax*thetay+H0(i-1,j+1)*thetax*
```

```
                    (1-thetay)+H0(i,j)*thetay*(1-thetax)+H0(i,j+1)*
                    (1-thetax)*(1-thetay);
                elseif u1(t(n-1),x(i),y(j))<=0 && u2(t(n-1),x(i),y(j))>0
                    h=H0(i,j-1)*thetax*thetay+H0(i,j)*thetax*
                    (1-thetay)+H0(i+1,j-1)*thetay*(1-thetax)+
                    H0(i+1,j)*(1-thetax)*(1-thetay);
                elseif u1(t(n-1),x(i),y(j))<=0 && u2(t(n-1),x(i),y(j))<=0
                    h=H0(i,j)*thetax*thetay+H0(i,j+1)*thetax*
                    (1-thetay)+H0(i+1,j)*thetay*(1-thetax)+
                    H0(i+1,j+1)*(1-thetax)*(1-thetay);
                end
            end
            H(i,j)=h+dt*f(t(n),x(i),y(j));
        end
    end
    H0=H;
    v=max(max(abs(u1(t(n),x,y)),abs(u2(t(n),x,y)))); dt=cfl*min(dx,dy)/v;
    if t(n)+dt>=T
        dt=T-t(n);
    end
    t=[t t(n)+dt];
    n=n+1;
end
```

Kod za LMNCmoc1 šemu

```
function [H, V]=cfl_LMNCmoc1(L,T,nx)
%H-enthalpy solution, V-velocity solution
%T-time, L-length, nx-number of nodal points in space
global p h0 he vel_0 vel_e fi hl hg betag
dx=L/nx; x=0:dx:L; cfl=1;
H=zeros(nx+1,1); V=zeros(nx+1,1);
V0=vel_0(x); H0=H;
v=max(V0); dt=cfl*dx/v;
t=[0 dt]; i=2;
while t(i)<T
    H(1)=he(t(i));
    for j=2:nx+1
        z=x(j)-dt*V0(j);
        if i==2
            h=h0(z);
        else
```

```
            theta=(x(j)-z)/dx;
            h=theta*H0(j-1)+(1-theta)*H0(j);
        end
        H(j)=h+dt*fi(t(i-1),z)/density(h);
    end
    %update of the velocity
    V(1)=vel_e(t(i));
    for j=2:nx+1
        if hl>H(j-1) && hl<H(j)
            xl=x(j-1)+dx*(hl-H(j-1))/(H(j)-H(j-1));
            V(j)=V(j-1)+(xl-x(j-1))*beta(H(j-1))*fi(t(i),x(j-1))/p+
            (x(j)-xl)*beta(H(j))*fi(t(i),x(j))/p;
        elseif hg>H(j-1) && hg<H(j)
            xg=x(j-1)+dx*(hg-H(j-1))/(H(j)-H(j-1));
            V(j)=V(j-1)+(xg-x(j-1))*beta(H(j-1))*fi(t(i),x(j-1))/p+
            (x(j)-xg)*beta(H(j))*fi(t(i),x(j))/p;
        else
            V(j)=V(j-1)+dx*(beta(H(j-1))*fi(t(i),x(j-1)))/p;
        end
    end
    v=max(V); dt=cfl*dx/v1;
    if t(i)+dt>=T
        dt=T-t(i);
    end
    t=[t t(i)+dt];
    H0=H; V0=V;
    i=i+1;
end
```

Zaključak

Parcijane diferencijanle jednačine pronalaze svoju primenu u najrazličitijim obastima nauke, ali i samog života. Rad se bazirao na numeričkoj šemi za rešavanje transportne jednačine i LMNC modela, modela koji dobro opisuje ponašanje fizičkih varijabli, poput brzine, entalpije, pritiska itd, u nuklearnom reaktoru kada je Mahov broj blizak nuli.

Transportna jednačina predstavlja linearnu parcijalnu diferencijalnu jednačinu prvog reda i u prvom delu ovog rada predstavljena je numerička šema za njeno rešavanje, metod karakteristika. U delu sa primerima pokazana je validnost dobijenih rezultata za jednodimenzionalni slučaj, odnosno konvergencija ka neprekidnom i diskretnom stabilnom stanju. Greška numeričke šeme zavisi od diskretizacije prostornog i vremenskog intervala. Šema proširena na dve dimenzije predstavljena je na kraju prve glave, ali u najednostavlnijem slučaju, prostorni interval je diskretizovan na pravougaonike, a aproksimacije su linearne. Ovo predstavlja podlogu za dalja unapređenja numeričke šeme.

U drugoj glavi metod karakteristika je primenjen na LMNC sistem u jednoj dimenziji, zahvaljujući postojanju transportne jednačine u modelu. Objašnjen je sistem kao i fizička pozadina istog. U delu sa primerima pokazani su rezultati, odnosno konvergencije ka neprekidnim i diskretnim stabilnim stanjima u specijanim slučajevima. Model ostavlja dosta prostotra za dalji rad i unapređenje numeričke šeme, ali isto tako i za nova istraživanja u teorijskom smislu.

Literatura

[1] Y. Penel, An explicit stable numerical scheme for the 1D transport equation. Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. S 5 (2012) 641–656.

[2] M. Bernard, S. Dellacherie, G. Faccanoni, B. Grec, and Y. Penel. Study of a low Mach nuclear core model for two-phase flows with phase transition I: stiffened gas law. ESAIM Math. Model. Numer. Anal., 48(6):1639–1679, 2014.

[3] F. Boyer and P. Fabrie, "Elements d'analyse pour l'etude de quelques modeles d'ecoulements de fluides visqueux incompressibles", Springer-Verlag, Berlin, 2006.

[4] E. Godlewski and P.-A. Raviart, "Numerical Approximation of Hyperbolic Systems of Conservation Laws," Springer-Verlag, New-York, 1996.

[5] J. Marsden and A. Chorin, "A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics," SpringerVerlag, New-York, 1979.

[6] S. Dellacherie, G. Faccanoni, B. Grec, and Y. Penel. Accurate steam-water equation of state for two-phase flow LMNC model with phase transition. 2018.

[7] M. Bernard, S. Dellacherie, G. Faccanoni, B. Grec, O. Lafitte, T.-T. Nguyen, and Y. Penel. Study of low Mach nuclear core model for single-phase flow. In ESAIM:Proc, volume 38, pages 118–134, 2012.

[8] A. Bondesan, S. Dellacherie, H. Hivert, J. Jung, V. Lleras, C. Mietka, and Y. Penel. Study of a depressurisation process at low Mach number in a nuclear core reactor. In CEMRACS 2015: Coupling multi-physics models involving fluids, volume 55 of ESAIM:ProcS, pages 41–60, 2015.

[9] S. Dellacherie. On a low Mach nuclear core model. In SMAI 2011, volume 35 of ESAIM:Proc, pages 79–106, 2012.

[10] Y. Penel, Existence of global solutions to the 1D abstract bubble vibration model. Differ. Integral Equ. 26 (2013) 59–80.

[11] W.F. Ames. Numerical methods for partial differential equations. Academic press, 1977.

[12] O. Le Métayer and R. Saurel. The Noble-Abel Stiffened-Gas equation of state. Phys. Fluids, 28:046102, 2016.

[13] E.W. Lemmon, M.O. McLinden, and D.G. Friend. Thermophysical Properties of Fluid Systems. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899.

[14] N. Zuber. Flow excursions and oscillations in boiling, two-phase flow systems with heat addition. In Symposium on Two-phase Flow Dynamics, Eindhoven EUR4288e, pages 1071–1089, 1967.

[15] R. Menikoff and B.J. Plohr. The Riemann problem for fluid flow of real materials. Rev. Modern Phys., 61(1):75–130, 1989.

Kratka biografija

Davor Kumozec je rođen 15. aprila 1994. godine u Subotici. Osnovnu školu "Miroslav Antić"na Paliću je završio 2009. godine kao nosilac diplome "Vuk Stefanović Karadžić". Ekonomsku srednju školu u Subotici je završio 2013. godine sa odličnim uspehom. Iste godine upisuje osnovne studije na Prirodno-matematičkom fakultetu u Novom Sadu, smer primenjena matematika-matematika finanasija i završava 2016. sa uspehom 9,38. Iste godine upisuje master studije primenjene matematike na Prirodno-matematičkom fakultetu u Novom Sadu i sve ispite polaže zaključno sa januarsko-febrarskim rokom 2018. sa prosekom 9,67. Tokom studija učestvovao je na festivalima nauke u Beogradu i Novom Sadu. Proveo je letnji semestar druge godine master studija u Parizu na Dekartovom univerzitetu, radeći na projketu vezanom za numeričko rešavanje parcijalnih diferencijalnih jednačina koji je poslužio za pisanje ovog rada.

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

Redni broj:
RBR
Identifikacioni broj:
IBR
Tip dokumentacije: *monografska dokumentacija*
BF
Tip zapisa: *tekstualni štampani materijal*
TZ
Vrsta rada: *master rad*
VR
Autor: *Davor Kumozec*
AU
Mentor: *prof. dr Marko Nedeljkov*
MN
Naslov rada: *Numeričko rešenje transportne jednačine i LMNC modela pomoću metode karakteristika*
NR
Jezik publikacije: *srpski(latinica)*
JP
Jezik izvoda: *s/e*
JI
Zemlja publikovanja: *Republika Srbija*
ZP
Uže geografsko područje: *Vojvodina*
UGP
Godina: *2018.*
GO
Izdavač: *autorski reprint*
IZ
Mesto i adresa: *Novi Sad, Trg Dositeja Obradovića 4*
MA
Fizički opis rada: *text*
FO
Naučna oblast: *matematika*
NO

Naučna disciplina: *primenjena matematika*
ND
Ključne reči: *metod karakteristika, transportna jednačina, LMNC model*
PO
UDK
Čuva se: *u biblioteci Departmana za matematiku i informatiku, Prirodno-matematičkog fakulteta, u Novom Sadu*
ČU
Važna napomena:
VN
Izvod: *Master rad će se sastojati iz dva dela. U prvom delu pažnja će biti posvećena numeričkom rešenju transportne jednačine metodom karakteristika u jednoj i dve dimenzije, kao i upoređivanju sa analitičkim rešenjima i proučavanjem konvergencije prema diskretnim i neprekidnim stabilnim stanjima. U šemi se mogu koristiti linearne aproksimacije ili aproksimacije većeg reda tačnosti. Poređenja će takođe biti predstavljena. Uvodi se i podela prostornog intervala na neekvidistantnu mrežu. Zatim nas zanima šta se dešava sa numeričkim rešenjem kada vreme teži u beskonačnost. Neprekidno stabilno stanje je tačno rešenje nakon beskonačno mnogo vremena, a diskretno stabilno stanje je numeričko rešenje nakon beskonačno mnogo iteracija. Diskretno stabilno stanje konvergira ka neprekidnom kada korak diskretizacije u prostoru teži ka nuli. Zatim ćemo kroz konkretne primere to i pokazati. Na kraju prvog dela metod karakteristika će biti proširen na dve prostorne dimenzije. U drugom delu, numerički metod će se proširiti na LMNC (Low Mach Number Core) model u jednoj dimenziji. To je model koji se dobija iz Navijer-Stoksovih jednačina kada je Mahov broj blizak nuli. Prvo će se dati kratak uvod u jednačine i objašnjenje fizičkih varijabli, kao i jednačine kontinuiteta (equation of state), a zatim će se objasniti numerička šema. Prvo će biti predstavljena numerička šema kada je difuzija zanemarena, a zatim i malo komplikovaniji slučaj kada šema uzima i difuzioni član u obzir. Posle toga će se sprovesti poređenja sa diskretnim i neprekidnim stabilnim stanjima u zavisnosti od reda tačnosti šeme koja se koristi i u zavisnosti od jednačine kontinuiteta, kada imamo slučaj bez difuzije. U difuzionom slučaju imamo samo neprekidno stabilno stanje. Novina leži u proširenju postojećih umeričkih šema na dve dimenzije i u pokretanju nekoliko poređenja od velikog interesa za procenu numeričke strategije. Na kraju rada će biti priloženi Matlab kodovi koji su se koristili prilikom numeriških proračuna.*
IZ
Datum prihvatanja teme od strane NN veća: *07.08.2018.*
DP
Datum odbrane:
DO
Članovi komisije:
KO
Predsednik: *dr Nataša Krklec Jerinkić, docent*
Član: *dr Marko Nedeljkov, redovni profesor*
Član: *dr Milana Čolić, docent*
Član: *dr Bérénice Grec, docent Univerziteta u Parizu*

UNIVERSITY OF NOVI SAD
FACULTY OF SCIENCES
KEY WORD DOCUMENTATION

Accession number:
ANO
Identification number:
INO
Document type: *monograph type*
DT
Type of record: *printed text*
TR
Contents code: *Master thesis*
CC
Author: *Davor Kumozec*
AU
Mentor: *prof. Marko Nedeljkov, PhD*
MN
Title: *Numerical solution of transport equation and LMNC model by means of the method of characteristics*
XI
Language of text: *Serbian(latin)*
LT
Language of abstract: *s/e*
LA
Country of publication: *Republic of Serbia*
CP
Locality of publication: *Vojvodina*
LP
Publication year: *2018.*
PY
Publisher: *author's reprint*
PU
Publ. place: *Novi Sad, Trg Dositeja Obradovića 4*
PP
Physical description: *text*
PD
Scientific field: *mathematics*
SF
Scientific discipline: *applied mathematics*
SD
Key words: *method of characteristics, transport equation, LMNC model*
UC

Holding data: *Department of Mathematics and Informatics' Library, Faculty of Sciences, Novi Sad*

HD

Note:

N

Abstract: *The master thesis would consist of two parts. In the first part, attention would be devoted to the numerical resolution of the transport equation by the method of characteristics in one and two dimensions, as well as comparisons with analytical solutions and the study of convergence towards discrete and continuous steady states. In schemes we can use linear approximations or approximations of higher order. Comparisons also will be present. We will introduce non-homogeneous meshes too. After that, we will be interested in what is happening with numerical solution when time tends to infinity. Continuous steady state is exact solution after infinite time and discrete steady state is numerical solution after infinite time. Discrete steady state converges to continuous steady state when discretization step in space tends to zero. After that we will show that through the concrete examples. At the end of the first part method of characteristics will be extended to two spatial dimensions. In the second part, the numerical method would be extended to the LMNC (Low Mach Nuclear Core) model in one dimension. This is a model which is obtained from Navier-Stokes equations when Mach number is close to zero. First we will give a short introduction to equations and explanation of physical variables as well as equation of state and then numerical scheme will be explained. After we will carry out comparisons with discrete and continuous steady states depending on the order of accuracy of scheme and depending on which EOS is used. The novelty lies in the extension to 2D of the existing numerical schemes and in the running of several comparisons of great interest for assessment of the numerical strategy. At the end of master work Matlab codes, which are used in numerical computations, will be attached.*

AB

Accepted by the Scientific Board on: *07.08.2018.*

ASB

Defended:

DE

Thesis defend board:

DB

President: *Nataša Krklec Jerinkić, PhD*
Member: *Marko Nedeljkov, PhD*
Member: *Milana Čolić, PhD*
Member: *Bérénice Grec, PhD*