ZESZYTY NAUKOWE POLITECHNIKI ŚLĄSKIEJ 1973
Seria: MATEMATYKA-FIZYKA z. 23 Nr kol. 485

M. Pazdur, A. Pazdur
Instytut Fizyki Politechniki Śląskiej

NUMERYCZNE ROZWIĄZANIE RÓWNANIA TERMODYFUZJI

Streszczenie. W pracy opisano metodę różnic skończonych, zastosowaną do rozwiązania zlinearyzowanego równania dyfuzji w drutowej kolumnie termodyfuzyjnej. Przedyskutowano problem stabilności obliczeń oraz podano opis programu i możliwości jego zastosowań.

Równanie opisujące proces dyfuzji termicznej w drutowej kolumnie termodyfuzyjnej jest równaniem różniczkowym cząstkowym drugiego rzędu, nieliniowym, typu parabolicznego. Ze względu na występowanie członu nieliniowego otrzymanie dokładnego analitycznego rozwiązania tego równania jest niemożliwe. Rozwiązanie analityczne otrzymuje się po zlinearyzowaniu równania, co jest możliwe w dwóch przypadkach: po pierwsze, gdy początkowe stężenia rozdzielanych substancji są w przybliżeniu równe, zaś wymagany stopień separacji jest mały i po drugie, gdy stężenie jednego ze składników jest znacznie mniejsze niż drugiego. Rozwiązanie analityczne dla pierwszego przypadku dla kolumny termodyfuzyjnej pracującej w sposób ciągły zostało otrzymane w [1], a dla przypadku drugiego dla kolumny pracującej w sposób nieciągły w [2, 3]. Otrzymane rozwiązania są przybliżone i są kłopotliwe w użyciu, gdyż zawierają nieskończony szereg i wyliczenie wartości liczbowych stężenia jest dość trudne, i jest obarczone dodatkowym błędem. Z tych względów równanie termodyfuzji rozwiązano numerycznie stosując metodę siatek.

1. Opis metody numerycznej

Ogólne równanie termodyfuzji ma postać [4]

$$\mu \frac{\partial u}{\partial t} = K \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + H \frac{\partial}{\partial x}\left[u(1 - u)\right], \tag{1.1}$$

gdzie $u = u(x,t)$ oznacza stężenie cięższego składnika.

Rozpisując ostatni wyraz po prawej stronie otrzymujemy

$$\mu \frac{\partial u}{\partial t} = K \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + H \frac{\partial u}{\partial x} - 2Hu \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (1.2)$$

Ostatni wyraz po prawej stronie (1.2) jest zaniedbywalnie mały w porównaniu z pozostałymi, gdyż występuje tu iloczyn dwóch bardzo małych wielkości. W rozważanym zagadnieniu wnosi on tylko niewielkie poprawki, leżące poniżej dokładności metod numerycznych [5]. Rozwiązano więc równanie

$$\mu \frac{\partial u}{\partial t} = K \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + H \frac{\partial u}{\partial x} \quad (1.3)$$

przy warunku początkowym

$$u(x,0) = \varphi(x),$$

gdzie $\varphi(x)$ oznacza znany rozkład stężenia początkowego i warunkach brzegowych postaci

$$Ku_x(0,t) + Hu(0,t) = 0 \quad (1.3a)$$

$$Ku_x(l,t) + Hu(l,t) = 0 \quad (1.3b)$$

Symbol u_x oznacza pochodną $\partial u/\partial x$, l - długość kolumny. Aby rozwiązać to równanie metodą siatek, należy przejść do zmiennych bezwymiarowych $x' = x/l$ oraz $t' = t/\tau$, gdzie τ - czas trwania procesu termodyfuzji. W zmiennych bezwymiarowych równanie (1.3) ma postać

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{K\tau}{\mu l^2} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{H\tau}{\mu l} \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (1.4)$$

gdzie $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq t \leq 1$.

Oznaczmy przez $u(m, n)$ wartość stężenia radonu w punkcie $x = m \cdot \Delta x$, w chwili $t = n \cdot \Delta t$, a przez $u_x(m, n)$, $u_{xx}(m, n)$ i $u_t(m, n)$ wartości odpowiednich pochodnych w tym punkcie. Pochodne cząstkowe zastępujemy ilorazami różnicowymi:

$$u_t(m, n) = \frac{1}{\Delta t}\left[u(m, n+1) - u(m, n)\right] \quad (1.5a)$$

$$u_x(m, n) = \frac{1}{\Delta x}\left[u(m, n) - u(m, n-1)\right] \quad (1.5b)$$

$$u_{xx}(m, n) = \frac{1}{(\Delta x)^2}\left[u(m+1, n) - 2u(m, n) + u(m-1, n)\right] \quad (1.5c)$$

Wstawiając (1.5a-c) do (1.4) otrzymujemy

$$u(m, n+1) = (1 - 2a + b)u(m, n) + a \cdot u(m+1, n) + (a - b)u(m-1, n), \quad (1.6)$$

gdzie

$$a = \frac{K\tau\Delta t}{\mu l^2 \Delta x^2} \quad (1.7a)$$

$$b = \frac{K\tau\Delta t}{\mu l . \Delta x} \quad (1.7b)$$

Wzór (1.6) pozwala na obliczenie wartości funkcji w punkcie $x = m \cdot \Delta x$ w chwili $t = (n+1)\Delta t$, o ile znane są wartości funkcji w chwili $t' = n \cdot \Delta t$ w trzech punktach $x_1 = (m-1)\Delta x$, $x_2 = m \cdot \Delta x$ oraz $x_3 = (m+1)\Delta x$.

Wzór ten może być stosowany tylko dla $m = 1, 2, \ldots, M - 1$, gdzie M jest liczbą całkowitą określoną przez warunek $1 = M \cdot \Delta x$, czyli oznacza liczbę kroków Δx. Dla punktów leżących na brzegu obszaru wartości funkcji obliczamy z warunków brzegowych.

Po zastąpieniu pochodnej cząstkowej u_x ilorazem różnicowym (1.5b) otrzymujemy dla $x = 0$

$$u(0, n+1) = u(1, n+1)/(1 - \frac{Hl\Delta x}{K}), \quad (1.8a)$$

zaś dla $x = 1$

$$u(M, n+1) = u(M - 1, n+1)/(1 + \frac{Hl\Delta x}{K}). \quad (1.8b)$$

Obliczenia przebiegają więc w następującej kolejności: najpierw na podstawie znanych wartości funkcji w chwili $t = n \cdot \Delta t$ w punktach $x = m\Delta x$ $m = 0, 1, 2, \ldots, M - 1, M$ obliczone są wartości $u(m, n+1)$ dla $m=1,2,\ldots, M - 1$ według wzoru (1.6), a następnie obliczone są wartości $u(0, n + 1)$ oraz $u(M, n+1)$ odpowiednio według (8a) i (8b).

2. Stabilność obliczeń

Zastąpienie pochodnych ilorazami różnicowymi jest nieuchronnie związane z pewnymi błędami, które są tym mniejsze im mniejsze są przyrosty zmiennych niezależnych. Ponieważ dla rozwiązania równania trzeba obliczać krok po kroku wartość funkcji, a w każdym kroku stosowana jest aproksymacja pochodnych przez ilorazy różnicowe, ważnym problemem jest zbadanie, czy błędy te nie narastają lawinowo w trakcie obliczeń. Można wykazać (patrz [6]), że dla równań różniczkowych cząstkowych typu parabolicznego obliczenia są stabilne gdy $a \leqslant 0,5$. Warunek stabilności narzuca ograniczenie na wartość przyrostów czasu Δt oraz przyrostów długości Δx, a ściślej na wartość stosunku $\Delta t/\Delta x^2$. Opierając się na definicji a (wzór (1.7a)) widać, że obliczenia są stabilne, gdy

$$\frac{\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2} \cdot \frac{u \cdot l^2}{K}. \tag{2.1}$$

Błędy związane z aproksymacją pochodnych przez ilorazy różnicowe występują także w warunkach brzegowych. Postać warunków brzegowych nakłada ograniczenie na wartość samego przyrostu x. W czasie obliczeń próbnych stwierdzono, że obliczenia są stabilne gdy spełnione są warunki (2.1) oraz

$$\Delta x < \frac{1}{3} \cdot \frac{H}{K \cdot l}. \tag{2.2}$$

Zmniejszanie przyrostu długości Δx oraz stosunku $\Delta t/\Delta x^2$ nie zwiększa w sposób widoczny dokładności obliczeń. Na podstawie obliczeń próbnych stwierdzono, że dokładność stosowanego schematu numerycznego jest rzędu 0,01%. Natomiast zastosowanie schematu numerycznego zaproponowanego przez Lin [5], przy powyższych warunkach brzegowych, daje obliczenie niestabilne nawet przy wartościach parametru $a < 0,1$.
Wyniki obliczeń oraz ich dyskusja jest podana w [7].

3. Opis programu

Dla wykonania obliczeń opracowano program TERMODIFEQ w języku ALGOL na maszynę cyfrową ODRA 1204.
Program TERMODIFEQ może być zastosowany do rozwiązania każdego równania różniczkowego typu parabolicznego o stałych współczynnikach postaci

$$\alpha u_t = \beta u_{xx} + \gamma u_x \tag{3.1}$$

przy warunku początkowym

$$u(x, 0) = \varphi(x), \quad 0 \leqslant x \leqslant 1 \tag{3.2}$$

oraz warunkach brzegowych

$$\begin{gathered} u(0, t) = -\frac{\beta}{\gamma} u_x(0,t) \\ u(1, t) = -\frac{\beta}{\gamma} u_x(1,t) \\ 0 < t \leqslant \tau, \end{gathered} \tag{3.3}$$

gdzie $\varphi(x)$ jest dowolną znaną funkcją położenia. Dla przeprowadzenia obliczeń, należy wprowadzić do pamięci maszyny kolejno: pięć liczb całkowitych nx. nt, drukx, drukt, czyt, pięć liczb rzeczywistych h, k, mi, l, t oraz wartości funkcji w chwili t = 0.

Zespół pięciu liczb całkowitych określa parametry obliczeń:

nx - liczba kroków Δx,

nt - liczba kroków Δt,

drukx - określa co ile kroków Δx maszyna ma drukować wyniki,

drukt - określa co ile kroków Δt maszyna ma drukować wyniki,

czyt - przyjmuje wartość 1 lub 2.

czyt = 1 odpowiada warunkom początkowym postaci $\varphi(x) = u(x,0) = \text{const}$. Wtedy zamiast nx + 1 liczb odpowiadających wartościom funkcji w punktach $x = m \cdot \Delta x$, $m = 0,1,\ldots,$ nx wystarczy podać tylko jedną liczbę równą stałej wartości stężenia początkowego. Gdy wartość początkowa $u(x,0) = \varphi(x) \neq \text{const}$, należy wstawić czyt = 2 i na taśmie danych umieścić nx + 1 liczb odpowiadających wartościom funkcji $\varphi(x)$ w punktach $x = i \cdot \Delta x$, $i = 0,1,\ldots$ nx.

Liczby rzeczywiste l, t, h, k, mi oznaczają odpowiednio:

l - długość kolumny termodyfuzyjnej,

t - czas trwania procesu termodyfuzji,

h, k, mi - współczynnik równania termodyfuzji.

W dalszym ciągu, jeżeli czyt = 1 maszyna wczytuje jedną liczbę całkowitą, będącą początkową wartością funkcji, a jeżeli czyt = 2 maszyna wczytuje nx + 1 liczb rzeczywistych.

W programie umieszczona jest instrukcja powodująca przerwanie obliczeń po naciśnięciu klawisza 9, przy jednoczesnym wyprowadzeniu wyników pośrednich w postaci umożliwiającej wykorzystanie ich do dalszych obliczeń.

W programie umieszczono dwie instrukcje powodujące przerwanie obliczeń w przypadku, gdy nie zostanie spełniony warunek (2.1) lub warunek (2.2).

Wyniki obliczeń wyprowadzone są na taśmę perforowaną, ze względu na szybszą pracę perforatora w stosunku do dalekopisu. Wartości funkcji drukowane są w postaci półlogarytmicznej z dokładnością do sześciu cyfr znaczących, niezależnie od wielkości liczby.

Autorzy serdecznie dziękują prof. dr Wł. Mościckiemu i dr A. Zastawnemu za dyskusje dotyczące interpretacji wyników. Kierownikowi Ośrodka Maszyn Matematycznych Politechniki Śląskiej doc. dr B. Szafnickiemu za umożliwienie wykonania obliczeń na maszynie ODRA-1204 oraz mgr W. Łyczbińskiemu z Ośrodka Maszyn Matematycznych za pomoc przy obliczeniach.

LITERATURA

1. G.G. Vichare, J.E. Powers, A.J.Ch.E.J., 7, 650 (19).
2. J. Bardeen, Phys. Rev., 57, 35 (1940).
3. J. Bardeen, Phys. Rev., 58, 94 (1940).
4. W. Jost, Diffusion in Solids, Liquids and Gases, Academic Press Inc. Publishers, New York (1960).
5. Shean - Lin Lin, A.J.Ch.E.J., 15, 334 (1969).
6. S.G. Michlin, C.L. Smolicki, Metody przybliżone rozwiązywania równań różniczkowych i całkowych, PWN, Warszawa (1970).
7. A. Pazdur, M. Pazdur, Zeszyty Naukowe Politechniki Śląskiej Seria Matematyka-Fizyka (w druku).

НУМЕРИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ТЕРМОДИФФУЗИОННОЙ КОЛОНКИ

Р е з ю м е

В работе представлено нумерический метод для решения уравнения термодиффузионной колонки. Рассмотрены условия стабильности вычислений и приведено детальное описание программы для электронной вычислительной машины. В последней части рассмотрено возможные приложения программы.

NUMERICAL SOLUTION OF THERMAL DIFFUSION EQUATION

S u m m a r y

In the present paper a finite difference method has been described with application of thermal diffusion equation for thermal diffusion column. The stability of calculations was discussed. In the last part the description of the program and the possibility of its applications were given.