



**زیربرنامه:**

FirstOrd\_Gradient3D

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **توسعه دهندگان** | مرتضی نامور |  |
| **تهیه کنندگان مستند** | مرتضی نامور، علیرضا رضایی | |
| **تاییدکنندگان** | مرتضی نامور | |
| **تاریخ تنظیم سند** | 22/02/1395 | |
| **شناسه سند** | **MC2F079F1** | |
| **زبان برنامه‌نویسی** | **Fortran 90** | |

1. وظایف

در این زیربرنامه، مقدار مشتق اول در مرکز تمامی سلول­ها با استفاده از قضیه گرین-گوس محاسبه می­شود.

1. تئوری و الگوریتم

در روش های مرتبه بالا جهت بازسازی مقادیر در وجوه سلولها، نیازمند مشتق اول برخی متغیرها در مرکز سلول می­باشد. لذا در این زیربرنامه، مشتق اول مولفه­های چگالی، سرعت و فشار در مرکز تمامی سلول­ها محاسبه می­گردد.

برای محاسبه مشتقات تابعدر داخل سلول، از قضیه گرین-گوس و تبدیل انتگرال حجمی به سطحی استفاده می‌شود. با استفاده از قضیه گرین انتگرال یک تابع که بر روی یک حجم کنترل تعریف شده است بصورت زیر به انتگرال روی سطح تبدیل می گردد:

1. 

در رابطه بالا  مقادیر تابع مورد نظر بر روی مرزهای حجم کنترل و *ds* مساحت اضلاع تشکیل دهنده مرزهای حجم کنترل می باشد و n بردار عمود بر این قطاع ها می باشد که از روابط زیر قابل محاسبه است

1. 

بنابراین انتگرال یک کمیت برداری در یک حجم کنترل بصورت گسسته شده زیر محاسبه می گردد:

1. 

حال فرض کنید مقدار مشتق یک تابع در راستای محور x مورد نظر باشد. برای این منظور می توان نوشت:

1. 

با استفاده از فرض حجم محدود که بیان می کند، مقدار یک کمیت در تمام نقاط حجم کنترل یکسان است می توان نوشت:

1. 

به همین ترتیب برای محاسبه مقدار مشتق یک تابع در راستای محور y می توان نوشت:

1. 

مقدار روی صفحه برابر است با میانگین مقادیر آن در دو سلول مجاور آن صفحه. برای مثال مقدار یک تابع بر روی صفحه گذرنده از نقاط P1 ، P2 ، P3 و P4 بصورت زیر محاسبه می شود:

1. 

که ME، سلول سمت چپ صفحه و NE سلول سمت راست صفحه است.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| (الف) | )ب) |

1. چیدمان نقاط و سلول‌ها در ساختار ضلع محور

|  |  |
| --- | --- |
| FaceType = 3 **(شکل الف)** | FaceType = 4 **(شکل ب)** |
| ME: سلول چپ (Main Element)  NE: سلول راست ( Neighboring Element)  P1: نقطه ابتدایی  P3: نقطه انتهایی | ME: سلول چپ (Main Element)  NE: سلول راست ( Neighboring Element)  P1: نقطه ابتدایی  P4: نقطه انتهایی |

حال که نحوه محاسبه مشتق توضیح داده شده است به نحوه پیاده سازی آن در یک شبکه محاسباتی که ساختار داده ای آن ضلع محور است پرداخته می شود (در اینجا فرض شده است که خواننده با این نوع ساختار داده ای که برای ذخیره شبکه محاسباتی بکار می رود آشنایی دارد). بطور مثال برای محاسبه مشتق یک تابع در راستای y ابتدا مقدار صورت کسر مربوط یه رابطه ‏(6) برای یک سلول محاسبه شده و در انتها با تقسیم آن بر حجم سلول، مقدار مشتق بدست می آید. نکته ای که در اینجا تا حدودی مبهم می باشد نحوه محاسبه صورت کسر اشاره شده یعنی عبارت زیر می باشد:

1. 

مفهوم این عبارت اینست که مقادیر باید برای تمام وجوه یک سلول محاسبه شود که مجموع آنها برابر است با عبارت فوق. از آن‌جا که شبکه محاسباتی دارای ساختار ضلع محور است، بنابراین با فراخوانی وجوه باید کار شود. نحوه کار این است که با فراخوانی هر وجه به دوسلول مجاور و نقاط تشکیل دهنده دست یافته می‌شود (با استفاده از آرایه IDS). حال اگر مقدار عبارت بر روی هر کدام از اضلاع شبکه محاسبه شود و به دو سلول مجاور آنها (که با استفاده از آرایه IDS به آنها دست یافته ایم) اضافه شود، رابطه ‏(8) برای تمام سلول های شبکه، بدست می آید.

در اینجا لازم است توجه شود که جهت بردار n بر اساس قضیه گرین-گوس باید بسمت بیرون حجم کنترل باشد. علاوه بر این باید توجه داشت هنگامی که گفته می شود "سلول اصلی یک ضلع" بدین معینست که جهت آن ضلع بگونه ایست که اگر در راستای آن بر روی مرزهای سلول اصلی حرکت کنیم، مرکز سلول اصلی در سمت چپ ما قرار دارد و به این دلیل مقدار بردار n برای "سلول اصلی یک ضلع" بسمت بیرون است و به همین ترتیب برای سلول همسایه آن بسمت داخل. بنابراین هنگامیکه عبارت  برای یک ضلع محاسبه می گردد، باید با علامت منفی به سلول همسایه اضافه شود.

1. بخش های زیربرنامه

در این قسمت، تمامی بخش­های زیربرنامه­ مطابق با شماره­گذاری موجود در برنامه کامپیوتری ارائه شده است. لازم است در اینجا دقت شود که مشتق مرتبه اول متغیرهای مورد بررسی در این زیربرنامه به صورت زیر در آرایه مربوطه ذخیره می شود:



1. مقداردهی اولیه به آرایه ها

مقدار اولیه مشتقات برابر صفر قرار داده می­شود.

1. تعیین مشتقات برای سلول­های مرزی

در این قسمت بخشی از محاسبات که باید برای اضلاع مرزی انجام شود، تعیین شده و به سلول مجاور ضلع مورد بررسی اضافه می شود.

1. ذخیره اطلاعات ضلع مورد بررسی

اطلاعات سلول مجاور ضلع مورد بررسی در پارامترهای محلی ذخیره می­گردند.

1. محاسبه متغیرها روی میانه اضلاع

مقدار متغیرهای در میانه اضلاع با استفاده از شرایط مرزی محاسبه می­شوند.

1. محاسبه مشتقات روی سلول­های مرزی

مقادیر محاسبه شده در بخش قبل به سلول مجاور ضلع مورد بررسی اضافه می گردد

1. محاسبات مربوط به اضلاع غیرمرزی

در این قسمت نیز مانند بخش 2، بخشی از محاسبات که باید برای اضلاع غیر مرزی انجام شود، تعیین شده و به سلول های مجاور ضلع مورد بررسی اضافه می شود.

1. ذخیره اطلاعات ضلع مورد بررسی

اطلاعات دو سلول مجاور و بردار عمود بر آن در پارامترهای محلی ذخیره می­گردند.

1. محاسبه متغیرها روی میانه اضلاع

با یک میانگین­گیری ساده از سلول­های مجاور، مقدار متغیرهایدر میانه اضلاع محاسبه می­شوند.

1. محاسبه مشتقات روی سلول­های غیرمرزی

مقادیر محاسبه شده در بخش قبل به سلول های مجاور ضلع مورد بررسی اضافه می­گردد.

1. محاسبه نهایی مشتقات در تمامی سلول­ها

مطابق رابطه ‏‏(6) و در یک حلقه تکرار روی تمامی سلول­ها، مقادیر مشتقات محاسبه شده در قسمت­های قبل تقسیم بر حجم هر سلول می­شوند.