

INHOUD

Lijst van meest voorkomende symbolen	6
DEEL I. FYSISCHE BASISVERGELIJKINGEN	
1. Inleiding	9
1.1. Doelstellingen van het college	9
1.2. De transportvergelijkingen	10
1.3. De behoudswetten	14
1.4. Coördinatentransformaties	14
1.5. Classificatie van vergelijkingen	15
1.6. Rand- en beginvoorwaarden	17
DEEL II. WISKUNDIGE METHODEN	
2. Analytische methoden	21
2.1. Gewone differentiaalvergelijkingen	21
2.2. Scheiden van variabelen	22
2.3. Eigenfuncties en eigenwaarden	28
2.4. Besselfuncties	31
2.5. Laplace-transformaties	35
2.6. Error- en gammafuncties	42
2.6.1. Error-functie	42
2.6.2. Gammafunctie	44
2.7. Dimensie-analyse en samennemen van variabelen	44
2.8. Benaderende analytische methoden	45
2.8.1. Integraalmethoden	48
2.8.2. Storingsrekening	54
2.8.3. Methode van de gewogen residuen	56
3. Numerieke methoden	61
3.1. Inleiding	61
3.1.1. Numerieke methodiek	61
3.1.2. Het principe van de eindige-differentiemethode	62
3.1.3. Het principe van de eindige-volumemethode	63
3.1.4. Vier basisregels	68
3.2. Stationair warmtetransport door diffusie	69
3.2.1. Niet-homogene materialen	70
3.2.2. Randvoorwaarden	71
3.2.3. Algemene implementatie van de randvoorwaarden	73
3.2.4. Niet-lineaire randvoorwaarde of bronterm	74
3.3. Instationaire diffusie	75
3.3.1. Stabiliteit van de expliciete methode	77
3.3.2. Nauwkeurigheid	77
3.3.3. Andere discretisatieschema's voor de instationaire diffusie-vergelijking	78
Expliciete methoden van Du Fort-Franklin en Saul'ev	79
3.4. Oplossingsmethoden voor de stationaire diffusievergelijking	80
3.4.1. Puntsgewijze iteratieve oplossingsmethoden	81
3.4.2. Convergentie en divergentie	85
3.4.3. De lijn-voor-lijn oplosmethode	86
3.5. De convectie-diffusie vergelijking	88

3.5.1. Upwind differenties	90
3.5.2. 2D convectie-diffusie vergelijking	92
3.5.3. Numerieke diffusie	94
3.5.4. Voorbeelden van nauwkeuriger differentieschema's	98
3.6. De impulsvergelijkingen	99
3.6.1. Vershoven roosters	100
3.6.2. De 2D impulsvergelijking	102
3.6.3. Het oplossen van het drukveld	103

DEEL III. FYSISCHE PROBLEMEN

4. Transportproblemen in rustende media	109
4.1. Stationaire problemen	109
4.2. Diffusievergelijking	111
4.2.1. Typen randvoorwaarden	111
4.2.2. Grafische oplossingen diffusievergelijking	112
4.2.3. De bronoplossing	119
4.2.4. Sommatie van bronnen en Greense functies	121
4.2.5. Lijn- en puntbronnen	127
4.2.6. Penetratietheorie en theorema van Duhamel	129
4.2.7. Contacttemperatuur bij twee verschillende materialen	131
4.2.8. Uitsterfprobleem	134
4.2.9. Instationaire diffusieproblemen in meer dimensies	135
4.3. Bewegend-frontproblemen	138
4.3.1. Algemene probleemstelling	138
4.3.2. Niet-stationaire warmtegeleiding met fase-overgang	139
4.3.3. Bewegend-frontprobleem bij stoftransport	141
4.3.4. Landau-transformatie en storingsrekening voor bewegend-frontproblemen	143
4.3.5. Stolling met convectieve warmte-overdracht	146
4.3.6. Integraalmethode bij stollingsproblemen met convectieve overdracht	148
4.4. Diffusievergelijking in brontermen	152
4.4.1. Niet-stationaire warmtegeleiding met warmteproductie in het medium	152
4.4.2. Niet-stationaire diffusie met homogene chemische reactie	154
4.4.3. Methode van Danckwerts voor eerste-orde reacties	157
5. Impulstransport	163
5.1. Inleiding	163
5.2. Stromingen van incompressibele media	164
5.2.1. Potentiaalstroming	164
5.2.2. Kruipstroming	170
5.2.3. Wervelsterkte en diffusievergelijking	173
5.3. Grenslaagstromingen	174
5.3.1. Grenslaagvergelijkingen	174
5.3.2. Oplossing laminaire grenslaagvergelijkingen	177
6. Diffusie en geleiding in stromende media	181
6.1. Stationair transport in stromingen met uniforme snelheid	181
6.1.1. Transport in propstroming langs een vlakke plaat	182
6.1.2. Transport in propstroming in een ronde buis	183
6.1.3. Diffusie vanuit een puntbron in een propstroom	185
6.2. L��v��que-probleem	186
6.3. Laminaire buisstroming	190
6.3.1. L��v��que--oplossing voor thermisch inloopgebied	190
6.3.2. Thermisch volledig ingestelde stroming	191

6.4. Transport in laminaire grenslagen	194
6.4.1. Integraalmethode-oplossingen	194
6.4.2. Warmte-overdrachtsrelaties voor laminaire grenslagen	197
6.4.3. Vrije convectie langs een verticale plaat	198
Appendix I. Bibliografie	205
Appendix II. Enkele stofeigenschappen	209
Trefwoordenlijst	211

3. NUMERIEKE METHODEN

3.1. Inleiding

Voor vele praktische stromingsproblemen met warmteoverdracht is het niet eenvoudig een oplossing te vinden voor de impulsbalans, de massabalans en de energiebalans. Vaak is het niet mogelijk de vergelijkingen zodanig te vereenvoudigen dat een analytische of benaderende oplossing gevonden kan worden door middel van bijvoorbeeld scheiden van variabelen, Laplace transformaties of een integraalmethode. Indien echter alle termen in de drie-dimensionale transportvergelijkingen van belang zijn en bovendien de vergelijkingen gekoppeld zijn door bijvoorbeeld temperatuurafhankelijke stoffeigenschappen als viscositeit en dichtheid, moet er naar andere manieren gezocht worden om tot de oplossing van een probleem te komen.

Sinds de zeventiger jaren zijn numerieke simulaties van stromingsproblemen met warmte- en/of stofoverdracht mogelijk. Hierbij worden met behulp van computers de vergelijkingen die het probleem beschrijven numeriek opgelost.

3.1.1. Numerieke methodiek

Nadat de vergelijkingen, die een probleem beschrijven, zijn geformuleerd worden de randvoorwaarden opgesteld. Vervolgens wordt het domein opgedeeld in een aantal aaneensluitende deelgebiedjes met in elk gebied een roosterpunt. De differentiaalvergelijkingen worden gediscretiseerd. Hierdoor ontstaan uit de oorspronkelijke partiële differentiaalvergelijkingen lineaire algebraïsche vergelijkingen, die eenvoudiger opgelost kunnen worden. Voor elk roosterpunt worden deze opgelost, zodat in een eindig aantal punten de waarden van de onbekende grootheden als snelheidscomponenten u , v en w , druk p , temperatuur T en concentraties c_A , c_B gevonden worden.

Een duidelijk verschil met een analytische oplossingsmethode komt hier naar voren. Waar een analytische methode de onbekenden op elke willekeurige plaats in ruimte en tijd oplost, geeft een numerieke methode een oplossing van de onbekende grootheden in een discreet aantal punten (de roosterpunten) op een discreet aantal tijdstippen.

Er is een aantal numerieke methoden bekend, met name de eindige-elementenmethode, de eindige-differentiemethode en de eindige-volumemethode. Deze methoden verschillen in de keuze van het verloop van de variabelen tussen de roosterpunten en op de wijze waarop men tot de gediscretiseerde vergelijkingen komt. Hierna zal in het kort het principe van de eindige-differentie- en de eindige-volumemethode besproken worden. Vervolgens wordt er dieper ingegaan op de eindige-volumemethode. Voor de eindige-elementenmethode zij verwezen naar [D10] en [D17].

3.1.2. Het principe van de eindige-differentiemethode

Bij het afleiden van de gediscretiseerde vergelijkingen via de eindige-differentiemethode wordt gebruik gemaakt van Taylor-reeksontwikkelingen. Beschouw een scalaire variabele ϕ als functie van x . Dan geeft een reeksontwikkeling:

$$\phi(x - \Delta x) = \phi(x) - \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_x + \frac{1}{2} (\Delta x)^2 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_x - \frac{1}{6} (\Delta x)^3 \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right)_x \quad (3.1.1)$$

of ook

$$\phi(x + \Delta x) = \phi(x) + \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_x + \frac{1}{2} (\Delta x)^2 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_x + \frac{1}{6} (\Delta x)^3 \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right)_x \quad (3.1.2)$$

Aftrekken van (3.1.1) van (3.1.2) en delen door Δx leidt tot een benadering van de gradiënt van $\phi(x)$ met *centrale differenties*:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_x = \frac{\phi(x + \Delta x) - \phi(x - \Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (3.1.3)$$

Hierin geeft O de orde van de afrondingsfout aan. Optellen van de beide reeksen en delen door Δx^2 geeft een benadering voor de tweede afgeleide van ϕ met centrale differenties:

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_x = \frac{\phi(x - \Delta x) - 2\phi(x) + \phi(x + \Delta x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \quad (3.1.4)$$

Invullen van deze benaderingen in de differentiaalvergelijking levert vervolgens een differentievergelijking op. We zien dat de afrondingsfout welke gemaakt wordt in de benaderingen voor de eerste en tweede afgeleiden met centrale differenties van de tweede orde (Δx^2) is. Uit de reeksontwikkeling (3.1.1) alleen is een eerste orde benadering te vinden vinden voor de gradiënt:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_x = \frac{\phi(x) - \phi(x - \Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (3.1.5)$$

We noemen dit de benadering van de gradiënt met *achterwaartse differenties*.

Evenzo vinden we een eerste orde benadering van de gradiënt met *voorwaartse differenties* met behulp van (3.1.2):

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_x = \frac{\phi(x + \Delta x) - \phi(x)}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (3.1.6)$$

Als voorbeeld van de eindige differentiemethoden doen we hier alleen de Laplace vergelijking (1.5.1) voor een twee-dimensionaal geval

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0. \quad (3.1.7)$$

Met $\Delta x = \Delta y = \Delta$ geeft toepassing van (3.1.4):

$$\frac{\phi(x-\Delta, y) - 2\phi(x, y) + \phi(x+\Delta, y)}{\Delta^2} + \frac{\phi(x, y-\Delta) - 2\phi(x, y) + \phi(x, y+\Delta)}{\Delta^2} = 0 \quad (3.1.8)$$

en dus:

$$4\phi_P = \phi_W + \phi_E + \phi_N + \phi_S \quad (3.1.9)$$

met $\phi_P = \phi(x_P, y_P)$ voor het punt x_P, y_P en ϕ_W, ϕ_E, ϕ_N en ϕ_S waarden van ϕ voor de vier in het x, y -vlak omliggende punten ten ‘westen’, ‘oosten’, ‘noorden’ en ‘zuiden’ van dit punt. De p.d.v. wordt een set van eenvoudige lineaire betrekkingen tussen waarden in discrete punten met direct omliggende punten.

Bij het gebruik van numerieke methoden dienen we ons er rekenschap van te geven dat we met benaderingen werken en dus fouten introduceren. Deze fouten kunnen we beperken door kleinere stappen Δx te nemen. We zeggen dat een numerieke oplossing de juiste is indien de oplossing van de differentievergelijkingen voor $\Delta x \rightarrow 0$ gelijk wordt aan de werkelijke oplossing van de differentiaalvergelijking. In de wiskunde van de numerieke analyse wordt veel aandacht gegeven aan de volgende voorwaarden voor het benaderen van de juiste oplossing met eindige differenties: nauwkeurigheid, consistentie, stabiliteit en convergentie. Enkele aspecten hiervan komen hier aan de orde. Verder zij verwezen naar de literatuur: Ames [D2], Richtmeijer [D4], Mitchel [D5] en Fox [D3].

3.1.3. Het principe van de eindige-volumemethode

Bij deze methode wordt voor de differentiaalvergelijkingen, zoals gegeven in paragraaf 1.3, uitgegaan van de als balansvergelijkingen (voor massa, impuls, energie en stof) geformuleerde uitdrukkingen. Voor het oplossen gaat men als volgt te werk:

1. Verdeel het domein in deelgebieden (roostercellen) en definieer in elke roostercel een roosterpunt.
2. Integreer de vergelijkingen (p.d.v.'s) over elke roostercel.
3. Gebruik profielen voor de variabelen tussen de roosterpunten om de integralen te kunnen oplossen.

Allereerst dient vastgesteld te worden wat de aard van het rooster moet zijn dat gebruikt zal gaan worden. Er zijn nogal wat mogelijkheden: cartesisch, cilindrisch, sferisch, orthogonaal of niet orthogonaal (boundary fitted) in twee of drie dimensies. Enkele twee-dimensionale roosters zijn gegeven in figuur 3.1.1.

De roosterlijnen of roostervlakken hoeven niet altijd op gelijke afstanden van elkaar te liggen. In gebieden waar grote gradiënten in de variabelen voorkomen is een grotere dichtheid van roosterlijnen of -vlakken aan te bevelen dan in gebieden waar de

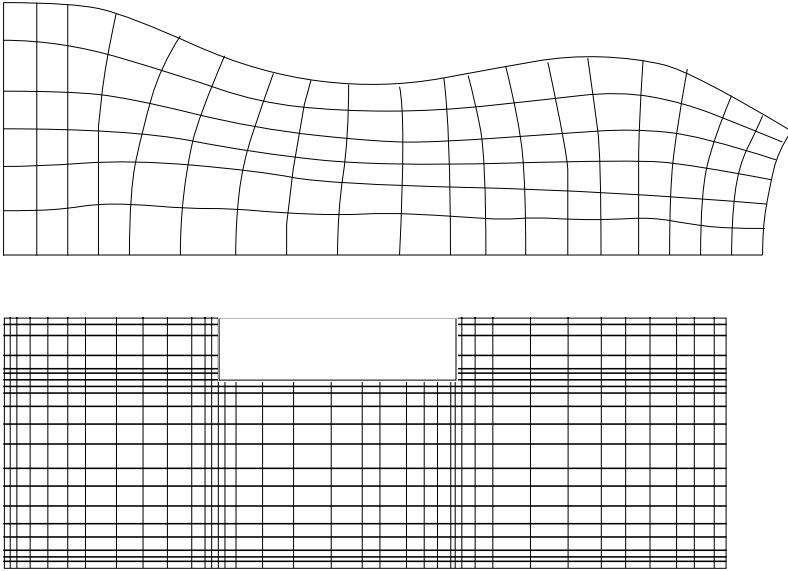


Fig. 3.1.1. Een orthogonaal en een niet uniform cartesisch rooster.

variabelen weinig variëren. In elke roostercel ligt een roosterpunt, zodanig dat midden tussen twee roosterpunten een roosterlijn of -vlak ligt. Bij niet lineaire roosters liggen de roosterpunten hierdoor niet in het midden van de roostercellen. In de roosterpunten worden de scalaire variabelen, zoals temperatuur en concentratie, bepaald. Ook de stoffeigenschappen (λ , ν , D), vaak temperatuurafhankelijk, worden in de roosterpunten bepaald. Zoals we in 3.6.1 kunnen zien worden er voor de snelheidscomponenten roosterpunten gedefinieerd die midden tussen de roosterpunten voor scalaire variabelen, dus op de roosterlijnen, liggen. We zullen ons hier beperken tot twee-dimensionale gevallen en definiëren het roosterpunt P met de coördinaten x_i , y_j . Dit punt P is omgeven door vier naburige punten W, E, S en N (west, east, south en north) met de coördinaten $W(x_{i-1}, y_j)$, $E(x_{i+1}, y_j)$, $S(x_i, y_{j-1})$ en $N(x_i, y_{j+1})$. De snelheidsvector heeft component u in de x -richting en component v in de y -richting.

Ook indien we te maken hebben met een twee-dimensionaal geval praten we over het volume van een roostercel en over oppervlakken tussen de roostercellen. Immers de derde dimensie is wel aanwezig. De gradiënten van alle scalaire variabelen in deze richting zijn echter nul, tevens is de snelheidscomponent in de derde dimensie gelijk aan nul. We veronderstellen dat in de derde richting het rekindomein een eenheidslengte van 1 meter heeft. De oppervlakken welke de roostercel om punt P omgeven zijn A_w, A_e, A_s en A_n . De roostercel om punt P heeft het volume V_P (zie fig. 3.1.2).

Aan de hand van drie gevallen worden de volgende twee stappen, nadat het rooster gedefinieerd is, verduidelijkt.

Het oplossen van de continuïteitsvergelijking (massa balans):

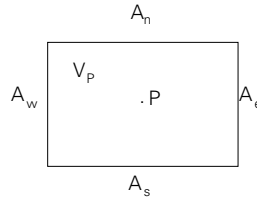


Fig. 3.1.2 roostercel met deelvolume V_P .

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \bar{\nabla}(\rho \bar{v}) = 0 \quad (3.1.10)$$

Integreren over een roostercel met volume V_P , als getekend in fig. 3.1.2, geeft voor de eerste term:

$$\int_{V_P} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = \frac{\partial}{\partial t} \int \rho dV = \frac{\partial M}{\partial t} \quad (3.1.11)$$

waarin M de totale massa van het volume is.

De tweede term geeft met het divergentie theorema van Gauss:

$$\int_{V_P} (\bar{\nabla} \rho \bar{v}) dV = \int_A (\rho \bar{v}) \cdot \bar{n} dA, \quad (3.1.12)$$

waarin A het oppervlak is dat het volume V_P omsluit en \bar{n} de normaalvector is op dit oppervlak. Is u de snelheidscomponent in de richting west-oost en v de snelheidscomponent in de richting zuid-noord dan is deze oppervlakte-integraal gelijk aan:

$$\int_{A_e} (\rho u)_e dA_e + \int_{A_n} (\rho v)_n dA_n - \int_{A_w} (\rho u)_w dA_w - \int_{A_s} (\rho v)_s dA_s. \quad (3.1.13)$$

De aldus gediscretiseerde continuïteitsvergelijking luidt dan (met \dot{m} voor de massastroom):

$$\frac{\partial M}{\partial t} + \dot{m}_e + \dot{m}_n - \dot{m}_w - \dot{m}_s = 0. \quad (3.1.14)$$

Rest nu nog geschikte uitdrukkingen te vinden voor de massastromen door de oppervlakken. Bovenstaande uitdrukking laat zien dat toepassen van de eindige-volumemethode op de continuïteitsvergelijking resulteert in het opstellen van massabalansen over alle roostercellen.

Het toepassen van de eindige-volumemethode op een convectie-diffusie vergelijking resulteert evenzo in een balansvergelijking. Beschouwen we de convectie-diffusie vergelijking voor de scalaire grootheid ϕ met een diffusiviteit Γ :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \bar{\nabla}(\rho\bar{u}\phi) = \bar{\nabla}(\Gamma\bar{\nabla}\phi). \quad (3.1.15)$$

Deze vergelijking wijkt af van de convectie-diffusie vergelijkingen voor temperatuur (1.3.1) en concentratie (1.3.2). Met behulp van de continuïteitsvergelijking zijn ze in elkaar om te schrijven. Ga dit na. Integreren over een roostercel als in figuur 3.1.2 geeft voor de achtereenvolgende termen:

$$\text{term 1: } \int_{V_p} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) dV = \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_p} \rho\phi dV = \frac{\partial}{\partial t}(M\phi). \quad (3.1.16)$$

$$\text{term 2: } \int_{V_p} \bar{\nabla}(\rho\bar{u}\phi) dV = \int_A (\rho\bar{u}\phi) \cdot \bar{n} dA = \quad (3.1.17)$$

$$\int (\rho u\phi) dA_e + \int (\rho v\phi) dA_n - \int (\rho u\phi) dA_w - \int (\rho v\phi) dA_s = \quad (3.1.18)$$

$$\dot{m}_e\phi_e + \dot{m}_n\phi_n - \dot{m}_w\phi_w - \dot{m}_s\phi_s. \quad (3.1.19)$$

$$\text{term 3: } \int_{V_p} \bar{\nabla}(\Gamma\bar{\nabla}\phi) dV = \int_A (\Gamma\bar{\nabla}\phi) \cdot \bar{n} dA = \quad (3.1.20)$$

$$\Gamma_e A_e \frac{\partial\phi}{\partial x} \Big|_e + \Gamma_n A_n \frac{\partial\phi}{\partial y} \Big|_n - \Gamma_w A_w \frac{\partial\phi}{\partial x} \Big|_w - \Gamma_s A_s \frac{\partial\phi}{\partial y} \Big|_s \quad (3.1.21)$$

Opsomming van de termen 1, 2 en 3 resulteert tenslotte in de volgende balansvergelijking:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(M\phi) + \dot{m}_e\phi_e + \dot{m}_n\phi_n - \dot{m}_w\phi_w - \dot{m}_s\phi_s = \\ \Gamma_e A_e \frac{\partial\phi}{\partial x} \Big|_e + \Gamma_n A_n \frac{\partial\phi}{\partial y} \Big|_n - \Gamma_w A_w \frac{\partial\phi}{\partial x} \Big|_w - \Gamma_s A_s \frac{\partial\phi}{\partial y} \Big|_s \end{aligned} \quad (3.1.22)$$

Rest nu tevens nog het vinden van benaderingen voor de waarden van Γ en de gradiënten van ϕ ter plaatse van de oppervlakken. Bovenstaande uitdrukking laat zien, dat integreren van de convectie-diffusie vergelijking over een roostercel leidt tot een balansvergelijking over dit volume.

Een laatste geval als voorbeeld is de stationaire geleiding in een metalen staaf. Veronderstel dat er geen temperatuurverschillen zijn in de doorsnede van de staaf, zodat er slechts temperatuurverschillen in de lengterichting bestaan, en we te maken hebben met een één-dimensionaal geleidingsprobleem. De warmteoverdracht van of naar de staaf wordt dan in de vorm van een bronterm in de energievergelijking opgenomen, welke dan als volgt luidt:

$$\frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) + S''' = 0. \quad (3.1.23)$$

Nu worden de drie stappen uitgevoerd:

1. De staaf wordt opgedeeld in roostercellen.

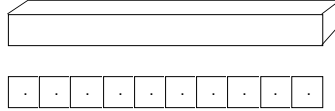


Fig. 3.1.3. Een staaf opgedeeld in roostercellen.

We voeren de volgende nomenclatuur in voor drie naast elkaar liggende roostercellen:

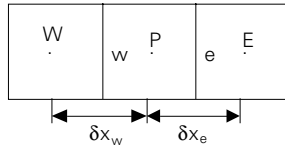


Fig. 3.1.4. Drie aangrenzende roostercellen.

Het roosterpunt P is omgeven door de roosterpunten W (west) en E (east). De scheidingsvlakken tussen de volumina zijn de vlakken w en e. De afstanden tussen de roosterpunten zijn tevens aangegeven in de figuur.

2. Integratie van de differentiaalvergelijking over het volume rond punt P geeft:

$$\int_V \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) dV + \int_V S''' dV = 0. \quad (3.1.24)$$

Indien de doorsnede van de staaf een oppervlak ter grootte A heeft wordt dit:

$$\int_w^e \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) A dx + S_p = 0. \quad (3.1.25)$$

Uitgedrukt in grootheden ter plaatse van de oppervlakken w en e:

$$\lambda_e A_e \left(\frac{dT}{dx} \right)_e - \lambda_w A_w \left(\frac{dT}{dx} \right)_w + S_p = 0. \quad (3.1.26)$$

Ook dit is weer een balansvergelijking en wel voor energie (warmte).

3. Indien tussen de roosterpunten een lineair temperatuurprofiel verondersteld wordt, resulteert dit in de volgende uitdrukking:

$$\lambda_e A_e \frac{T_E - T_P}{\delta x_e} - \lambda_w A_w \frac{T_P - T_W}{\delta x_w} + S_p = 0. \quad (3.1.27)$$

Samen met soortgelijke uitdrukkingen voor de andere roosterpunten en de randvoorwaarden voor de uiteinden van de staaf geeft dit een oplosbaar stelsel vergelijkingen. De temperatuur in het punt P kan uitgedrukt worden in de temperaturen van de naburige punten:

$$\left(\frac{\lambda_e A_e}{\delta x_e} + \frac{\lambda_w A_w}{\delta x_w}\right) T_P = \left(\frac{\lambda_e A_e}{\delta x_e}\right) T_E + \left(\frac{\lambda_w A_w}{\delta x_w}\right) T_W + S_P = 0. \quad (3.1.28)$$

Of meer algemeen, waarbij de coëfficiënten afhankelijk zijn van de profielbenadering tussen de roosterpunten:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + S_P. \quad (3.1.29)$$

In het algemeen zal voor een stationair twee-dimensionaal geleidingsprobleem een soortgelijke vergelijking voor de temperatuur in punt P gevonden worden:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + b. \quad (3.1.30)$$

Het stelsel vergelijkingen van het type (3.1.30) voor alle roostercellen rond elk punt $P(x_i, y_j)$ in het domein kan op verschillende manieren worden opgelost, hierover later meer.

3.1.4. Vier basisregels

Zoals uit het voorgaande is gebleken sluit de eindige-volumemethode goed aan bij de fysische realiteit. Er worden namelijk steeds fysische balanswetten opgesteld. Om nog beter bij deze fysische realiteit aan te sluiten zijn er vier basisregels opgesteld, waaraan de opgestelde gediscretiseerde vergelijkingen moeten voldoen. Deze basisregels zijn:

Regel 1.

De fluxen aan beide zijden van een oppervlak tussen twee aangrenzende volumina dienen gelijk aan elkaar te zijn, of:

$$q_e^i = q_w^{i+1} \quad (3.1.31)$$

Deze regel lijkt triviaal. Echter in het geval van kwadratische profielen tussen de roosterpunten is niet zonder meer aan deze regel voldaan. Ook met lineaire profielen voor de variabele ϕ kan tegen deze regel gezondigd worden, indien de diffusiviteit konstant verondersteld wordt over een volume en er dus een stapsgewijze verandering van de diffusiviteit ter plaatse van het oppervlak tussen de volumina is. De diffusiefluxen zouden dan gedefinieerd kunnen worden als:

$$\Gamma_i (T_{i+1} - T_i)/\delta x \quad \text{en} \quad \Gamma_{i+1} (T_{i+1} - T_i)/\delta x, \quad (3.1.32)$$

hetgeen niet dezelfde expressie is. Het niet voldoen aan deze regel zou betekenen dat niet voldaan kan worden aan de behoudswet over het gehele rekendomein.

Regel 2.

Alle coëfficiënten in de gediscretiseerde vergelijkingen dienen positief te zijn.

De invloed van de nabuurpunten is een gevolg van convectie en diffusieprocessen. Dus kan een toename van de waarde in een aangrenzend roosterpunt alleen maar een toename van de waarde in het beschouwde punt opleveren en geen afname. Dit betekent dat alle coëfficiënten in vergelijking (3.1.30) hetzelfde teken moeten hebben. We hebben de vrijheid om dit teken zelf te kiezen, en kiezen voor positieve coëfficiënten. Indien de coëfficiënten niet allen positief zijn, betekent dit dat er fysisch onrealistische oplossingen gevonden zullen worden. Mathematisch betekent het dat er instabiliteiten zullen optreden indien gedurende het iteratieproces, waarmee het stelsel vergelijkingen opgelost wordt, negatieve coëfficiënten optreden.

Regel 3.

De gelineariseerde bronterm dient een negatieve richtingscoëfficiënt te hebben.

Teneinde een lineair stelsel vergelijkingen te krijgen zal in de regel de bronterm gelineariseerd worden tot:

$$S = S_C + S_P \phi_P. \quad (3.1.33)$$

In dit geval dient de waarde van S_P negatief te zijn anders zou de coëfficiënt van ϕ negatief kunnen worden en dat zou in strijd zijn met regel 2. Ook nu moet er weer voor gezorgd worden dat bij het lineariseren aan deze regel voldaan wordt om instabiliteiten tijdens de oplossingsprocedure te voorkomen.

Regel 4.

De coëfficiënt a_p moet de som zijn van de coëfficiënten van de buurpunten indien de brontermen nul zijn. Indien de dv slechts afgeleiden van de afhankelijke variabele bevat en de functie T is een oplossing van de dv , dan is de functie $T + c$ (met c een constante) ook een oplossing van de dv . Dit moet ook tot uiting komen in de gediscretiseerde vergelijking, waaruit regel 4 volgt. Deze regel geldt in alle gevallen voor stromingen met warmte- of stofoverdracht, indien de brontermen gelijk zijn aan 0.

3.2. Stationair warmtetransport door diffusie

De differentiaalvergelijking voor het twee-dimensionale stationaire warmtetransport door diffusie luidt:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\lambda \frac{\partial T}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\lambda \frac{\partial T}{\partial y}) + S''' = 0, \quad (3.2.1)$$

waarbij S''' een gegeven warmtebron of put is. De balansvergelijking, na integreren over een roostercel met roosterpunt P grenzend aan de cellen met roosterpunten E ,

S, W en N, leidt analoog aan (3.1.30) tot:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + S_C \quad (3.2.2)$$

met

$$a_W = \frac{\lambda_w A_w}{\delta x_w}, \quad a_E = \dots \text{enz.} \quad (3.2.3)$$

$$a_P = a_N + a_S + a_E + a_W + S_P \quad (3.2.4)$$

$$\int S''' dV. = S_C + S_P T_P \quad (3.2.5)$$

Voor een uniform rooster en constante λ wordt (3.2.2):

$$4T_P = T_W + T_E + T_S + T_N + \frac{S_C}{a_E} \quad (3.2.6)$$

zonder bronterm is dit dezelfde vergelijking als (3.1.9) die met eindige differenties was gevonden.

3.2.1. Niet-homogene materialen

De warmtegeleidingscoëfficiënt kan een functie van de plaats zijn. Bijvoorbeeld voor een geleidingsprobleem door materialen met verschillende λ . Indien een vlak tussen twee roosterzellen samenvalt met de overgang van twee materialen is niet op voorhand duidelijk hoe groot λ op dit vlak is. In eerste instantie bestaat de neiging voor de λ op een tussenvlak het gemiddelde te nemen van de λ 's op de nabijgelegen roosterpunten. Hierbij kan rekening worden gehouden met de eventuele niet-uniformiteit van het rooster. We zullen laten zien dat deze eenvoudige benadering van de warmtegeleidingscoëfficiënt op een tussenvlak niet juist is. Het gaat er om een juiste voorspelling van de warmtestroom door het tussenvlak te vinden.

Rekening houdend met materialen met verschillende λ rond het tussenvlak e tussen de punten P en E kan de warmtestroom tussen E en P benaderd worden met:

$$q_e = \frac{T_P - T_E}{(x_e - x_P)/\lambda_P + (x_E - x_e)/\lambda_E}. \quad (3.2.7)$$

Deze warmtestroom dient gelijk te zijn aan de warmtestroom gebaseerd op de warmtegeleidingscoëfficiënt op het tussenvlak:

$$q_e = \frac{\lambda_e (T_P - T_E)}{x_E - x_P}, \quad (3.2.8)$$

waaruit volgt dat, indien het vlak e precies midden tussen de punten P en E ligt, dat λ_e benaderd dient te worden met het harmonisch gemiddelde van λ_E en λ_P :

$$\lambda_e = \frac{2\lambda_p\lambda_E}{\lambda_E + \lambda_p}. \quad (3.2.9)$$

Ga zelf na dat dit ook goede benaderingen oplevert, indien een van de materialen een perfecte isolator is, of indien er een groot verschil in warmtegeleidingscoëfficiënt tussen beide materialen is.

3.2.2. Randvoorwaarden

Bij het oplossen van partiële differentiaalvergelijkingen met behulp van de eindige-volumemethode moeten ook de randvoorwaarden in eindige-volume vorm worden gegoten. Implementatie van de randvoorwaarden hangt af van de ligging van de volumes en roosterpunten ten opzichte van de rand. Er zullen twee verschillende opties behandeld worden. In beide gevallen wordt er een warmtebalans over het eerste volume langs de rand opgesteld.

1. Extra roosterpunt op de rand.

Aangezien de eerste roostercel aan dient te sluiten aan de rand krijgen we daar een afwijkende ligging van de roosterpunten, zoals in figuur 3.2.1 is aangegeven.

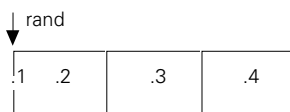


Fig. 3.2.1. Eerste roosterpunt op de rand.

a) Randvoorwaarde van de eerste soort, $T = T_0$.

Een warmtebalans over de eerste roostercel aan de rand (volume (2)) levert op:

$$\left(\frac{\lambda A}{\delta x}\right)_e^{(2)}(T_3 - T_2) - \left(\frac{\lambda A}{\delta x/2}\right)_w^{(2)}(T_2 - T_0) + S^{(2)} = 0. \quad (3.2.10)$$

Verondersteld is hierbij dat het temperatuurprofiel tussen de punten (1) en (2) lineair is. Voeren we de nieuwe variabele $D = \lambda A / \delta x$ in, dan geeft herschikking van bovenstaande balansvergelijking de differentievergelijking voor de temperatuur in het roosterpunt (2):

$$(2D_w^{(2)} + D_e^{(2)}) T_2 = D_e^{(2)} T_3 + 2D_w^{(2)} T_0 + S^{(2)}. \quad (3.2.11)$$

We zien dat deze differentievergelijking afwijkt van de algemene vergelijking (3.1.28) voor de interne roostercellen.

b) Randvoorwaarde van de tweede soort: $q = q_0$.

Een warmtebalans over de eerste roostercel geeft:

$$q_0 + S^{(2)} + D_e^{(2)}(T_3 - T_2) = 0. \quad (3.2.12)$$

Dit resulteert voor de vergelijking voor roosterpunt (2) in:

$$D_e^{(2)}T_2 = DD_e^{(2)}T_3 + q_0 + S^{(2)} \quad (3.2.13)$$

c) Randvoorwaarde van de derde soort: $q = \alpha(T_1 - T_0)$.

Een warmtebalans over de eerste rooster cel resulteert voor de vergelijking voor het roosterpunt (2) in:

$$D_e^{(2)}T_2 = D_e^{(2)}T_3 + \alpha T_1 - \alpha T_0 + S^{(2)}. \quad (3.2.14)$$

Nu hebben we een extra vergelijking voor de temperatuur in het roosterpunt (1) nodig. Deze vinden we uit:

$$\alpha(T_1 - T_0) = \left(\frac{\lambda}{\delta x/2}\right)_e^{(2)}(T_2 - T_1). \quad (3.2.15)$$

De vergelijking voor het roosterpunt (1) wordt dus:

$$T_1 = \left(\frac{2\lambda}{\alpha \cdot \delta x + 2\lambda}\right)_e^{(2)}T_2 + \left(\frac{\alpha \cdot \delta x}{\alpha \cdot \delta x + 2\lambda}\right)_e^{(2)}T_0 \quad (3.2.16)$$

In het algemeen is er een extra vergelijking nodig voor punt (1) terwijl de vergelijking voor punt (2) afwijkt van de algemene vergelijking voor de interne rooster cellen.

2. Eerste rooster cel niet op de wand (virtuele rooster cel).

Een elegantere manier om de randvoorwaarden te implementeren gaat via het invoeren van een virtuele rooster cel. Het rekenrooster loopt nu in feite één punt over de rand heen, waarbij het volume om dit roosterpunt in zijn geheel buiten het rekendomein valt, zoals in onderstaande figuur is verduidelijkt. Hierbij wordt aangenomen dat het medium buiten het rekenrooster hetzelfde is als dat van het rekendomein.

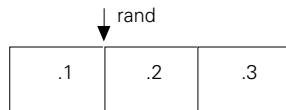


Fig. 3.2.2. Virtuele rooster cel (1) buiten het rekendomein.

Voor het roosterpunt (2) wordt nu de algemene vergelijking (3.2.2) voor een intern roosterpunt gebruikt. Vervolgens wordt voor het virtuele roosterpunt een vergelijking gevonden, zoanig dat deze vergelijking samen met die voor roosterpunt (2) voldoet aan de randvoorwaarde.

a) Randvoorwaarde van de eerste soort, $T = T_0$.

Een vergelijking voor de temperatuur in het virtuele punt wordt gevonden met

behelp van twee uitdrukkingen van de warmtestroom door de wand:

$$q = -\left(\frac{\lambda A}{\delta x}\right)_e^{(2)}(T_2 - T_1) = -\left(\frac{\lambda A}{\delta x/2}\right)_e^{(2)}(T_2 - T_0). \quad (3.2.17)$$

Dit leidt tot:

$$T_1 = -T_2 + 2T_0. \quad (3.2.18)$$

De vergelijking voor het punt (2) is:

$$(D_e^{(2)} + D_w^{(2)}) T_2 = D_e^{(2)} T_3 + D_w^{(2)} T_1 + S^{(2)}. \quad (3.2.19)$$

Invullen van (3.2.18) in (3.2.19) leidt tot hetzelfde resultaat als (3.2.11).

b) Randvoorwaarde van de tweede soort, $q = q_0$.

De temperatuur in het virtuele roosterpunt moet nu voldoen aan:

$$q_0 = -\left(\frac{\lambda A}{\delta x}\right)_e^{(1)}(T_2 - T_1) = -D_e^{(1)}(T_2 - T_1). \quad (3.2.20)$$

Hiermee wordt de vergelijking voor het virtuele punt:

$$D_e^{(1)} T_1 = D_e^{(1)} T_2 + q_0. \quad (3.2.21)$$

Ook nu levert invulling van (3.2.21) in (3.2.19) hetzelfde resultaat als (3.2.13)

c) Randvoorwaarde van de derde soort, $q = \alpha(T_w - T_0)$.

De temperatuur in het virtuele roosterpunt moet nu voldoen aan:

$$\left(\frac{\lambda}{\delta x}\right)_e^{(2)}(T_2 - T_1) = \alpha(T_w - T_0) = \left(\frac{2\lambda}{\delta x}\right)_e^{(2)}(T_2 - T_w) \quad (3.2.22)$$

Na eliminatie van T_w wordt de volgende uitdrukking voor de temperatuur in het virtuele roosterpunt verkregen:

$$\left(\alpha + \left(\frac{2\lambda}{\delta x}\right)_e^{(2)}\right) T_1 = \left(-\alpha + \left(\frac{2\lambda}{\delta x}\right)_e^{(2)}\right) T_2 + 2\alpha T_0 \quad (3.2.23)$$

3.2.3. Algemene implementatie van de randvoorwaarden

Het gebruik van een virtuele roosterpunt staat een algemene implementatie van de randvoorwaarden toe. De algemene vergelijking voor een 2D diffusie probleem is voor het roosterpunt (i,j):

$$A_P^{i,j} \phi_{i,j} = A_E^{i,j} \phi_{i+1,j} + A_W^{i,j} \phi_{i-1,j} + A_N^{i,j} \phi_{i,j+1} + A_S^{i,j} \phi_{i,j-1} + S_C^{i,j}. \quad (3.2.24)$$

Indien het volume (i,j) grenst aan een oostrand, en het punt (i+1,j) het virtuele

volume buiten het rekendomein is, dan luidt de algemene vergelijking voor dit virtuele roosterpunt $(i+1,j)$:

$$A_P^{i+1,j} \phi_{i+1,j} = A_W^{i+1,j} \phi_{i,j} + S_P^{i+1,j}. \quad (3.2.25)$$

Invullen van $\phi_{i+1,j}$ uit (3.2.25) in de vergelijking voor $\phi_{i,j}$ (3.2.24) levert een identieke vergelijking als (3.2.24) op met andere coëfficiënten. De nieuwe coëfficiënten uitgedrukt in de oude worden dan:

$$A_E^{i,j} = 0 \quad (3.2.26)$$

$$A_P^{i,j} = A_P^{i,j} - \frac{A_E^{i,j} A_W^{i+1,j}}{A_P^{i+1,j}} \quad (3.2.27)$$

$$b_P^{i,j} = b_P^{i,j} - \frac{A_E^{i,j} b_W^{i+1,j}}{A_P^{i+1,j}}. \quad (3.2.28)$$

Door dit opnemen van de randvoorwaarde in de algemene vergelijking voor de roostercel grenzend aan de rand hebben alle punten dezelfde vergelijking gekregen. Slechts de waarden van de coëfficiënten variëren van punt tot punt.

3.2.4. Niet-lineaire randvoorwaarde of bronterm

De eindige-volumemethode levert ons steeds een stelsel gekoppelde lineaire vergelijkingen op, welke met een geschikte numerieke methode opgelost kunnen worden. Niet-lineariteiten zouden roet in het eten kunnen gooien. Brontermen of randvoorwaarden kunnen niet lineair van vorm zijn. De coëfficiënten van de gediscretiseerde vergelijkingen zijn dan een functie van de temperatuur. Na linearisatie van de bronterm of randvoorwaarde kan er toch een stelsel lineaire vergelijkingen verkregen worden, dat via een iteratieproces opgelost kan worden. Een voorbeeld van een niet lineariteit geeft de randvoorwaarde welke de warmteoverdracht door straling naar de omgeving beschrijft: $q_{\text{wand}} \approx T^4$. In het stelsel lineaire vergelijkingen kan dit benaderd worden met:

$$q_{\text{wand}} \approx T_0^3 T_n, \quad (3.2.29)$$

waarin T_0 de temperatuur aan de wand van de laatste iteratie is en T_n de temperatuur van de nieuwe iteratie. Een betere vorm van lineariseren geeft de Newton-Raphson linearisatie met voor dit geval als resultaat:

$$q_{\text{wand}} \approx 4T_0^3 T_n - 3T_0^3. \quad (3.2.30)$$

Bij het lineariseren van brontermen moeten we wel op onze hoede zijn om negatieve coëfficiënten te voorkomen.

3.3. Instationaire diffusie

Beschouwen we nu de 1D instationaire warmtevergelijking:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho T) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad \text{met } \Gamma = \lambda c_p. \quad (3.3.1)$$

Integreren van deze differentiaalvergelijking over een tijdsinterval van t tot $t + \Delta t$ en over een volume dat zich uitstrekt van vlak w tot vlak e geeft:

$$\int_w^e (\rho AT)^{t+\Delta t} - (\rho AT)^t dx = \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\Gamma A \frac{\partial T}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma A \frac{\partial T}{\partial x} \right)_w \right] dt. \quad (3.3.2)$$

Bovenstaande vergelijking is een balans tussen de energie geaccumuleerd in het eindige volume gedurende de tijd Δt en de netto warmtestroom door geleiding welke gedurende de tijd Δt door de oppervlakken van het volume is gegaan. Indien de warmtestroom door geleiding Q constant wordt verondersteld gedurende het tijdsinterval Δt , en ρAT constant wordt verondersteld over het volume tussen de oppervlakken e en w ($\rho AT = M_P T_P$) leidt bovenstaande integratie tot:

$$(M_P T_P)^{n+1} - (M_P T_P)^n = Q_w \Delta t - Q_e \Delta t, \quad (3.3.3)$$

waarin n het tijdstip $t = n\Delta t$ en $n+1$ het tijdstip $t = (n+1)\Delta t$ voorstelt. De warmtestromen Q_w en Q_e kunnen genomen worden op het nieuwe tijdstip $n+1$:

$$Q_w^{n+1} = -D_w (T_P^{n+1} - T_W^{n+1}), \quad \text{met } D_w = \frac{\Gamma A}{\delta x_w} \quad (3.3.4)$$

op het oude tijdstip n :

$$Q_w^n = -D_w (T_P^n - T_W^n), \quad (3.3.5)$$

of op een willekeurig ander tijdstip $t = (n+f)\Delta t$ hier tussen in:

$$Q_w = (1-f)Q_w^n + fQ_w^{n+1} \quad \text{met } 0 \leq f \leq 1. \quad (3.3.6)$$

Substitueren we deze laatste uitdrukking voor de warmtestromen in vergelijking (3.3.3) dan vinden we de volgende gediscretiseerde vergelijking voor het volume met roosterpunt P :

$$\begin{aligned} \frac{M_P T_P^{n+1}}{\Delta t} - \frac{M_P T_P^n}{\Delta t} &= (1-f) \{ -D_w (T_P^n - T_W^n) + D_e (T_E^n - T_P^n) \} + \\ &f \{ -D_w (T_P^{n+1} - T_W^{n+1}) + D_e (T_E^{n+1} - T_P^{n+1}) \} \end{aligned} \quad (3.3.7)$$

De temperatuur in het punt P op het nieuwe tijdstip kan nu uitgedrukt worden in temperaturen in P en omliggende roosterpunten op het nieuwe en op het oude

tijdstip:

$$\left\{ \frac{M_P}{\Delta t} + f(D_w + D_e) \right\} T_P^{n+1} = fD_w T_W^{n+1} + fD_e T_E^{n+1} + (1-f)D_w T_W^n + (1-f)D_e T_E^n + \left\{ \frac{M_P}{\Delta t} - (1-f)(D_w + D_e) \right\} T_P^n. \quad (3.3.8)$$

De verschillende keuzen voor f leiden tot de volgende methoden:

$f = 0$: Expliciet schema.

We zien dat voor dit geval de waarde van de temperatuur in het punt P op het nieuwe tijdstip expliciet uitgedrukt wordt in waarden van de bekende temperaturen op het oude tijdstip in de punten P, E en W. Dit is het meest eenvoudige schema, dat zonder iteratieproces eenvoudig is op te lossen. Dit schema hoeft echter niet altijd stabiel te zijn. De coëfficiënt van T_P^n kan namelijk negatief worden hetgeen zal leiden tot instabiliteiten. Door het beperken van de grootte van de tijdstap kan stabiliteit gewaarborgd worden.

$f = \frac{1}{2}$: Het schema van Crank-Nicolson.

Dit is een impliciet schema waarin de temperatuur in het punt P op het nieuwe tijdstip uitgedrukt wordt in temperaturen van de omliggende punten op het oude tijdstip en op het nieuwe tijdstip. Dit schema is weliswaar ingewikkelder dan het expliciete schema, echter kan bewezen worden dat dit schema onvoorwaardelijk stabiel is. Oscillaties tijdens het oplossingsproces zijn echter niet uitgesloten en kunnen vermeden worden door weer een juiste keuze van de tijdstap te maken.

$f = 1$: Het volledig impliciete schema.

Voor dit schema zijn de coëfficiënten altijd positief en is stabiliteit gegarandeerd. De tijdstap is niet aan een maximum gebonden. Het oplossen van een impliciet stelsel vergt per tijdstap meer rekenwerk dan voor een expliciet stelsel. Men moet de N vergelijkingen door matrix-inversie dan wel via een iteratieve procedure oplossen. Een voordeel is dat men minder tijdstappen kan nemen wegens het ontbreken van een stabiliteitseis aan Δt . Het totale rekenwerk kan daarom toch binnen redelijke grenzen blijven.

3.3.1. Stabiliteit van de expliciete methode

De voorwaarde dat alle coëfficiënten in de differentievergelijking positief moeten zijn leidt zoals uit vergelijking (3.3.8) kan worden ingezien voor het volledig expliciete schema tot de volgende eis:

$$\frac{M_P}{\Delta t} \geq D_e + D_w, \text{ of } \frac{1}{\Delta t} \geq \frac{1}{\Delta t_e'} + \frac{1}{\Delta t_w'}, \text{ met } \Delta t' = \frac{M_P}{D} = \frac{\Delta x^2}{a}. \quad (3.3.9)$$

indien $D_e = D_w$ luidt deze stabiliteitseis:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2a} \text{ of } a\Delta t/\Delta x^2 = \text{Fo}(\Delta) \leq \frac{1}{2}. \quad (3.1.10)$$

Er kan dus kennelijk een maximale tijdstap gedefinieerd worden bij een bepaalde roosterafstand Δx . Dit heeft een fysische betekenis. Beschouw de warmtepenetratie van punt W naar punt P (op een afstand Δx van dit punt W) na de tijd Δt . Indien de temperatuur in punt W een verandering ondergaat van T_w^n naar T_w^{n+1} geeft dit volgens de penetratietheorie:

$$\frac{T - T_w^{n+1}}{T_w^n - T_w^{n+1}} = \text{erfc} \left(\frac{x - x_w}{2\sqrt{at}} \right) \quad (3.3.11)$$

In het punt P zal op het tijdstip $t = \Delta x^2/2a$ de temperatuur gelijk zijn aan:

$$\frac{T_P - T_w^{n+1}}{T_w^n - T_w^{n+1}} = \text{erfc} \left(\frac{1}{2}\sqrt{2} \right) \approx 0,32. \quad (3.3.12)$$

In deze tijd zou de temperatuur in het punt P dus al aanzienlijk zijn toegenomen door de verandering van temperatuur in punt W. Echter bij de berekening van de nieuwe temperatuur in dit punt P wordt geen rekening gehouden met de nieuwe temperatuur in dit buurpunt. Duidelijk is dat, indien de tijdstap te groot is, dit tot onrealistische resultaten aanleiding geeft.

Voor de randpunten zal men in het algemeen een afwijkende eis voor stabiliteit vinden. Om tot de meest stringente eis voor stabiliteit te komen dient men de randpunten mede in de beschouwing te betrekken.

3.3.2. Nauwkeurigheid

De nauwkeurigheid van de expliciete en impliciete methoden kan beschouwd worden voor het geval van constante stoffeigenschappen en een equidistant rooster met afstanden tussen de roosterpunten ter grootte Δx . Dan reduceert de algemene differentievergelijking (3.3.7) tot:

$$T_P^{n+1} - T_P^n = \frac{a\Delta t}{\Delta x^2} \{ (1 - f)(T_E^n - 2T_P^n + T_W^n) + f(T_E^{n+1} - 2T_P^{n+1} + T_W^{n+1}) \} \quad (3.3.13)$$

Deze differentievergelijking krijgen we ook met de eindige differentiemethode.

De volledig expliciete methode ($f = 0$) verkrijgen we via voorwaartse differentie in de tijd en centrale differentie in de plaats. De nauwkeurigheid van de expliciete methode is dus $O(\Delta t + \Delta x^2)$. (zie § 3.1.2) Met behulp van Taylor-reeksen kan voor dit specifieke geval afgeleid worden dat voor $a\Delta t/\Delta x^2 = \text{Fo}(\Delta) = 1/6$ de afbreekfout $O(\Delta t^2 + \Delta x^4)$ is. Zowel de fout door Δt als door Δx wordt hiermee kleiner. Voor korte tijden zijn de gradiënten meestal groot. Het heeft daarom zin om bij kleine t

en grote gradiënten in tijd en plaats met $Fo(\Delta) = 1/6$ te werken en voor grotere t over te gaan op $Fo(\Delta) = 1/2$, hetgeen nog net voldoet aan de stabiliteitseis.

De volledig impliciete methode ($f = 1$) verkrijgen we via achterwaartse differentie in de tijd en centrale differentie in de plaats. Hiervan is de nauwkeurigheid eveneens $O(\Delta t + \Delta x^2)$.

De impliciete methode van Crank-Nicolson ($f = 1/2$) kan verkregen worden via centrale differenties zowel in tijd als plaats voor het tijdstip halverwege tussen n en $n+1$. Dit schema is dus nauwkeuriger dan het volledig expliciete en volledig impliciete schema en heeft een afrondingsfout van de orde $O(\Delta t^2 + \Delta x^2)$. Evenals bij de expliciete methode is er een nauwkeuriger methode, waarbij fouten in Δx^2 wegvallen, te verkrijgen via manipulaties met Taylor-reeksen. Indien

$$Fo(\Delta) = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{2 - 4f} \right) \quad (3.3.14)$$

is de afbreekfout $O(\Delta t^2 + \Delta x^4)$. Hierbij wordt tevens aan de stabiliteitseis bij $f < 0.5$ voldaan. Bovenstaand geval wordt nog gunstiger indien ook nog geldt dat:

$$Fo(\Delta) = \frac{1}{\sqrt{20}} \quad (3.3.15)$$

met een afbreekfout $O(\Delta t^2 + \Delta x^6)$. Aangezien deze methoden in de fout in Δt geen verbetering geven ten opzichte van Crank-Nicolson worden ze toch weinig gebruikt. Zij het dat met een groter aantal tijdstappen en een zelfde aantal x -stappen een grotere nauwkeurigheid wordt gehaald.

3.3.3. Andere discretisatieschema's voor de instationaire diffusie-vergelijking

a) Methode van Baker en Oliphant.

Door de eerste afgeleide in de tijd te schatten uit de drie waarden voor T op de tijdstippen $n+1$, n en $n-1$ krijgt men samen met centrale differenties voor de plaats op het tijdstip $n+1$ een altijd stabiele impliciete methode. Het schema van Baker en Oliphant geeft als differentievergelijking:

$$\frac{3T_P^{n+1} - 4T_P^n + T_P^{n-1}}{2\Delta t} = a \frac{T_E^{n+1} - 2T_P^{n+1} + T_W^{n+1}}{\Delta x^2} \quad (3.3.16)$$

Ten opzichte van Crank-Nicolson is er het voordeel dat deze methode minder oscillaties geeft. Echter moet men nu tevens de waarden op twee tijdstippen eerder opzoeken voor de berekening.

Expliciete methoden van Du Fort-Frankel en Saul'ev

Er zijn twee expliciete schema's die niet de stabiliteitseis $Fo(\Delta) < 0,5$ hebben. Zij kunnen dus met grotere tijdstappen werken, echter is er nu een consistentie eis.

Beide methoden vereisen dat $\Delta t/\Delta x \rightarrow 0$ als Δx en $\Delta t \rightarrow 0$ voor consistentie. Indien hiervoor gezorgd kan worden zijn het beide zeer efficiënte schema's. Het schema van Du Fort-Frankel neemt twee stappen voorwaarts in de tijd en is centraal in de plaats en heeft als differentievergelijking:

$$\frac{T_P^{n+1} - T_P^{n-1}}{2\Delta t} = a \frac{(T_E^n - T_P^{n-1}) - (T_P^{n+1} - T_E^n)}{\Delta x^2} \quad (3.3.17)$$

In wezen worden de warmtestromen door de oost en west wand van een roostercel geëvalueerd met behulp van temperaturen op verschillende tijdstippen. Een differentieschema heet consistent als bij substitutie van de oplossing van de differentievergelijkingen in de differentiaalvergelijking een fout overblijft die bij netverfijning naar nul gaat. Dat consistentie van bijvoorbeeld het schema van Crank-Nicolson gewaarborgd is blijkt, indien we de uitdrukking voor de afbreekfout, gevonden met behulp van Taylor-reeksontwikkeling, aan een nadere beschouwing onderwerpen. Deze afbreekfout is:

$$e = \frac{1}{12} a\Delta x^2 \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} + \frac{1}{6} \Delta t^2 \left(\frac{\partial^3 T}{\partial x^3} - \frac{3}{2} a \frac{\partial^4 T}{\partial x^2 \partial t^2} \right) + \dots \quad (3.3.18)$$

Dit geeft $e \rightarrow 0$ als Δx en $\Delta t \rightarrow 0$. Maar voor Du Fort-Frankel vinden we:

$$e = \frac{1}{6} \Delta t^2 \frac{\partial^3 T}{\partial t^3} - \frac{1}{12} a\Delta x^2 \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} + \frac{a\Delta t^2}{\Delta x^2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \dots \quad (3.3.19)$$

Indien nu voor $\Delta t \rightarrow 0$ en $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta t/\Delta x$ bijvoorbeeld naar de constante waarde 1 gaat, dan lossen we in feite niet meer de oorspronkelijke vergelijking $T_t - aT_{xx} = 0$ op, maar $T_t - aT_{xx} = aT_{tt}$, hetgeen niet consistent is. De laatste term in (3.3.19) is om te werken met:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} \quad (3.3.20)$$

Voor de tweede en derde term samen krijgen we dan:

$$a \left(-\frac{1}{12} \Delta x^2 + \frac{a^2 \Delta t^2}{\Delta x^2} \right) \frac{\partial^4 T}{\partial x^4} \quad (3.3.21)$$

We hebben aan de eis voor consistentie voldaan indien

$$\frac{a^2 \Delta t^2}{\Delta x^2} = n^2 \frac{\Delta x^2}{12} \quad (3.3.22)$$

waarbij n een geheel getal is. We mogen n niet te groot nemen, maar voor $n = 3,5$ (overeenkomend met $Fo(\Delta) \approx 1$) kan toch nog redelijk gerekend worden.

Het schema van Saul'ev bestaat uit twee stappen:

$$T_P^{n+1} - T_P^n = \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x^2}\right) (T_E^n - T_P^n - T_P^{n+1} + T_W^{n+1}) \quad (3.3.23)$$

$$T_P^{n+2} - T_P^{n+1} = \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x^2}\right) (T_E^{n+2} - T_P^{n+2} - T_P^{n+1} + T_W^{n+1}) \quad (3.3.24)$$

Ook deze methode kent een beperking voor de verhouding van $\Delta t/\Delta x$.

In tabel 3.3.1 zijn al de hiervoor besproken rekenschema's nog eens op een rijtje gezet.

3.4. Oplossingsmethoden voor de stationaire diffusievergelijking

De stationaire 1D diffusievergelijking

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) = 0 \quad (3.4.1)$$

heeft in het algemeen de volgende gediscretiseerde vorm:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W. \quad (3.4.2)$$

Voor de een-dimensionale situatie zijn de n vergelijkingen voor de n roosterpunten eenvoudig direkt op te lossen. In een 3 dimensionale situatie met meerdere gekoppelde differentiaalvergelijkingen is het verkrijgen van een direkte oplossing echter een zeer moeizame weg en ligt een iteratieve oplossingsmethode meer voor de hand. Aan de hand van het 1 dimensionale geval zal een aantal iteratieve oplossingsmethoden besproken worden. Vervolgens wordt een lijn-voor-lijn iteratieve methode behandeld.

3.4.1. Puntsgewijze iteratieve oplossingsmethoden

A. Jacobi

De oplossingsmethode van Jacobi is een expliciete methode. De temperaturen op het nieuwe iteratieniveau $n+1$ voor alle roosterpunten worden uitgedrukt in temperaturen op het oude iteratieniveau n :

$$a_P T_P^{n+1} = a_E T_E^n + a_W T_W^n. \quad (3.4.3)$$

Op deze manier kunnen voor alle roosterpunten eerst de coëfficiënten bepaald worden, waarna voor alle roosterpunten een nieuwe temperatuur berekend kan worden. Deze methode wordt vaak toegepast in combinatie met onderrelaxatie. Indien \hat{T}_P^n de temperatuur is berekend met vergelijking (3.4.3) wordt voor de nieuwe temperatuur in punt P de volgende lineaire combinatie genomen:

$$T_P^{n+1} = (1 - \omega) T_P^n + \omega \hat{T}_P^{n+1}, \quad \text{met } \omega \leq 1. \quad (3.4.4)$$

Op deze manier wordt de verandering in een iteratie ingeperkt om divergentie te voorkomen. Het gebruik van onderrelaxatie komt er op neer dat niet vergelijking

(3.4.3) wordt opgelost, maar

$$\frac{a_P}{\omega} T_P^{n+1} = \left(\frac{1}{\omega} - 1\right) a_P T_P^n + a_E T_E^n + a_W T_W^n. \quad (3.4.5)$$

B. Gauss Seidel

Indien tijdens het iteratieproces niet eerst alle coëfficiënten bepaald worden, maar gebeurt dit ook punt voor punt, dan wordt voor een van de punten W of E (afhankelijk van de volgorde waarop de punten bezocht worden) de waarde van de temperatuur op het nieuwe iteratie niveau meegenomen. Indien de punten van west naar oost bezocht worden betekent dit:

$$a_P T_P^{n+1} = a_E T_E^n + a_W T_W^{n+1}. \quad (3.4.6)$$

Dit is de oplosmethode van Gauss Seidel.

C. Successive Over Relaxation (SOR)

De methode van Gauss Seidel kan versneld tot convergentie geleid worden, indien gebruik gemaakt wordt van overrelaxatie. Daar vergelijking (3.4.6) niet meer volledig expliciet is, blijft stabiliteit gegarandeerd ook voor waarden van ω groter dan 1. Het gebruik van overrelaxatie in combinatie met Gauss Seidel staat bekend als de methode van Successive Over-Relaxation (SOR):

$$\frac{a_P}{\omega} T_P^{n+1} = \left(\frac{1}{\omega} - 1\right) a_P T_P^n + a_E T_E^n + a_W T_W^{n+1}. \quad (3.4.7)$$

De waarde van ω moet nu voldoen aan $0 < \omega \leq 2$ om stabiliteit te garanderen.

Nr.	Schema	Typering	Rekenmoduul
1.0		Algemeen zespunts $0 \leq \theta \leq 1$	$u_i^{j+1} = u_i^j + \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x^2}\right) [\theta \delta^2(u_i^{j+1}) + (1 - \theta) \delta^2(u_i^j)]$
1.1.a.		Expliciet $\theta = 0$	$u_i^{j+1} = u_i^j + \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x^2}\right) \delta^2(u_i^j)$
1.1.b		Binder-Schmidt $\theta = 0, \frac{a\Delta t}{\Delta x^2} = \frac{1}{2}$	$u_i^{j+1} = \frac{1}{2}(u_{i-1}^j + u_{i+1}^j)$
1.1.c		Expliciet nauwkeurig $\theta = 0, \frac{a\Delta t}{\Delta x^2} = \frac{1}{6}$	$u_i^{j+1} = u_i^j + \frac{1}{6} \delta^2(u_i^j)$
1.2		Liebmann $\theta = 1$	$u_i^{j+1} = u_i^j + \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x^2}\right) \delta^2(u_i^{j+1})$
1.3		Crank-Nicolson $\theta = \frac{1}{2}$	$u_i^{j+1} = u_i^j + \frac{1}{2} \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x^2}\right) [\delta^2(u_i^{j+1}) + \delta^2(u_i^j)]$
1.4		Impliciet nauwkeurig $\frac{a\Delta t}{\Delta x^2}$ $\theta = \frac{1}{2} - \frac{1}{12a\Delta t}$	$u_i^{j+1} = u_i^j + \frac{1}{2} \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x^2}\right) [\delta^2(u_i^{j+1}) + \delta^2(u_i^j)] +$ $+ \frac{1}{12} [\delta^2(u_i^{j+1}) - \delta^2(u_i^j)]$
1.5		Impliciet nauwkeurigst $\theta = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{20}}{12} \frac{a\Delta t}{\Delta x^2} = \frac{1}{\sqrt{20}}$	$u_i^{j+1} = u_i^j + \frac{1}{\sqrt{80}} [\delta^2(u_i^{j+1}) + \delta^2(u_i^j)] +$ $+ \frac{1}{12} [\delta^2(u_i^{j+1}) - \delta^2(u_i^j)]$
2.0		Baker-Oliphant	$u_i^{j+1} = \frac{4}{3}u_j^j - \frac{1}{3}u_{j-1}^j + \frac{2}{3} \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x^2}\right) \delta^2(u_i^{j+1})$
2.1		Gemodificeerde Baker Nauwkeurig	$(1 + \frac{\Delta x^2}{12a\Delta t})u_i^{j+1} = \frac{4}{3}u_j^j - (\frac{1}{3} + \frac{\Delta x^2}{12a\Delta t})u_{j-1}^j +$ $+ \frac{2}{3} \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x^2}\right) \delta^2(u_i^{j+1})$
3.0		Du Fort-Frankel	$u_i^{j+1} = u_i^{j-1} + \left(\frac{2a\Delta t}{\Delta x^2}\right) [u_{i+1}^j - u_i^{j+1} - u_i^{j-1} + u_{i-1}^j]$
4.0		Saul'ev	1. $u_i^{j+1} = u_i^j + \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x^2}\right) (u_{i+1}^j - u_i^j - u_i^{j+1} + u_{i-1}^{j+1})$ 2. $u_i^{j+2} = u_i^{j+1} + \left(\frac{a\Delta t}{\Delta x^2}\right) (u_{i+1}^{j+2} - u_i^{j+2} - u_i^{j+1} + u_{i-1}^{j+1})$ $Fo(\Delta) = 1: 1. u_i^{j+1} = \frac{1}{2}(u_{i+1}^j + u_{i-1}^{j+1})$ 2. $u_i^{j+2} = \frac{1}{2}(u_{i+1}^{j+2} + u_{i-1}^{j+1})$

Tabel 3.3.1. Rekenschema's diffusievergelijking.

Nr.	Expl./Impl.	Stabiel indien:	Afbreekfout en consistentie
1.0	Impliciet als $\theta \neq 0$	$0 < \theta < \frac{1}{2}$ als $\frac{a\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2 - 4\theta}$ $\frac{1}{2} \leq \theta < 1$ altijd	$O(\Delta t + \Delta x^2)$, consistent
1.1.a.	Expliciet	$\frac{a\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$	$O(\Delta t + \Delta x^2)$, consistent
1.1.b	Expliciet	altijd stabiel	$O(\Delta t + \Delta x^2)$, consistent
1.1.c	Expliciet	altijd stabiel	$O(\Delta t^2 + \Delta x^4)$, consistent
1.2	Impliciet	altijd stabiel	$O(\Delta t + \Delta x^2)$, consistent
1.3	Impliciet	altijd stabiel	$O(\Delta t^2 + \Delta x^2)$, consistent
1.4	Impliciet	altijd stabiel	$O(\Delta t^2 + \Delta x^4)$, consistent
1.5	Impliciet	altijd stabiel	$O(\Delta t^2 + \Delta x^6)$, consistent
2.0	Impliciet	altijd stabiel	$O(\Delta t^2 + \Delta x^2)$, consistent
2.1	Impliciet	altijd stabiel	$O(\Delta t^2 + \Delta x^4)$, consistent
3.0	Expliciet	altijd stabiel	$O(\Delta t^2 + \Delta x^2 + \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2})$, consistent als $\frac{\Delta t}{\Delta x} \rightarrow 0$: $\Delta t \rightarrow 0$, $\Delta x \rightarrow 0$
4.0	Expliciet	altijd stabiel	$O(\Delta t^2 + \Delta x^2 + \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2})$, consistent als $\frac{\Delta t}{\Delta x} \rightarrow 0$: $\Delta t \rightarrow 0$, $\Delta x \rightarrow 0$.

Tabel 3.3.1. Rekenschema's diffusievergelijking (vervolg).

Details over puntsgewijze oplosmethoden

Aan de hand van zeer eenvoudige voorbeelden zal nu wat meer inzicht gegeven worden in de puntsgewijze oplosmethoden van Jacobi en Gauss-Seidel. Een stationair een-dimensionaal geleidingsprobleem leidt tot de volgende differentievergelijking:

$$(D_e + D_w)T_P = D_e T_E + D_w T_W. \quad (3.4.8)$$

Met constante stoffeigenschappen en een equidistant rooster is $D_e = D_w$ en vinden we dat de temperatuur in het punt P gelijk is aan:

$$T_P = \frac{1}{2}T_E + \frac{1}{2}T_W. \quad (3.4.9)$$

Definiëren we een rooster van 5 punten met de randvoorwaarden gegeven op de punten 1 en 5: $T_1 = 100$ en $T_5 = 0$, dan kunnen we met een iteratieve methode de temperaturen op de tussenliggende punten berekenen. De oplosmethoden van Jacobi en Gauss-Seidel leiden dan tot de volgende resultaten:

A. Jacobi

De oplosmethode volgens Jacobi leidt voor het m^e iteratieniveau tot:

$$T_P^m = \frac{1}{2}T_E^{m-1} + \frac{1}{2}T_W^{m-1}. \quad (3.4.10)$$

Voor een drietal iteraties geeft dit het resultaat zoals weergegeven in onderstaande tabel.

	begin veld	1e iteratie	2e iteratie	3e iteratie	∞ iteratie
1	100	100	100	100	100
2	0	50	50	62,5	75
3	0	0	25	25	50
4	0	0	0	12,5	25
5	0	0	0	0	0

Tabel 3.4.1. Drie iteraties met Jacobi

B. Gauss Seidel

Gauss-Seidel levert voor het m^e iteratieniveau beginnend bij het punt 1:

$$T_P^m = \frac{1}{2}T_E^{m-1} + \frac{1}{2}T_W^m. \quad (3.4.11)$$

Voor de drie eerste stappen in het iteratieproces staan de resultaten in tabel 3.4.2. Vergelijken we de resultaten uit beide tabellen dan wordt duidelijk dat de methode van Gauss-Seidel sneller tot een oplossing zal leiden dan de methode van Jacobi. Indien Gauss-Seidel toegepast wordt met punt 5 als startpunt blijkt de convergentie trager te zijn. Ook het startveld waarvan men uitgaat is hierbij van belang. Het blijkt

	begin veld	1e iteratie	2e iteratie	3e iteratie	∞ iteratie
--	------------	-------------	-------------	-------------	-------------------

1	100	100	100	100	100
2	0	50	62,5	68,75	75
3	0	25	37,5	42,75	50
4	0	12,5	18,75	21,88	25
5	0	0	0	0	0

Tabel 3.4.2. Drie iteraties met Gauss-Seidel

dat de snelste convergentie bereikt wordt indien men begint daar waar de afwijkingen van de uiteindelijke oplossing het grootst zijn.

3.4.2. Convergentie en divergentie

De methode van Gauss-Seidel geeft niet in alle omstandigheden een oplossing van het probleem. Aan de hand van een eenvoudig voorbeeld kunnen we laten zien, dat ook divergentie op kan treden. Beschouw het volgende stelsel van twee lineaire vergelijkingen met twee onbekenden:

$$T_1 = 0,4T_2 + 0,2 \quad (3.4.12)$$

$$T_2 = T_1 + 1. \quad (3.4.13)$$

We zien dat na vijf iteraties de oplossing al heel goed benaderd is:

iteratie no.	0	1	2	3	4	5	∞
T_1	0	0,2	0,68	0,872	0,949	0,980	1,0
T_2	0	1,2	1,68	1,872	1,949	1,980	2,0

Tabel 3.4.3. convergentiegedrag stelsel 3.4.12 en 3.4.13

We kunnen de vergelijkingen (3.4.12) en (3.4.13) ook anders schrijven:

$$T_1 = T_2 - 1 \quad (3.4.14)$$

$$T_2 = 2,5T_1 - 0,5. \quad (3.4.15)$$

met als oplossing via Gauss-Seidel:

iteratie no.	0	1	2	3	4
T_1	0	-1	-4	-11,5	-30,25
T_2	0	-3	-10,5	-29,25	-76,13

Tabel 3.4.4. Convergentiegedrag stelsel 3.4.14 en 3.4.15

Dit ziet er niet goed uit. Het iteratieproces divergeert. Scarborough vond al in 1958 een criterium waaraan de vergelijkingen zouden moeten voldoen om gegarandeerd convergentie te verkrijgen met de Gauss-Seidel methode. Voldoende voor convergentie blijkt te zijn indien voldaan is aan (het subscript bp staat voor buurpunten):

$$\frac{\sum |a_{bp}|}{|a_p|} \begin{cases} \leq 1 & \text{voor alle vergelijkingen} \\ < 1 & \text{voor tenminste 1 vergelijking} \end{cases}$$

De eisen dat alle coëfficiënten positief moeten zijn, en dat de gelineariseerde bronterm een negatieve richtingscoëfficiënt moet hebben kunnen in het licht van dit Scarborough criterium bezien worden. Is er namelijk niet aan deze eisen voldaan, dan is eenvoudig in te zien dat ook het Scarborough criterium in gevaar komt.

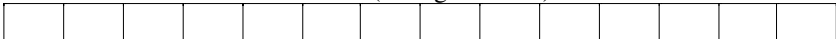
3.4.3. De lijn-voor-lijn oplosmethode

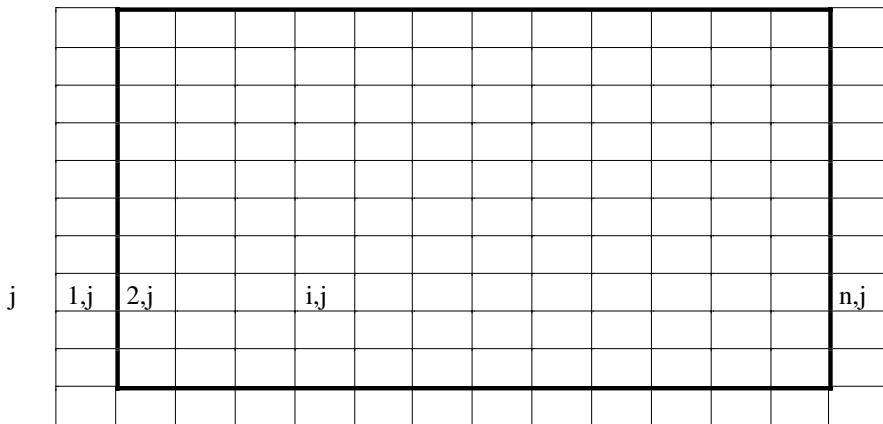
De puntsgewijze oplosmethode heeft als nadeel, dat de convergentie erg traag is. Er zijn andere iteratieve oplosmethoden, welke sneller tot een oplossing leiden. Zo kan men bijvoorbeeld alle vergelijkingen voor punten op een lijn tegelijkertijd oplossen en zo lijn-voor-lijn door het oplosdomein bewegen. Men kan ook voor alle punten in een vlak een oplossing vinden en dan vlak voor vlak door de ruimte bewegen. Men kan tenslotte alle vergelijkingen in alle punten in een 3D ruimte tegelijkertijd oplossen met een directe matrix oplosmethode. Het hangt in feite van het probleem af welke oplosmethode de minste rekentijd zal vergen. Voor een 3D stromingsprobleem, waar tenminste 4 gekoppelde differentiaalvergelijkingen opgelost moeten worden, is een directe oplosmethode ongeschikt alleen al door de geweldig grote hoeveelheid geheugen die voor een dergelijke matrix benodigd is. In de meeste gevallen blijkt een lijn-voor-lijn algoritme de beste resultaten te geven. We beperken ons hier dan ook tot het bespreken van deze lijn-voor-lijn methode.

Toepassen van de eindige-volumemethode op een 2D convectie-diffusie vergelijking voor bijvoorbeeld de temperatuur levert een stelsel lineaire vergelijkingen op voor de waarden van de temperaturen in elk roosterpunt als functie van temperaturen in de buurpunten. Beschouwen we een rij punten in het rekendomein en veronderstellen we dat de waarden van de temperaturen op de naburige lijnen bekend zijn, dan kunnen we een oplossing vinden voor de temperaturen op de betreffende lijn. Dit kan met behulp van het Thomas algoritme, of het tdma algoritme (tri-diagonal matrix algorithm), dat er als volgt uit ziet. De vergelijkingen op een lijn hebben de volgende gedaante:

$$a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E + (b + a_S T_S + a_N T_N). \tag{3.4.16}$$

Indien de temperaturen op de naburige lijnen ten zuiden en noorden van de beschouwde lijn bekend verondersteld kunnen worden, dan is de term tussen de haken in bovenstaande vergelijking bekend. Voor elk punt P van de lijn is de temperatuur uitgedrukt in de temperaturen van de buurpunten. Beschouwen we nu de lijn j met n roostercellen, waarvan de cellen (1,j) en (n,j) virtuele roostercellen zijn die buiten het rekendomein vallen (zie figuur 3.4.1).





Figuur 3.4.1. Rooster met n punten op lijn j

De randvoorwaarde geeft voor het virtuele roosterpunt:

$$T_{i,j} = f(T_{2,j}). \quad (3.4.17)$$

Voor het punt $(2,j)$ op de beschouwde lijn geldt:

$$T_{2,j} = f(T_{1,j}, T_{3,j}). \quad (3.4.18)$$

Combineren van 3.4.17 en 3.4.18 resulteert in:

$$T_{2,j} = f'(T_{3,j}). \quad (3.4.19)$$

Met $T_{3,j} = f(T_{2,j}, T_{4,j})$ geeft dit dan weer $T_{3,j} = f'(T_{4,j})$. Bewegend van west naar oost wordt op deze manier de temperatuur in elk punt (i,j) van lijn j uitgedrukt in de temperatuur van het naburige punt $(i+1,j)$. Zo ook voor het op een na laatste, meest oostelijke punt van het domein: $T_{n-1,j} = f'(T_{n,j})$. De randvoorwaarde geeft voor het virtuele roosterpunt op de lijn: $T_{n,j} = g(T_{n-1,j})$, zodat uit deze laatste twee vergelijkingen $T_{n,j}$ en $T_{n-1,j}$ bepaald kunnen worden. Vervolgens wordt $T_{n-2,j}$ berekend uit $T_{n-1,j}$. Nu bewegend van oost naar west, wordt de temperatuur in elk punt (i,j) bepaald uit de temperatuur in het naburige punt $(i+1,j)$. Nu alle temperaturen op de lijn zijn bepaald kan hetzelfde herhaald worden voor de naburige lijn, bijvoorbeeld lijn $j+1$, en zo kan elke lijn in het rekendomein bezocht worden. Dit wordt herhaald totdat convergentie is bereikt.

Deze lijn-voor-lijn oplosmethode kan gebruikt worden in combinatie met Jacobi, Gauss-Seidel of Successive Over Relaxation op dezelfde manier als de puntsgewijze oplosmethoden. Van belang hierbij kan zijn de richting waarin het veld doorlopen wordt. De voordeligste richting hangt af van de coëfficiënten. Voor een stroming die hoofdzakelijk plaats vindt van oost naar west is de gunstigste richting waarmee het veld doorlopen wordt ook van oost naar west. Vaak bestaat een iteratie uit twee stappen, de eerste stap oost-west wordt bijvoorbeeld gevolgd door een stap west-oost. In het meest algemene geval zal een complete iteratie

bestaan uit vier afzonderlijke stappen. Het veld wordt hierbij in alle vier mogelijke richtingen doorlopen (oost-west, west-oost, zuid-noord en noord-zuid).

3.5. De convectie-diffusie vergelijking

De 1D convectie-diffusie vergelijking zal nu geïntegreerd worden over eindige volumina en over een eindige tijdstap. Hierna zullen benaderingen gegeven worden van grootheden ter plaatse van de vlakken tussen de eindige volumina. De vergelijking luidt:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho T) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u T) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial T}{\partial x} \right) + S''' \quad (3.5.1)$$

Integratie van de eerste term over de tijd Δt en het volume ΔV geeft:

$$\int_V \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t}(\rho T) dt dV = M^{n+1} T_P^{n+1} - M^n T_P^n \quad (3.5.2)$$

Voor een volledig expliciet schema levert de convectieterm het volgende op:

$$\int_t^e \int_V \frac{\partial}{\partial x}(\rho u T) dV dt = \int_t^e \int_V \frac{\partial}{\partial x}(\rho u A T) dx dt = (\dot{m}_e^n T_e^n - \dot{m}_w^n T_w^n) \Delta t \quad (3.5.3)$$

Indien het snelheidsveld gegeven is moeten we uitdrukkingen hebben voor de temperaturen op de vlakken e en w tussen roosterpunten in. De waarden van deze temperaturen op de tussenvlakken kunnen benaderd worden door bijvoorbeeld:

$$T_e = \frac{1}{2}(T_E + T_P) \quad \text{en} \quad T_w = \frac{1}{2}(T_W + T_P), \quad (3.5.4)$$

waarmee de convectieterm benaderd wordt door:

$$\frac{1}{2} \dot{m}_e (T_E^n + T_P^n) - \frac{1}{2} \dot{m}_w (T_W^n + T_P^n). \quad (3.5.5)$$

De diffusie term geeft:

$$\int_t^e \int_V \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial T}{\partial x} \right) dV dt = \left(\frac{A_e \Gamma_e}{\delta x_e} (T_E^n - T_P^n) - \frac{A_w \Gamma_w}{\delta x_w} (T_P^n - T_W^n) \right) \Delta t \quad (3.5.6)$$

Na wat rangschikken van de termen ziet de gediscretiseerde differentiaalvergelijking er dan als volgt uit:

$$\begin{aligned} \frac{M_P^{n+1}}{\Delta t} T_P^{n+1} &= (D_w + \frac{1}{2} \dot{m}_w) T_W^n + (D_e - \frac{1}{2} \dot{m}_e) T_E^n + \\ &\left(\frac{M_P^n}{\Delta t} - (D_e + D_w) + \frac{1}{2} (\dot{m}_w - \dot{m}_e) \right) T_P^n \end{aligned} \quad (3.5.7)$$

Het is duidelijk dat twee van de coëfficiënten negatief kunnen worden, hetgeen

evenveel voorwaarden oplevert voor stabiliteit. De eerste voorwaarde luidt:

$$D_e \geq \frac{1}{2} \dot{m}_e \text{ of } \left(\frac{\lambda}{c_p \Delta x} \right)_e \geq \frac{1}{2} (\rho Au)_e. \quad (3.5.8)$$

Dit is equivalent met de voorwaarde: $Pe(\Delta)_e \leq 2$ met $Pe(\Delta) = \rho c_p u \Delta x / \lambda$. Het cel-Péclet getal geeft de verhouding tussen het transport door convectie en diffusie weer, zodat de voorwaarde voor stabiliteit betekent dat het transport door convectie niet groter mag zijn dan twee maal het transport door diffusie.

De tweede voorwaarde voor stabiliteit volgt uit de coëfficiënt van T_p^n :

$$\frac{M_p}{\Delta t} + \frac{1}{2} (\dot{m}_w - \dot{m}_e) \geq D_e + D_w. \quad (3.5.9)$$

Veronderstellen we dat $\dot{m}_w = \dot{m}_e$ en $D_e = D_w$ dan levert deze eis uiteindelijk op:

$$\frac{a \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} \text{ of } Fo(\Delta) \leq \frac{1}{2}. \quad (3.5.10)$$

Deze eis komt er in feite op neer, dat de tijdstap kleiner moet zijn dan de tijd nodig voor diffusie naar het nabijgelegen roosterpunt. De twee stabiliteitseisen gekombineerd levert op: $Pe(\Delta) \cdot Fo(\Delta) = Co(\Delta) \leq 1$ (het kental van Courant = $u \Delta t / \Delta x$). De fysische betekenis hiervan is dat de afstand afgelegd door het fluïdum in de tijd Δt : $u \Delta t$ kleiner dient te zijn dan Δx . Dit criterium alleen is niet voldoende. Er moet tevens aan een van de twee andere criteria voldaan zijn.

Dat met name het criterium $Pe(\Delta) \leq 2$ kan leiden tot problemen wordt nu aangetoond aan de hand van een voorbeeld. Beschouw een gegeven propstrooming door een buis en bepaal de temperatuurverdeling in het thermisch inloopgebied indien vanaf $x = 0$ de wandtemperatuur hoger is dan de de temperatuur van het fluïdum dat door de buis stroomt. Dit is een twee-dimensionaal probleem. Kies tien roosterpunten in de y-richting loodrecht op de wand. Aan de hand van het criterium $Pe(\Delta) = 2$ kan het minimum aantal roosterpunten in de x-richting langs de wand bepaald worden. De lengte van het thermisch inloopgebied is gelijk aan: $L = 0,1 D Pe$. Hierin is D de diameter van de buis en Pe het Péclet getal betrokken op deze diameter. Het minimum aantal roosterpunten wordt gegeven door: $\Delta x = 2a/u$. Het aantal roosterpunten dat met deze Δx nodig is om het gehele thermisch inloopgebied te bestrijken is:

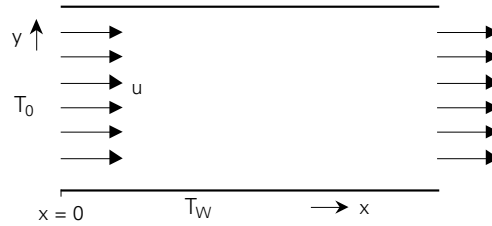


Fig. 3.5.1. Propstroming met konstante wandtemperatuur.

$$N_x = \frac{L}{\Delta x} = 0,05 \text{ Pe}^2. \quad (3.5.11)$$

Is het Re getal betrokken op de hydraulische diameter van de buis bijvoorbeeld gelijk aan $Re = 1000$ en is $Pr = 1$, dan betekent dit voor het aantal roosterpunten in de x-richting: $N_x = 50.000$ en is het totaal aantal roosterpunten gelijk aan 500.000 .

Met

$Pr = 1000$ loopt het totale aantal roosterpunten zelfs op tot $5,0 \cdot 10^{11}$. Dit is een buitengewoon groot aantal punten voor een betrekkelijk eenvoudig probleem.

3.5.1. Upwind differenties

In het voorafgaande is duidelijk geworden dat het benaderen van de temperaturen op de tussenvlakken als het gemiddelde van de temperaturen op de twee omliggende roosterpunten tot een buitengewoon groot aantal roosterpunten aanleiding geeft. Vooral voor gevallen waarin het transport gedomineerd wordt door convectie en de diffusie praktisch te verwaarlozen is lijkt een andere benadering van de temperaturen op de tussenvlakken gewenst. Een benadering welke altijd tot positieve coëfficiënten leidt is die van de upwind differenties. Hierbij wordt voor de temperatuur van het vlak tussen de punten P en E genomen:

$$T_e = T_P \text{ indien } \dot{m}_e > 0 \quad (3.5.12)$$

$$T_e = T_E \text{ indien } \dot{m}_e < 0$$

Voor de temperatuur op een tussenvlak wordt dus de stroomopwaartse waarde genomen. Dat dit een logische benadering is, indien de convectieve overdracht veel groter is dan de diffusieve overdracht, is te illustreren met het volgende voorbeeld. Beschouw de eindige volumina als aan elkaar grenzende goed geroerde vaten met tussen deze vaten dunne buisjes waardoor vloeistof van het ene naar het andere vat stroomt. De wanden van de vaten zijn vervaardigd van een perfecte isolator. De temperatuur in de verbindende buisjes zal die van het stroomopwaartse vat zijn indien de geleiding verwaarloosd kan worden.

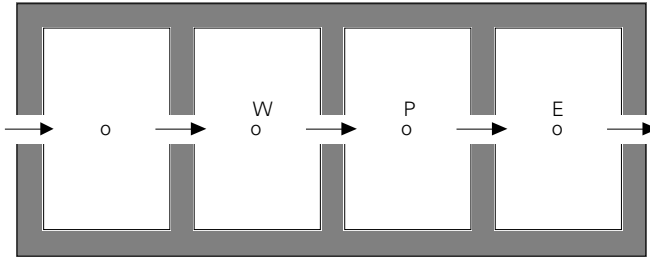


Fig. 3.5.2. Aaneengeschakelde geroerde vaten

Er is ook inzicht te verkrijgen in het waarom van upwind differenties door de 1D convectie-diffusie vergelijking analytisch op te lossen. De 1D vergelijking luidt:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u T) = \frac{\partial}{\partial x}(\Gamma \frac{\partial T}{\partial x}). \quad (3.5.13)$$

met de dichtheid ρ , de snelheid u en de diffusiviteit Γ constant en de randvoorwaarden

$$x = 0: T = T_P \quad \text{en} \quad x = \Delta x: T = T_E \quad (3.5.14)$$

is de oplossing van deze vergelijking:

$$\frac{T - T_P}{T_E - T_P} = \frac{\exp(\text{Pe} \frac{x}{\Delta x}) - 1}{\exp(\text{Pe}) - 1} \quad \text{met} \quad \text{Pe} = \frac{\rho u \Delta x}{\Gamma}. \quad (3.5.15)$$

Deze oplossing is als functie van het Pe-getal uitgezet in figuur 3.5.3.

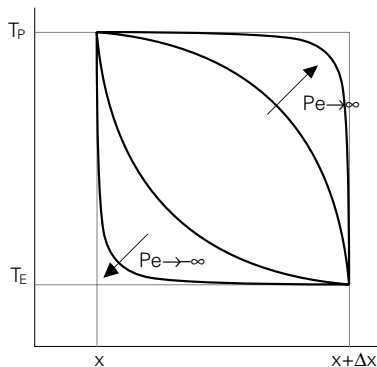


Fig. 3.5.3. Exacte oplossing 1D convectie-diffusie vergelijking.

Voor grote waarden van het Péclet getal blijkt de temperatuur midden tussen de punten x en Δx nagenoeg gelijk te zijn aan de temperatuur in het stroomopwaartse punt. Voor $\text{Pe} = 0$ bestaat er een lineair temperatuurprofiel wat te verwachten is bij pure geleiding. Indien zowel convectie als diffusie van belang zijn kunnen de temperatuur en de temperatuurgradiënt op het tussenvlak tussen twee roosterpunten

P en E benaderd worden met:

$$T_e = \left(\frac{1}{2} + \alpha_e\right)T_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_e\right)T_E. \quad (3.5.16)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_e = \beta_e \frac{T_E - T_P}{\Delta x_e} \quad (3.5.17)$$

De waarden van α_e en β_e zijn afhankelijk van het Péclet getal.

$$\text{Voor } Pe \rightarrow 0: \quad \alpha_e = 0 \text{ en } \beta_e = 1 \quad (\text{centraal schema})$$

$$\text{Voor } Pe \rightarrow \infty: \quad |\alpha_e| = \frac{1}{2} \text{ en } \beta_e = 1 \quad (\text{upwind schema})$$

$$\text{Voor } 2 \leq Pe \leq \infty: \quad \alpha_e = \frac{1}{2} - \frac{\exp(Pe/2) - 1}{\exp(Pe) - 1} \quad (\text{exponentieel schema})$$

$$\beta_e = Pe \frac{\exp(Pe/2)}{\exp(Pe) - 1}$$

$$\text{Voor } 2 \leq Pe \leq \infty: \quad |\alpha_e| = \frac{1}{2} \frac{Pe}{5 + Pe^2} \quad (\text{benadering exponentieel schema})$$

$$\beta_e = \frac{1 + 0,005Pe^2}{1 + 0,05Pe^2}$$

Het exponentiële schema is afgeleid uit de exacte oplossing van de 1D convectie-diffusie vergelijking. Een nadeel van dit exponentiële schema is dat het een erg rekenintensief schema is. Voor het uitrekenen van de exponenten is veel rekentijd nodig. Vandaar het laatste schema, dat een goed benadering is van het exponentiële schema.

3.5.2. 2D convectie-diffusie vergelijking

Een uitbreiding naar de 2D convectie-diffusie vergelijking is zeer eenvoudig. In deze paragraaf zullen nog eens alle stappen volgens welke de eindige volumemethode werkt doorlopen worden voor de 2D convectie-diffusie vergelijking in cartesische coördinaten. Hierbij zal gebruik gemaakt worden van het algemene schema met de definities van de temperaturen en temperatuurgradiënten zoals gedefinieerd in de vorige paragraaf met vergelijkingen (3.5.16) en (3.5.17).

De 2D convectie-diffusie vergelijking is:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho T) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u T) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v T) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial T}{\partial y} \right) + S'''. \quad (3.5.18)$$

Het rekendomein wordt opgedeeld in volumes, waarvan er een in de onderstaande figuur is weergegeven.

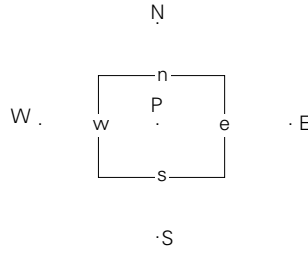


Fig.3.5.4. 2D deelvolume.

Integreren van de dv over het volume rond punt P geeft als resultaat (zie ook vgl. 3.1.22):

$$\left(\frac{M_P}{\Delta t} T_P - \frac{M_P^o}{\Delta t} T_P^o\right) + (\dot{m}_e T_e + \dot{m}_s T_s - \dot{m}_w T_w - \dot{m}_n T_n) = (\Gamma A \frac{\partial T}{\partial x})_e + (\Gamma A \frac{\partial T}{\partial y})_s - (\Gamma A \frac{\partial T}{\partial x})_w - (\Gamma A \frac{\partial T}{\partial y})_n + S. \quad (3.5.19)$$

De waarden met het superscript o zijn genomen op het oude tijdsniveau, de overigen op het nieuwe tijdsniveau. Om de uiteindelijke differentievergelijking handzamer te maken wordt de gediscretiseerde continuïteitsvergelijking gebruikt. Uit de continuïteitsvergelijking volgt:

$$\frac{M_P}{\Delta t} T_P = \frac{M_P^o}{\Delta t} T_P^o + (\dot{m}_w + \dot{m}_n - \dot{m}_e - \dot{m}_s) T_P. \quad (3.5.20)$$

Dit ingevuld in vergelijking (3.5.19) leidt tot:

$$\left(\frac{M_P^o}{\Delta t} T_P - \frac{M_P^o}{\Delta t} T_P^o\right) + \dot{m}_e (T_e - T_P) + \dot{m}_s (T_s - T_P) - \dot{m}_w (T_w - T_P) - \dot{m}_n (T_n - T_P) = (\Gamma A \frac{\partial T}{\partial x})_e + (\Gamma A \frac{\partial T}{\partial y})_s - (\Gamma A \frac{\partial T}{\partial x})_w - (\Gamma A \frac{\partial T}{\partial y})_n + S. \quad (3.5.21)$$

Vervolgens worden de profielen tussen de roosterpunten benaderd om waarden te vinden voor de temperaturen en de temperatuurgradiënten op de tussenvlakken e, w, n en s. Passen we de benadering toe als in vergelijkingen (3.5.16) en (3.5.17) resulteert dit in:

$$a_P T_P = a_E T_E + a_W T_W + a_S T_S + a_N T_N + b \quad (3.5.22)$$

met

$$a_E = \beta_e D_e - \frac{1}{2} \dot{m}_e + |\alpha_e| |\dot{m}_e|; \quad (3.5.23)$$

$$a_W = \beta_w D_w + \frac{1}{2} \dot{m}_w + |\alpha_w| |\dot{m}_w|; \quad (3.5.24)$$

$$a_N = \beta_n D_n - \frac{1}{2} \dot{m}_n + |\alpha_n| |\dot{m}_n|; \quad (3.5.25)$$

$$a_S = \beta_s D_s + \frac{1}{2} \dot{m}_s + |\alpha_s| |\dot{m}_s|; \quad (3.5.26)$$

$$a_P = \frac{M_P^0}{\Delta t} + a_E + a_W + a_S + a_N - S_P; \quad (3.5.27)$$

$$b = \frac{M_P^0}{\Delta t} T_P^0 + S_C. \quad (3.5.28)$$

De bronterm S in vergelijking (3.5.21) is gelineariseerd tot $S_P T_P + S_C$.

3.5.3. Numerieke diffusie

Het gebruik van upwind differenties heeft een groot nadeel dat wij kennen als numerieke diffusie of ook wel als ‘false diffusion’. Deze numerieke diffusie kan de nauwkeurigheid van de oplossing in hoge mate nadelig beïnvloeden. Dat zal uit het volgende duidelijk worden.

De convectieve flux van de scalaire grootheid ϕ door bijvoorbeeld het vlak e is gegeven door:

$$C_e = (\rho u)_e \phi_e = \dot{m}_e \phi_e. \quad (3.5.29)$$

Het centrale (CDS) en het upwind differentieschema (UDS) hebben verschillende benaderingen voor de waarde van ϕ ter plaatse van het vlak e :

$$\text{CDS: } \phi_e = (\phi_P + \phi_E)/2. \quad (3.5.30)$$

$$\text{UDS: } \phi_e = \phi_P \text{ voor } u \rightarrow \infty. \quad (3.5.31)$$

Vergelijken we deze benaderingen met een benadering van ϕ welke uit Taylor reeksen volgt. Ontwikkeling rond het punt P geeft:

$$\phi_P = \phi_e - \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_e + \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{4} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_e + \dots \quad (3.5.32)$$

Ontwikkeling rond het punt E geeft:

$$\phi_E = \phi_e + \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_e + \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{4} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_e + \dots \quad (3.5.33)$$

Invullen van deze reeksen in de benaderingen van ϕ_e geeft achtereenvolgens voor het centrale schema:

$$\phi_e = \phi_e + \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{4} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_e + \dots \quad (3.5.34)$$

en voor het upwind schema:

$$\phi_e = \phi_e - \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_e + \dots \quad (3.5.35)$$

Hieruit blijkt dat het centrale schema 2^e orde in x is, terwijl het upwind schema 1^e orde in x is. De fout welke gemaakt wordt met het upwind schema voor het benaderen van de convectieve flux is gelijk aan

$$-\dot{m}_e \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_e. \quad (3.5.36)$$

Dit heeft de gedaante van een diffusieterm, namelijk $\Gamma(\partial\phi/\partial x)$, vandaar de uitdrukking numerieke diffusie. De grootte van deze "diffusie" neemt af met Δx , een fijn rooster is dus gunstiger. Verder heeft deze term weinig te betekenen voor gebieden waar $\partial\phi/\partial x$ klein is.

Met behulp van de oplossing van het 1D convectie-diffusie probleem is aangetoond dat upwind differenties voor hoge Pe getallen succesvol zijn. Voor een 2D of een 3D stroming is dit echter niet altijd het geval. Dit kan geïllustreerd worden aan de hand van het volgende voorbeeld. Beschouw een stroming welke een hoek van 45° maakt met de randen van een rechthoekig rekendomein. De stroming is uniform. Een scalaire grootheid ϕ heeft de waarde 1 op de verticale wand welke aangestroomd wordt en de waarde 0 op de horizontale wand welke aangestroomd wordt (zie figuur 3.5.5). De convectie is zeer groot t.o.v. de diffusie, zodat de diffusie verwaarloosd kan worden. De verspreiding van de scalar ϕ wordt beschreven door de volgende vergelijking:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v \phi) = 0. \quad (3.5.37)$$

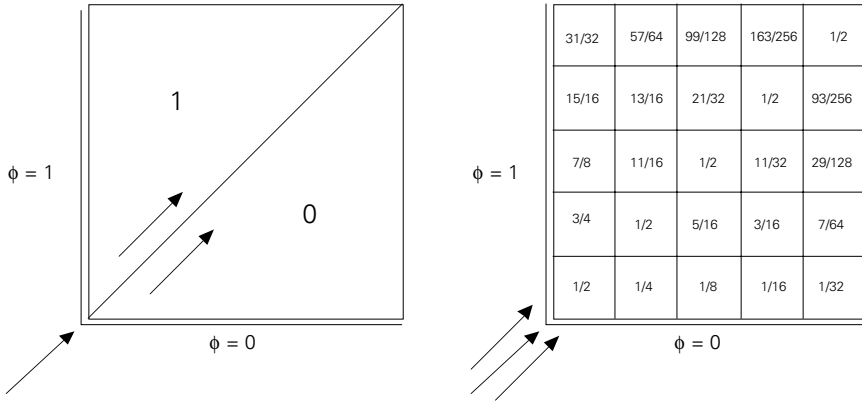
Het centrale differentie schema kan niet gebruikt worden bij het oplossen van deze vergelijking daar het Pe-getal gebaseerd op de roosterafstand nooit kleiner dan 2 kan worden. Toepassing van het upwind differentie schema leidt tot het volgende:

$$\dot{m}_e \phi_e + \dot{m}_n \phi_n = \dot{m}_w \phi_w + \dot{m}_s \phi_s \quad (3.5.38)$$

De massastromen door alle vlakken zijn aan elkaar gelijk indien de roostercellen vierkant zijn. In dat geval herleidt vergelijking (3.5.44) zich met de benaderingen volgens het upwind differentie schema ($\phi_e = \phi_P$, $\phi_n = \phi_P$, $\phi_w = \phi_W$, $\phi_s = \phi_S$) tot:

$$2\phi_P = \phi_W + \phi_S. \quad (3.5.39)$$

De oplossing kan nu eenvoudig gevonden worden en is gegeven in figuur 3.5.5.



Figuur 3.5.5. Illustratie numerieke diffusie.

De exacte oplossing van dit probleem is triviaal. Boven de diagonaal van de linkeronderhoek naar de rechterbovenhoek moet $\phi = 1$. Onder deze diagonaal is de oplossing $\phi = 0$. Immers er is geen diffusie loodrecht op de stromingsrichting. De numerieke oplossing verkregen met behulp van het upwind differentie schema vertoont uitsmering loodrecht op deze diagonaal. Deze uitsmering als gevolg van de numerieke techniek heeft het karakter van diffusie loodrecht op de stromingsrichting. De numerieke oplossing kan vergeleken worden met de analytische oplossing voor werkelijke diffusie loodrecht op de stromingsrichting. In vergelijking (4.2.12) van paragraaf 4.2.4 is de oplossing gegeven voor het geval dat men twee media met dezelfde thermische eigenschappen maar verschillende temperaturen op $t = 0$ met elkaar in warmtecontact brengt. Met behulp van de transformatie $t = s/u$, waarin s de afgelegde weg in de richting van de snelheidsvector is en u de grootte van de snelheid in deze richting, is deze oplossing te gebruiken om een idee te krijgen van de grootte van de schijnbare diffusie. Met z de coördinaat loodrecht op de snelheidsrichting resulteert de diffusie loodrecht op de stromingsrichting in:

$$T = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{z}{2\sqrt{as/u}}\right). \tag{3.5.40}$$

Op de plaats $z = \frac{3}{2}\sqrt{2} \Delta$ en $z = 3\sqrt{2} \Delta$ is volgens het numerieke schema $T = \frac{7}{64}$. Dit ingevuld in (3.5.40) geeft:

$$\frac{7}{64} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{3}{8\sqrt{2}}\operatorname{Pe}(\Delta)\right)^{1/2} \tag{3.5.41}$$

Waaruit volgt dat $\operatorname{Pe}(\Delta) = 2,85$. En dus vinden we voor de schijnbare diffusiecoëfficiënt Γ_{num} :

$$\Gamma_{\text{num}} = \frac{u \Delta}{2,85} \tag{3.5.42}$$

Voor een waterstroming bij kamertemperatuur is de warmtevereffeningscoëfficiënt $a = 1,4 \cdot 10^{-7}$. Bij een stroomsnelheid van 1 m/s en een stromingsrichting welke een hoek van 45° maakt met het rooster en een roosterafstand van $4 \cdot 10^{-7}$ m. is de schijnbare diffusie door het gebruik van het upwind differentieschema gelijk aan de echte warmtediffusie. Met behulp van de hierboven gevonden uitdrukking voor de schijnbare diffusiviteit is de warmtevereffening berekend uit (3.5.40) vergeleken met de numerieke diffusie in figuur 3.5.6. Hieruit blijkt dat de numerieke diffusie inderdaad hetzelfde karakter heeft als de werkelijke diffusie.

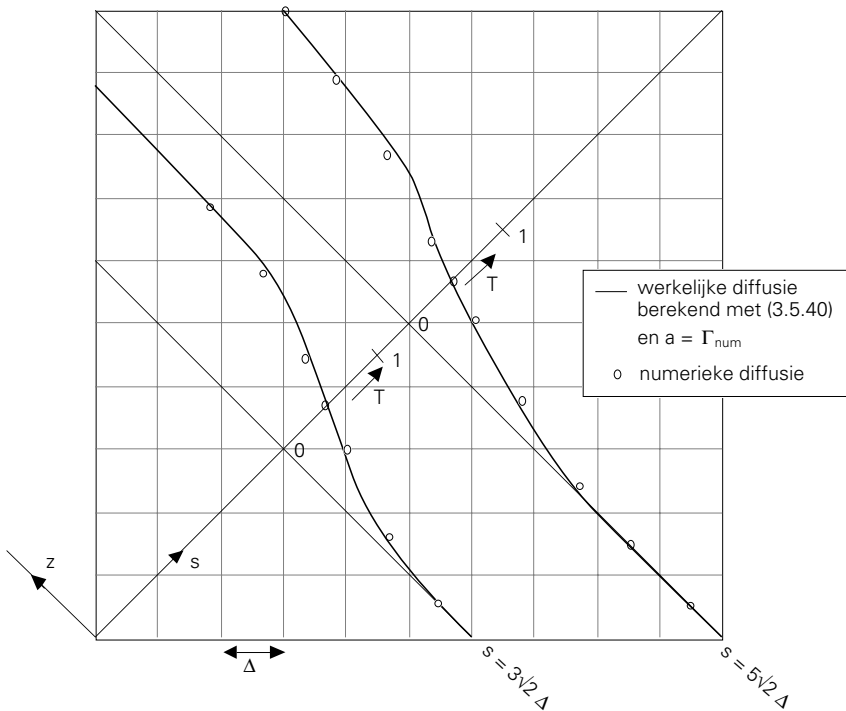


Fig. 3.5.6. Numerieke diffusie vergeleken met werkelijke diffusie.

De numerieke diffusie wordt veroorzaakt door het feit dat niet gebruik gemaakt wordt van de echte stroomopwaartse waarden van ϕ . De goede waarde van ϕ op een tussenvlak zou gevonden moeten worden in de negatieve stromingsrichting en niet voor een horizontaal vlak in de negatieve x-richting en voor een verticaal vlak in de negatieve y-richting. De grootheid ϕ stroomt met de verkeerde waarde binnen, waarna er menging plaats vindt in het volume. Men moet zo veel mogelijk proberen de hoofdstromingsrichting en de roosterrichting te laten samenvallen. Uit dit voorbeeld is duidelijk geworden dat er bij een probleem dat gedomineerd wordt door convectie (hoge Pe getallen) op een betere wijze rekening gehouden dient te worden met de hoek welke de stroming maakt met het rekenrooster. Oplossingen van dit probleem zijn:

1. In gebieden waar de stromingsrichting dit vereist werken met zeer fijne roosters, zodat de Pe-getallen gebaseerd op de roosterafstanden niet te groot worden.
2. Het gebruik van nauwkeuriger interpolatieschema's, zoals hieronder besproken.

3.5.4. Voorbeelden van nauwkeuriger differentieschema's

Hier worden een drietal nauwkeuriger differentieschema's in het kort getoond.

1. Tweede orde upwind.

Bij dit schema wordt de waarde van ϕ op een tussenvlak w bepaald uit de waarden van ϕ op de twee stroomopwaartse roosterpunten, bijvoorbeeld de punten W en WW als in de figuur (zie figuur 3.5.7).

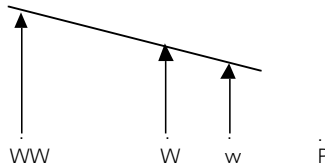


Fig. 3.5.7. Tweede orde upwind schema.

Het voordeel van dit schema is dat de extrapolatie tot een hogere nauwkeurigheid leidt dan het upwind schema. Aan de andere kant is het schema niet onvoorwaardelijk stabiel. Er kunnen negatieve coëfficiënten voorkomen. Bovendien ontstaan er problemen bij de randen met instroom randvoorwaarden.

2. Quadratic Upwind schema.

Hier vindt kwadratische interpolatie plaats tussen de punten P en de twee stroomopwaartse punten, bijvoorbeeld W en WW .

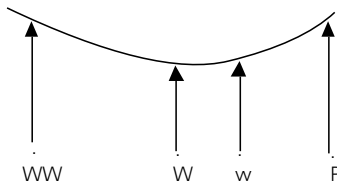


Fig. 3.5.8. Quadratic Upwind schema.

Zowel de convectieve als de diffusieve term wordt met behulp van dit profiel benaderd. Dit schema wordt meestal het Quick-schema genoemd. Aan dit schema kleven ongeveer dezelfde problemen als aan het tweede orde upwind schema: mogelijk negatieve coëfficiënten en problemen met instroom randvoorwaarden. Het schema is wel weer nauwkeuriger dan het eerste orde upwind schema.

3. Skew Upwind Differencing Scheme.

Bij dit schema wordt gebruik gemaakt van de volgende transformatie:

$$\rho u \frac{\partial \phi}{\partial x} + \rho v \frac{\partial \phi}{\partial y} = \rho U \frac{\partial \phi}{\partial s}, \quad (3.5.43)$$

waarin U de lokale snelheid is en s de afstand in de stromingsrichting. Voor hoge Péclet getallen luidt dan de convectie-diffusievergelijking:

$$\rho U \frac{\partial \phi}{\partial s} = S^\phi \quad (3.5.44)$$

Een benadering van ϕ op een roostervlak wordt nu gevonden met:

$$\phi_w = \phi_u + \Delta\phi_w \quad (3.5.45)$$

Hierin is ϕ_u de echte stroomopwaartse waarde, welke gevonden wordt uit een interpolatie tussen waarden van ϕ op enkele stroomopwaartse punten (zie figuur 3.5.9). $\Delta\phi_w$ is een correctie voor de variatie van ϕ tussen de posities u en w . Er zijn verschillende manieren om ϕ_u en $\Delta\phi_w$ te evalueren. Hiertoe zij verwezen naar de literatuur [D17].

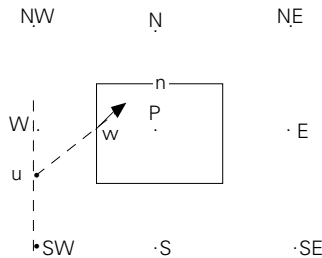


Fig. 3.5.9. Skew Upwind Differencing Scheme.

3.6. De impulsvergelijkingen

Tot nu toe zijn we steeds uitgegaan van een gegeven stromingsveld. Echter in de praktijk zal dit niet het geval zijn en zullen de impulsvergelijkingen ook opgelost dienen te worden. Voor de snelheidscomponent u luidt de impulsvergelijking (gebruik makend van de Einstein conventie):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j}) - \frac{\partial p}{\partial x_j} + S \quad (3.6.1)$$

Duidelijk is dat de drie vergelijkingen voor de drie snelheidscomponenten via de convectieve term en via de druk aan elkaar gekoppeld zijn. Bovendien is duidelijk, dat de convectieve term niet-lineair is. Deze problemen kunnen eenvoudig overkomen worden indien gekozen wordt voor een iteratieve oplosmethode. Het grootste probleem bij het oplossen van het snelheidsveld is het feit, dat er geen vergelijking is voor de druk. Indirect kan de druk verkregen worden via de continuïteitsvergelijking. Indien het correcte drukveld in de impulsvergelijkingen wordt ingevuld voldoet het verkregen snelheidsveld aan de continuïteitsvergelijking. In feite zou dus het stelsel gekoppelde vergelijkingen voor

behoud van impuls en massa via een directe methode opgelost moeten worden. Door de niet-lineariteiten is dit echter geen aantrekkelijke weg en we zullen zien, dat een iteratieve methode een betere mogelijkheid is.

3.6.1. Vershoven roosters

Uitgangspunt van de eindige-volumemethode is de integratie van de partiële differentiaal vergelijking over een roostercel en het benaderen van onbekenden via profielen tussen waarden in de roosterpunten. Voeren we dit uit voor de drukgradiënt uit de impulsvergelijking voor een 1D stroming:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uu) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial x}\right) - \frac{\partial p}{\partial x} + S \quad (3.6.2)$$

dan krijgen we:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_V -\frac{\partial p}{\partial x} dV dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e -\frac{\partial p}{\partial x} A dx dt = -(p_e - p_w) A \Delta t \quad (3.6.3)$$

De waarden van de druk op de tussenvlakken e en w van de roostercellen kunnen benaderd worden met behulp van lineaire profielen, waarmee de geïntegreerde drukgradiënt gelijk wordt aan:

$$-\left(\frac{p_P + p_E}{2} - \frac{p_P + p_W}{2}\right) A \Delta t = \frac{p_E - p_W}{2} A \Delta t \quad (3.6.4)$$

Uit dit resultaat blijkt, dat voor de benadering van de drukgradiënt een grover rooster gebruikt wordt, dan het actuele rooster. Bovendien blijkt dat een golvend (zigzag) drukveld als in figuur 3.6.1 door het numerieke schema gezien wordt als een constant drukveld, aangezien voor elk roosterpunt de gediscretiseerde drukgradiënt gelijk aan nul wordt.

$$\overset{\circ}{p}=1 \quad \overset{\circ}{p}=2 \quad \overset{\circ}{p}=1 \quad \overset{\circ}{p}=2 \quad \overset{\circ}{p}=1 \quad \overset{\circ}{p}=2 \quad \overset{\circ}{p}=1$$

Fig. 3.6.1 Een golvend drukveld

Voor een 2D geval zijn er zelfs vier onafhankelijke oplossingen mogelijk voor het drukveld, zoals uit figuur 3.6.2 blijkt. Voor alle punten is de drukgradiënt, zoals berekend volgens (3.6.4) en een soortgelijke uitdrukking voor de gradiënt in de y-richting, gelijk aan nul.

Een numeriek model, dat een dergelijk niet uniform drukveld aanziet voor een veld met constante druk, is ontoelaatbaar. Beter zou zijn de druk uit te rekenen op een twee maal zo grof rooster. Bij het formuleren van de differentievergelijking van de continuïteitsvergelijking treedt een vergelijkbaar probleem op. Voor het discretiseren van $\partial u / \partial x$ krijgen we analoog aan de discretisatie van $\partial p / \partial x$:

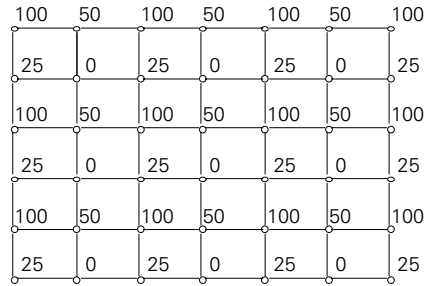


Fig. 3.6.2. Golvend 2D drukveld

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_V \frac{\partial u}{\partial x} dV dt = \left(\frac{u_E - u_W}{2} \right) A \Delta t \quad (3.6.5)$$

Ook hier zijn dus op dezelfde manier als voor de druk in de figuren 3.6.1 en 3.6.2 weergegeven, golvende snelheidsvelden mogelijk, welke volgens het numerieke schema aan de continuïteitsvergelijking voldoen.

Een oplossing van de hierboven beschreven problematiek kan gevonden worden door roosterpunten voor snelheden en druk niet samen te laten vallen. Indien de roostercellen voor de snelheden verschoven worden ten opzichte van de roostercellen voor de druk, temperatuur en andere scalaire variabelen, zodanig dat de roosterpunten voor de snelheden op de celwanden van de roostercellen voor de druk vallen (zie figuur 3.6.3) zijn beide problemen opgelost.

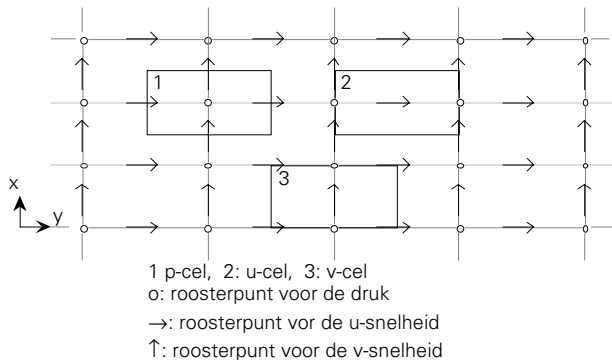


Fig. 3.6.3. Vershoven roosters voor de snelheidscomponenten

De roostercellen voor de snelheidscomponent in de x-richting worden verschoven in de x-richting en de roostercellen voor de snelheidscomponent in de y-richting worden verschoven in de y-richting. De u-impuls- vergelijking wordt nu geïntegreerd over een u-cel, de v-impuls- vergelijking over een v-cel en alle andere vergelijkingen (temperatuur, continuïteit) over een p-cel. De over een u-cel geïntegreerde drukgradiënt resulteert in:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_V -\frac{\partial p}{\partial x} dV dt = -(p_e - p_w) A \Delta t \quad (3.6.6)$$

Hierin zijn p_e en p_w op de celwanden bekend en hoeft er niet verder geïnterpoleerd te worden, zodat de drukgradiënt uitgedrukt wordt in drukken op twee naburige roosterpunten. Evenzo wordt $\partial u / \partial x$ uit de continuïteitsvergelijking voor een p-cel benaderd met:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_V \frac{\partial u}{\partial x} dV dt = -(u_e - u_w) A \Delta t \quad (3.6.7)$$

Ook nu hoeft er niet meer geïnterpoleerd te worden om de snelheden op de celwanden te krijgen, daar de roosterpunten voor de snelheden op de celwanden zijn gedefinieerd.

3.6.2. De 2D impulsvergelijking

Met de invoering van de verschoven roosters voor de snelheidscomponenten moeten we nadere afspraken maken over de nomenclatuur. We spreken af, dat de roosterpunten voor de snelheden op het oostvlak en het noordvlak van een p-cel behoren bij het punt P. Op deze manier ontstaat de nomenclatuur als gegeven in figuur 3.6.4.

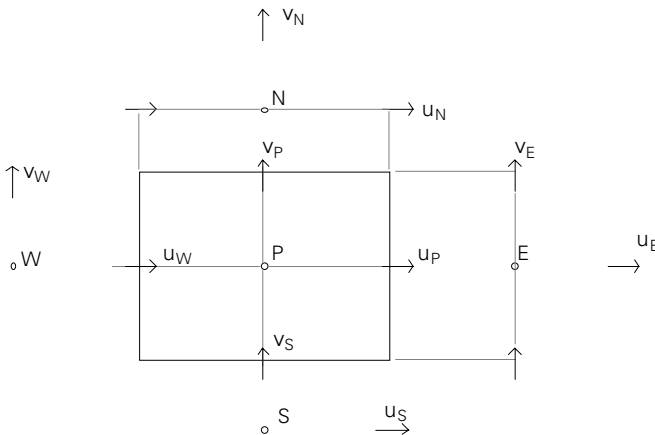


Fig. 3.6.4. p-cel, u-cel and v-cel met nomenclature.

Discretiseren we nu de 2D u-impulsvergelijking welke als volgt luidt:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u u) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v u) = \frac{\partial}{\partial x} (\mu \frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (\mu \frac{\partial u}{\partial y}) - \frac{\partial p}{\partial x} + S''' \quad (3.6.8)$$

dan gaat dit geheel analoog met de discretisatie van de 2D convectie- diffusie vergelijking als in paragraaf 3.5.2, resulterend in:

$$a_p^u u_p = a_E^u u_E + a_W^u u_W + a_S^u u_S + a_N^u u_N - A_e(p_E - p_P) + b^u \quad (3.6.9)$$

met identieke uitdrukkingen als (3.5.22) t/m (3.5.28) voor de coëfficiënten. Het bovenschrijft u van de coëfficiënten duidt aan dat we te maken hebben met de coëfficiënten voor de u -impulsvergelijking. Voor de v -impuls krijgen we :

$$a_p^v v_p = a_E^v v_E + a_W^v v_W + a_S^v v_S + a_N^v v_N - A_e(p_N - p_P) + b^v \quad (3.6.10)$$

3.6.3. Het oplossen van het drukveld

De impulsvergelijkingen (3.6.9) en 3.6.10) kunnen slechts opgelost worden, indien het drukveld gegeven is. Indien slechts een schatting van het drukveld wordt gebruikt, zal het resulterende snelheidsveld na oplossen van de impulsvergelijkingen niet voldoen aan de continuïteitsvergelijking. Vervolgens kan deze continuïteitsvergelijking gebruikt worden om bij het gevonden snelheidsveld het bijpassende drukveld te vinden. Dit is dan weer een nieuwe schatting van het drukveld, waarmee de impulsvergelijkingen weer kunnen worden opgelost. Op deze manier kan iteratief een snelheidsveld gevonden worden dat zowel aan de impulsvergelijkingen als aan de continuïteitsvergelijking voldoet. Zaak is dus met behulp van de continuïteitsvergelijking een vergelijking voor de druk af te leiden. Stel het geschatte drukveld is p^* . Dit geeft dan met behulp van de impulsvergelijkingen het snelheidsveld u^* en v^* :

$$a_p^u u_p^* = a_E^u u_E^* + a_W^u u_W^* + a_S^u u_S^* + a_N^u u_N^* - A_e(p_E^* - p_P^*) + b^u \quad (3.6.11)$$

$$a_p^v v_p^* = a_E^v v_E^* + a_W^v v_W^* + a_S^v v_S^* + a_N^v v_N^* - A_e(p_N^* - p_P^*) + b^v \quad (3.6.12)$$

Veronderstel vervolgens dat het juiste druk- en snelheidsveld gegeven wordt door:

$$p = p^* + p' \quad (3.6.13)$$

$$u = u^* + u' \quad (3.6.14)$$

$$v = v^* + v' \quad (3.6.15)$$

Uitdrukkingen voor de snelheidscorrecties u' in elk roosterpunt worden gevonden door (3.6.11) af te trekken van (3.6.9), resulterend in:

$$a_p^u u_p' = a_E^u u_E' + a_W^u u_W' + a_S^u u_S' + a_N^u u_N' - A_e(p_E' - p_P') \quad (3.6.16)$$

Verwaarlozen we de invloed van de naburige punten, dan krijgen we een zeer handzame vergelijking welke de snelheidscorrecties u' uitdrukt in drukcorrecties:

$$u_p' = \frac{A_e}{a_p^u} = (p_P' - p_E') = d_e (p_P' - p_E') \quad (3.6.17)$$

Voor de snelheidscorrecties v' krijgen we op dezelfde wijze:

$$\dot{v}'_P = \frac{A_n}{a_p} (p'_P - p'_N) = d_n (p'_P - p'_N) \quad (3.6.18)$$

Het verwaarlozen van $a_E^u u'_E + a_W^u u'_W + a_S^u u'_S + a_N^u u'_N$ in (3.6.16) is toegestaan omdat uiteindelijk in de geconvergeerde situatie alle snelheidscorrecties gelijk zullen zijn aan nul. Er zijn echter andere methoden om tot handzame uitdrukkingen te komen voor de snelheidscorrecties. De methode hier beschreven draagt de naam SIMPLE (Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations). Andere vergelijkbare methoden zijn SIMPLER, SIMPLEC, SIMPLEST, etc. Hiervoor wordt verwezen naar de literatuur ([D10] en [D17]).

Uitdrukkingen (3.6.17) en (3.6.18) worden nu gebruikt om met behulp van de continuïteitsvergelijking een vergelijking af te leiden voor de drukcorrectie p' . De 2D continuïteitsvergelijking luidt:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (3.6.19)$$

Integratie over een niet verschoven roostercel (de p-cel van de figuren 3.6.3 en 3.6.4) geeft:

$$\left(\frac{\rho_P - \rho_P^0}{\Delta t}\right)\Delta V + \rho_e A_e u_P + \rho_n A_n v_P - \rho_w A_w u_W - \rho_s A_s v_S = 0 \quad (3.6.20)$$

Verondersteld is dat de dichtheid ρ_P constant is over de gehele roostercel, en dat de snelheden constant zijn over de wanden van de roostercel. Substitutie van de relaties (3.6.14), (3.6.15), (3.6.17) en (3.6.18) in (3.6.20) leidt tot

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\rho_P - \rho_P^0}{\Delta t}\right)\Delta V + \rho_e A_e d_e (p'_P - p'_E) + \rho_n A_n d_n (p'_P - p'_N) - \\ &\rho_w A_w d_w (p'_W - p'_P) - \rho_s A_s d_s (p'_S - p'_P) + \Delta M^* = 0 \end{aligned} \quad (3.6.21)$$

met

$$\Delta M^* = \rho_e A_e u_P^* + \rho_n A_n v_P^* - \rho_n A_n u_W^* - \rho_s A_s v_S^* \quad (3.6.22)$$

Rangschikking geeft de differentievergelijking voor de drukcorrecties:

$$a_P^p p'_P = a_E^p p'_E + a_W^p p'_W + a_S^p p'_S + a_N^p p'_N + b^p \quad (3.6.23)$$

met de coëfficiënten

$$a_E^p = \rho_e A_e d_e \quad (3.6.24)$$

$$a_W^p = \rho_w A_w d_w \quad (3.6.25)$$

$$a_N^p = \rho_n A_n d_n \quad (3.6.26)$$

$$a_S^p = \rho_s A_s d_s \quad (3.6.27)$$

$$a_P^p = a_E^p + a_W^p + a_N^p + a_S^p \quad (3.6.28)$$

$$b^p = \left(\frac{\rho_P - \rho_P^0}{\Delta t} \right) \Delta V - \Delta M^* \quad (3.6.29)$$

Met de drukcorrectievergelijking hebben we nu alle ingrediënten om de impulsvergelijkingen met de continuïteitsvergelijking gekoppeld op te lossen. Het oplossingsalgoritme is:

1. Bereken de coëfficiënten voor de impulsvergelijkingen (3.6.9) en (3.6.10) met beschikbare schattingen van de snelheden u en v .
2. Gebruik de best beschikbare schatting van het drukveld (p^*) om (3.6.9) en (3.6.10) op te lossen. Dit levert nieuwe schatting op voor het snelheidsveld (u^* en v^*). Dit snelheidsveld voldoet aan de impulsbalans.
3. Gebruik de waarden van u^* en v^* om b^p te bepalen uit (3.6.29) en los de drukcorrectievergelijking (3.6.23) op.
4. Bereken de snelheidscorrecties uit (3.6.17) en (3.6.18)
5. Gebruik de druk- en snelheidscorrectie om nieuwe waarden van u, v en p te vinden met (3.6.13), (3.6.14) en (3.6.15). Het snelheidsveld voldoet nu aan de continuïteitsvergelijking.
6. Gebruik het gevonden drukveld als nieuwe schatting en herhaal de stappen 1 t/m 6, totdat convergentie is bereikt.