TNO-rapport
FSP-RPT-970083

Versnellen van SIMPLE(R) voor WISH3D met Krylov methoden

TNO Technisch Physische Dienst
TU Delft

Stieltjesweg 1
Postbus 155
2600 AD Delft

Telefoon 015 - 2692000
Fax 015 - 2692111

Datum
16 december 1997

Auteur(s)
A. Saghir

Opdrachtnummer
015783

Alle rechten voorbehouden.
Niets uit deze opgave mag worden vermenigvuldigd en/of openbaar gemaakt door middel van druk, fotokopie, microfilm of op welke andere wijze dan ook, zonder voorafgaande toestemming van TNO.

Indien dit rapport in opdracht werd uitgebracht, wordt voor de rechten en verplichtingen van opdrachtgever en opdrachtnemer verwezen naar de Algemene Voorwaarden voor onderzoeks- opdrachten aan TNO, dan wel de betreffende terzake tussen partijen gesloten overeenkomst.
Het ter inzage geven van het TNO-rapport aan direct belanghebbenden is toegestaan.

© 1997 TNO

Afstudeercommissie
Prof.dr.ir. P. Wesseling (TU Delft)
Dr.ir. C. Vuik (TU Delft)
Dr.ir. G.P. Boerstoel (TNO-TPD)

Inhoud

1 Inleiding 3
1.1 Het doel 3
1.2 Algemene opzet 3

2 Incompressibele stromingen 5
2.1 Inleiding 5
2.2 Bewegingsvergelijkingen 5
2.3 Turbulente stromingen 8
2.4 Begin- en randvoorwaarden 11

3 Discretisatie 13
3.1 De convectie-diffusie vergelijking 14
3.2 De Stokes vergelijkingen 18
3.3 De Navier-Stokes vergelijkingen 22

4 Numerieke oplossing 26
4.1 SIMPLE methode 26
4.2 Krylov methoden 29
4.3 SIMPLE voor Stokes versnellen met GCR 33
4.4 SIMPLE voor Navier-Stokes versnellen met GCR 34

5 Voorstel voor de afstudeerfase 36
5.1 Stokes stromingen inbouwen in WISH3D 36
5.2 SIMPLE voor Stokes versnellen met GCR 36
5.3 SIMPLE voor Navier-Stokes versnellen met GCR 36
5.4 SIMPLER versnellen met GCR 37
5.5 Het $k - \epsilon$ turbulentie model 37

6 Bibliografie 38

1 Inleiding

TNO (Toegepast Natuurwetenschappelijk Onderzoek) is actief in diverse domeinen van de industrie en werkt ook samen met de universiteiten, waaronder de TU Delft. Eén van de 15 instituten van TNO is de TPD (Technisch Physische Dienst) te Delft die uit meerdere divisies bestaat. De divisie Fysische Systemen en Processen bestaat uit 5 subdivisies, waaronder Procesfysica. Procesfysica doet onderzoek aan processen waarin warmteoverdracht, stoftransport en stroming een rol spelen. Hiertoe wordt veelal gebruik gemaakt van geavanceerde rekenmodellen. Ook de ontwikkeling van thermofysische instrumentatie is belangrijk. Het modelleren van dynamische stromingen is een belangrijk vakgebied binnen Procesfysica. Om stromingen, warmteoverdracht en stoftransport te simuleren beschikt TNO-TPD over het CFD (Computational Fluid Dynamics) model TNO-WISH3D.

1.1 Het doel

Fysische problemen, veelal turbulente processen met of zonder verbranding, worden door een mathematische model beschreven. Er ontstaat een aantal niet-lineaire en gekoppelde partiële differentiaalvergelijkingen (PDV). Deze vergelijkingen worden met behulp van de eindige volume methode (EVM) gediscretiseerd. Verder worden de gediscretiseerde vergelijkingen opgelost met behulp van de iteratieve methode SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations), die in hoofdstuk 4 besproken wordt, of de variant daarvan SIMPLER (SIMPLE Revised). In de praktijk is gebleken dat de SIMPLE(R) methode vaak veel tijd in beslag neemt. Dit heeft aanleiding gegeven om dit onderzoek te starten. Dit onderzoek is een voortzetting van het onderzoek van H. Tazammourti [6] en heeft als doel het versnellen van de iteratieve methode SIMPLE(R). Bekend is dat, een iteratieve Krylov versnelling goedkoop is, vaak beter convergeert en dat langzaam convergerende componenten na een aantal iteraties geen invloed meer hebben op de convergentie (super lineaire convergentie). In dit onderzoek wordt de SIMPLE(R) methode versneld met behulp van een Krylov methode.

1.2 Algemene opzet

In hoofdstuk 2 van dit verslag wordt het mathematische model beschreven. Er wordt aandacht besteed aan de incompressibele Navier-Stokes vergelijkingen en het $k-\epsilon$ turbulentie model.
De genoemde vergelijkingen worden in hoofdstuk 3 gediscretiseerd met behulp

van de eindige volume methode. Dit levert een stelsel vergelijkingen van de vorm $\mathbf{A}\underline{x} = \underline{b}$. Waarin $\mathbf{A}$ een ijle matrix is, en de vector $\underline{x}$ bevat de onbekende snelheidscomponenten en de druk. Als het $k-\epsilon$ model gebruikt wordt bevat $\underline{x}$ bovendien de turbulente kinetische energie en de dissipatie ervan. In hoofdstuk 4 wordt de SIMPLE methode afgeleid gebruikmakend van de distributieve iteratie methode. Hierin wordt de matrix $\mathbf{A}$ gepostconditioneerd door een nog te definieren matrix $\mathbf{B}$. De meeste aandacht wordt besteed aan het versnellen van de SIMPLE(R) methode met behulp van Krylov methoden.

2 Incompressibele stromingen

2.1 Inleiding

Op basis van de wetten van behoud van massa, impuls, energie en chemische stoffen beschrijft men de stroming van vloeibare of gasvormige media. Uitgaande van deze wetten worden de vergelijkingen geformuleerd (zie [4]).
We introduceren de sommatieconventie. Dit betekent dat in het geval van een herhaalde index (bijvoorbeeld $u_i u_i$) over alle coördinaatrichtingen wordt gesommeerd:

$$u_i u_i = \sum_{i=1}^{3} u_i u_i.$$

We beschouwen een vloeistofelement met een volume δV die zich zal bewegen door het medium met een snelheid u_j. Veranderingen langs de baan van het vloeistofelement als functie van de tijd worden aangegeven met de zogenaamde materiële afgeleide: $\frac{D}{Dt}$. In het vaste assenstelsel is deze afgeleide gedefinieerd als:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_j \frac{\partial}{\partial x_j}. \tag{2.1}$$

De term $\frac{\partial}{\partial t}$ staat bekend als de locale tijdsafgeleide en $u_j \frac{\partial}{\partial x_j}$ wordt de advectieterm genoemd. Deze advectieterm beschrijft de bijdrage aan de materiële afgeleide tengevolge van het transport in een ruimtelijk variërend veld.

2.2 Bewegingsvergelijkingen

2.2.1 Continuïteitsvergelijking

Behoud van massa voor een incompressibele stroming kunnen we als volgt schrijven

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} = 0, \tag{2.2}$$

waarbij ρ de dichtheid van het vloeistof is. Merk op dat de dichtheid kan variëren door temperatuurverschillen. Deze vergelijking wordt ook de continuïteitsvergelijking genoemd.

2.2.2 Navier-Stokes vergelijkingen

Behoud van impuls voor een incompressibele stroming wordt beschreven door de volgende vergelijkingen, die bekend staan als Navier-Stokes vergelijkingen.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ij}) + \rho g_i, \tag{2.3}$$

waarbij p en g_i respectievelijk de druk en de zwaartekrachtversnelling in de x_i-richting voorstellen. De term τ_{ij} is de spanningtensor. Voor een Newtonse vloeistof ziet τ_{ij} er als volgt uit

$$\tau_{ij} = -\mu(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}) + \frac{2}{3}\mu\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij}, \tag{2.4}$$

waarin δ_{ij} de Kronecker-delta voorstelt en μ is de dynamische viscositeit.

2.2.3 Stokes-stromingen

We beschouwen de stromingen waarin de traagheidskrachten verwaarloosbaar zijn ($Re \ll 1$, waarin Re het Reynoldsgetal voorstelt). Dit zijn stromingen waarvoor de niet-lineaire termen $\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j u_i)$ in (2.3) verwaarloosbaar zijn en wel Stokes-stromingen genoemd. De vergelijking (2.3) reduceert dan tot

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ij}) + \rho g_i. \tag{2.5}$$

2.2.4 Behoud van energie

Behoud van energie in een vloeistof of gas wordt gegeven door

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho U + \frac{1}{2}\rho u_i u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho u_j (U + \frac{1}{2}u_i u_i)\right) = \\ -\frac{\partial}{\partial x_j}(q_j) - \frac{\partial}{\partial x_j}(p u_j) + \rho u_i g_i - \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ij} u_i) + S_{rad}, \tag{2.6}$$

waarbij U de inwendige energie per massaeenheid is, $\frac{1}{2}u_i u_i$ de kinetische energie, q_j de j-component van de energieflux en S_{rad} de stralingsbronterm.

Als we de energie vergelijking in termen van enthalpie H (met $H = U + \frac{p}{\rho}$) uitdrukken dan volgt

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H + \frac{1}{2}\rho u_i u_i - p) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho u_j (H + \frac{1}{2}u_i u_i)\right) = - \frac{\partial}{\partial x_j}(q_j) + \rho u_i g_i - \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ij} u_i) + S_{rad}. \quad (2.7)$$

In ons geval is de enthalpie de som van de voelbare enthalpie H_{sens} en de latente (chemische) enthalpie H_{lat}. Voor een ideaal gas geldt

$$dH_{sens} = c_p dT, \quad (2.8)$$

waarbij T de temperatuur voorstelt en c_p de specifieke warmte voor constante druk is. Voor de energieflux geldt bovendien het volgende

$$q_j = -\frac{\lambda}{c_p}\frac{\partial H}{\partial x_j}, \quad (2.9)$$

waarbij λ de thermische conductiviteit voorstelt. Voor meer details zie [3]. De kinetische energie $\frac{1}{2}u_i u_i$ is verwaarloosbaar ten opzichte van de enthalpie H zolang het Mach getal $\left(\text{Mach getal} = \frac{\text{snelheid van de stroming}}{\text{geluidssnelheid}}\right)$ klein is. Vervolgens worden de visceuse dissipatieterm en de de gravitatieterm in de energie vergelijking verwaarloosd. De vergelijking (2.7) reduceert tot

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H - p) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j H) = -\frac{\partial}{\partial x_j}(\frac{\lambda}{c_p}\frac{\partial H}{\partial x_j}) + S_{rad}. \quad (2.10)$$

2.2.5 Behoud van chemische stoffen

Na enkele vereenvoudigingen (zie [3]) wordt de vergelijking voor behoud van chemische stoffen als volgt geformuleerd

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho M_a) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j M_a) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\Gamma_a \frac{\partial M_a}{\partial x_j}) + S_a, \quad (2.11)$$

waarbij M_a de massafractie van de chemische stof a is, Γ_a is het product van de dichtheid van de vloeistof en de diffusiecoëfficient. S_a is de netto productie van de stoffen door chemische reacties.
De massfractie M_a voldoet aan

$$\sum_a M_a = 1. \quad (2.12)$$

Gebruikmakend van vergelijkingen (2.11), (2.12) en (2.2) volgt

$$\sum_a S_a = 0. \quad (2.13)$$

2.2.6 Toestandsvergelijking

Beschouwen we een vloeistof als mengsel van ideale gassen, dan luidt de toestandsvergelijking

$$Wp = \rho RT, \tag{2.14}$$

waarin W de moleculaire massa van het gemengde gas voorstelt en R de universele gasconstante.

2.3 Turbulente stromingen

Een turbulente stroming is een fluctuerend verschijnsel. In veel toepassingen is men niet geïnteresseerd in de instantane waarden van de stromingsvariabelen zoals, de snelheid en de druk, maar in de tijdsgemiddelde van deze waarden. Iedere instantane variabele ϕ kan in een gemiddelde en een fluctuatie gesplitst worden.

$$\phi(\underline{x}, t) = \overline{\phi}(\underline{x}, t) + \phi'(\underline{x}, t), \tag{2.15}$$

waarin het Reynoldsgemiddelde $\overline{\phi}(\underline{x})$ gegeven wordt door

$$\overline{\phi}(\underline{x}, t) = \frac{1}{\tau} \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} \phi(\underline{x}, t+s) ds, \tag{2.16}$$

en de uitdrukking (2.15) wordt de Reynoldsdecompositie genoemd. De middelingstijd τ wordt groot genoeg gekozen ten opzichte van dezelfde tijdschaal van de turbulentie maar steeds klein vergeleken met andere tijdsafhankelijke verschijnselen. Er geldt bovendien

$$\overline{\phi'} = 0. \tag{2.17}$$

Om in de volgende paragrafen met deze middelingsoperator te kunnen manipuleren in de bewegingsvergelijkingen eisen we dat deze operator voldoet aan de volgende voorwaarden zie [4], die bekend staan als de Reynoldsvoorwaarden

$$\begin{aligned}
\overline{f+g} &= \overline{f} + \overline{g}, \\
\overline{\alpha f} &= \alpha \overline{f}, \\
\overline{\frac{\partial f}{\partial s}} &= \frac{\partial \overline{f}}{\partial s}, \\
\overline{\overline{f} g} &= \overline{f}\,\overline{g},
\end{aligned}$$

hierin zijn f en g fluctuerende grootheden en α is een constante. Op basis van deze Reynoldsvoorwaarden kunnen we bijvoorbeeld de volgende relaties afleiden

$$\overline{\overline{f}} = \overline{f}, \quad \overline{\overline{f}\,\overline{g}} = \overline{f}\,\overline{g}. \tag{2.18}$$

2.3.1 Continuïteitsvergelijking

Als we de Reynoldsdecompositie $\rho = \overline{\rho}+\rho'$, $u = \overline{u}+u'$ in de continuïteitsvergelijking voor incompressibele stroming (2.2) invullen dan volgt

$$\frac{\partial(\overline{\rho}+\rho')}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}[(\overline{\rho}+\rho')(\overline{u}_j+u'_j)] = 0. \tag{2.19}$$

Wanneer de termen waarin de fluctuatie van de dichtheid ρ' voorkomt worden verwaarloosd, reduceert (2.19) tot

$$\frac{\partial\overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\ \overline{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}u'_j) = 0. \tag{2.20}$$

Vervolgens wordt het Reynoldsgemiddeld van (2.20) genomen en dit levert een vergelijking voor de gemiddelde stroming

$$\frac{\partial\overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\ \overline{u}_j) = 0. \tag{2.21}$$

2.3.2 Navier-Stokes vergelijkingen

Behoud van impuls voor een turbulente stroming wordt als volgt geformuleerd (naast de termen waarin de fluctuatie van de dichtheid voorkomt worden bovendien de termen met derde orde correlaties ook verwaarloosd)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\ \overline{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\ \overline{u}_i\ \overline{u}_j + \overline{\rho u'_i u'_j}) = -\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\tau}_{ij}) + \overline{\rho}g_i, \tag{2.22}$$

met

$$\overline{\tau}_{ij} = -\mu(\frac{\partial\overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\overline{u}_j}{\partial x_i}) + \frac{2}{3}\mu\frac{\partial\overline{u}_k}{\partial x_k}\delta_{ij}. \tag{2.23}$$

2.3.3 Behoud van energie

In een turbulente stroming wordt de energiebalans geformuleerd als

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\overline{H} - \overline{p}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\ \overline{u}_j\overline{H} + \overline{\rho u'_j H'}) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\frac{\lambda}{c_p}\frac{\partial\overline{H}}{\partial x_j}) + \overline{S}_{rad} \tag{2.24}$$

2.3.4 Behoud van chemische stoffen

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\overline{M}_a) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\ \overline{u}_j\overline{M}_a + \overline{\rho u'_j M'_a}) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\Gamma_a\frac{\partial\overline{M}_a}{\partial x_j}) + \overline{S}_a \tag{2.25}$$

2.3.5 Het standaard $k-\epsilon$ turbulentie model

Door het gebruik van de Reynoldsdecompositie ontstaan nieuwe onbekenden. Om de onbekende Reynoldstermen $\overline{\rho}\overline{u_i'u_j'}$, $\overline{\rho}\overline{u_j'H'}$ en $\overline{\rho}\overline{u_j'M_a'}$ te evalueren maken we gebruik van het $k-\epsilon$ model (zie [3]).

$$\overline{\rho}\overline{u_i'u_j'} = -\mu_t(\frac{\partial\overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\overline{u}_j}{\partial x_i}) + \frac{2}{3}\overline{\rho}k\delta_{ij}, \tag{2.26}$$

waarbij $k = \frac{1}{2}\overline{u_i'u_i'}$ de turbulente kinetische energie voorstelt, $\mu_t = \frac{C_\mu\overline{\rho}k^2}{\epsilon}$ is de turbulente viscositeit, met C_μ een empirische constante is en ϵ is de dissipatie van de turbulente kinetische energie:

$$\epsilon = \frac{\mu}{\overline{\rho}}\left(\overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_j}\frac{\partial u_i'}{\partial x_j}}\right). \tag{2.27}$$

De turbulente kinetische energie en de dissipatie ervan voldoen aan

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\bar{u_j}k) = \frac{\partial}{\partial x_j}((\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k})\frac{\partial k}{\partial x_j}) + P_k - \bar{\rho}\epsilon, \tag{2.28}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\bar{u_j}\epsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j}((\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon})\frac{\partial \epsilon}{\partial x_j}) + (C_{\epsilon 1}P_k - C_{\epsilon 2}\bar{\rho}\epsilon)\frac{\epsilon}{k}, \tag{2.29}$$

waarbij σ_k en σ_ϵ de turbulente Prandtlgetallen voorstellen, $C_{\epsilon 1}$ en $C_{\epsilon 2}$ zijn empirische constanten en P_k is de productie term gegeven door

$$P_k = [\mu_t(\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial u_j} + \frac{\partial\bar{u}_j}{\partial u_i}) - \frac{2}{3}\bar{\rho}k\delta_{ij}]\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial u_j}. \tag{2.30}$$

Op analoge wijze kunnen de volgende Reynoldstermen gemodelleerd worden.

$$\overline{\rho}\overline{u_j'H'} = -\frac{\mu_t}{\sigma_H}\frac{\partial\overline{H}}{\partial x_j}, \tag{2.31}$$

$$\overline{\rho}\overline{u_j'M_a'} = -\frac{\mu_t}{\sigma_a}\frac{\partial\overline{M_a}}{\partial x_j}, \tag{2.32}$$

waarin σ_H het turbulente Prandtl getal is en σ_a het turbulente Schmidt getal voor chemische stoffen.

2.3.6 Favre-decompositie

Voor turbulente stromingen met een temperatuurafhankelijke dichtheid kunnen we de zogenoemde Favre-decompositie gebruiken (zie [5]). Het voordeel hiervan boven de Reynoldsdecompositie is het vermijden van de expliciete

dichtheidscorrelaties (die bij de Reynoldsdecompositie verwaarloosd zijn). De Favre-decompositie van een variabele ϕ luidt als volgt

$$\phi(\underline{x},t) = \tilde{\phi}(\underline{x},t) + \phi''(\underline{x},t), \tag{2.33}$$

met

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\overline{\rho}}. \tag{2.34}$$

Het Favre gemiddelde van de fluctuatie ϕ'' is nul. waarbij $\overline{\rho\phi}$ en $\overline{\rho}$ Reynoldsgemiddelden zijn. Bovendien geldt er

$$\overline{\phi''} = -\frac{\overline{\rho'\phi'}}{\overline{\rho}}, \tag{2.35}$$

met ρ' de fluctuatie van ρ.

2.4 Begin- en randvoorwaarden

Een eenduidige oplossing voor de bewegingsvergelijkingen is alleen mogelijk als er begin- en randvoorwaarden gegeven zijn.

2.4.1 Beginvoorwaarden

Voor instationaire stromingen wordt op een begintijdstip t_0 de waarde van ϕ gegeven door een functie ϕ_0

$$\phi|_{t_0} = \phi_0. \tag{2.36}$$

2.4.2 Randvoorwaarden

We kunnen de volgende randvoorwaarden onderscheiden

$$\phi = f, \qquad (Dirichlet) \tag{2.37}$$

$$(\Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial x_j})n_j = f. \qquad (Neumann) \tag{2.38}$$

Voor een stilstaand randoppervlak reduceert de Dirichlet randvoorwaarde voor het snelheidsveld tot

$$u_t = 0 \quad \text{(no-slip conditie)}, \tag{2.39}$$

$$u_n = 0 \quad \text{(no-flow conditie)}, \tag{2.40}$$

waarin u_t en u_n respectievelijk de tangentiële en de normale snelheden voorstellen. De randvoorwaarden voor de temperatuur worden gegeven door de

temperatuur op de rand

$$T = T_{rand}, \tag{2.41}$$

of door de warmteflux q_{rand} op de rand

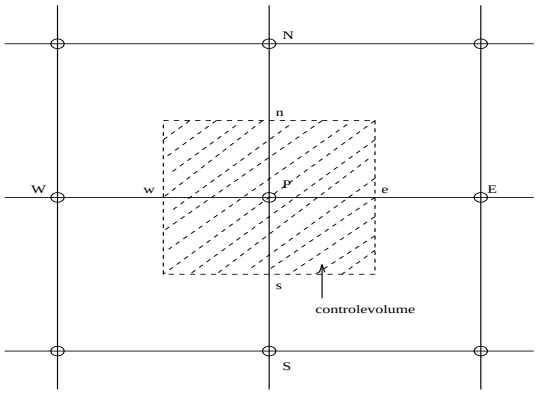
$$-k\frac{\partial T}{\partial n} = q_{rand}. \tag{2.42}$$

Lijst van behandelde onderwerpen:

- Incompressibele stromingen
  - Inleiding
  - Bewegingsvergelijkingen
    - Continuïteitsvergelijking
    - Navier-Stokes vergelijkingen
    - Stokes stromingen
    - Behoud van energie
    - Behoud van chemische stoffen
    - Toestandsvergelijking
  - Turbulente stromingen
    - Continuïteitsvergelijking
    - Navier-Stokes vergelijkingen
    - Behoud van energie
    - Behoud van chemische stoffen
    - Het standaard $k - \epsilon$ turbulentie model
    - Favre-decompositie
  - Begin- en randvoorwaarden
    - Beginvoorwaarden
    - Randvoorwaarden

3 Discretisatie

In deze sectie wordt aandacht besteed aan het oplossen van de vergelijkingen genoemd in Hoofdstuk 2. Omdat een analytische oplossing in het algemeen niet mogelijk is voor dit soort vergelijkingen, gebruiken we numerieke methoden. De gebruikte numerieke methode in dit verslag is de eindige volume methode (EVM) beschreven in [2]. Het drie-dimensionale gebied wordt in een aantal controle volumina verdeeld, zie figuur 3.1 voor het twee-dimensionale geval. Ieder controlevolume heeft een roosterpunt P als middelpunt waarop alle scalaire grootheden ϕ (druk p of temperatuur T) worden geëvalueerd. De roosterpunten voor de snelheidscomponenten zijn genomen op de zijvlakken van het controlevolume zodat ze verschoven zijn ten opzichte van het roosterpunt P. Met andere woorden we gebruiken het zogenaamde verschoven rooster (staggered grid). Om het hydrodynamische probleem (bestaande



Figuur 3.1: Controlevolume en roosterpunten voor het twee-dimensionale geval

uit de Navier-Stokes vergelijkingen en de continuïteitsvergelijking) op te lossen, dat wil zeggen om de snelheden en de druk te bepalen, zullen we gebruik maken van de SIMPLE methode die in Hoofdstuk 4 verder besproken zal worden (zie [2]).
De vergelijkingen (2.2), (2.3), (2.6) en (2.11) in Hoofdstuk 2 hebben de vorm van een convectie-diffusie vergelijking. De algemene vorm van zulke vergelijkingen voor een variabele ϕ luidt

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \phi) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j}) + S_\phi. \tag{3.1}$$

3.1 De convectie-diffusie vergelijking

De vergelijking (3.1) kunnen we ook als volgt formuleren

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x_1}(J_{x_1}) + \frac{\partial}{\partial x_2}(J_{x_2}) + \frac{\partial}{\partial x_3}(J_{x_3}) = S_\phi, \tag{3.2}$$

met

$$J_{x_1} = \rho u_1 \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_1}, \tag{3.3}$$

$$J_{x_2} = \rho u_2 \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_2}, \tag{3.4}$$

$$J_{x_3} = \rho u_3 \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_3}, \tag{3.5}$$

waarin u_1, u_2 en u_3 de snelheidscomponenten respectievelijk in de x_1, x_2 en de x_3-richting voorstellen. Beschouw een roosterpunt P en zijn zes buurpunten (vier buurpunten in het twee-dimensionaal geval, zie figuur 3.1) E(East), W(West), N(North), S(South), T(Top) en B(Bottom). Op ieder zijvlak van het controlevolume kan de totale flux gedefinieerd worden, voor het zijvlak e (east) is die gedefinieerd door

$$J_e = \big[\rho u_1 \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_1}\big]_e A_e, \tag{3.6}$$

waarbij A_e de oppervlakte is van het bovengenoemde zijvlak en $\big[\quad\big]_e$ de evaluatie aanduidt van alle grootheden in het bijbehorende zijvlak. Nu integreren we de vergelijking (3.2) over een controlevolume met volume $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ en een tijdsinterval $[t, t + \Delta t]$, voor meer details zie [6]. Dus

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{\Delta V} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_{\Delta V} [\frac{\partial(J_{x_1})}{\partial x_1} + \frac{\partial(J_{x_2})}{\partial x_2} + \frac{\partial(J_{x_3})}{\partial x_3}] dV dt = \\ = \int_t^{t+\Delta t} \int_{\Delta V} S_\phi dV dt. \tag{3.7}$$

Voor de tijdsdiscretisatie wordt in dit hoofdstuk het volledig impliciete tijdsschema genoemd. Voor de tijdsafhankelijke term wordt er aangenomen dat ρ en ϕ constant zijn over het hele controlevolume. De bronterm wordt op de gebruikelijke wijze gelineariseerd

$$S_\phi = S_C + S_P \phi_P, \tag{3.8}$$

hier staat de index P niet voor het roosterpunt P. Voor details verwijzen we naar Patankar [2]. Gebruikmakend van het divergentie-theorema van Gauss wordt de convectie-diffusie term gediscretiseerd

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial x_j}(J_j) dV = \int_{\partial V} J_j n_j dA, \tag{3.9}$$

waarbij ∂V de rand van ΔV voorstelt en n_j de naar buiten gerichte eenheidsnormaal van $\partial V_j, j = e, w, n, s, t, b$. Er volgt dus

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial x_j}(J_j)dV = (J_e - J_w) + (J_n - J_s) + (J_t - J_b). \tag{3.10}$$

Dus

$$[(\rho\phi)_P - (\rho\phi)_{P,0}]\,\frac{\Delta V}{\Delta t} + (J_e - J_w) + (J_n - J_s) + (J_t - J_b) = \\ = (S_c + S_P\phi_P)\Delta V, \tag{3.11}$$

waarin $(\rho\phi)_{P,0}$ de waarde van $(\rho\phi)_P$ op het tijdstip t voorstelt, terwijl alle andere grootheden $(\phi_P, \phi_E, ..., \phi_B)$ de onbekenden op tijdstip $t + \Delta t$ zijn. De totale fluxen J_w, J_n, J_s, J_t en J_b worden op analoge wijze als J_e in (3.6) gedefinieerd. Nu gaan we de totale fluxen voor ieder zijvlak van het controlevolume evalueren. Beschouw de totale flux J_e in (3.6) bestaande uit een convectieve term $\rho u_1\phi$ en een diffusieve term $\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x_1}$. Voor de diffusieve term wordt gebruik gemaakt van de centrale differentie methode. Benadering van de convectieve term met behulp van de centrale differentie methode leidt tot instabiliteit in de numerieke oplossing als het rooster Pecletgetal Pe (bijvoorbeeld voor e geldt $Pe = \frac{(\rho u_1)_e(\delta x_1)_e}{\Gamma_e}$, waarbij $(\delta x_1)_e$ de afstand tussen de roosterpunten P en E voorstelt) groter is dan 2. Om die reden wordt de convectieve term met behulp van een hybrid schema benaderd.
Met andere woorden

- Centrale differentie methode als $|Pe| \leq 2$.
- Upwind schema als $|Pe| > 2$.

Hieronder wordt het eerste orde upwind schema beschreven:
De waarde van ϕ_e wordt gegeven door

$$\phi_e = \phi_P \quad \text{als} \quad (u_1)_e > 0, \tag{3.12}$$
$$\phi_e = \phi_E \quad \text{als} \quad (u_1)_e \leq 0. \tag{3.13}$$

Er volgt dus

$$J_e = \left[(\rho u_1)_e\phi_P + \Gamma_e\frac{\phi_E - \phi_P}{(\delta x_1)_e}\right]A_e \quad \text{als} \quad (u_1)_e > 0, \tag{3.14}$$
$$J_e = \left[(\rho u_1)_e\phi_E + \Gamma_e\frac{\phi_E - \phi_P}{(\delta x_1)_e}\right]A_e \quad \text{als} \quad (u_1)_e \leq 0, \tag{3.15}$$

waarbij $A_e = \Delta y\Delta z$. De convectieve term kunnen we ook als volgt schrijven

$$(\rho u_1)_e\phi_e = \max\Big((\rho u_1)_e, 0\Big)\phi_P + \max\Big(-(\rho u_1)_e, 0\Big)\phi_E. \tag{3.16}$$

Voor de rand w geldt

$$(\rho u_1)_w \phi_w = \max\Big((\rho u_1)_w, 0\Big)\phi_W + \max\Big(-(\rho u_1)_w, 0\Big)\phi_P. \tag{3.17}$$

Op analoge manier worden de fluxen voor de zijvlakken n, s, t en b van het controlevolume gediscretiseerd. De discretisatie van de convectie diffusie vergelijking (3.1) kunnen we in de volgende vorm schrijven

$$a_P\phi_P = a_E\phi_E + a_W\phi_W + a_N\phi_N + a_S\phi_S + a_T\phi_T + a_B\phi_B + b, \tag{3.18}$$

met

$$a_E = \max\Big(-(\rho u_1)_e, 0\Big)A_e + \frac{\Gamma_e A_e}{(\delta x_1)_e}, \tag{3.19}$$

$$a_W = \max\Big((\rho u_1)_w, 0\Big)A_w + \frac{\Gamma_w A_w}{(\delta x_1)_w}, \tag{3.20}$$

$$a_N = \max\Big(-(\rho u_2)_n, 0\Big)A_n + \frac{\Gamma_n A_n}{(\delta x_2)_n}, \tag{3.21}$$

$$a_S = \max\Big((\rho u_2)_s, 0\Big)A_s + \frac{\Gamma_s A_s}{(\delta x_2)_s}, \tag{3.22}$$

$$a_T = \max\Big(-(\rho u_3)_t, 0\Big)A_t + \frac{\Gamma_t A_t}{(\delta x_3)_t}, \tag{3.23}$$

$$a_B = \max\Big((\rho u_3)_b, 0\Big)A_3 + \frac{\Gamma_b A_b}{(\delta x_3)_b}, \tag{3.24}$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B + \rho_P\frac{\Delta V}{\Delta t} - S_P\Delta V, \tag{3.25}$$

$$b = S_C\Delta V + (\rho\phi)_{P,0}\frac{\Delta V}{\Delta t}. \tag{3.26}$$

De lineaire vergelijking (3.18) kan ook in de volgende vorm geschreven worden

$$a_P\phi_P = \sum_{nb} a_{nb}\phi_{nb} + b, \tag{3.27}$$

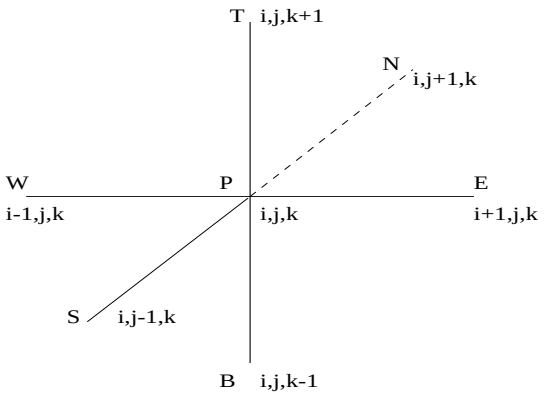
waarbij de sommatie uitgevoerd wordt over de buurpunten van het punt P.

Als we aan het punt P de index i, j, k toekennen, aan het punt E de index $i+1, j, k$ etc..., zie figuur 3.2, dan kunnen we (3.18) als volgt schrijven

$$\begin{aligned} -a^B_{ijk}\phi_{i,j,k-1} - a^S_{ijk}\phi_{i,j-1,k} - a^W_{ijk}\phi_{i-1,j,k} + a^P_{ijk}\phi_{i,j,k} + \\ - a^E_{ijk}\phi_{i+1,j,k} - a^N_{ijk}\phi_{i,j+1,k} - a^T_{ijk}\phi_{i,j,k+1} = b_{ijk} \end{aligned} \tag{3.28}$$

We zullen ons beperken tot de twee-dimensionaal stationaire stromingen met Dirichlet randvoorwaarden. De gediscretiseerde vergelijkingen luiden dan

$$a_P\phi_P = a_E\phi_E + a_W\phi_W + a_N\phi_N + a_S\phi_S + b, \tag{3.29}$$



Figuur 3.2: Indices van de buurpunten van het roosterpunt P

met

$$a_E = \max\Big(-(\rho u_1)_e, 0\Big)\Delta y + \frac{\Gamma_e \Delta y}{(\delta x_1)_e}, \tag{3.30}$$

$$a_W = \max\Big((\rho u_1)_w, 0\Big)\Delta y + \frac{\Gamma_w \Delta y}{(\delta x_1)_w}, \tag{3.31}$$

$$a_N = \max\Big(-(\rho u_2)_n, 0\Big)\Delta x + \frac{\Gamma_n \Delta x}{(\delta x_2)_n}, \tag{3.32}$$

$$a_S = \max\Big((\rho u_2)_s, 0\Big)\Delta x + \frac{\Gamma_s \Delta x}{(\delta x_2)_s}, \tag{3.33}$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S - S_P \Delta x \Delta y, \tag{3.34}$$

$$b = S_C \Delta x \Delta y. \tag{3.35}$$

De vergelijking (3.29) kunnen we als volgt schrijven

$$-a^S_{ij}\phi_{i,j-1} - a^W_{ij}\phi_{i-1,j} + a^P_{ij}\phi_{i,j} - a^E_{ij}\phi_{i+1,j} - a^N_{ij}\phi_{i,j+1} = b_{ij}, \tag{3.36}$$
$$\text{voor} \quad 1 \le i \le n, 1 \le j \le m,$$

waarin n en m respectievelijk het aantal roosterpunten in x_1- en x_2-richting is. Uit (3.36) volgt een stelsel vergelijkingen van de vorm

$$\mathbf{A}\underline{\phi} = \underline{b}, \tag{3.37}$$

met

$$\underline{\phi} = (\phi_{11}, \phi_{21} \ldots, \phi_{n1}, \phi_{12}, \phi_{22}, \ldots, \phi_{n2}, \ldots\ldots, \phi_{1m}, \phi_{2,m}, \ldots, \phi_{nm})^T, \tag{3.38}$$

en de nm bij nm matrix $\mathbf{A}$ ziet er als volgt uit

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_1 & N_1 & & & & \\ S_2 & A_2 & N_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & S_{m-1} & A_{m-1} & N_{m-1} \\ & & & & S_m & A_m \end{pmatrix}$$

met

$$A_j = \begin{pmatrix} a_{1j}^P & -a_{1j}^E & & & & \\ -a_{2j}^W & a_{2j}^P & -a_{2j}^E & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -a_{n-1j}^W & a_{n-1j}^P & -a_{n-1j}^E \\ & & & & -a_{nj}^W & a_{nj}^P \end{pmatrix}$$

voor $1 \leq j \leq m$ en

$$\begin{aligned} S_j &= \mathbf{Diag}(a_{1j}^S, a_{2j}^S, \ldots\ldots, a_{nj}^S), \quad \text{voor} \qquad 1 \leq j \leq m, \\ N_j &= \mathbf{Diag}(a_{1j}^N, a_{2j}^N, \ldots\ldots, a_{nj}^N), \quad \text{voor} \qquad 1 \leq j \leq m. \end{aligned}$$

3.2 De Stokes vergelijkingen

Wij beperken ons tot een twee-dimensionaal stationaire stroming met constante dichtheid ρ. De continuïteitsvergelijking (2.2) reduceert tot

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0. \tag{3.39}$$

Het snelheidsveld is dus divergentievrij en dit reduceert (2.4) tot

$$\tau_{ij} = -\mu(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}). \tag{3.40}$$

Substitutie van (3.40) in (2.5) levert de Stokes vergelijkingen. Voor het gemak wordt de volgende notatie ingevoerd: $u := u_1, v := u_2, x := x_1$ en $y := x_2$. Om het Stokes probleem op te lossen zullen we dus de volgende vergelijkingen discretiseren.

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \tag{3.41}$$

$$\mu(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}) - \frac{\partial P}{\partial x} = 0, \tag{3.42}$$

$$\mu(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}) - \frac{\partial P}{\partial y} = 0, \tag{3.43}$$

waarbij $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ de kinematische viscositeit voorstelt en P is de gemodificeerde druk en wordt gegeven door $p = p_0 + \rho g_i x_i + P$, waarin p_0 een referentiedruk voorstelt. We zullen in het vervolg voor de gemodificeerde druk weer de kleine letter p gebruiken.
De vergelijkingen (3.41),(3.42) en (3.43) worden in een dimensieloze vorm geschreven. Voer in een lengteschaal L en snelheidsschaal U. Met deze lengte- en snelheidsschaal definiëren we de volgende dimensieloze variabelen (voor het gemak blijft de notatie onveranderd).
$x := \frac{x}{L}, y := \frac{y}{L}, u := \frac{u}{U}, v := \frac{v}{U}, p := \frac{Rep}{\rho U^2}$. met $Re = \frac{UL}{\nu}$.

Substitutie van de ingevoerde variabelen in (3.41),(3.42) en (3.43) levert

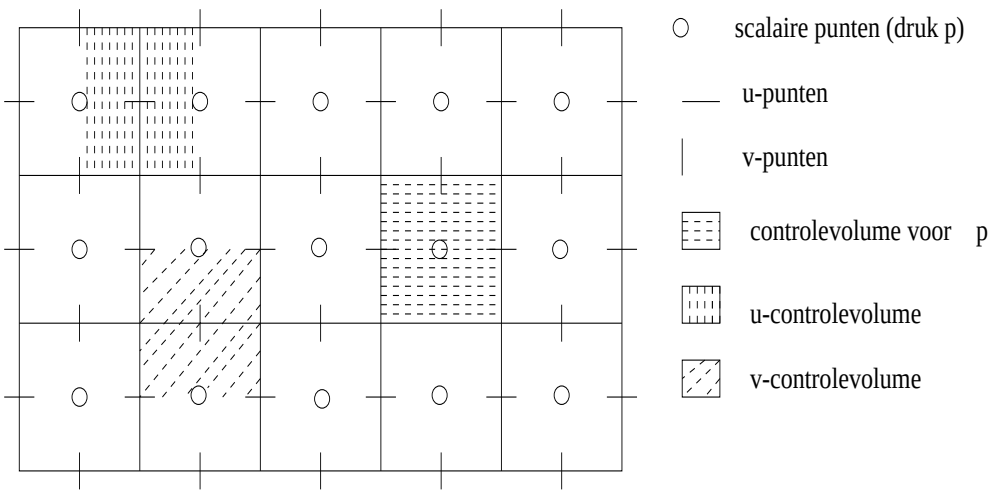
$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \tag{3.44}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \tag{3.45}$$

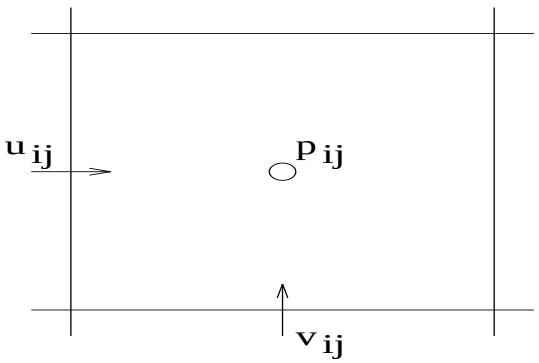
$$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} - \frac{\partial p}{\partial y} = 0. \tag{3.46}$$

3.2.1 De continuïteitsvergelijking

Met behulp van de technieken behandeld in Hoofdstuk 2 zullen we (3.44), (3.45) en (3.46) discretiseren. We gebruiken een uniform rekenrooster G (zie figuur 3.3) met een stapgrootte h_1 in de x-richting en h_2 in de y-richting. Een cel met middelpunt $((i-\frac{1}{2})h_1, (j-\frac{1}{2})h_2)$ noemen we Ω_{ij}. De variabelen in het middelpunt van Ω_{ij} en in het middelpunt van de linker zijkant en de onderkant van Ω_{ij} zijn gelabeld met ij (zie figuur 3.4).



Figuur 3.3: Controlevolumina van een verschoven rooster



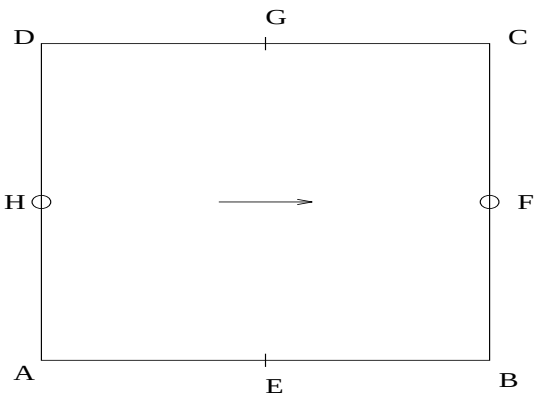
Figuur 3.4: Een cel gelabeld met ij

Eindige volume methode

De continuïteitsvergelijking (3.44) wordt over Ω_{ij} geïntegreerd. Dit levert

$$(u_{i+1,j} - u_{ij})h_2 + (v_{i,j+1} - v_{ij})h_1 = 0 \tag{3.47}$$

De Stokes vergelijking (3.45) in de x-richting wordt over een verschoven controlevolume (met middelpunt $((i-1)h_1, (i-\frac{1}{2})h_2)$) geïntegreerd.
Het verschoven controlevolume is gegeven in figuur 3.5. Dit levert als resultaat



Figuur 3.5: Verschoven controlevolume voor de Stokes vergelijking in x-richting

$$h_2 \left[[\frac{\partial u}{\partial x}]_F - [\frac{\partial u}{\partial x}]_H \right] + h_1 \left[[\frac{\partial u}{\partial y}]_G - [\frac{\partial u}{\partial y}]_E \right] - (p_F - p_H)h_2 = 0. \tag{3.48}$$

Bovendien worden de termen $\frac{\partial u}{\partial x}$ en $\frac{\partial u}{\partial y}$ benaderd door de centrale differentie methode. Dit leidt tot het volgende resultaat

$$\frac{h_2}{h_1}(u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}) + \frac{h_1}{h_2}(u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}) + \\ - (p_{i,j} - p_{i-1,j})h_2 = 0 \tag{3.49}$$

Toepassing van dezelfde technieken als hierboven op de Stokes vergelijking (3.46) in y-richting levert

$$\frac{h_2}{h_1}(v_{i-1,j} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j}) + \frac{h_1}{h_2}(v_{i,j-1} - 2v_{i,j} + v_{i,j+1}) + \\ - (p_{i,j} - p_{i,j-1})h_1 = 0 \tag{3.50}$$

Randvoorwaarden

We beperken ons tot de Dirichlet randvoorwaarden, dat wil zeggen dat de snelheden op de randen gegeven zijn. Neem aan dat de cel ABCD
in figuur 3.5 op de onderste rand ligt. Dus de snelheden op AB gegeven zijn, dan kunnen we u_{i0} elimineren door de volgende benadering in te voeren

$$u_{i0} = 2u_E - u_{i1}.$$

Op de zijrand is de snelheid u_{1j} gegeven, dat wil zeggen

$$u_{1j} = u_{geg}.$$

Samenvatting van de gediscretiseerde vergelijkingen

De gediscretiseerde Stokes- en continuïteitsvergelijking kunnen we in de volgende vorm schrijven (voor de rangschikking van u, v en p zie (3.38))

$$\begin{pmatrix} \mathbf{Q}_1 & 0 & \mathbf{G}_1 \\ 0 & \mathbf{Q}_2 & \mathbf{G}_2 \\ \mathbf{G}_1^* & \mathbf{G}_2^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}, \tag{3.51}$$

waarbij $\mathbf{G}_1^*$ en $\mathbf{G}_2^*$ respectievelijk de getransponeerde van $\mathbf{G}_1$ en $\mathbf{G}_2$ is en

$$\mathbf{Q}_1 = \begin{pmatrix} -2(a+1/a) & a & & 1/a & & \\ a & -2(a+1/a) & a & & & \\ & & & & & 1/a \\ 1/a & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a & -2(a+1/a) & a \\ & & 1/a & & a & -2(a+1/a) \end{pmatrix},$$

waarbij $a = \frac{h_2}{h_1}$,

$$\mathbf{G}_1 = \begin{pmatrix} -h_2 & & & & \\ h_2 & -h_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & h_2 & -h_2 \end{pmatrix}.$$

In de matrices $\mathbf{Q}_1$ en $\mathbf{G}_1$ moeten de randvoorwaarden nog verwerkt worden. De matrices $\mathbf{Q}_2$ en $\mathbf{G}_2$ hebben respectievelijk een vergelijkbare gedaante als $\mathbf{Q}_1$ en $\mathbf{G}_1$. Dit stelsel kunnen we simpelweg als volgt schrijven

$$\mathbf{A}x = b. \tag{3.52}$$

3.3 De Navier-Stokes vergelijkingen

Na het discretiseren van de Stokes vergelijkingen zullen we de Navier-Stokes vergelijkingen (2.3) en (2.2) waarin niet-lineaire termen voorkomen, discretiseren met dezelfde technieken die gebruikt zijn in sectie 3.2. Voor niet-lineaire termen zullen we een hybrid schema gebruiken. Beschouw de stationaire tweedimensionale Navier-Stokes vergelijkingen. In deze sectie wordt aangenomen dat ρ constant is. Dat wil zeggen dat de volgende vergelijkingen gediscretiseerd moeten worden

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \tag{3.53}$$

$$\frac{\partial (u^2)}{\partial x} + \frac{\partial (uv)}{\partial y} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x} + \nu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right), \tag{3.54}$$

$$\frac{\partial (uv)}{\partial x} + \frac{\partial (v^2)}{\partial y} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial y} + \nu\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right). \tag{3.55}$$

Gebruikmakend van de dimensieloze variabelen ingevoerd in sectie 3.2 wordt de dimensieloze vorm van deze vergelijkingen verkregen.

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \tag{3.56}$$

$$\frac{\partial (u^2)}{\partial x} + \frac{\partial (uv)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right), \tag{3.57}$$

$$\frac{\partial (uv)}{\partial x} + \frac{\partial (v^2)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re}\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right). \tag{3.58}$$

We richten ons nu op de discretisatie van de niet lineaire term in (3.57) op hetzelfde verschoven rooster als in sectie 3.2. De term $\frac{\partial (u^2)}{\partial x} + \frac{\partial (uv)}{\partial y}$ wordt

geïntegreerd over het verschoven controlevolume met volume ΔV in figuur 3.5.

$$\int_{\Delta V}[\frac{\partial(u^2)}{\partial x}+\frac{\partial(uv)}{\partial y}]dV = h_2(u_F^2-u_H^2)+h_1((uv)_G-(uv)_E). \tag{3.59}$$

Omdat de u en v niet gegeven zijn op E, F, G, H, wordt een verdere benadering verkregen door toepassing van een combinatie van centrale differenties en een upwind schema, ook wel hybrid schema genoemd, die we in de volgende paragraaf zullen bespreken (voor meer details verwijzen we naar [1]).

3.3.1 Hybrid schema

Voor het benaderen van de snelheid u_F definieren we het rooster Pecletgetal door

$$Pe_{1,i+1/2,j} = |u_{i+1/2,j}|h_1/\nu, \tag{3.60}$$

waarin

$$u_{i+1/2,j} = \frac{1}{2}(u_{ij}+u_{i+1,j}). \tag{3.61}$$

Definieer $s_{1,i+1/2,j}$ door

$$s_{1,i+1/2,j} = 1 \quad \text{als} \quad u_{i+1/2,j} > 0, \tag{3.62}$$

$$s_{1,i+1/2,j} = -1 \quad \text{als} \quad u_{i+1/2,j} < 0. \tag{3.63}$$

Het hybrid schema voor u_F^2 wordt als volgt gedefinieerd

$$u_F^2 = \frac{1}{2}(u_{ij}^2+u_{i+1,j}^2) \quad \text{als} \quad Pe_{1,i+1/2,j} \le 2, \tag{3.64}$$

$$u_F^2 = \frac{1}{2}[(1+s_{1,i+1/2,j})u_{ij}^2+(1-s_{1,i+1/2,j})u_{i+1,j}^2] \quad \text{als} \quad Pe_{1,i+1/2,j} > 2. \tag{3.65}$$

De term u_H^2 wordt op dezelfde manier als u_F^2 benaderd. De term $(uv)_G$ wordt op de volgende wijze benaderd

$$(uv)_G = u_G v_{i-1/2,j+1}, \tag{3.66}$$

waarin

$$v_{i-1/2,j+1} = \frac{1}{2}(v_C+v_D) = \frac{1}{2}(v_{i,j+1}+v_{i-1,j+1}), \tag{3.67}$$

Definieer het rooster Pecletgetal

$$Pe_{2,i-1/2,j+1} = |v_{i-1/2,j+1}|h_2/\nu, \tag{3.68}$$

en het teken van $v_{i-1/2,j+1}$ door $s_{2,i-1/2.j+1}$. De term u_G wordt met het volgende hybride schema benaderd:

$$u_G = \frac{1}{2}(u_{ij} + u_{i,j+1}) \quad \text{als} \quad Pe_{2,i-1/2,j+1} \leq 2, \tag{3.69}$$

$$u_G = \frac{1}{2}[(1 + s_{2,i-1/2,j+1})u_{ij} + (1 - s_{2,i-1/2,j+1})u_{i,j+1}] \quad \text{als} \quad Pe_{2,i-1/2,j+1} > 0. \tag{3.70}$$

Het upwind schema wordt niet op v toegepast maar op u, omdat voor de Navier-Stokes vergelijking in de x-richting u als onbekende genomen wordt, terwijl v als een bekende coëfficient beschouwd wordt.

Linearisatie van de convectieve term

In de iteratieve oplossingsmethoden moet men de convectieve termen lineariseren. Dat wil zeggen dat de uitdrukkingen voor u_F^2 vervangen moet worden door (de superscript k duidt de k-de iteratiestap aan)

$$u_F^2 = \frac{1}{2}(u_{ij}^k u_{ij}^{k+1} + u_{i+1,j}^k u_{i+1,j}^{k+1}) \quad \text{als} \quad Pe_{1,i+1/2,j} \leq 2, \tag{3.71}$$

$$u_F^2 = \frac{1}{2}[(1 + s_{1,i+1/2,j})u_{ij}^k u_{ij}^{k+1} + (1 - s_{1,i+1/2,j})u_{i+1,j}^k u_{i+1,j}^{k+1}] \quad \text{als} \quad Pe_{1,i+1/2,j} > 2, \tag{3.72}$$

en $(uv)_G$ door

$$(uv)_G = \frac{1}{2}v_{i-1/2,j}^k[u_{ij}^{k+1} + u_{i,j+1}^{k+1}] \quad \text{als} \quad Pe_{2,i-1/2,j+1} \leq 2, \tag{3.73}$$

$$(uv)_G = \frac{1}{2}v_{i-1/2,j}^k[(1 + s_{2,i-1/2,j+1})u_{ij}^{k+1} + (1 - s_{2,i-1/2,j+1})u_{i,j+1}^{k+1}] \quad \text{als} \quad Pe_{2,i-1/2,j+1} > 0, \tag{3.74}$$

De Navier-Stokes bewegingsvergelijking in de y-richting wordt op een analoge manier gediscretiseerd.

3.3.2 Samenvatting van de gediscretiseerde vergelijkingen

De gediscretiseerde Navier-Stokes vergelijkingen kunnen we eenvoudigweg in de volgende vorm schrijven

$$\mathbf{Q}_1(\underline{u}^k)u^{k+1} + \mathbf{G}_1 p^{k+1} = b_1, \tag{3.75}$$

$$\mathbf{Q}_2(\underline{u}^k)v^{k+1} + \mathbf{G}_2 p^{k+1} = b_2, \tag{3.76}$$

$$\mathbf{G}_1^* u^{k+1} + \mathbf{G}_2^* v^{k+1} = b_3, \tag{3.77}$$

waarin $\underline{u} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$. De matrices $\mathbf{Q}_1$ en $\mathbf{Q}_2$ hangen dus van de snelheidscomponenten u en v af. Het stelsel bestaand uit (3.75), (3.76) en (3.77) kan samengevat worden door

$$\mathbf{A}x = b, \tag{3.78}$$

waarbij

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{G}_1 \\ \mathbf{0} & \mathbf{Q}_2 & \mathbf{G}_2 \\ \mathbf{G}_1^* & \mathbf{G}_2^* & \mathbf{0} \end{pmatrix} \tag{3.79}$$

Lijst van behandelde onderwerpen:

- Discretisatie
  - Discretisatie van de convectie-diffusie vergelijking
  - Discretisatie van de Stokes vergelijkingen
    - Discretisatie van de continuïteitsvergelijking
  - Discretisatie van de Navier-Stokes vergelijkingen
    - Hybrid schema
    - Samenvatting van de gediscretiseerde vergelijkingen

4 Numerieke oplossing

De verkregen stelsels bij het discretiseren van de Stokes en Navier-Stokes vergelijkingen (zie (3.52) en (3.78)) zijn van de vorm $\mathbf{A}x = b$, waarvoor de matrix $\mathbf{A}$ de volgende vorm heeft

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{G}_1 \\ \mathbf{0} & \mathbf{Q}_2 & \mathbf{G}_2 \\ \mathbf{G}_1^* & \mathbf{G}_2^* & \mathbf{0} \end{pmatrix} \tag{4.1}$$

Een geschikte splitsing van $\mathbf{A}$ van de vorm $\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$ zodat $\mathbf{M}$ eenvoudig inverteerbaar is, is niet mogelijk door de aanwezigheid van de nul-blokmatrix op de hoofddiagonaal. Bovendien hangt voor de Navier-Stokes vergelijkingen de matrix $\mathbf{A}$ van de snelheidscomponenten af. Voor het oplossen van deze stelsels wordt in WISH3D de iteratieve methode SIMPLE of SIMPLER gebruikt. Aan de hand van de distributieve iteratie methode (zie Wesseling [1]) zullen we de SIMPLE methode beschrijven.

Distributieve iteratie

In plaats van het oplossen van $\mathbf{A}x = b$ men kan ook het volgende stelsel oplossen

$$\mathbf{AB}y = b, \qquad x = \mathbf{B}y. \tag{4.2}$$

De matrix $\mathbf{B}$ wordt een postconditionering van $\mathbf{A}$ genoemd, en wordt gekozen zodat de splitsing $\mathbf{AB} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$ leidt tot een convergente iteratieve methode. De iteratieve methode ziet er dan als volgt uit

$$x^{k+1} = x^k + \mathbf{B}\mathbf{M}^{-1}(b - \mathbf{A}x^k). \tag{4.3}$$

4.1 SIMPLE methode

De gediscretiseerde Navier-Stokes vergelijkingen zien er als volgt uit (zie (3.78))

$$\mathbf{Q}_1 u + \mathbf{G}_1 p = b_1 \tag{4.4}$$

$$\mathbf{Q}_2 v + \mathbf{G}_2 p = b_2 \tag{4.5}$$

$$\mathbf{G}_1^* u + \mathbf{G}_2^* v = b_3 \tag{4.6}$$

Een oplossing van (4.4) en (4.5) is alleen mogelijk als de druk of een benadering daarvan bekend is. Uitgaand van een benadering p^* van de druk leveren de vergelijkingen (4.4) en (4.5) een oplossing u^* en v^* die voldoen aan

$$\mathbf{Q}_1 u^* + \mathbf{G}_1 p^* = b_1, \tag{4.7}$$

$$\mathbf{Q}_2 v^* + \mathbf{G}_2 p^* = b_2. \tag{4.8}$$

Gezocht wordt naar een manier om te zorgen dat de resulterende snelheden steeds aan de continuïteitsvergelijking voldoen. We nemen aan dat de correcte druk p verkregen wordt door $p = p^* + \delta p$, waarin δp de drukcorrectie genoemd wordt. Hetzelfde geldt voor de snelheidscomponenten, dat wil zeggen

$$u = u^* + \delta u, \tag{4.9}$$
$$v = v^* + \delta v. \tag{4.10}$$

Als we (4.7) van (4.4) aftrekken dan krijgen we de volgende vergelijking voor δu

$$\mathbf{Q}_1 \delta u + \mathbf{G}_1 \delta p = 0. \tag{4.11}$$

Op dezelfde manier volgt een vergelijking voor δv

$$\mathbf{Q}_2 \delta v + \mathbf{G}_2 \delta p = 0. \tag{4.12}$$

Om δu en δv in (4.11) en (4.12)te bepalen wordt in de SIMPLE aanpak de volgende benadering gemaakt (voor meer details zie [2])

$$\delta u = -\mathbf{D}_1^{-1} \mathbf{G}_1 \delta p, \tag{4.13}$$
$$\delta v = -\mathbf{D}_2^{-1} \mathbf{G}_2 \delta p, \tag{4.14}$$

waarbij

$$\mathbf{D}_1 = \mathrm{Diag}(\mathbf{Q}_1), \tag{4.15}$$
$$\mathbf{D}_2 = \mathrm{Diag}(\mathbf{Q}_2). \tag{4.16}$$

Door substitutie van u en v respectievelijk gegeven door (4.9) en (4.10) in de vergelijking (4.6), gebruikmakend van de uitdrukkingen (4.13) en (4.14) volgt

$$(-\mathbf{G}_1^* \mathbf{D}_1^{-1} \mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_2^* \mathbf{D}_2^{-1} \mathbf{G}_2) \delta p = b_3 - \mathbf{G}_1^* u^* - \mathbf{G}_2^* v^*. \tag{4.17}$$

We hebben alle vergelijkingen die nodig zijn voor het bepalen van de snelheden en de druk geformuleerd. Nu zijn we in staat om het SIMPLE algoritme te beschrijven.

SIMPLE algoritme

1. kies een beginschatting p^*
2. los op $\mathbf{Q}_1 u^* + \mathbf{G}_1 p^* = b_1$
3. los op $\mathbf{Q}_2 v^* + \mathbf{G}_2 p^* = b_2$
4. los op $(-\mathbf{G}_1^* \mathbf{D}_1^{-1} \mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_2^* \mathbf{D}_2^{-1} \mathbf{G}_2)\delta p = b_3 - \mathbf{G}_1^* u^* - \mathbf{G}_2^* v^*$
5. bereken $p := p^* + \delta p$
6. bereken $u := u^* - \mathbf{D}_1^{-1} \mathbf{G}_1 \delta p$
   bereken $v := v^* - \mathbf{D}_2^{-1} \mathbf{G}_2 \delta p$
7. neem $p^* := p$ als nieuwe beginschatting en herhaal dit proces vanaf stap 2 tot convergentie

De SIMPLE methode kunnen we ook afleiden door het postconditioneren van de matrix $\mathbf{A}$ door een matrix $\mathbf{B}$ zodat een geschikte splitsing van de vorm $\mathbf{AB} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$ mogelijk is. De SIMPLE methode kan verkregen worden door de keuze

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} & -\mathbf{D}_1^{-1}\mathbf{G}_1 \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} & -\mathbf{D}_2^{-1}\mathbf{G}_2 \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}. \tag{4.18}$$

Dit levert met $\mathbf{R} = -\mathbf{G}_1^* \mathbf{D}_1^{-1} \mathbf{G}_1 - \mathbf{G}_2^* \mathbf{D}_2^{-1} \mathbf{G}_2$

$$\mathbf{AB} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{G}_1 - \mathbf{Q}_1 \mathbf{D}_1^{-1} \mathbf{G}_1 \\ \mathbf{0} & \mathbf{Q}_2 & \mathbf{G}_2 - \mathbf{Q}_2 \mathbf{D}_2^{-1} \mathbf{G}_2 \\ \mathbf{G}_1^* & \mathbf{G}_2^* & \mathbf{R} \end{pmatrix}. \tag{4.19}$$

De matrix $\mathbf{M}$ wordt dan als volgt gedefinieerd

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{Q}_2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{G}_1^* & \mathbf{G}_2^* & \mathbf{R} \end{pmatrix}. \tag{4.20}$$

Gebruikmakend van de distributieve iteratie methode (4.3), wordt het stelsel (3.78) opgelost met het volgende iteratieve proces

$$x^{k+1} = x^k + \mathbf{B}\mathbf{M}^{-1}(b - \mathbf{A}x^k) \qquad k = 0, 1, 2, ... \tag{4.21}$$

Dit is equivalent met het oplossen van

for $k = 0, 1, ...$until convergence **do**
  $r^k = b - \mathbf{A}x^k$
  $\mathbf{M}\delta\tilde{x} = r^k$
  $\delta x = \mathbf{B}\delta\tilde{x}$
  $x^{k+1} = x^k + \delta x$
end for

Resumerend komen we tot het SIMPLE algoritme:

Algoritme 4.1

p^0 =beginschatting,
u^0 =beginschatting,
v^0 =beginschatting,
for $k = 0, 1, 2...$ until convergence **do**
/** $r^k = b - \mathbf{A}x^k$ **/
a. $r_1^k = b_1 - \mathbf{Q}_1 u^k - \mathbf{G}_1 p^k$
b. $r_2^k = b_2 - \mathbf{Q}_2 v^k - \mathbf{G}_2 p^k$
c. $r_3^k = b_3 - \mathbf{G}_1^* u^k - \mathbf{G}_2^* v^k$
/** $\mathbf{M}\delta\tilde{x} = r^k$ **/
d. $\mathbf{Q}_1 \delta\tilde{u} = r_1^k$
e. $\mathbf{Q}_2 \delta\tilde{v} = r_2^k$
f. $\mathbf{R}\delta\tilde{p} = r_3^k - \mathbf{G}_1^* \delta\tilde{u} - \mathbf{G}_2^* \delta\tilde{v}$
/** $\delta x = \mathbf{B}\delta\tilde{x}$ **/
g. $\delta u = \delta\tilde{u} - \mathbf{D}_1^{-1}\mathbf{G}_1 \delta\tilde{p}$
h. $\delta v = \delta\tilde{v} - \mathbf{D}_2^{-1}\mathbf{G}_2 \delta\tilde{p}$
i. $\delta p = \delta\tilde{p}$
/** $x^{k+1} = x^k + \delta x$ **/
j. $u^{k+1} := u^k + \delta u$
k. $v^{k+1} := v^k + \delta v$
l. $p^{k+1} := p^k + \delta p$
end for

Merk op dat Algoritme 4.1 en het SIMPLE algoritme identiek zijn. Immers, beschouw Algoritme 4.1 en substitueer (d), (e) en (f) in (a), (b) en (c). Gebruik de notatie $u^* := u^k + \delta u$, $v^* := v^k + \delta v$ en $p^* := p^k$ en substitueer vervolgens (g), (h) en (i) in (j), (k) en (l) dan volgt het SIMPLE algoritme.

4.2 Krylov methoden

Beschouw het lineaire stelsel $\mathbf{A}x = b, \quad \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad b \in \mathbb{R}^n$. Afhankelijk van de eigenschappen van de matrix $\mathbf{A}$, kunnen diverse Krylov methoden gebruikt worden. Als $\mathbf{A}$ symmetrisch positief definiet (SPD) is gebruiken we de PCG (Preconditioned Conjugate Gradient) methode. Voor lineaire stelsels waarvoor de matrix $\mathbf{A}$ niet symmetrisch is wordt in dit onderzoek gebruik gemaakt van de GCR (Generalized Conjugate Residual) methode of de gepreconditioneerde versie daarvan PGCR. Beschouw een niet singuliere matrix $\mathbf{P}^{-1}$ als preconditionering van de matrix $\mathbf{A}$, dat wil zeggen dat het stelsel $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}x = \mathbf{P}^{-1}b$ wordt opgelost in plaats van $\mathbf{A}x = b$. Daarvoor wordt het volgende iteratieve

proces geïntroduceerd

$$x^{k+1} = x^k + \mathbf{P}^{-1}(b - \mathbf{A}x^k), \qquad \text{voor} \quad k = 0, 1, 2, ... \tag{4.22}$$

Voor de iteratiefout $x^{k+1} - x$ geldt:

$$x^{k+1} - x = (\mathbf{I} - \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A})(x^k - x), \qquad \text{voor} \quad k = 0, 1, 2, ... \tag{4.23}$$

waarbij x de exacte oplossing voorstelt.
Voer in $\mathbf{C} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}$, dan volgt

$$x^{k+1} = x + (\mathbf{I} - \mathbf{C})^{k+1}(x^0 - x), \qquad \text{voor} \quad k = 0, 1, 2, ... \tag{4.24}$$

Definieer het residu door $r^k = b - \mathbf{A}x^k$ voor $k = 0, 1, 2, ...$
Hiermee kan de iteratieformule herschreven worden tot

$$x^{k+1} = x - (\mathbf{I} - \mathbf{C})^{k+1}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{P}^{-1}r^0, \qquad \text{voor} \quad k = 0, 1, 2, ... \tag{4.25}$$

Er geldt dus

$$x^{k+1} = x - p_{k+1}(\mathbf{C})\mathbf{C}^{-1}\mathbf{P}^{-1}r^0, \tag{4.26}$$

waarbij p_k een k-de graads polynoom is met $p_k(0) = 1$. Of wel

$$x^{k+1} = x^0 + (\mathbf{I} - p_{k+1}(\mathbf{C}))\mathbf{C}^{-1}\mathbf{P}^{-1}r^0. \tag{4.27}$$

Omdat p_{k+1} een polynoom is van graad $(k+1)$ met $p_{k+1}(0) = 1$, is $(\mathbf{I} - p_{k+1}(\mathbf{C}))\mathbf{C}^{-1}$ een willekeurige polynoom van graad k. Hieruit volgt dat $x^{k+1} - x^0$ in de ruimte zit, opgespannen door de vectoren $\{\mathbf{P}^{-1}r^0, \mathbf{C}\mathbf{P}^{-1}r^0, \ldots, \mathbf{C}^k\mathbf{P}^{-1}r^0\}$. Dit heet de Krylov ruimte van dimensie $(k+1)$ en noteren we met $\mathbf{K}^{k+1}\{\mathbf{C}, \mathbf{P}^{-1}r^0\}$. Merk op dat het inwendige product $(.,.)$, welke in het vervolg van dit onderzoek gebruikt wordt, gegeven wordt door

$$\|x\|_2^2 = (x, x), \quad x \in \mathbb{R}^n. \tag{4.28}$$

4.2.1 PCG methode

Neem nu aan dat de matrix $\mathbf{A}$ en de preconditioneringsmatrix $\mathbf{P}^{-1}$ symmetrisch en positief definiet zijn. Gegeven een ϵ $(0 < \epsilon \ll 1)$ en een beginschatting x^0. Het volgende algoritme berekent een vector x zodat $\|b - \mathbf{A}x\|_2 \approx \epsilon \|r^0\|_2$.

Algoritme 4.2.1

$r^0 = b - \mathbf{A}x^0$
$p^0 = \mathbf{P}^{-1}r^0$
$z^0 = p^0$
while $(\|r^k\|_2 > \epsilon\|r^0\|_2)$ **do**
  $\alpha^k = \dfrac{(r^k, z^k)}{(\mathbf{A}p^k, p^k)}$
  $x^{k+1} = x^k + \alpha^k p^k$
  $r^{k+1} = r^k - \alpha^k \mathbf{A}p^k$
  $z^{k+1} = \mathbf{P}^{-1}r^{k+1}$
  $\beta^{k+1} = \dfrac{(r^{k+1}, z^{k+1})}{(r^k, z^k)}$
  $p^{k+1} = z^{k+1} + \beta^{k+1}p^k$
end while

4.2.2 GCR methode

In deze sectie introduceren we de GCR (Generalized Conjugate Residuals) methode (zie [7]) voor het oplossen van lineaire stelsels waarvoor de matrix $\mathbf{A}$ niet symmetrisch is. Het GCR algoritme kan in het kort beschreven worden door

$r^0 = b - \mathbf{A}x^0, \quad s^0 = r^0$
for $k = 0, 1, \ldots$ **do**
  $\alpha^k = \dfrac{(r^k, \mathbf{A}s^k)}{(\mathbf{A}s^k, \mathbf{A}s^k)}$
  $x^{k+1} = x^k + \alpha^k s^k$
  $r^{k+1} = r^k - \alpha^k \mathbf{A}s^k$
  for $i = 0, 1, 2, \ldots k$ **do**
    $\beta^i_{(k+1)} = -\dfrac{(\mathbf{A}r^{k+1}, \mathbf{A}s^i)}{(\mathbf{A}s^i, \mathbf{A}s^i)}$
  end for
  $s^{k+1} = r^{k+1} + \sum_{i=0}^{k} \beta^i_{(k+1)} s^i$
end for

We zullen nu een variant van het bovenstaande GCR algoritme beschouwen (voor meer details zie [12]).

Algoritme GCR

$r^0 = b - \mathbf{A}x^0$
for $k = 0, 1, 2, \ldots$ **do**
  $s^{k+1} = r^k$
  $v^{k+1} = \mathbf{A}s^{k+1}$
  for $i = 1, 2, ...k$ **do**
    $\alpha = (v^{k+1}, v^i)$
    $v^{k+1} := v^{k+1} - \alpha v^i$
    $s^{k+1} := s^{k+1} - \alpha s^i$
  end for
  $v^{k+1} := v^{k+1}/\|v^{k+1}\|_2$
  $s^{k+1} := s^{k+1}/\|v^{k+1}\|_2$
  $x^{k+1} := x^k + (r^k, v^{k+1})s^{k+1}$
  $r^{k+1} := r^k - (r^k, v^{k+1})v^{k+1}$
end for

Beschouw een niet singulier preconditioneringsmatrix $\mathbf{P}^{-1}$. In het bovenstaande GCR algoritme kiezen we de zoekrichting $s^{k+1} = \mathbf{P}^{-1}r^k$. Dit leidt tot Het PGCR (Preconditioned GCR) algoritme.

Algoritme 4.2.2

$r^0 = b - \mathbf{A}x^0$
for $k = 0, 1, 2, \ldots$ **do**
  $s^{k+1} = \mathbf{P}^{-1}r^k$
  $v^{k+1} = \mathbf{A}s^{k+1}$
  for $i = 1, 2, ...k$ **do**
    $\alpha = (v^{k+1}, v^i)$
    $v^{k+1} := v^{k+1} - \alpha v^i$
    $s^{k+1} := s^{k+1} - \alpha s^i$
  end for
  $v^{k+1} := v^{k+1}/\|v^{k+1}\|_2$
  $s^{k+1} := s^{k+1}/\|v^{k+1}\|_2$
  $x^{k+1} := x^k + (r^k, v^{k+1})s^{k+1}$
  $r^{k+1} := r^k - (r^k, v^{k+1})v^{k+1}$
end for

Merk op dat de vectoren s^k en v^k in het geheugen opgeslagen moeten worden. Verder neemt de hoeveelheid werk in het Gram-Schmidt proces kwadratisch toe met het aantal iteraties. Om dit te verlagen kan men gebruik maken van de volgende technieken:

- Trunkeren: Er wordt gebruik gemaakt van slechts k_t zoekrichtingen. Als het aantal iteraties groter is dan k_t dan wordt een oude zoekrichting

overschreven.

- Herstarten: Een ander alternatief is het herstarten van het GCR algoritme na k_s iteraties. Alle vectoren s^k en v^k worden verwijderd en het algoritme wordt herstart met een nieuwe beginschatting $x^0 = x^{k_s}$.

4.3 SIMPLE voor Stokes versnellen met GCR

De SIMPLE methode is een Gauss-Jacobi-achtige methode toegepast op het stelsel (4.29). Bekend is dat de Krylov versnelling vaak veel beter convergeert, dat die goedkoop is, dat wil zeggen het extra werk dat uitgevoerd moet worden door het gebruik van de Krylov versnelling (bv: orthogonalisatie) verwaarloosbaar is. Bovendien hebben de langzaam convergerende termen na verloop van de tijd geen invloed meer (superlineaire convergentie), en meestal is geen relaxatie nodig. Dit zijn redenen om het SIMPLE algoritme te versnellen met een Krylov methode.
Door een combinatie van de GCR methode en het SIMPLE algoritme zullen we proberen het SIMPLE algoritme te versnellen. Het probleem

$$\mathbf{A}x = b, \tag{4.29}$$

wordt met behulp van de volgende distributieve iteratie methode opgelost

$$x^{k+1} = x^k + \mathbf{B}\mathbf{M}^{-1}(b - \mathbf{A}x^k), \tag{4.30}$$

waarbij $\mathbf{B}$ gegeven is door (4.18) en $\mathbf{M}$ door (4.20). De GCR methode gegeven door Algoritme 4.2.2 wordt nu op (4.30) toegepast. Er wordt voor de zoekrichting s^{k+1} de keuze $s^{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{M}^{-1}r^k$ gemaakt. Hieruit volgt

Algoritme GCR-SIMPLE

$r^0 = b - \mathbf{A}x^0$
for $k = 0, 1, 2, \ldots$ **do**
  $\mathbf{M}z^{k+1} = r^k$
  $s^{k+1} = \mathbf{B}z^{k+1}$
  $v^{k+1} = \mathbf{A}s^{k+1}$
  for $i = 1, 2, \ldots k$ **do**
    $\alpha = (v^{k+1}, v^i)$
    $v^{k+1} := v^{k+1} - \alpha v^i$
    $s^{k+1} := s^{k+1} - \alpha s^i$
  end for
  $v^{k+1} := v^{k+1}/\|v^{k+1}\|_2$
  $s^{k+1} := s^{k+1}/\|v^{k+1}\|_2$
  $x^{k+1} := x^k + (r^k, v^{k+1})s^{k+1}$
  $r^{k+1} := r^k - (r^k, v^{k+1})v^{k+1}$
end for

De vector x wordt vervangen door $\begin{pmatrix} u \\ v \\ p \end{pmatrix}$. Voor het gemak voeren we de volgende transformatie: $u_1 := u, \quad u_2 := v$.
Definieer:
$r = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix}$, $s = \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \\ s_3 \end{pmatrix}$, $v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix}$ en $z = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix}$. Dan volgt het GCR-SIMPLE algoritme:

Algoritme 4.3 (GCR-SIMPLE)

kies een beginschatting p^0, u_1^0 en u_2^0,
$r_j^0 = b_j - \mathbf{Q}_j u_j^0 - \mathbf{G}_j p^0, \quad j = 1,2$
$r_3^0 = b_3 - \mathbf{G}_1^* u_1^0 - \mathbf{G}_2^* u_2^0$
for $k = 0, 1, 2, \ldots$ **do**
  los op $\mathbf{Q}_j z_j^{k+1} = r_j^k, \qquad j = 1,2$
  los op $\mathbf{R} z_3^{k+1} = r_3^k - \mathbf{G}_1^* z_1^{k+1} - \mathbf{G}_2^* z_2^{k+1}$
  $s_j^{k+1} = z_j^{k+1} - \mathbf{D}_j^{-1} \mathbf{G}_j z_3^{k+1}, \qquad j = 1,2$
  $s_3^{k+1} = z_3^{k+1}$
  $v_j^{k+1} = \mathbf{Q}_j s_j^{k+1} + \mathbf{G}_j s_3^{k+1}, \qquad j = 1,2$
  $v_3^{k+1} = \mathbf{G}_1^* s_1^{k+1} + \mathbf{G}_2^* s_2^{k+1}$
  for $i = 1, 2, \ldots k$ **do**
    $\alpha = \sum_{j=1}^{3} (v_j^{k+1}, v_j^i)$
    $v_j^{k+1} := v_j^{k+1} - \alpha v_j^i, \qquad j = 1,2,3$
    $s_j^{k+1} := s_j^{k+1} - \alpha s_j^i, \qquad j = 1,2,3$
  end for
  $\beta = \sum_{j=1}^{3} \|v_j^{k+1}\|_2$
  $v_j^{k+1} := v_j^{k+1}/\beta, \qquad j = 1,2,3$
  $s_j^{k+1} := s_j^{k+1}/\beta, \qquad j = 1,2,3$
  $\gamma = \sum_{j=1}^{3} (r_j^k, v_j^{k+1})$
  $u_j^{k+1} := u_j^k + \gamma s_j^{k+1}, \quad j = 1,2$
  $p^{k+1} := p^k + \gamma s_3^{k+1}$
  $r_j^{k+1} := r_j^k - \gamma v_j^{k+1}, \quad j = 1,2,3$
end for

4.4 SIMPLE voor Navier-Stokes versnellen met GCR

In het stelsel (3.78) hangt de matrix $\mathbf{A}$ van de snelheidscomponenten af, zoals aangegeven in (3.75) en(3.76). De aanpak is dat (4.31) wordt opgelost met een iteratief proces waarin alleen lineaire stelsels hoeven te worden opgelost (iteratiemethode van Picard). Dat is equivalent met het oplossen van stelsels van de vorm

$$\mathbf{A}(x^i) x^{i+1} = b. \tag{4.31}$$

Die lineaire stelsels worden opgelost met het reeds behandelde methode in Algoritme 4.3. Uitgaande van een beginschatting x^0 wordt het stelsel $\mathbf{A}(x^0)x^1 = b$ met behulp van Algoritme 4.3 opgelost en de verkregen oplossing x^1 wordt gebruikt om een nieuwe matrix $\mathbf{A}(x^1)$ op te bouwen. Dit proces wordt herhaald totdat een oplossing is gevonden zodanig dat $\mathbf{A}(x^{i+1})x^{i+1} = b$. Dan komen we tot een algoritme voor het oplossen van de Navier-Stokes vergelijkingen:

Algoritme 4.4

kies een beginschatting x^0,
for $i = 0, 1, 2 \ldots$ **do**
  pas Algoritme 4.3 toe op $\mathbf{A}(x^i)x^{i+1} = b$
end for

Merk op dat in het algoritme 4.4 bij ieder iteratiestap het algoritme 4.3 uitgevoerd moet worden. In het algoritme 4.3, die equivalent is met het algoritme GCR-SIMPLE, wordt een lineair stelsel ($\mathbf{M}z^{k+1} = r^k$) opgelost en worden twee operaties matrix-vector uitgevoerd ($s^{k+1} = \mathbf{B}z^{k+1}$ en $v^{k+1} = \mathbf{A}s^{k+1}$). Dit is equivalent met één SIMPLE iteratie zie algoritme 4.1. Het extra werk dat uitgevoerd moet worden bij ieder iteratiestap k van het GCR-SIMPLE algoritme ten opzichte van het SIMPLE algoritme 4.1 is gelijk aan:

- k×(1×inproduct+2×vectorupdates)
- 2 delingen
- 2×inproducten+2×vectorupdates

We hebben dus gezien hoe de SIMPLE methode voor de Navier-Stokes vergelijkingen versneld kan worden met behulp de GCR methode. Het is ook mogelijk om andere iteratieve methoden te gebruiken in plaats van de GCR methode (bv: GCR(k): GCR herstarten na k iteraties zie [7], MR: Minimal residual, GMRES: Generalized minimal residual zie [8] en [10], GMRESR zie [9] of een Krylov methode voor niet-lineaire stelsels zie [11], enz...).

Lijst van behandelde onderwerpen:

- Numerieke oplossing van de Stokes en Navier-Stokes vergelijkingen
  - SIMPLE methode
  - Krylov methoden
    - Gepreconditioneerde CG methode
    - GCR methode
  - SIMLPE methode voor Stokes versnellen met GCR
  - SIMPLE methode voor Navier-Stokes versnellen met GCR

5 Voorstel voor de afstudeerfase

Tijdens de afstudeerfase komen de volgende onderwerpen aan de orde:

5.1 Stokes stromingen inbouwen in WISH3D

WISH3D kent alleen de Navier-Stokes stromingen. Om de Stokes stromingen te bepalen moeten er aanpassingen in de code aangebracht worden. Ten eerste wordt de Stokes solver in WISH3D ingebouwd voor het oplossen van Stokes stromingen. Vervolgens wordt deze solver op de volgende testproblemen toegepast:

- Laminaire pijpstroming 2D.
- Laminaire stroming in een backward facing step 2D.

waarna de convergentiesnelheden van de SIMPLE iteratie van ieder probleem bepaald worden.

5.2 SIMPLE voor Stokes versnellen met GCR

De SIMPLE methode voor Stokes solver wordt versneld met behulp van GCR methode, en wordt opnieuw toegepast op de testproblemen van sectie 5.1. Bovendien worden de convergentiesnelheden vergeleken met die gevonden in 5.1 (d.w.z. zonder GCR).

5.3 SIMPLE voor Navier-Stokes versnellen met GCR

Beschouw het algoritme 4.4 en kies $x^0 = 0$. Ten eerste worden slechts twee stappen van dit algoritme uitgevoerd. In de eerste stap wordt het stelsel $\mathbf{A}(0)x^1 = b$ opgelost en dat is niet nieuw in verband met 5.2. In de tweede stap wordt het stelsel $\mathbf{A}(x^1)x^2 = b$ opgelost. Als dit een goed resultaat oplevert, dat wil zeggen dat het algoritme 4.4 een betere convergentiesnelheid bereikt dan wordt het SIMPLE algoritme voor Navier-Stokes solver versneld met behulp van GCR. De volgende testproblemen worden behandeld:

- Laminaire pijpstroming 2D.

- Laminaire stroming in een backward facing step 2D.
- Oven 2D/3D (laminair).

Vervolgens worden de convergentiesnelheden van turbulente stromingen (bestaand uit de versnelde Navier-Stokes en het $k-\epsilon$ model) bepaald. Dit wordt gedaan aan hand van de volgende testproblemen:

- Turbulente pijpstroming 2D.
- Turbulente stroming in een backward facing step 2D.
- Oven 2D/3D (turbulent).

5.4 SIMPLER versnellen met GCR

De stappen van 5.2 en 5.3 herhalen maar nu voor SIMPLER in plaats van SIMPLE.

5.5 Het $k-\epsilon$ turbulentie model

Eventueel het model bestaand uit de Navier-Stokes vergelijkingen en het $k-\epsilon$ model versnellen met een Krylov methode.

6 Bibliografie

[1] **P. Wesseling**, *An Introduction To Multigrid Methods*, John Wiley and Sons, Chichester, 1992.

[2] **Patankar, S.V.**, *Numerical Heat Transfer and fluid Flow*, Hemisphere, New York, 1980.

[3] **L. Post**, *Modelling of Flow and Combustion in a Glass Melting Furnace*, Thesis, TU Delft, 1988.

[4] **F.T.M. Nieuwstadt**, Turbulentie: *Inleiding in de theorie en toepassingen van turbulente stromingen*, Epsilon, Utrecht, 1992.

[5] **G.P. Boerstoel**, *Modelling of Gas-Fired Furnaces*, Thesis, TU Delft, 1997.

[6] **H. Tazammourti**, *(Parallelle) Solvers voor CFD-code WISH3D*, Afstudeerverslag, TU Delft, 1997.
http://dutita0.twi.tudelft.nl/users/vuik/numanal/tazammourti.html

[7] **S.C. Eisenstat, H.C. Elman and M.H. Schultz**, *Variational iterative methods for nonsymmetric syste ms of linear equations*, SIAM J. Numer. Anal., 20:345-357, 1983.

[8] **Y. Saad and M.H. Schultz**, *GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems*, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 7 (1986) 856-869.

[9] **H.A. van der Vorst and C. Vuik**, *GMRESR: A family of nested GMRES methods*, Num. Lin. Alg. Appl., 1:369-386, 1994.

[10] **H.A. van der vorst and C. Vuik**, *The superlinear convergence behaviour of GMRES*. J. Comput. Appl. Math., 48:327-341, 1993.

[11] **P.N. Brown and Y. Saad**, *Hybrid Krylov methods for nonlinear systems of equations*, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 11:450-481, 1990.

[12] **H.A. van der Vorst and C. Vuik**, *Voortgezette numerieke lineaire algebra*, Collegediktaat, TU Delft, Oktober 1996.