Een multigrid versnelling van de SIMPLE methode voor incompressibele stromingen

a. el Uasghiri
Technische Wiskunde, Numerieke Wiskunde

Technische Universiteit Delft
juli 2000

Afstudeercomissie:
Prof.dr.ir.P. Wesseling (TU Delft)
Dr.ir.C. Vuik (TU Delft)
Dr.ir.P. Boerstoel (TNO-TPD)
Ir.H. Tazammourti (TNO-TPD)

Inhoudsopgave

Hoofdstuk 1

Inleiding

De TPD [1] (Technisch Pysische Dienst) te Delft is één van de 15 gevestigde instituten van TNO (Nederlandse Organisatie voor Toepaste Natuurwetenschappelijk Onderzoek) in Nederland. De TPD is zelf ook weer onderverdeeld in een aantal subdivisies, waarvan Proces Fysica (PF) er één van is. Binnen PF houdt men zich bezig met het modellering van warmte en stromingen in alle soorten van industriële processen. Een voorbeeld hiervan zijn de glasovens waar aan veelvuldig door PF gerekend wordt.
Ten behoeve van het simuleren van de fysische processen, is men binnen TNO-TPD bezig het CFD pakket X-stream te ontwikkelen (zie [1]). Met dit software pakket hoopt men de turbulente stroming, de warmte vergelijking en het massatransport in een gecompliceerde geometrie te simuleren. Deze stromingen mogen zowel stationair als instationair zijn. Voordat er gerekend kan worden dient een rekenrooster gemaakt worden. In X-stream wordt het rekenrooster in een aantal blokken (multiblok) verdeeld, waarbij elke blok uit een gestructureerde niet-orthogonale mesh bestaat. Binnen dit pakket is het mogelijk om een gegeven blok een aantal keer ten opzichte van de andere blokken te verfijnen, ook wel lokale verfijning genoemd. Lokale verfijning is nodig om deelgebieden van het rekendomein, waar we meer informatie over het gedrag van de stroming willen hebben; een voorbeeld van zo'n deelgebied is de grenslaag.
Voor het genereren van multiblok roosters wordt op dit moment gebruik gemaakt van de FLUENT gridgenerator. FLUENT is een CFD code die ook binnen TNO-TPD gebruikt wordt. De geproduceerde gridfile van FLUENT wordt naar een gridfile geconverteerd in een formaat dat voor X-stream leesbaar is. X-stream draait ook parallel, waarbij elke processor één of meer blokken toegewezen krijgt.
Het ontwikkelen van X-stream is tot een fase gevorderd waarin het simuleren van laminaire- en turbulente stromingen een feit is. Het model dat voor de simulatie gebruikt wordt in X-stream bestaat uit de Navier-Stokes

[1] www.tno.tpd.nl

vergelijkingen. Het geheel vormt een stelsel van niet-lineaire gekoppelde diffentiaalvergelijkingen, die niet analytisch kunnen worden opgelost. Voor het simuleren van turbulente stromingen wordt in X-stream gebruik gemaakt van het standaard $(k-\epsilon)$-model. Het $(k-\epsilon)$-model bestaat uit twee niet lineaire vergelijkingen, die ook niet analytisch op te lossen zijn. X-stream berust dan ook op numerieke methoden om een oplossing te bepalen. Het numerieke model in X-stream is gebaseerd op:

- Eindige Volume Methode (EVM): de behoudswetten (voor impuls, massa, energie enzovoort) worden met behulp van het theorema van Gauss geintegreerd over volume elementen (normaliter cellen genoemd). Dit houdt onder andere dat in alle omstandigheden per definitie aan alle behoudswetten voldaan wordt.

- Om het gekoppelde niet lineaire Navier-Stokes vergelijkingen op te lossen, wordt de SIMPLE methode (*<u>S</u>emi <u>I</u>mplicit <u>M</u>ethod for <u>P</u>ressure <u>L</u>inked <u>E</u>quations*) gebruikt. Tijdens een buiteniteratie van SIMPLE worden de lineaire stelsels in X-stream met een iteratieve methode, bekend als SIP-solver (Strongly Implicit Procedure), opgelost, zie figuur 1.1.

Het flow diagram in figuur 1.1 geeft de oplossingsprocedure van X-stream aan. X-stream is verbonden met pre- en postprocessing. Tussen de pre- en postprocessing zit het hoofdprogramma, zie figuur 1.1.

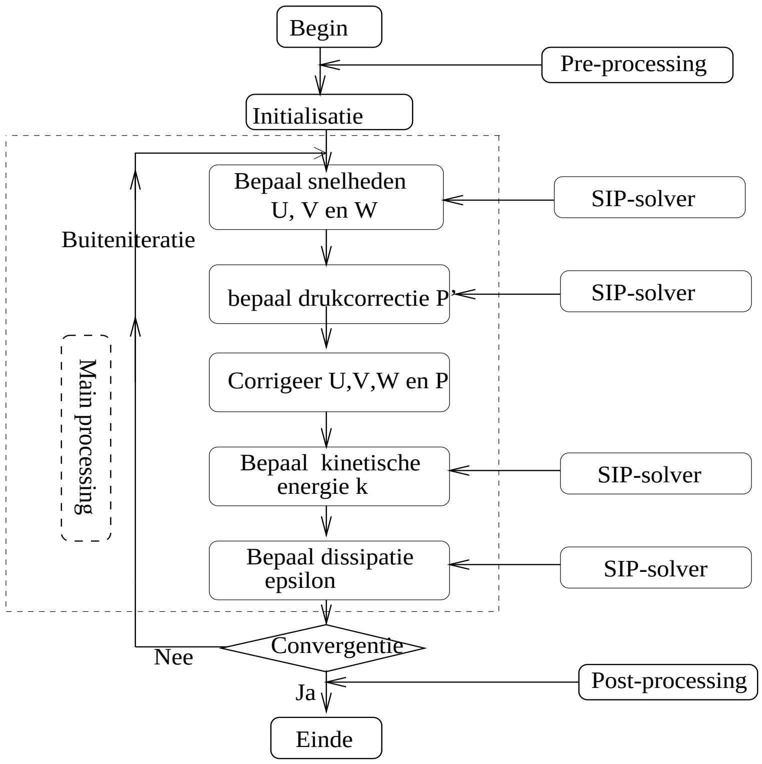
- De preprocessing bestaat uit de input-files, waarin problemen gedefinieerd kunnen worden. Deze file bevat de gridfile, de randvoorwaarden enzovoort. Hiermee wordt X-stream bestuurd.

- Het hoofdprogramma bestaat uit het oplossen van de gelineariseerde stelsels. Hierin worden de berekeningen gevoerd.

- De postprocessing bestaat uit de output-files, waarin de data verkregen in het hoofdprogramma geschreven wordt. Deze data kunnen we visualiseren.

<u>Het doel</u>

Oplosmethode SIMPLE is waarschijnlijk de meest gebruikte methode om incompressibele vergelijkingen op te lossen. Het nadeel van de SIMPLE methode is dat deze methode steeds minder efficiënt wordt naarmate het rekenrooster verfijnd wordt. De reden van de trage convergentie is ondermeer de zwakke koppeling tussen de variabelen en de niet-lineariteit van de op te lossen vergelijkingen. De convergentie van SIMPLE is sterk afhankelijk van het aantal roosterpunten. Om convergentie van SIMPLE in X-stream te versnellen zullen we een Multigrid methode gebruiken.



Figuur 1.1: De oplossingsprocedure van X-stream

<u>Algemene opzet</u>

In hoodstuk 2 van dit verslag wordt het mathematische model beschreven. Er wordt aandacht besteed aan de incompressibele Navier-Stokes vergelijkingen en het standaard $(k-\epsilon)$ model. De partiële differentiaal vergelijkingen worden aangevuld met begin- en randvoorwaarden.
Het discretiseren van de gegeven partiële differentiaal vergelijkingen met behulp van de Eindige Volume Methode met een 'collocated arrangement van de onbekende' wordt in hoofdstuk 3 behandeld. Hieruit worden stelsels lineaire vergelijkingen verkregen van de vorm $A\phi = b$, waarbij A een ijle matrix is. De vector ϕ bevat de onbekenden. In hoofdstuk 4 wordt voor het bepalen van een stelsel vergelijkingen voor de druk, een druk-correctie methode, SIMPLE, beschreven. In hoofdstuk 5 wordt aandacht besteed aan Multigrid methode en het versnellen van SIMPLE met een Multigrid methode.

Hoofdstuk 2

Bewegingsvergelijkingen

2.1 Incompressibele stromingen

De vergelijkingen, die stroming van een vloeibare medium beschrijven, zijn gebaseerd op de wetten van behoud van massa, impuls en energie (zie [2]). Als uitgangspunt beschouwen we een zogenaamd vloeistofelement met volume V. De positie van het vloeistofelement wordt vastgesteld in een Cartesisch assenstelsel (x_1, x_2, x_3). Het vloeistofelement zal zich door het medium bewegen met de snelheid u_i ter plaatse van de positie van het element. Verder zullen we gebruik maken van de Einstein-sommatie-conventie. Dit betekent dat in het geval van een herhaalde index (bijvoorbeeld $u_i u_i$) over alle richtingen (x_1, x_2, x_3) wordt gesommeerd: $u_i u_i = u_1 u_1 + u_2 u_2 + u_3 u_3$.

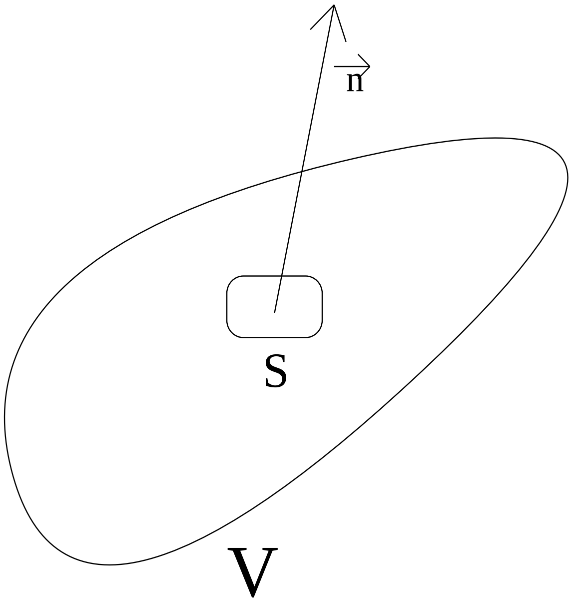
2.2 Continuiteitsvergelijking

Beschouw een vast (dat wil zeggen niet meebewegend met de stroming) volume V, dat omsloten wordt door een oppervlak S, waarop de buitennormaal n gedefinieerd is, zie figuur (2.1). Behoud van massa impliceert dat de verandering van de massa in V gelijk is aan de netto massaflux die door het oppervlak S stroomt, (mits er geen interne bronnen in V aanwezig zijn).
Een integraalvorm van de massabalans is:

$$\frac{\partial M}{\partial t} \equiv \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV = - \int_S \rho v \cdot n dS, \tag{2.1}$$

waarbij M is de totale massa in V en ρ is de dichtheid van het medium.
Toepassing van de divergentie stelling van Gauss op (2.1) geeft:

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \int_V div(\rho v) dV. \tag{2.2}$$



Figuur 2.1: Een vloeistofelement met volume V

Aangezien de vergelijking (2.2) voor alle V geldt, volgt :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\rho v) = 0. \tag{2.3}$$

De vergelijking (2.3) staat bekend als continuiteitsvergelijking.

2.3 Navier-Stokes vergelijkingen

Behoud van impuls voor een incompressibele stroming, ofwel een onsamendrukbare stroming (ρ is constant) en tevens voor een zogenaamd Newtons fluidum, wordt beschreven door de volgende vergelijkingen:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\sigma_{ij}) + \rho g_i, \tag{2.4}$$

waarbij ρg_i de volumekracht is, met g_i de zwaartekrachtversnelling in de x_i-richting. De term σ_{ij} is spanningstensor. Deze tensor is gedefinieerd als

$$\sigma_{ij} = -\mu(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}) + \frac{2}{3}\mu\frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij}, \tag{2.5}$$

waarin $\delta_{ij} = 0$ als $i \neq j$ en $\delta_{ij} = 1$ als $i = j$. De term μ staat bekend als de dynamische viscositeit. Dat is een materiaalconstante, die dus alleen afhankelijk is van het medium.

De vergelijkingen (2.4) staan bekend als de Navier-Stokes vergelijkingen.

2.4 Behoud van energie

Behoud van energie in een vloeistof of gas wordt beschreven door, (zie [3])

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j E) = -\frac{\partial}{\partial x_j}(q_j) - \frac{\partial}{\partial x_j}(p u_j) + \rho u_i g_i - \frac{\partial}{\partial x_j}(\sigma_{ij} u_i) + S_{rad}. \tag{2.6}$$

waarin $E = U + \frac{1}{2}u_i u_i$, waarbij U is de inwendige energie per massaeenheid, de term $\frac{1}{2}u_i u_i$ is de kinetische energie, q_j is de j-component van de energieflux en S_{rad} is de stralingsbronterm.
Als wij vergelijking (2.6) in termen van enthalpie herschrijven ($H = U + \frac{p}{\rho}$) dan volgt:

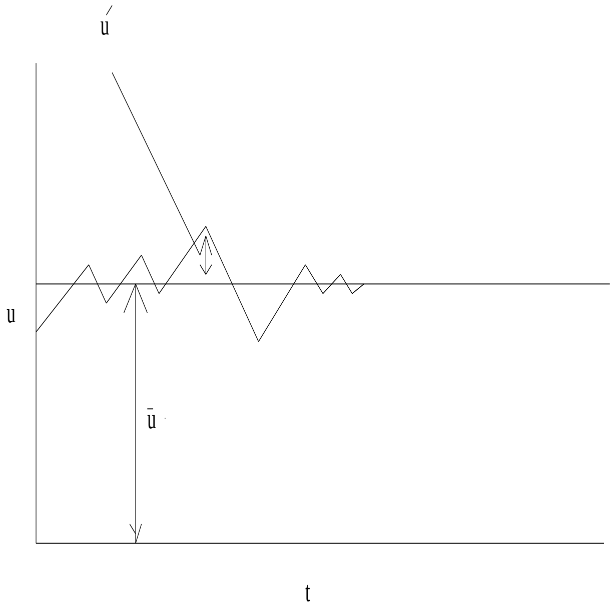
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H + \frac{1}{2}\rho u_i u_i - p) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j (H + \frac{1}{2}u_i u_i)) = -\frac{\partial}{\partial x_j}(q_j) + \rho u_i g_i - \frac{\partial}{\partial x_j}(\sigma_{ij} u_i) + S_{rad}. \tag{2.7}$$

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 (perfect gas) geldt $dH_{sens} = c_p dT$ waarbij T de temperatuur voorstelt en c_p is de specifieke warmte bij constante druk. Voor de energieflux geldt het volgende

$$q_j = -\frac{\lambda}{c_p}\frac{\partial H}{\partial x_j}, \tag{2.8}$$

waarbij λ de thermische conductiviteit voorstelt. De visceuse dissipatieterm en de gravitatieterm worden verwaarloosd. Tevens is de kinetische energie $\frac{1}{2}u_i u_i$ verwaarloosbaar ten opzichte van enthalpie H zolang het Mach getal ($Mach\ getal = \frac{snelheid\ van\ de\ stroming}{geluidsnelheid}$) klein is.
De vergelijking (2.7) wordt dan

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H - p) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j H) = -\frac{\partial}{\partial x_j}(\frac{\lambda}{c_p}\frac{\partial H}{\partial x_j}) + S_{rad}. \tag{2.9}$$



Figuur 2.2: Turbulente stroming

2.5 Turbulente stromingen

Binnen de stromingsleer zijn er twee typen stromingen te onderscheiden: laminair en turbulent. De karakteristieke eigenschappen van beide stomingstypen zijn:

- Laminair: gelaagd, glad en geordend,
- Turbulent: fluctuerend en chaotisch.

In een turbulente stroming, is men in het algemeen geinteresseerd in het gemiddelde van een variabele ϕ over een tijdsinterval [0,T]. Als uitgangspunt stellen we dat in een turbulente stroming een instantane variabele ϕ gesplitst kan worden in een gemiddelde plus een fluctuatie. Neem als voorbeeld de snelheidscomponent u dan geldt $u = \overline{u} + u'$ waarbij de middelingsoperator wordt aangegeven met een streep boven de variabele en een fluctuatie wordt aangegeven met een accent zie figuur (2.2). Deze splitsing wordt meestal de Reynoldsdecompositie genoemd. Deze middelingsoperator voldoet aan de volgende regels (zie [2]):

$$\overline{f+g} = \overline{f}+\overline{g}, \tag{2.10}$$
$$\overline{\alpha f} = \alpha\overline{f}, \tag{2.11}$$
$$\overline{\frac{\partial f}{\partial s}} = \frac{\partial \overline{f}}{\partial s}, \tag{2.12}$$
$$\overline{\overline{f}g} = \overline{f}\overline{g}. \tag{2.13}$$

Hierin zijn f en g fluctuerende grootheden en α is een constante. Op basis van (2.10-2.13) kunnen we de volgende relaties afleiden: $\overline{u'} = 0$, $\overline{\overline{u}} = \overline{u}$ en $\overline{\overline{f}\overline{g}} = \overline{f}\overline{g}$
Definitie van de Reynoldsdecompositie voor de variabele ϕ luidt

$$\phi(\underline{x}, t) = \overline{\phi}(\underline{x}) + \phi'(\underline{x}, t), \tag{2.14}$$

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

$$\overline{\phi}(\underline{x}) = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T \phi(\underline{x}, t)ds, \tag{2.15}$$

waarbij T de middelingstijd voorstelt.

2.6 Bewegingsvergelijkingen voor turbulente stromingen

Om de bewegingsvergelijkingen voor een turbulente stroming te vinden, definiëren we

$$u_i = \overline{u_i} + u_i', \tag{2.16}$$
$$\rho = \overline{\rho} + \rho'. \tag{2.17}$$

Als wij (2.16-2.17) in de bewegingsvergelijking (2.3-2.4) substitueren dan volgt

Behoud van massa

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}+\rho') + \frac{\partial}{\partial x_j}((\overline{\rho}+\rho')(\overline{u_i}+u_i')) = 0. \tag{2.18}$$

Als we nu de fluctuaties van de dichtheid ρ' in (2.18) verwaarlozen dan volgt

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}u_i') = 0. \tag{2.19}$$

Als we nu het Reynoldsgemiddelde van (2.19) nemen dan volgt de vergelijking voor massabehoud in een turbulente stroming

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\bar{u}_i) = 0. \tag{2.20}$$

Navier-Stokes vergelijkingen

De Navier-Stokes vergelijkingen voor een turbulente stroming worden:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\bar{u}_i\bar{u}_j + \overline{\rho}\overline{u_i'u_j'}) = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\sigma_{ij}}) + \overline{\rho}g_i, \tag{2.21}$$

waarbij

$$\overline{\sigma_{ij}} = \mu(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i}) - \frac{2}{3}\mu\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j}\delta_{ij}. \tag{2.22}$$

2.7 $(k - \epsilon)$ model

Door het toepassen van de Reynoldsdecompositie hebben we in de turbulente vergelijking nieuwe onbekenden $(\overline{\rho}\overline{u_i'u_j'})$ gecreëerd, de zogenaamde Reynold stress termen. Nu zijn er meer onbekenden dan het aantal vergelijkingen. Om deze onbekenden te bepalen is een turbulentie model nodig. Welk turbulentie model gebruikt wordt hangt mede af van het probleem. Wij kiezen voor modellen waarbij tenminste de turbulente kinetische energie k en de de dissipatie ervan ϵ afgeschat worden. Voor de Reynoldstressterm gebruiken we de volgende uitdrukking (zie [3]):

$$\overline{\rho}\overline{u_i'u_j'} = -\mu_t(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j}) + \frac{2}{3}\overline{\rho}k\delta_{ij}, \tag{2.23}$$

waarbij $k = \frac{1}{2}\overline{u_i'u_j'}$ de turbulente kinetische energie voorstelt. De turbulente viscositeit is:

$$\mu_t = \frac{C_\mu \overline{\rho} k^2}{\epsilon}, \tag{2.24}$$

waarin C_μ een empirische constante is en ϵ is de dissipatie van turbulente kinetische energie. ϵ is gedefinieerd als:

$$\epsilon = \frac{\mu}{\overline{\rho}}(\overline{\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\frac{\partial u_i'}{\partial x_j}}). \tag{2.25}$$

Om de onbekende, Reynoldstermen te bepalen moeten k en ϵ bekend zijn. Hiervoor zijn twee extra vergelijkingen nodig:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\bar{u}_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j}((\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k})\frac{\partial k}{\partial x_j}) + P_k - \overline{\rho}\epsilon, \tag{2.26}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho}\epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho}\bar{u}_j \epsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j}((\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon})\frac{\partial \epsilon}{\partial x_j}) + (C_{\epsilon 1}P_k - C_{\epsilon 2}\overline{\rho}\epsilon)\frac{\epsilon}{k}, \tag{2.27}$$

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 en deze wordt gegeven door

$$P_k = (\mu_t(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i}) - \frac{2}{3}\overline{\rho}k\delta_{ij})\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j}. \tag{2.28}$$

Het blijkt dat als dichtheidscorrelaties niet verwaarloosbaar zijn in turbulente stromingen handiger is om de Favre decompositie te gebruiken. Er onstaan dan geen extra correlaties in de convectie termen. In X-stream is momenteel slechts de Reynoldsdecompositie toegepast.

2.7.1 Rand- en beginvoorwaarden

Voor het oplossen van de partiële differentiaal vergelijkingen dienen we voor de stationaire problemen over randvoorwaarden te beschikken. Voor de niet-stationaire problemen komen er beginvoorwaarden bij. Het opstellen van de juiste voorwaarden is belangrijk. Algemene regels zijn niet te geven, men kan zich het beste in het fysische probleem afvragen wat er nodig is, wil het probleem fysisch goed gesteld zijn. Een aantal veel voorkomende randvoorwaarden, die opgelegd kunnen worden voor een variabele ϕ zijn Dirichlet- en Neumann randvoorwaarden.
randvoorwaarden

- Dirichlet: $\phi = f$,
- Neumann: $(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_j})n_j = f$,
- Voor een niet meebewegend randoppervlak geldt: voor de tangentiële snelheid geldt $u_t = 0$ en is bekend als no-slip voorwaarde. Voor de normale snelheid geldt $u_n = 0$ en is bekend als no-flow voorwaarde.

beginvoorwaarden
Voor de beginvoorwaarden moeten we de waarde op tijd t_0 kennen ofwel $\phi(t_0) = \phi_0$.

2.7.2 Wandfunctie

De wandfunctie gebruiken we als randvoorwaarden voor de turbulente kinetische energie k en de dissipatie ϵ. Direct naast de wand in een zeer dunne laag, de grenslaag, zijn de aanames voor het turbulentie model in het buitengebied niet meer geldig. Daarnaast neemt de snelheid zeer snel af tot nul aan de wand. Voor de wandfunctie beschouwen we de stroming in het wandgebied waarin de parallele richting en de normaalrichting aangegeven zijn met x respectievelijk y. Hierbij kan de stroming opgevat worden als één-dimensionale Couette-stroming met snelheid U in de x-richting (zie [3]). In vergelijkingsvorm :

$$\frac{\partial}{\partial y}(\mu + \mu_t)\frac{\partial U}{\partial y} = 0 \qquad voor \;\; y > 0. \tag{2.29}$$

waarbij μ en μ_t de moleculaire dynamische, respectievelijk, de turbulente viscositeit zijn. We definieren de wandschuifspanning τ_ω door :

$$\tau_\omega = (\mu + \mu_t)\frac{\partial U}{\partial y} \qquad op \;\; y = 0. \tag{2.30}$$

Uit de vergelijking (2.30) volgt :

$$\frac{\partial U}{\partial y} = \frac{\tau_\omega}{\mu + \mu_t}. \tag{2.31}$$

We definiëren een zogenaamde wrijvingssnelheid U^*, een dimensieloze snelheid U^+ en een dimensieloze afstand tot de wand y^+ :

$$U^* = \sqrt{\frac{\tau_\omega}{\rho}}, \tag{2.32}$$

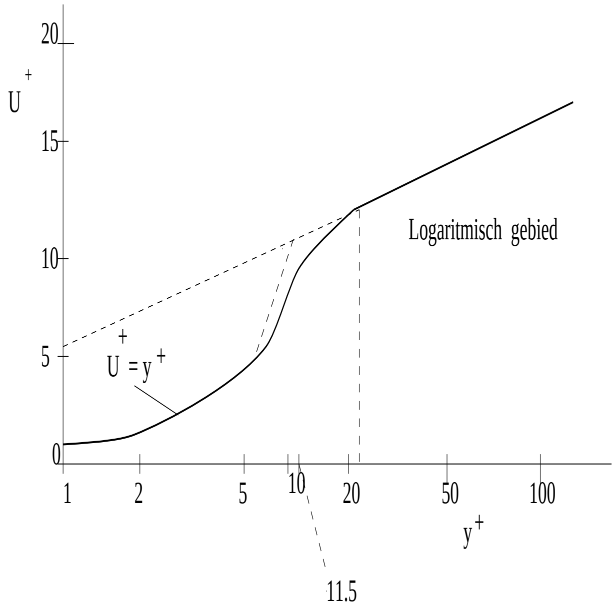
$$U^+ = \frac{U}{U^*}, \tag{2.33}$$

$$y^+ = \frac{\rho y U^*}{\mu}. \tag{2.34}$$

Substitutie van (2.33) en (2.34) in (2.31) resulteert in de volgende dimensieloze vergelijking :

$$\frac{\partial U^+}{\partial y^+} = \frac{\mu}{\mu + \mu_t}. \tag{2.35}$$

We kunnen μ_t schatten met behulp van de zogenaamde Prandtl-mengweg hypothese:



Figuur 2.3: De grenslaag

$$\mu_t = \rho l_m^2 |\frac{\partial U}{\partial y}|. \tag{2.36}$$

waarbij l_m de mengweg is en deze is gedefinieerd door $l_m = k_v y$ met $k_v = 0.42$ en is bekend als de Karman constante. We kunnen μ_t uitdrukken in termen van dimensieloze variabelen U^+ en y^+ door (2.34) en (2.34) te gebruiken. Het resultaat is :

$$\mu_t = \mu k_v^2 (y^+)^2 |\frac{\partial U^+}{\partial y^+}|. \tag{2.37}$$

Het wandgebied waarin vergelijking (2.35) geldig is, kan opgedeeld worden in twee sublagen, de logaritmische en de visceuze laag, zie figuur (2.3).
De logaritmische sublaag is het deel van het gebied waarin de moleculaire dynamische viscositeit μ te verwaarlozen is ten opzichte van de turbulente viscositeit μ_t. Dus de vergelijking (2.35) wordt:

$$\frac{\partial U^+}{\partial y^+} = \frac{\mu}{\mu_t}. \tag{2.38}$$

Substitutie van (2.37) in vergelijking (2.38) geeft :

$$k_v^2 (y^+)^2 |\frac{\partial U^+}{\partial y^+}| \frac{\partial U^+}{\partial y^+} = 1. \tag{2.39}$$

De vergelijking (2.39) heeft de volgende oplossing :

$$U^+ = \frac{1}{k_v} ln(Ey^+) \qquad \text{voor } \; y^+ \geq 11.5. \tag{2.40}$$

waarbij E=9.8 een integratie constante is. De waarde van E is experimenteel bepaald. De viskeuze laag is het gebied vlakbij de wand waarin de turbulente viscositeit μ_t te verwaarlozen is ten opzichte van de viscositeit μ. In dit geval wordt de vergelijking (2.35) :

$$\frac{\partial U^+}{\partial y^+} = 1. \tag{2.41}$$

De vergelijking lossen we op met de randvoorwaarde $U^+ = 0$ voor $y^+ = 0$ en we krijgen

$$U^+ = y^+ \qquad voor \;\; y^+ \leq 11.5. \tag{2.42}$$

In het wandgebied nemen we aan dat er een lokaal evenwicht tussen de produktie en de dissipatie van turbulente kinetische energie is. Dit betekent dat in vergelijking (2.26) van het $(k-\epsilon)$-turbulentie model de convectie-diffusie termen te verwaarlozen zijn ten opzichte van $P_k - \rho\epsilon$. Aangezien de Couette-stroming stationair is, verdwijnt $\frac{\partial}{\partial t}(\rho k)$ ook uit de vergelijking (2.26). Hieruit volgt :

$$P_k - \rho\epsilon = 0, \tag{2.43}$$

waarbij de produktie term P_k bepaald kan worden door vergelijking (2.28) te beschouwen voor een Couette-stroming:

$$P_k = \mu_t (\frac{\partial U}{\partial y})^2. \tag{2.44}$$

Als wij de vergelijking (2.44) en (2.37) in (2.43) invullen en vervolgens de dimensieloze variabelen U^+ en y^+, dan krijgen we :

$$\epsilon = (\frac{\rho}{\mu})(k_v y^+)^2 (U^*)^4 |\frac{\partial U^+}{\partial y^+}| (\frac{\partial U^+}{\partial y^+})^2. \tag{2.45}$$

Substitutie van (2.37) en (2.45) in (2.24) dan volgt :

$$k = (c_\mu)^{-\frac{1}{2}} (k_v y^+)^2 (U^*)^2 (\frac{\partial U^+}{\partial y^+})^2. \tag{2.46}$$

In het volgende hoofdstuk zullen we het discretiseren van de Navier-Stokes vergelijkingen beschrijven.

Hoofdstuk 3

Discretisatie van de Navier-Stokes vergelijkingen

3.1 Discretisatie

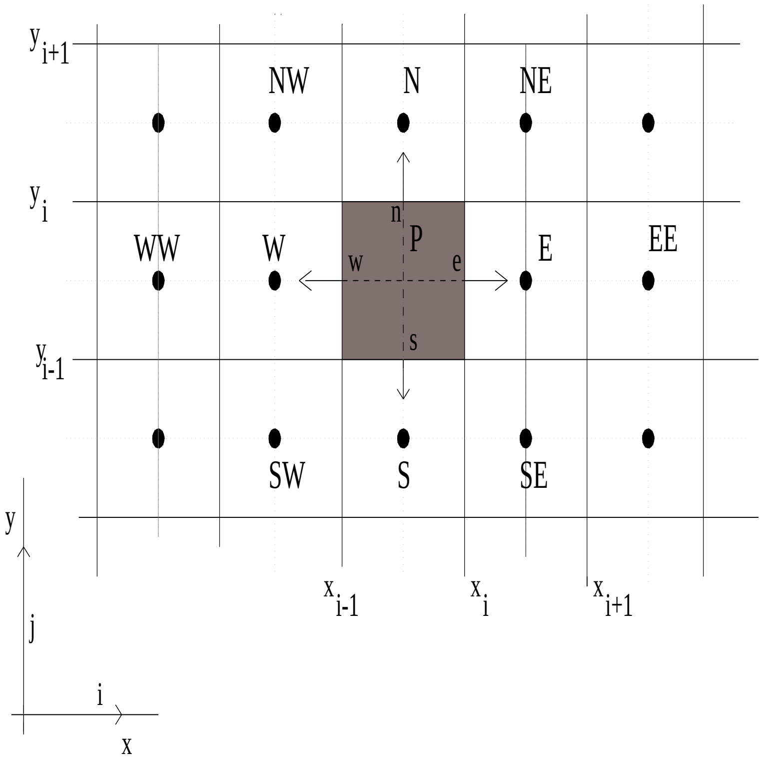
Vaak is het niet mogelijk de vergelijkingen (impulsbalans, massabalans, energiebalans enz.) zodanig te vereenvoudigen dat een analytische of benaderende oplossing gevonden kan worden. De vereenvoudiging is niet mogelijk omdat bijvoorbeeld alle termen in de drie-dimensionale transportvergelijkingen van belang zijn en bovendien zijn deze vergelijkingen gekoppeld door bijvoorbeeld een temperatuur afhankelijke stofeigenschap zoals viscositeit en dichtheid. Dus moet er naar een ander manier gezocht worden om tot een oplossing van het probleem te komen. Een mogelijkheid is om deze problemen numeriek op te lossen. Er zijn een aantal methoden bekend:

- Eindige Elementen Methode (EEM),
- Eindige Differentie Methode (EDM),
- Eindige Volume Methode (EVM).

In dit verslag wordt de EVM gehanteerd. Alleerst dient vastgesteld te worden wat de aard van het rooster moet zijn dat gebruikt zal gaan worden. Er zijn nogal wat mogelijkheden: cilindrisch, orthogonaal of niet orthogonaal, twee of drie dimensies. In X-stream wordt gebruik gemaakt van een drie-dimensionaal niet orthogonaal rooster. We beschouwen eerst het orthogonale rooster.

3.1.1 Orthogonaal rooster

Het drie-dimensionale gebied, waarop de oplossing van een probleem gevonden moet worden, wordt in een eindige aantal control volumes (Cv's)



Figuur 3.1: Het orthogonale rekenrooster

verdeeld zie figuur (3.1) voor een twee-dimensionaal gebied. Ieder Cv bevat één roosterpunt P in het centrum. In dit punt worden de onbekenden ϕ (de snelheidscomponenten u,v,w, de druk p en de temperatuur T) bepaald. Hier wordt gebruik gemaakt van het zogenaamd 'collocated grid arrangement', (zie [4]). Elke Cv is omsloten door een aantal zijvlakken S_k, zes in 3D en vier in 2D. Deze zijvlakken zijn aangegeven ten opzichte van het centrum van P met e(ast), w(est), n(orth), s(outh), t(op), b(ottom) zie figuur (3.1). De algemene vorm van de vergelijkingen in hoofdstuk (2) is:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla(\rho v\phi) - \nabla\cdot(\Gamma_\phi\nabla\phi) = S_\phi. \tag{3.1}$$

We beschouwen een control volume Cv met volume $V = \Delta x\Delta y\Delta z$. We integreren over deze dit Control Volume:

$$\int_V \frac{\partial\rho\phi}{\partial t}dV + \int_V \nabla(\rho v\phi)dV = \int_V \nabla\cdot(\Gamma_\phi\nabla\phi)dV + \int_V S_\phi dV. \tag{3.2}$$

Het divergentietheorema van Gauss toepassen op (3.2) geeft:

$$\int_V \frac{\partial \rho\phi}{\partial t} dV = -\int_S (\rho v \cdot \phi) dS + \int_S \Gamma_\phi \nabla\phi \cdot n dS + \int_V S_\phi dV, \tag{3.3}$$

waarbij S de rand van het Cv is en n is de eenheidnormaal op S. De netto flux door een Cv is te schrijven als de som van de totale flux die door de zijvlakken stroomt.

$$\int_S f dS = \sum_k \int_{S_k} f dS, \tag{3.4}$$

waarbij f een component is van de convectieterm $(\rho\phi v \cdot n)$ of een component van de diffusieterm $(\Gamma_\phi \nabla\phi \cdot n)$. We concentreren ons op zijvlak 'e' van één Cv. Om de integraal $\int_{S_e} f dS$ exact te bepalen, moeten we f overal op het zijvlak 'e' weten. Aangezien deze waarden niet bekend zijn zullen er interpolatie schema's gebruikt worden. De eenvoudigste benadering is de midpunt regel:

$$F_e = \int_{S_e} f dS \approx f_e \int_{S_e} dS. \tag{3.5}$$

Om de convectie term (f^c) en de diffusieterm (f^d) te berekenen, nemen we aan dat de snelheidscomponenten u,v,w en ρ en Γ bekend zijn. Er zullen twee interpolatie schema's beschreven worden, maar we definiëren eerst het rooster Peclet getal (Pe): $Pe = \frac{\rho_e u_e \Delta x_e}{\Gamma_\phi}$. Numerieke oscillaties kunnen optreden als Pe ¿ 2 met het centrale differentieschema.

$\underline{Upwind\ Differentie\ Schema\ (UDS):}$

$\phi_e = \phi_P$ als $(v \cdot n)_e \geq 0$

en

$\phi_e = \phi_E$ als $(v \cdot n)_e < 0$

- voordeel is dat met dit schema oscillaties voorkomen worden, omdat er niet aan de voorwaarde voor het Peclet getal voldaan hoet te worden (zie [5]).
- nadeel is dat dit schema minder nauwkeurig is.

$\underline{Central\ Differentie\ Schema\ (CDS):}$

Een andere benadering van het zijvlak 'e' is lineaire interpolatie tussen de buren van het centrum P.

$$\phi_e = \phi_E \lambda_e + \phi_P (1 - \lambda_e). \tag{3.6}$$

met

$$\lambda_e = \frac{x_e - x_P}{x_E - x_P}. \tag{3.7}$$

- nadeel is dat met dit schema oscillaties gegenereerd kunnen worden, omdat voor grote stapgrootte Δx_e niet aan de voorwaarde $Pe \leq 2$ voldaan is.
- voordeel is dat dit schema nauwkeurig is ten opzichte van UDS.

Het is ook mogelijk om beide schema's (UDS en CDS) te combineren. Dit geeft:

$$\phi_e = \phi_e^{UDS} + \beta(\phi_e^{CDS} - \phi_e^{UDS})^{vorige}. \tag{3.8}$$

waarbij $0 \leq \beta \leq 1$ en β is de blending factor. De term met superscript 'vorige' is afkomstig van de vorige iteratie. Dit schema genereert bij een geschikte β geen oscillaties en is nauwkeuriger dan UDS. Dit schema staat bekend als deferred correctie schema. Het schema (3.8) is met de schema's UDS en CDS aan de hand van een één-dimensionale convectie-diffusie vergelijking bekeken. De resultaten zijn in appendix A weergegeven.
Voor de afgeleide in f^d wordt de benadering met CDS:

$$(\frac{\partial \phi}{\partial x})_e \approx \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P}. \tag{3.9}$$

Voor de bronterm hebben we :

$$Q_p = \int_V S_\phi dV \approx (S_C + S_P \phi_P)\Delta V_P. \tag{3.10}$$

waarbij de bronterm gelineariseerd is.
We zullen deze interpolatie schema's voor een twee-dimensionale stationaire convectie-diffusie vergelijking (3.3) uitschrijven.

$$\int_S (\rho v \cdot \phi) dS = \int_S \Gamma_\phi \nabla \phi \cdot n dS + \int_V S_\phi dV. \tag{3.11}$$

<u>De convectie term</u>

De convectie term voor de variabele ϕ door het zijvlak 'e' kunnen we schrijven als:

$$F_e^c = \int_{S_e} \rho \phi v \cdot n dS \approx \dot{m}_e \phi_e. \tag{3.12}$$

waarbij $\dot{m}_e$ de massaflux die door het zijvlak 'e' stroomt en de variabele ϕ_e is de snelheidsvector op het zijvlak 'e'. We kunnen de flux door het zijvlak

'e' schrijven als: $\dot{m}_e = \int_{S_e} \rho v \cdot n dS = (\rho u)_e \Delta y$, waarbij u de snelheid is in de x-richting op zijvlak 'e'.
Benaderen van ϕ_e in (3.12) met UDS geeft:

$$F_e^c = max(\dot{m}_e, 0)\phi_P + min(\dot{m}_e, 0)\phi_E, \tag{3.13}$$

Op analoge wijze volgt voor de andere zijvlakken w(est),n(orth) en s(outh):

$$F_w^c = max(\dot{m}_w, 0)\phi_W + min(\dot{m}_w, 0)\phi_P, \tag{3.14}$$

$$F_n^c = max(\dot{m}_n, 0)\phi_P + min(\dot{m}_n, 0)\phi_N, \tag{3.15}$$

$$F_s^c = max(\dot{m}_s, 0)\phi_S + min(\dot{m}_s, 0)\phi_P. \tag{3.16}$$

Benaderen van ϕ_e in (3.12) met CDS geeft

$$F_e^c = \dot{m}_e(1 - \lambda_e)\phi_P + \dot{m}_e \lambda_e \phi_E, \tag{3.17}$$

waarbij λ_e gedefinieerd zoals in (3.7). Op analoge wijze volgt voor de andere randen (w(est),n(orth) en s(outh)):

$$F_w^c = \dot{m}_w(1 - \lambda_w)\phi_P + \dot{m}_w \lambda_w \phi_W, \tag{3.18}$$

$$F_n^c = \dot{m}_n(1 - \lambda_n)\phi_P + \dot{m}_n \lambda_n \phi_N, \tag{3.19}$$

$$F_s^c = \dot{m}_s(1 - \lambda_s)\phi_P + \dot{m}_s \lambda_s \phi_S. \tag{3.20}$$

De convectie term in (3.11) kunnen we schrijven als:

*UDS interpolatie geeft de volgende coefficienten :

$$A_P^c \phi_P = A_E^c \phi_E + A_W^c \phi_W + A_N^c \phi_N + A_S^c \phi_S. \tag{3.21}$$

met

$$A_E^c = min(\dot{m}_e, 0), \tag{3.22}$$
$$A_W^c = min(\dot{m}_w, 0), \tag{3.23}$$
$$A_N^c = min(\dot{m}_n, 0), \tag{3.24}$$
$$A_S^c = min(\dot{m}_s, 0), \tag{3.25}$$
$$A_P^c = (A_E^c + A_W^c + A_N^c + A_S^c). \tag{3.26}$$

*CDS interpolatie:
Er geldt:

$$F_e^c + F_w^c + F_s^c + F_n^c = (\sum_c \dot{m}_c)\phi_P - (\sum_c \dot{m}_c \lambda_c)\phi_P + \\ + (\lambda_e \dot{m}_e \phi_E + \lambda_w \dot{m}_w \phi_W + \lambda_n \dot{m}_n \phi_N + \lambda_s \dot{m}_s \phi_S), \tag{3.27}$$

waarbij c=e, w, n, s. In vergelijking (3.27) is de eerste term in het rechterlid nul en dat volgt uit de wet van massabehoud. De vergelijking (3.27) wordt korter geschreven als:

$$\sum_c F_c = -A_P^c \phi_P + \sum_c A_{nb}^c \phi_{nb}, \tag{3.28}$$

waarbij

$$A_E^c = \dot{m}_e \lambda_e, \tag{3.29}$$
$$A_W^c = \dot{m}_w \lambda_w, \tag{3.30}$$
$$A_N^c = \dot{m}_n \lambda_n, \tag{3.31}$$
$$A_S^c = \dot{m}_s \lambda_s, \tag{3.32}$$
$$A_P^c = (A_E^c + A_W^c + A_N^c + A_S^c), \tag{3.33}$$

<u>De diffusie term</u>

Voor de diffusie term krijgen we:

$$F_e^d = \int_{S_e} \Gamma_\phi grad\phi \cdot n dS \approx (\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x})_e \Delta y. \tag{3.34}$$

De afgeleide op de zijvlak 'e' bepalen we met CDS dan volgt:

$$F_e^d \approx \frac{\Gamma_\phi \Delta y}{x_E - x_P}(\phi_E - \phi_P), \tag{3.35}$$

De diffusie termen voor de andere zijvlakken gaat op analoge wijze:

$$F_w^d \approx \frac{\Gamma_\phi \Delta y}{x_P - x_W}(\phi_P - \phi_W), \tag{3.36}$$

$$F_n^d \approx \frac{\Gamma_\phi \Delta x}{x_N - x_P}(\phi_N - \phi_P), \tag{3.37}$$

$$F_s^d \approx \frac{\Gamma_\phi \Delta x}{x_P - x_S}(\phi_P - \phi_S). \tag{3.38}$$

De diffusie term in (3.11) kunnen we schrijven als:

$$A_P^d \phi_P = A_E^d \phi_E + A_W^d \phi_W + A_N^d \phi_N + A_S^d \phi_S \tag{3.39}$$

met

$$A_E^d = -\frac{\Gamma_\phi \Delta y}{x_E - x_P}, \tag{3.40}$$

$$A_W^d = -\frac{\Gamma_\phi \Delta y}{x_P - x_W}, \tag{3.41}$$

$$A_N^d = -\frac{\Gamma_\phi \Delta x}{x_N - x_P}, \tag{3.42}$$

$$A_S^d = -\frac{\Gamma_\phi \Delta x}{x_P - x_S}, \tag{3.43}$$

$$A_P^d = (A_E^d + A_W^d + A_N^d + A_S^d). \tag{3.44}$$

<u>De bronterm</u>

Voor de bronterm geldt:

$$Q_p = \int_S S_\phi dS \approx (S_C + S_P \phi_P)\Delta V_P = (S_C + S_P \phi_P)\Delta x \Delta y. \tag{3.45}$$

waarbij de bronterm gelineariseerd is.
De convectie-diffusie vergelijking in (3.11) kunnen we als volgt schrijven:

$$A_P \phi_P = A_E \phi_E + A_W \phi_W + A_N \phi_N + A_S \phi_S + b_P \tag{3.46}$$

met

$$A_E = A_E^c + A_E^d, \tag{3.47}$$

$$A_W = A_W^c + A_W^d, \tag{3.48}$$

$$A_N = A_N^c + A_N^d, \tag{3.49}$$

$$A_S = A_S^c + A_S^d, \tag{3.50}$$

$$A_P = A_P^c + A_P^d. \tag{3.51}$$

Het rechterlid b_P bevat de termen, die expliciet zijn bepaald. Het rechterlid b_P is dan te schrijven als:

$$b_P = S_C \Delta x \Delta y + b_e + b_w + b_s + b_n. \tag{3.52}$$

waarbij :

$$b_e = \beta(F_e^{CDS} - F_e^{UDS})^{vorige}, \tag{3.53}$$

$$b_w = \beta(F_w^{CDS} - F_w^{UDS})^{vorige}, \tag{3.54}$$

$$b_n = \beta(F_n^{CDS} - F_n^{UDS})^{vorige}, \tag{3.55}$$

$$b_s = \beta(F_s^{CDS} - F_s^{UDS})^{vorige}. \tag{3.56}$$

De vergelijking (3.46) wordt korter geschreven als :

$$A_P\phi_P = \sum_{nb} A_{nb}\phi_{nb} + b_P, \tag{3.57}$$

waarbij nb de buurpunten (E, W, S, N) van het punt P.

3.1.2 Niet-orthogonaal rooster

In het geval dat het rekendomein van de stroming gecompliceerd is, wordt vaak gebruik gemaakt van een niet-orthogonaal rooster. De voordelen van zo'n rooster zijn ondermeer:

- Het kan makkelijk aangepast worden aan elk rekendomein,
- Het inbedden van de randvoorwaarden in het rekendomein is makkelijk te implementeren.

Maar er zijn ook nadelen :

- De gediscretiseerde vergelijkingen, die wij uiteindelijk willen oplossen bevatten extra termen, die meer rekenwerk vergen en deze termen brengen implementatie moeilijkheden met zich mee,
- Een belangrijke nadeel is dat de effecten van een niet orthogonaal rooster numerieke oscillaties kunnen genereren (zie [4], blz. 224-228).

We zullen om oscillaties te elimineren, gebruik maken van deferred correctie. We beschouwen nu de tijdsafhankelijke convectie-diffusie vergelijking (3.1) in 3D.

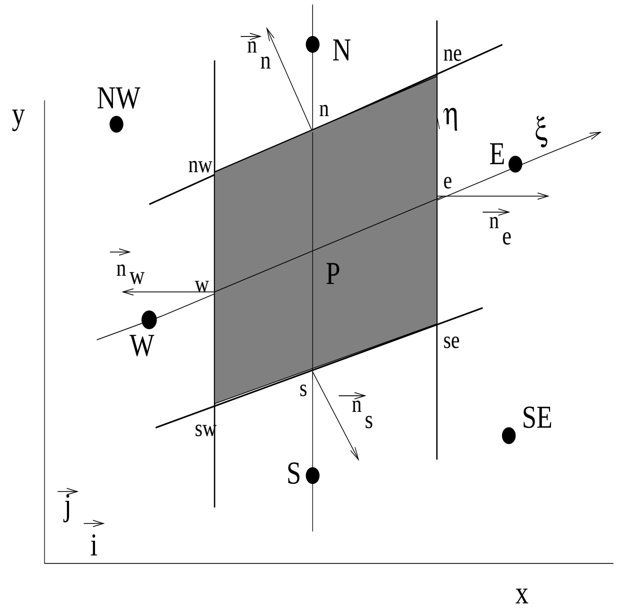
<u>De diffusie term</u>
De diffusie flux door de zijvlak 'e' wordt met midpuntregel als volgt benaderd:

$$F_e^d = \int_{S_e} \Gamma_\phi \nabla\phi \cdot n dS \approx (\Gamma_\phi \nabla\phi \cdot n)_e S_e. \tag{3.58}$$

De vergelijking (3.58) voor een niet-orthogonaal rooster kunnen we door gebruik te maken van deferred correctie als volgt schrijven:

$$F_e^d = \Gamma_\phi S_e (\frac{\partial\phi}{\partial\xi})_e + \Gamma_\phi S_e [\overline{(\frac{\partial\phi}{\partial n})_e} - \overline{(\frac{\partial\phi}{\partial\xi})_e}]^{vorige}. \tag{3.59}$$

waarbij n is de normaal vector op het oppervlak S_e en ξ is de richting van de vector PE, zie figuur (3.2). De eerste term van het rechterlid in (3.59) geeft



Figuur 3.2: Een niet-orthogonaal controle volume

de matrixcoefficienten. De tweede term, deferred correctie, aangegeven met superscript 'vorige' is afkomstig van de vorige iteratie en deze term wordt in het rechterlid b_P gestopt.
De deferred correctie wordt met de geinterpoleerde gradiënt van de variabele ϕ op zijvlak 'e' bepaald, namelijk

$$\overline{(\frac{\partial\phi}{\partial n})_e} = \overline{(\nabla\phi)_e} \cdot n_e, \tag{3.60}$$

$$\overline{(\frac{\partial\phi}{\partial\xi})_e} = \overline{(\nabla\phi)_e} \cdot \frac{PE}{|PE|}, \tag{3.61}$$

De uiteindelijke uitdrukking voor de benadering van de diffusieflux, waarbij de eerste term in (3.59) met een centraal differentie schema wordt benaderd:

$$F_e^d = \Gamma_\phi S_e \frac{\phi_E - \phi_P}{|PE|} + \Gamma_\phi S_e [\overline{(\nabla\phi)_e} \cdot n_e - \overline{(\nabla\phi)_e} \cdot \frac{PE}{|PE|}]^{vorige}. \tag{3.62}$$

Op analoge wijze worden de fluxen voor de andere zijvlakken bepaald.
<u>De convectie term</u>
De convectie flux van een variabele ϕ door zijvlak 'e', zie figuur (3.2) is te schrijven als:

$$F_e^c = \int_{S_e} \rho\phi v \cdot n dS \approx \dot{m}_e \phi_e. \tag{3.63}$$

waarbij $\dot{m}_e$ de massaflux door zijvlak 'e' en ϕ_e is het gemiddelde waarde van ϕ op zijvlak 'e'.
De massaflux is als volgt gedefinieerd :

$$\dot{m}_e = \int_{S_e} \rho v \cdot n dS \approx (\rho v \cdot n)_e S_e. \tag{3.64}$$

waarbij

$$n_e S_e = S_e^x i + S_e^y j. \tag{3.65}$$

De oppervlakten S_e^x en S_e^y zijn als volgt gedefinieerd :

$$S_e^x = (y_n - y_s)_e, \tag{3.66}$$

$$S_e^y = -(x_n - x_s)_e. \tag{3.67}$$

Het oppervlak S_e wordt:

$$S_e = \sqrt{(S_e^x)^2 + (S_e^y)^2}. \tag{3.68}$$

De massaflux door zijvlak 'e' wordt dan :

$$\dot{m}_e = \rho_e (u S_e^x + v S_e^y)_e. \tag{3.69}$$

waarbij u en v de snelheidscomponenten zijn in x-richting respectievelijk y-richting. We benaderen de variabele ϕ_e door:

$$\phi_e = \phi_e^{UDS} + \beta(\phi_e^{CDS} - \phi_e^{UDS})^{vorige}. \tag{3.70}$$

Op analoge wijze worden de fluxen door de andere zijvlakken benadert.

<u>De bronterm</u>
De bronterm wordt :

$$Q_p = \int_S S_\phi dS \approx (S_C + S_P \phi_P) \Delta V_P. \tag{3.71}$$

waarbij ΔV_P de volume van een Cv en deze volume is voor 2D als volgt gedefinieerd:

$$\Delta V = \frac{1}{2}[(r_{ne} - r_{sw}) \times (r_{nw} - r_{se})] = \frac{1}{2}[(x_{ne} - x_{sw})(y_{nw} - y_{se}) - (y_{ne} - y_{sw})(x_{ne} - x_{sw})]. \tag{3.72}$$

waarbij bijvoorbeeld r_{ne} de afstandsvector is van de oorsprong tot het punt ne.

Tijdsdiscretiseren

Voor de tijdsdiscretiseren wordt het volledige impliciete tijdsschema gebruikt.

$$\int_V \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV = (\phi_P - \phi_P^{t-\Delta t})\frac{\Delta V}{\Delta t}. \tag{3.73}$$

waarbij Δt de tijdstap is en $(t - \Delta t)$ duidt de vorige tijdsiteratie aan. Na het samenvoegen van de diffusie, convectie, bronterm en de tijdsafhankelijke term krijgen we een algebraische vergelijking

$$A_P \phi_P = \sum_{nb} A_{nb} \phi_{nb} + b_P \tag{3.74}$$

waarij de coefficienten A_P, A_{nb} en het rechterlid b_P zijn dan als volgt gedefinieerd :

$$A_E = \Gamma_\phi \frac{S_e}{|PE|} + min(\dot{m}_e, 0), \tag{3.75}$$

$$A_W = \Gamma_\phi \frac{S_w}{|PW|} + min(\dot{m}_w, 0), \tag{3.76}$$

$$A_N = \Gamma_\phi \frac{S_n}{|PN|} + min(\dot{m}_n, 0), \tag{3.77}$$

$$A_S = \Gamma_\phi \frac{S_s}{|PS|} + min(\dot{m}_s, 0), \tag{3.78}$$

$$A_T = \Gamma_\phi \frac{S_t}{|PT|} + min(\dot{m}_t, 0), \tag{3.79}$$

$$A_B = \Gamma_\phi \frac{S_b}{|PB|} + min(\dot{m}_b, 0), \tag{3.80}$$

$$A_P = A_E + A_W + A_N + A_S + A_T + A_B - S_P \Delta V_P + \frac{\Delta V}{\Delta t}. \tag{3.81}$$

Voor het rechterlid b_P bevat de termen die uit de vorige iteratie zijn bepaald en de gelineariseerde term van de bronterm ofwel :

$$b_P = S_C \Delta v_P + \frac{\Delta V}{\Delta t}\phi_P^{t-\Delta t} + b_e + b_w + b_n + b_s + b_t + b_b. \tag{3.82}$$

waarbij :

$$b_e = \Gamma_\phi S_e[\overline{(\nabla\phi)_e} \cdot n_e - \overline{(\nabla\phi)_e} \cdot \frac{PE}{|PE|}]\beta(F_e^{CDS} - F_e^{UDS}), \tag{3.83}$$

$$b_w = \Gamma_\phi S_w[\overline{(\nabla\phi)_w} \cdot n_w - \overline{(\nabla\phi)_w} \cdot \frac{PW}{|PW|}] + \beta(F_w^{CDS} - F_w^{UDS}) \tag{3.84}$$

$$b_n = \Gamma_\phi S_n[\overline{(\nabla\phi)_n} \cdot n_n - \overline{(\nabla\phi)_n} \cdot \frac{PN}{|PN|}] + \beta(F_n^{CDS} - F_n^{UDS}), \tag{3.85}$$

$$b_s = \Gamma_\phi S_s[\overline{(\nabla\phi)_s} \cdot n_s - \overline{(\nabla\phi)_s} \cdot \frac{PS}{|PS|}] + \beta(F_s^{CDS} - F_s^{UDS}), \tag{3.86}$$

$$b_t = \Gamma_\phi S_t[\overline{(\nabla\phi)_t} \cdot n_t - \overline{(\nabla\phi)_t} \cdot \frac{PT}{|PT|}] + \beta(F_t^{CDS} - F_t^{UDS}), \tag{3.87}$$

$$b_b = \Gamma_\phi S_b[\overline{(\nabla\phi)_b} \cdot n_b - \overline{(\nabla\phi)_b} \cdot \frac{PB}{|PB|}] + \beta(F_e^{CDS} - F_e^{UDS}). \tag{3.88}$$

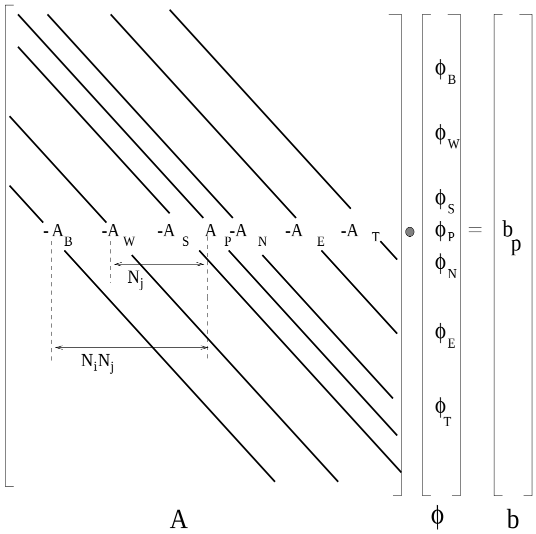
We kunnen (3.74) in matrix vector notatie schrijven. Stel dat het roosterpunt ϕ_P met lokale referentie overkomt met ϕ_l dan wordt de vergelijking (3.74)

$$\begin{aligned} A_{l,l-N_iN_j}\phi_{l-N_iN_j} + A_{l,l-N_j}\phi_{l-N_j} + A_{l,l-1}\phi_{l-1} + A_{l,l}\phi_l + \\ + A_{l,l+1}\phi_{l+1} + A_{l,l+N_j}\phi_{l+N_j} + A_{l,l+N_iN_j}\phi_{l+N_iN_j} = b_l. \end{aligned} \tag{3.89}$$

waarbij l de index is van één-dimensionale array, waarin de elementen van de vector ϕ zijn opgeslagen. Aan de hand van de onderstaande tabel kunnen we door middel van de roosterpunten (i,j,k) de index l achterhalen. Op deze manier, dus het opslaan van vijf vectoren in 2D of zeven vectoren in 3D van matrix A in een één-dimensionale array, besparen we op de geheugenruimte in de computer.

roosterpunt	*notatie*	*geheugenlokatie*
i, j, k	P	$l = (k-1)N_jN_i + (i-1)N_j + j$
$i-1, j, k$	W	$l - N_j$
$i, j-1, k$	S	$l - 1$
$i, j+1, k$	N	$l + 1$
$i+1, j, k$	E	$l + N_j$
$i, j, k-1$	B	$l - N_iN_j$
$i, j, k+1$	T	$l + N_iN_j$

De vergelijking (3.89) kunnen we voor alle roosterpunten schrijven als $A\phi = b_P$, waarbij A een matrix is en ϕ is een vector die de onbekenden bevat, zie figuur (3.3).



Figuur 3.3: Het stelsel vergelijkingen

Hoofdstuk 4

Numerieke methoden

4.1 SIP-solver

In hoofdstuk 3 hebben we het stelsel lineaire vergelijkingen verkregen, dat ontstaat is na het discretiseren van de Navier-Stokes vergelijkingen:

$$A\phi = b, \tag{4.1}$$

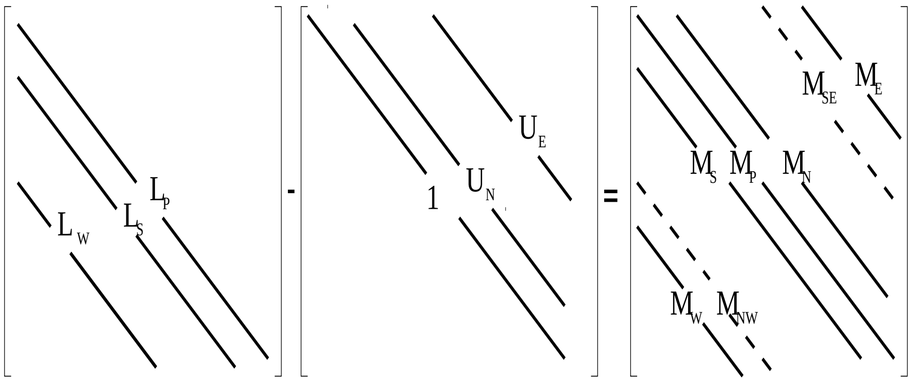
waarbij de matrix A ijl is, hetgeen inhoudt dat slechts enkele elementen van A niet nul zijn. Numerieke oplosmethoden voor (4.1) zullen deze eigenschappen moeten uitbuiten, daar de stelsels die in de praktijk voorkomen vaak zeer groot zijn. Voor de numerieke oplossing zijn verschillende directe methoden en iteratieve methoden beschikbaar. Bij een directe methode is het uitbuiten van ijlheid niet eenvoudig. Iteratieve methoden hebben de voorkeur bij zeer grote aantal onbekenden. De structuur van A biedt ons de mogelijkheid om iteratieve methoden efficïent te gebruiken.
Na n iteraties krijgen we een benaderende oplossing ϕ^n voor ϕ in (4.1). Invullen van ϕ^n in (4.1) houden we het residu r^n over :

$$A\phi^n = b - r^n. \tag{4.2}$$

De doelstelling is om met een iteratieve proces het residu r^n naar nul te drijven. Een veel gebruikte methode in CFD (<u>C</u>omputational <u>F</u>luid <u>D</u>ynamics) is de SIP methode (<u>S</u>trongly <u>I</u>mplictit <u>P</u>rocedure, zie [6]).
Een algemenere iteratieve methode voor (4.1) is :

$$M\phi^{n+1} = N\phi^n + b, \tag{4.3}$$

met $A = M - N$ en n is de n^{de} iteratie en $n = 0, 1, 2.........$
Hier zijn M en N ook ijle matrices. Als wij $M\phi^n$ van beide kanten van (4.3) aftrekken dan volgt :



Figuur 4.1: LU-onbinding van matrix M

$$M(\phi^{n+1} - \phi^n) = A\phi - A\phi^n = b - (M - N)\phi^n = r^n, \tag{4.4}$$

of

$$M\delta^{n+1} = r^n, \tag{4.5}$$

met

$$\delta^{n+1} = \phi^{n+1} - \phi^n, \tag{4.6}$$

De vergelijking (4.6) wordt de correctie of update genoemd. De term r^n is het residu en is voor de duidelijkheid gedefinieerd door:

$$r^n = b - (M - N)\phi^n. \tag{4.7}$$

We ontbinden de matrix M in L en U in een twee-dimensionaal probleem, zie figuur (4.1), waarbij de hoofddiagonaal van U enen bevat. Het produkt LU geeft twee extra diagonalen ten opzichte van de matrix A. Dit produkt leidt tot :

$$M^l_W = L^l_W, \tag{4.8}$$
$$M^l_{NW} = L^l_W U^{l-N_j}_N, \tag{4.9}$$
$$M^l_S = L^l_S, \tag{4.10}$$
$$M^l_P = L^l_W U^{l-N_j}_E + L^l_S U^{l-1}_N + L^l_P, \tag{4.11}$$
$$M^l_N = U^l_N L^l_P, \tag{4.12}$$
$$M_{SE} = L^l_S U^{l-1}_E, \tag{4.13}$$
$$M^l_E = U^l_E L^l_P, \tag{4.14}$$

waarbij l de index van de geheugenlokatie van de elementen van M in een één-dimensionale array. Om convergentie van (4.3) te versnellen, willen we L en U zodanig selecteren dat M erg veel op A lijkt. Er geldt :

$$(M\phi)_P = \sum_{nb} M_{nb}\phi_{nb} + M_{NW}\phi_{NW} + M_{SE}\phi_{SE}, \tag{4.15}$$

De laatste twee termen van (4.15) zijn de extra diagonalen. Matrix N bevat zeven niet nul diagonalen en heeft de zelfde srtruktuur als M. Matrix N bevat ook de twee extra diagonalen M_{NW} en M_{SE}. Om matrix A goed te benaderen met M, willen we de bijdrage van N in (4.3) bijna nul hebben, liefst nul, met andere woorden:

$$\sum_{nb} N_{nb}\phi_{nb} + M_{NW}\phi_{NW} + M_{SE}\phi_{SE} \approx 0. \tag{4.16}$$

Dit is mogelijk als de bijdrage van de twee extra diagonalen in (4.16) door de andere diagonalen geëlimineerd wordt. We schrijven nu (4.16) als:

$$M_{NW}(\phi_{NW} - \phi^*_{NW}) + M_{SE}(\phi_{SE} - \phi^*_{SE}) \approx 0, \tag{4.17}$$

waarbij ϕ^*_{NW} en ϕ^*_{SE} benaderigen zijn van ϕ_{NW} en ϕ_{SE}. Om (4.17) te realiseren moeten we ϕ^*_{NW} en ϕ^*_{SE} uitdrukken in de variabelen ϕ_{nb} met nb=W, E, S, N en P. Een mogelijke benadering voorgestelt door Stone is als volgt:

$$\phi^*_{NW} \approx \alpha(\phi_W + \phi_N - \phi_P), \tag{4.18}$$

$$\phi^*_{SE} \approx \alpha(\phi_S + \phi_E - \phi_P), \tag{4.19}$$

Hier is de parameter α een relexatiefactor en wordt om stabiliteit redenen $\alpha \leq 1$ gekozen. Voor $\alpha = 1$ zijn de benaderingen (4.18) en (4.19) lineair interpolaties in 2D. Het kiezen van optimale α is probleem afhankelijk en deze parameter wordt in de stromingsproblemen vaak 0.92 gekozen. Als wij (4.18) en (4.19) in (4.17) vullen dan volgt :

$$M_{NW}\phi_{NW} - \alpha M_{NW}(\phi_W + \phi_N - \phi_P) + M_{SE}\phi_{SE} - \alpha M_{SE}(\phi_S + \phi_E - \phi_P) \approx 0. \tag{4.20}$$

We stellen (4.16) gelijk aan (4.20) stellen dan volgt :

$$\begin{aligned}\sum_{nb} N_{nb}\phi_{nb} &\approx -\alpha M_{NW}(\phi_W + \phi_N - \phi_P) - \alpha M_{SE}(\phi_S + \\ &+ \phi_E - \phi_P) + M_{NW}\phi_{NW} + M_{SE}\phi_{SE}.\end{aligned} \tag{4.21}$$

We kunnen nu met de relatie $M\phi = A\phi + N\phi$ de elementen van L en U bepalen. Er geldt:

$$\sum_{nb} M_{Nb}\phi_{nb} = \sum_{nb} A_{nb}\phi_{nb} + \alpha M_{NW}(\phi_W + \phi_N - \phi_P) + \\ + \alpha M_{SE}(\phi_S + \phi_E - \phi_P), \tag{4.22}$$

De elementen van de matrices L en U behoeven we slechts een keer te bepalen en deze zijn door gebruik te maken van (4.10 - 4.14):

$$L_W = A_W - \alpha M_{NW} = A_W - \alpha L_W U_N, \tag{4.23}$$

Uit (4.23) volgt de uitdrukking voor L_W, namelijk:

$$L^l_W = -\frac{A^l_W}{1 + \alpha U_N^{l-N_j}}, \tag{4.24}$$

Op analoge wijze volgen de andere termen :

$$L^l_S = -\frac{A^l_S}{(1 + \alpha U_E^{l-1}}, \tag{4.25}$$

$$L^l_P = A^l_P + \alpha(L^l_W U_N^{l-N_j} + L^l_S U_E^{l-1}) - L^l_W U_E^{l-N_j} - L^l_S U_N^{l-1}, \tag{4.26}$$

$$U^l_N = \frac{A^l_N - \alpha L^l_W U_N^{l-N_j}}{L^l_P}, \tag{4.27}$$

$$U^l_E = \frac{A^l_E - \alpha L^l_S U_E^{l-1}}{L^l_P}. \tag{4.28}$$

Nu kunnen we (4.5) op lossen.

$$U\delta^{n+1} = L^{-1}r^n = z^n, \tag{4.29}$$

waarbij z^n een hulpvector is.
De elementen van z^n in (4.29) zijn te bepalen door :

$$z^l = (r_l - L^l_S z^{l-1} - L^l_W z^{l-N_j})\frac{1}{L^l_P}. \tag{4.30}$$

Na het bepalen van z in (4.30), kunnen we de correctie bepalen door $\delta^{n+1} = U^{-1}z^n$ op te lossen. Er volgt:

$$\delta^l = (z^l - U^l_N \delta^{l+1} - U^l_E \delta^{l+N_j}). \tag{4.31}$$

In figuur (4.2) is aan de hand van een Flowdiagram de SIP methode schematisch weergegeven.