

Fysische Transportverschijnselen II

C.J. Hoogendoorn en T.H. van der Meer

Een sterk aangepaste Engelstalige editie verschijnt naar verwachting
najaar 2007 onder de titel **Modelling Transport Phenomena**,
auteurs K. Hanjalic, S. Kenjeres, M.J. Tummers, H. J. J. Jonker,
ca. 300 pp.

© VSSD

Eerste druk 1978

Derde druk 1991-2005

Uitgegeven door:

VSSD

Leeghwaterstraat 42, 2628 CA Delft, The Netherlands

tel. +31 15 278 2124, telefax +31 15 278 7585, e-mail: hlf@vssd.nl

internet: <http://www.vssd.nl/hlf>

URL over dit boek: <http://www.vssd.nl/hlf/c014.htm>

Een verzameling digitale illustraties en/of een elektronische versie van het boek is beschikbaar voor docenten die met het boek werken. Een aanvraag, voorzien van enige informatie over de cursus waarbij het boek gebruikt wordt, kan men sturen naar e-mail adres hlf@vssd.nl.

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photo-copying, recording, or otherwise, without the prior written permission of the publisher.

ISBN-10 90-6562-059-1

ISBN-13 978-90-6562-059-0

NUR 924

Keywords: natuurkunde, transportverschijnselen

Voorwoord

Het college Fysische Transportverschijnselen II werd in 1960 opgezet door prof. ir. H. Kramers en prof. dr. J. A. Prins. Het eerste dictaat werd geschreven door prof. Kramers en prof.dr.ir. J. Schenk. In de cursus 1969/70 werd het college voor het eerst gegeven als een blokcollege met veel tijd voor oefeningen. Hierbij werd de opzet van het college veranderd zonder dat de feitelijke inhoud zich wijzigde. Dit maakte het uitreiken van collegestencils naast het oude dictaat FT II noodzakelijk. Deze door prof. dr. ir. W. J. Beek begonnen vorm van het college werd in de cursusjaren na 1970 voortgezet. In 1973 verscheen een beknopt aangepast dictaat, dat later in meer volledige vorm als een sterk herziene uitgave verscheen.

Dit nieuwe boek is een synthese van het dictaat Kramers/Schenk en de uitgereikte collegestencils uit de jaren '60 en '70. Het verschil tussen de oorspronkelijke opzet en deze is de volgorde van behandeling van de stof. Terwijl het oorspronkelijke dictaat opgezet was vanuit de fysische problemen waarbij de wiskundige hulpmiddelen door de hoofdstukken heen verweven waren, is dit bij de blokcollege-opzet veranderd. Eerst worden nu de wiskundige hulpmiddelen behandeld, wel steeds aan de hand van een fysisch voorbeeld, daarna worden de fysische problemen systematisch behandeld.

Voor veel studenten behoort de bespreking van de wiskundige methoden een recapitulatie te zijn. Voor een aantal is dit echter wel nodig. Gezien de toenemende mogelijkheden voor computerberekeningen is tevens aandacht aan de numerieke methoden gegeven. In deze derde druk is het hoofdstuk over numerieke methoden nog verder uitgebreid en aangepast aan nieuwe ontwikkelingen, met name in de numerieke stromingsleer. Dit weerspiegelt het sterk groeiende belang van numerieke simulatie in dit vakgebied. Uiteraard worden alleen die methoden behandeld die voor FT-problemen van belang zijn. Bovendien worden ze steeds geïllustreerd met voorbeelden van warmte- en stoftransport.

Een belangrijk punt bij de studie van dit vak is het zelf aanpakken van problemen. Daaraan wordt bij het blokcollege een aantal oefenmiddagen besteed. De gebruikte voorbeeldproblemen zijn hier voor een deel opgenomen, de overige zijn verkrijgbaar bij ondergetekenden.

Delft, december 1990

C.J. Hoogendoorn

T.H. van der Meer

Voorwoord

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

3.5.	De convectie-diffusie vergelijking	88
3.5.1.	Upwind differenties	90
3.5.2.	2D convectie-diffusie vergelijking	92
3.5.3.	Numerieke diffusie	94
3.5.4.	Voorbeelden van nauwkeuriger differentieschema's	98
3.6.	De impulsvergelijkingen	99
3.6.1.	Verschoven roosters	100
3.6.2.	De 2D impulsvergelijking	102
3.6.3.	Het oplossen van het drukveld	103
DEEL III. FYSISCHE PROBLEMEN		
4.	TRANSPORTPROBLEMEN IN RUSTENDE MEDIA	109
4.1.	Stationaire problemen	109
4.2.	Diffusievergelijking	111
4.2.1.	Typen randvoorwaarden	111
4.2.2.	Grafische oplossingen d ffusievergelijking	112
4.2.3.	De bronoplossing	119
4.2.4.	Sommatie van bronnen en Greense functies	121
4.2.5.	Lijn- en puntbronnen	127
4.2.6.	Penetratietheorie en theorema van Duhamel	129
4.2.7.	Contacttemperatuur bij twee verschillende materialen	131
4.2.8.	Uitsterfprobleem	134
4.2.9.	Instationaire diffusieproblemen in meer dimensies	135
4.3.	Bewegend-frontproblemen	138
4.3.1.	Algemene probleemstelling	138
4.3.2.	Niet-stationaire warmtegeleiding met fase-overgang	139
4.3.3.	Bewegend-frontprobleem bij stoftransport	141
4.3.4.	Landau-transformatie en storingsrekening voor bewegend-frontproblemen	143
4.3.5.	Stolling met convectieve warmte-overdracht	146
4.3.6.	Integraalmethode bij stollingsproblemen met convectieve overdracht	148
4.4.	Diffusievergelijking in brontermen	152
4.4.1.	Niet-stationaire warmtegeleiding met warmteproductie in het medium	152
4.4.2.	Niet-stationaire diffusie met homogene chemische reactie	154
4.4.3.	Methode van Danckwerts voor eerste-orde reacties	157
5.	IMPULSTRANSPORT	163
5.1.	Inleiding	163
5.2.	Stromingen van incompressibele media	164
5.2.1.	Potentiaalstroming	164
5.2.2.	Kruipstroming	170
5.2.3.	Wervelsterkte en diffusievergelijking	173
5.3.	Grenslaagstromingen	174
5.3.1.	Grenslaagvergelijkingen	174
5.3.2.	Oplossing laminaire grenslaagvergelijkingen	177
6.	DIFFUSIE EN GELEIDING IN STROMENDE MEDIA	181
6.1.	Stationair transport in stromingen met uniforme snelheid	181
6.1.1.	Transport in propstroming langs een vlakke plaat	182
6.1.2.	Transport in propstroming in een ronde buis	183

6.1.3.	Diffusie vanuit een puntbron in een propstroom	185
6.2.	Lévéque-probleem	186
6.3.	Laminaire buisstroming	190
6.3.1.	Lévéque-oplossing voor thermisch inloopgebied	190
6.3.2.	Thermisch volledig ingestelde stroming	194
6.4.	Transport in laminaire grenslagen	194
6.4.1.	Integraalmethode-oplossingen	194
6.4.2.	Warmte-overdrachtsrelaties voor laminaire grenslagen	197
6.4.3.	Vrije convectie langs een verticale plaat	198
APPENDIX I. BIBLIOGRAFIE		205
APPENDIX II. ENKELE STOFEIGENSCHAPPEN		209
TREFWOORDENLIJST		211

LIJST VAN MEEST VOORKOMENDE SYMBOLEN

a	warmtevereffeningscoëfficiënt	m^2/s
c	concentratie (volume, massa, mol)	$(m^3/m^3, kg/m^3, mol/m^3)$
c_p	soortelijke warmte	J/kgK
d	diameter	m
D	stof-diffusiecoëfficiënt	m^2/s
g	versnelling van de zwaartekracht	m/s^2
$J_k(x)$	Besselfunctie	
k	reactiesnelheidsconstante	1/s
L	lengte	m
p	druk	N/m^2
Q	warmte (stof) hoeveelheid, bronsterkte	J (kg)
r	straal	m
t	tijd	s
T	temperatuur	K
$\bar{T}(x,p)$	Laplace-getransformeerde van T(x,t)	—
u	} snelheid	m/s
v		
v_x		
v_y		
v_z		
a	warmte-overdrachtscoëfficiënt	$W/m^2 K$
δ	grenslaagdikte	m
ϵ	storingsparameter	—
λ	warmtegeleidingscoëfficiënt	W/mK
η	dynamische viscositeit	Ns/m^2
ρ	dichtheid	kg/m^3
τ	schuifspanning (of dim. tijd)	$N/m^2 (-)$
Φ_w'', Φ_m''	warmte- of stofstroombichtheid	$W/m^2 (kg/m^2s)$
ν	kinematische viscositeit	m^2/s

Voor dimensieloze groepen, zie tabel 2.7.1.

DEEL I

Fysische basisvergelijkingen

1. Inleiding

1.1. Doelstellingen van het college

De titel van dit dictaat Fysische Transportverschijnselen II wijst erop dat er ook een FT I is. Voor dat laatste college zij hier verwezen naar het boek van prof. J.M. Smith, dr.ir. E. Stammers en dr.ir. L.P.B.M. Janssen*. Een direct vervolg op FT I is FT II echter niet. Het is in wezen de behandeling van dezelfde stof, maar nu gericht op het gebruik maken van en inzicht krijgen in de wiskundige oplossingsmethoden.

De doelstellingen van het college zijn als volgt te formuleren:

- op een fysisch-fenomenologische wijze inzicht verwerven in het formuleren van de problemen en het opstellen van de mathematische vergelijkingen die transport van materie, warmte en impuls op macroschaal beschrijven;
- de algemene (niet zozeer op strak wiskundige wijze) merites en samenhang leren onderkennen van de verschillende oplossingsmethoden voor de betreffende partiële differentiaalvergelijkingen met hun randvoorwaarden;
- paraat bruikbare kennis opdoen voor het oplossen van veel voorkomende problemen.

In dit boek komen na dit eerste deel dat de fysische basisvergelijkingen bespreekt, in een tweede en derde deel respectievelijk de wiskundige methoden en de fysische problemen afzonderlijk aan de orde. Hierdoor krijgen de wiskundige oplossingsmethoden veel (noodzakelijke) aandacht. Hopelijk wekt deze opzet niet de onjuiste indruk dat FT II een vorm van toegepaste wis-kunde is. Men moet de nadruk gelegd zien op de fysische problemen, met gebruikmaking van de wiskunde.

Voor wat betreft de plaats van het vak Fysische Transportverschijnselen zij hier verwezen naar de inleiding van het dictaat FT I. Als toepassingsgebieden zijn daar genoemd: chemische techniek, kern- en energietechniek, meteorologie, ruimtevaart, fysiologie en hydraulica. Daarnaast vallen hier nog te noemen de bouw fysica, de warmte- en koudetechniek, de landbouwtechniek en de metallurgie.

Er zijn veel boeken betreffende de transportverschijnselen en nog steeds verschijnen er nieuwe. De als appendix I toegevoegde bibliografie geeft slechts een greep uit de belangrijkste literatuur.

Het boek van Bird, Steward en Lightfoot, “Transport phenomena” [B1] is het eerste boek dat destijds (1960) de behandeling van impuls, warmte en stoftransport onder één noemer bracht. Het idee om dit te doen is mede voortgekomen uit de tijd die Bird bij Kramers doorbracht. Kramers zette in Delft reeds in 1956 de colleges fysische transportverschijnselen op.

Verder zij hier speciaal verwezen naar het boek van Carslaw en Jaeger [A1], dat klassiek is voor de behandeling van transport in starre media. Voor de stromingsleer zij hier verwezen naar de boeken van Schlichting [B3] en Tennekes en Lumley [B14]. In dit laatste boek wordt de turbulentie uitvoerig behandeld, hetgeen in dit college FT II buiten de stof blijft.

1.2. De transportvergelijkingen

Transportverschijnselen veroorzaken in een systeem dat niet in thermodynamisch evenwicht is zodanige energie- en massastromen dat het evenwicht hersteld kan worden. In een systeem in evenwicht zijn de intensieve toestands-grootheden overal constant en niet veranderlijk in de tijd. In een niet-evenwichtssituatie zullen er in het systeem wel verschillen in de toestands-grootheden zijn. Dit kunnen bijvoorbeeld verschillen in temperatuur, concentratie of druk zijn, die aanleiding geven tot gradiënten. Deze gradiënten werken nu via de transportverschijnselen als een drijvende kracht voor een netto transport dat het evenwicht probeert te herstellen.

Dit netto transport (flux) \bar{J} blijkt in veel fysische situaties, die niet sterk van thermodynamisch evenwicht verschillen, lineair afhankelijk te zijn van de gradiënten $\text{grad } x$, dit geeft de transportvergelijking:

$$\bar{J} = -L \text{ grad } x, \quad (1.2.1)$$

waarbij L de transportcoëfficiënt is. Bijvoorbeeld indien x de temperatuur is, zijn \bar{J} en L respectievelijk de warmtestroom $\bar{\Phi}_w''$ en de warmtegeleidingscoëfficiënt λ :

$$\bar{\Phi}_w'' = -\lambda \text{ grad } T. \quad (1.2.2)$$

Op microscopische schaal kan men vanuit statistische beschouwingen de transportvergelijkingen afleiden en voorspellingen doen over de grootte van de transportcoëfficiënten op grond van het statistische gedrag van moleculaire systemen. Deze weg zal hier niet gevolgd worden, hiervoor wordt verwezen naar de literatuur [B6, B7]. Het belang van deze beschouwingen voor technische toepassingen ligt vooral in de mogelijkheid kwantitatieve voorspellingen te doen over de grootte van de transportcoëfficiënten, die soms niet eenvoudig experimenteel te bepalen zijn. In het boek van Bird [B1] wordt dit voor de viscositeit, warmtegeleidingscoëfficiënt en de diffusiecoëfficiënt gedaan. Het boek van Bretsznajder [B8] geeft zeer uitvoerig voorspellingen van de transportcoëfficiënten.

Hier zullen we steeds de macroscopische beschouwingen gebruiken. Daartoe zullen we voor het opstellen van de transportvergelijkingen het medium steeds als een continuüm beschouwen en uitgaan van fenomenologisch gedefinieerde transportcoëfficiënten. Bij de continuümbeschouwing beschouwt men de stof als één ondeelbaar geheel, dat voor alle delen, hoe klein ook, dezelfde eigenschappen heeft. Dit betekent in feite dat de kleinste delen die we beschouwen nog steeds zo groot moeten zijn dat ze veel moleculen omvatten. Dit is toe te lichten aan de hand van de dichtheid van een stof, bv. water. Een watermolecuul heeft afmetingen van ongeveer 5 \AA ($5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$). Zolang we volumina beschouwen van 10^{-21} m^3 (kubus van 0.1 \mu m), dan zal dit in de vloeistoffase voor water nog ca. 10^6 moleculen bevatten. We kunnen dan nog steeds stellen dat de dichtheid van water gegeven wordt door:

$$\rho = \lim_{\Delta V \rightarrow \delta V} \frac{\Delta m}{\Delta V}, \quad \delta V = 10^{-21} \text{ m}^3. \quad (1.2.3)$$

2. Analytische methoden

2.1. Gewone differentiaalvergelijkingen

Indien we een probleem met slechts één onafhankelijk veranderlijke hebben, krijgen we een gewone differentiaalvergelijking. Dit geval doet zich alleen voor bij stationaire problemen in één dimensie. Oplossing hiervan kan dikwijls analytisch, zo nodig ook numeriek. Voorbeelden hiervan zijn behandeld in FT I, één geval wordt hier besproken.

Dit aan de hand van de effectiviteit van een poreuze vaste katalysator voor gasreacties (zie fig. 2.1.1).

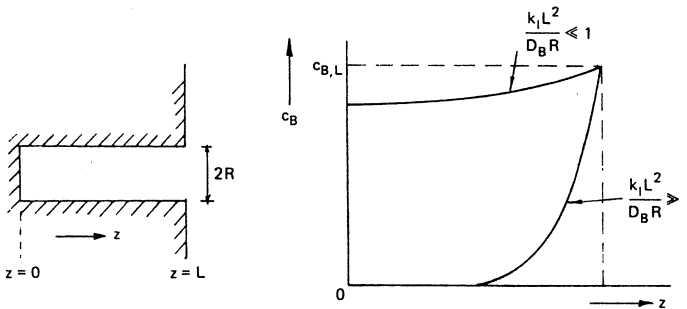


Fig. 2.1.1. Concentratieverloop van reactant B in katalysator-porie.

Op $z = L$ wordt de concentratie van de op het katalysatoroppervlak reagerende component B gelijk aan $c_{B,L}$ gesteld. Deze component B diffundeert naar binnen en reageert aan de wand van de porie volgens een eerste-orde reactie: aantal kmol B omgezet per eenheid van tijd en wandoppervlak is $k_1 c_B$. Radiale concentratiegradiënten verwaarlozende (geoorloofd als $k_1 R/D_B \ll 1$) vindt men voor de stofbalans over een schijfje dz :

$$D_B \frac{d^2 c_B}{dz^2} \cdot \pi R^2 dz - k_1 c_B \cdot 2\pi R dz = 0 \quad (2.1.1)$$

met de randvoorwaarden $z = L$, $c_B = c_{B,L}$ en $z = 0$, $\frac{dc_B}{dz} \approx 0$.

De concentratieverdeling wordt:

$$\frac{c_B}{c_{B,L}} = \frac{\cosh z \sqrt{\frac{2k_1}{D_B R}}}{\cosh L \sqrt{\frac{2k_1}{D_B R}}} \quad (2.1.2)$$

De effectiviteit van de katalysator (werkelijke reactie-opbrengst gedeeld door maximaal denkbare reactie-opbrengst) is:

$$\frac{2\pi R k_1 \int_0^L c_B dz}{2\pi R k_1 c_{B,L} L} = \frac{\operatorname{tgh} L \sqrt{\frac{2k_1}{D_B R}}}{L \sqrt{\frac{2k_1}{D_B R}}} \quad (2.1.3)$$

3. Numerieke methoden

3.1. Inleiding

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

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

3.1.1. Numerieke methodiek

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

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

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

4. Transportproblemen in rustende media

4.1. Stationaire problemen

Hierbij hebben we te maken met de Laplace-vergelijking

$$\nabla^2 T = 0 \quad (4.1.1)$$

met bijbehorende randvoorwaarden.

De Laplace-vergelijking is belangrijk voor alle potentiaalveldproblemen in de natuurkunde, zoals elektrische velden, potentiaalstroming en warmtegeleiding. Oplossingen uit het ene gebied zijn bruikbaar voor een ander gebied, indien de randvoorwaarden overeenstemmen.

Deze Laplace-vergelijking is voor willekeurige gevallen numeriek (relaxatiemethode) of analoog (elektrisch geleidend papier) zeer goed op te lossen. Analytische oplossingen zijn in een aantal gevallen door scheiden van variabelen te vinden. Een enkel voorbeeld van dit laatste wordt hier behandeld en wel de stationaire geleiding in een strook.

We bekijken de temperatuurverdeling in een lange strook geleidend materiaal, waarvan in fig. 4.1.1 de dwarsdoorsnede is getekend ('koelvin').

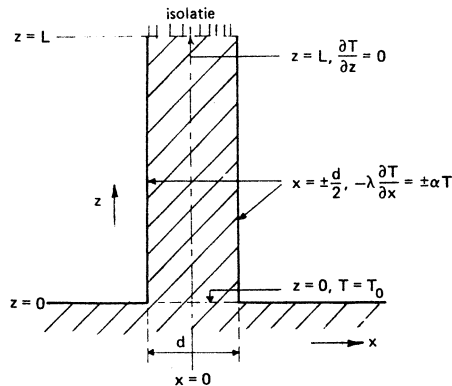


Fig. 4.1.1. Doorsnede van een strook met koelvin met randvoorwaarden.

In de stationaire toestand is de 'overtemperatuur' ten opzichte van de omgeving $T = T(x, z)$; $T = 0$ voor omgeving. De temperatuurverdeling moet voldoen aan de differentiaalvergelijking 4.1.1 die hier wordt:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0, \quad (4.1.2)$$

met de randvoorwaarden

$$\left. \begin{array}{l} z = 0, \quad T = T_0, \quad z = L, \quad \frac{\partial T}{\partial z} = 0 \\ \text{en} \\ x = \pm \frac{d}{2}, \quad -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = \pm \alpha T. \end{array} \right\} \quad (4.1.3)$$