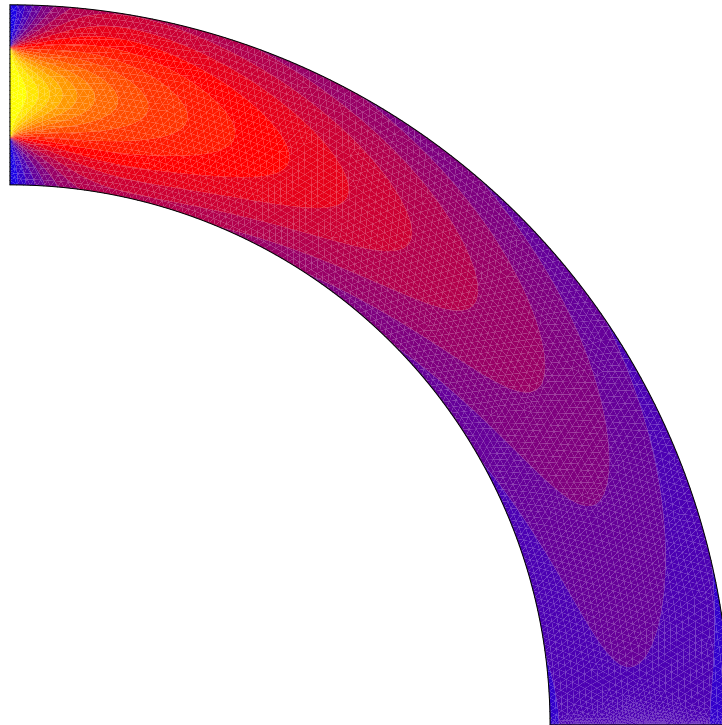


delta-9-tetrahydrocannabinol

door een hoekje gedreven



Verslag over het practicum voor Numerieke Methoden voor
Partiële Differentiaalvergelijkingen

Sebastiaan
Willem van Hillegaersbergstraat 100c
3051 RP Rotterdam
sebastia@ch.twi.tudelft.nl
121164
Datum: december 2001

Inhoudsopgave

1	Samenvatting	4
2	Uitwerking	8
2.1	Opgave	8
2.2	Oplossen van het probleem	8
2.3	Sepran	10
2.3.1	De mesh	10
2.3.2	Fortran code	12
2.3.3	Het probleem definiëren	12
2.3.4	De postprocessor	12
3	Grote diffusie	13
4	Kleine diffusie	13
5	Conclusie	16
A	Sepran sources	17
A.1	Mesh (warm.msh)	17
A.2	Fortran (warm.f)	19
A.3	Problem (warm.prb)	22
A.4	Postporcessing (warm.pst)	23
B	Literatuur	24

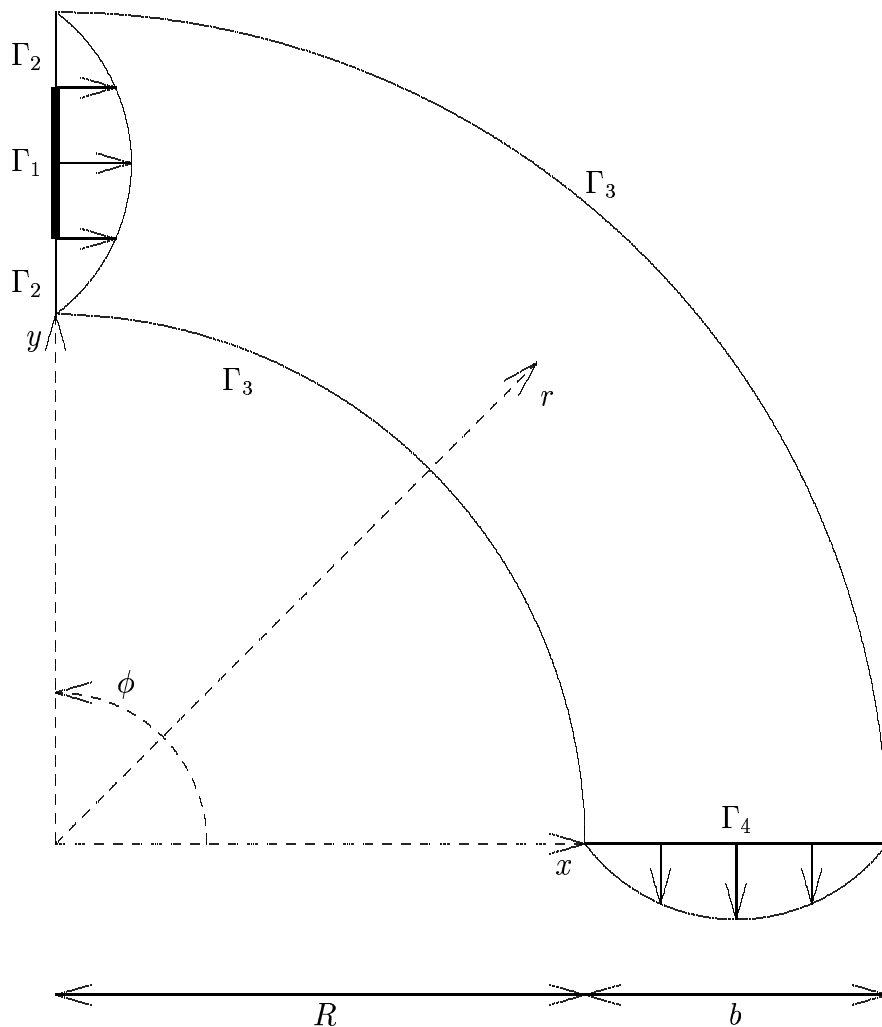
Lijst van figuren

1	De buis	4
2	Concentratieverloop op de grove mesh, grote diffusie (zie ook figuur 8)	6
3	Concentratieverloop op de fijne mesh, grote diffusie (zie ook figuur 9)	6
4	Concentratieverloop op de grove mesh, kleine diffusie (zie ook figuur 10)	7
5	Concentratieverloop op de fijne mesh, kleine diffusie (zie ook figuur 11)	7
6	Grove mesh	11
7	Fijne mesh	11
8	Concentratieverloop op de grove mesh (zie ook figuur 2)	14
9	Concentratieverloop op de fijne mesh (zie ook figuur 3)	14
10	Concentratieverloop op de grove mesh (zie ook figuur 4)	15
11	Concentratieverloop op de fijne mesh (zie ook figuur 5)	15

1 Samenvatting

De verspreiding van verontreinigde stof door een stromend medium kan beschreven worden door de convectie-diffusie vergelijking, die door een kwarttronde buis stroomt, zoals gegeven in figuur 1. Aan de ingang van de buis is een stukje vervuiling geplaatst, de wanden zijn halfdoorlatend en de uiteinde van de buis wordt ongemoeid gelaten.

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div}(\kappa \nabla c) + \mathbf{u} \cdot \nabla c = f \quad (1)$$



Figuur 1: De buis

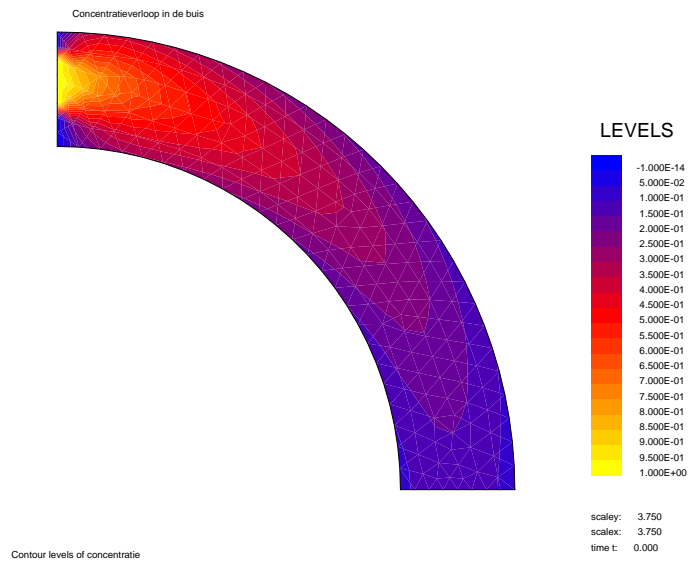
Voor de Practicum Opgave 1.2.4 wordt een stationaire toestand onderzocht zonder inwendige verontreinigingsbronnen. Gevraagd is om het probleem op te lossen en te onderzoeken in hoeverre de maaswijdte van het gekozen grid van belang is. Dit is onderzocht voor twee verschillende diffusiesnelheden.

In het geval dat we een relatief grote diffusiesnelheid hebben genomen, komen we neer op een concentratieverloop zoals gegeven is in figuur 2 wanneer een grove mesh is gebruiken en met een fijne mesh zoals in figuur 3 (zie ook 8 en 9 respectievelijk voor countourplaatjes). Op het wat hoekige verloop van de concentratiegebieden na is dit de uitkomst die je verwacht: de vervuiling die aan het begin zit diffundeert langzaam in de vloeistof die door de buis stroomt. Het uiteinde is een vrije stroom, terwijl door de wanden van de buis een beetje wegdiffundeert.

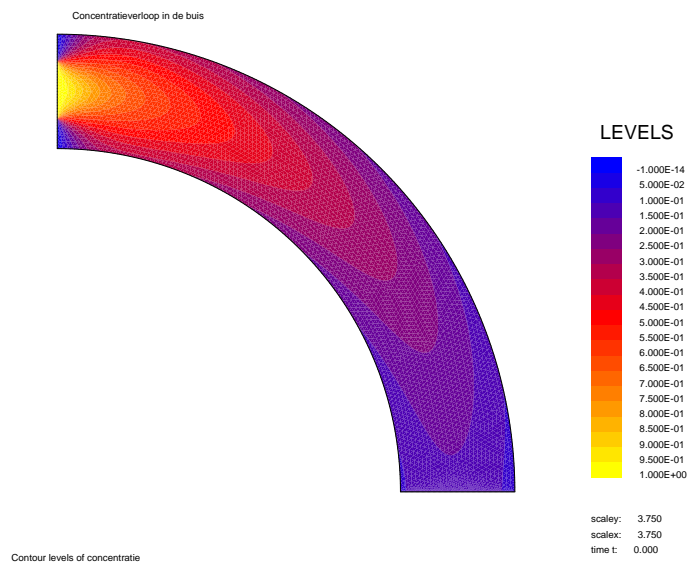
In het tweede geval, voor een lage diffusiesnelheid, zien we hoe erg het met een grove mesh fout kan gaan. De oplossing voor dit probleem is gegeven in de figuren 4 en 5 (zie ook respectievelijk de figuren 10 en 11 voor de countourrepresentatie). Hier zien we dat het bij de grove mesh erg hard fout gaat. Er zijn aan het begin van de buis gebieden te zien waar de concentratie 1.5 bedraagt, terwijl de maximale concentratie slechts 1 kan zijn. Ook verder in de buis zijn loze gebiedjes te vinden die volgens het natuurlijke verloop onmogelijk zijn.

Bekijken we de uitkomst wanneer we een fijner grid hebben gebruikt, dan krijgen we weer het beeld dat je zou verwachten, zij het dat er nu nauwelijks diffusie is.

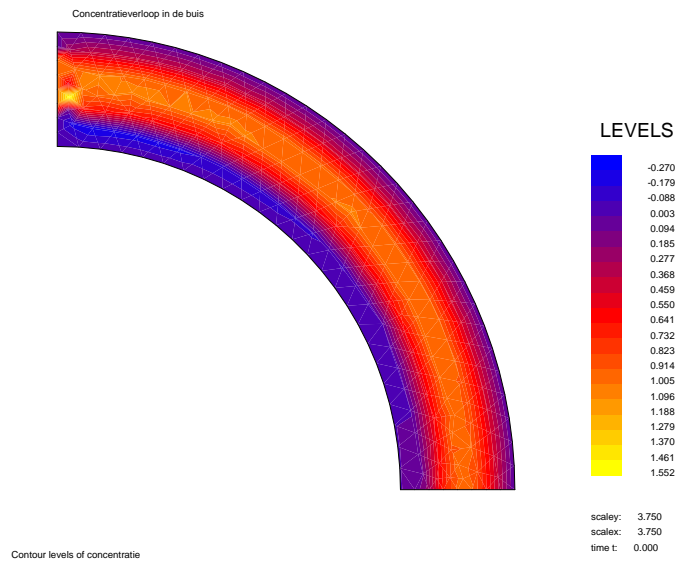
Het is dus belangrijk om een fijn grid te nemen.



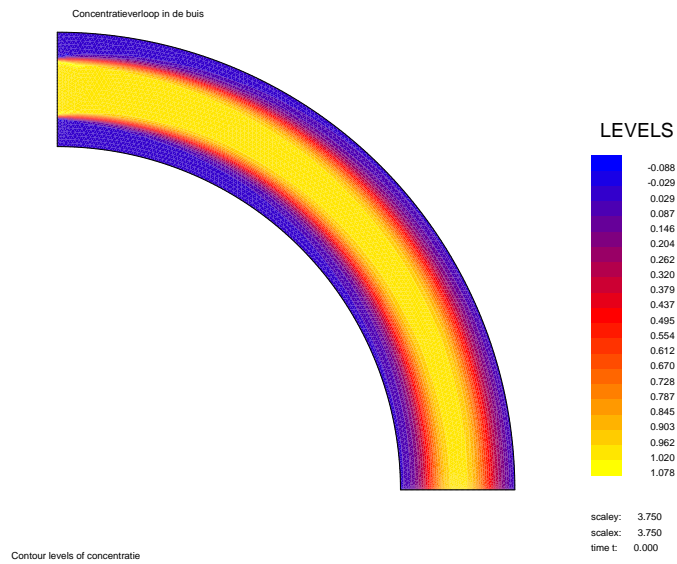
Figuur 2: Concentratieverloop op de grove mesh, grote diffusie (zie ook figuur 8)



Figuur 3: Concentratieverloop op de fijne mesh, grote diffusie (zie ook figuur 9)



Figuur 4: Concentratieverloop op de grove mesh, kleine diffusie (zie ook figuur 10)



Figuur 5: Concentratieverloop op de fijne mesh, kleine diffusie (zie ook figuur 11)

2 Uitwerking

2.1 Opgave

Voor deze opgave is het volgende gegeven. We bekijken de stroming door een cirkelvormige kanaalbocht zoals gegeven is in figuur 1. De binnenstraal heeft lengte R en de breedte is b . We bekijken de convectie-diffusie vergelijking:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div}(\kappa \nabla c) + \mathbf{u} \cdot \nabla c = f \quad (2)$$

In deze opgave bekijken we de evenwichtstoestand en gaan ervan uit dat er geen inwendige verontreinigingsbronnen zijn. De vergelijking die we gaan bekijken is dus:

$$-\operatorname{div}(\kappa \nabla c) + \mathbf{u} \cdot \nabla c = 0 \quad (3)$$

Het snelheidsveld wordt gegeven door de volgende formules:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} x_x \\ x_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -r \sin \phi u_\phi \\ r \cos \phi u_\phi \end{pmatrix} \quad (4a)$$

$$u_r = 0$$

$$u_\phi = \frac{1}{4r}(r - (R + b))(r - R) \quad (4b)$$

Verder is er een blokje vervuiling ter lengte van $\frac{1}{2}b$ op Γ_1 . Verder nemen we de uitstroming natuurlijk en de wanden zwak doorlatend zijn. Al met al worden de randvoorwaarden voor de concentratie:

$$\begin{cases} c = 1 & \text{op } \Gamma_1 \\ c = 0 & \text{op } \Gamma_2 \\ \kappa \frac{\partial c}{\partial n} + \sigma c = 0 & \text{op } \Gamma_3 \\ \frac{\partial c}{\partial n} = 0 & \text{op } \Gamma_4 \end{cases} \quad (5)$$

2.2 Oplossen van het probleem

Voor de vergelijking 3 met randvoorwaarden 5 bestaat volgens stelling 4.4 in [1] geen equivalent minimaliseringsprobleem omdat daar geen eerste orde afgeleiden in voor mogen komen. Daarom gaan we dit probleem oplossen met behulp van de methode van Galerkin. Daartoe moeten we eerst een zwakke formulering afleiden.

De zwakke formulering van 3 krijgen we door deze met η te vermenigvuldigen en te integreren over Ω :

$$\int_{\Omega} \{-\operatorname{div}(\kappa \nabla c) + \mathbf{u} \cdot \nabla c\} \eta \, d\Omega = 0 \quad (6)$$

Dit lossen we op door Gauss te gebruiken. Volgens deze man is $\int_{\Omega} \text{div } \mathbf{a} \, d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma$. Als wij nemen $\mathbf{a} = -\eta\kappa\nabla c$ en deze invullen in Gauss krijgen we vergelijking 7. Ook gaan we het eerste gedeelte van de vergelijking van Gauss partiël integreren. De twee verkregen vergelijkingen vullen we in elkaar in. We krijgen dus als volgt:

$$\int_{\Omega} \text{div}(-\eta\kappa\nabla c) \, d\Omega = \int_{\Gamma} -\eta\kappa\nabla c \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma = - \int_{\Gamma} \eta\kappa \frac{\partial c}{\partial n} \, d\Gamma \quad (7)$$

$$\int_{\Omega} \text{div}(-\eta\kappa\nabla c) \, d\Omega = \int_{\Omega} \kappa \{ -\nabla\eta \cdot \nabla c - \eta \text{div}(\nabla c) \} \, d\Omega \quad (8)$$

$$\int_{\Omega} \kappa \{ \nabla\eta \cdot \nabla c + \eta \text{div}(\nabla c) \} \, d\Omega = \int_{\Gamma} \eta\kappa \frac{\partial c}{\partial n} \, d\Gamma \quad (9)$$

Uit 6 valt af te leiden dat:

$$\int_{\Omega} \{ \text{div}(\kappa\nabla c) \, d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla c \eta \, d\Omega \quad (10)$$

dus gecombineerd met 9 geeft dit:

$$\int_{\Omega} \kappa\nabla\eta \cdot \nabla c \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla c \eta \, d\Omega - \int_{\Gamma} \eta\kappa \frac{\partial c}{\partial n} \, d\Gamma = 0 \quad (11)$$

Nu nog het verwerken van de randvoorwaarden. Voor de randintegraal \int_{Γ} geldt dat $\int_{\Gamma} = \int_{\Gamma_1} + \int_{\Gamma_2} + \int_{\Gamma_3} + \int_{\Gamma_4}$. Ten eerste moet gemeld worden dat de testfunctie η zó gekozen is dat $\eta|_{\Gamma_1} = 0$ en $\eta|_{\Gamma_2} = 0$ omdat je de functie op deze Dirichlet randen niet kunt variëren. Op Γ_4 is gegeven dat $\frac{\partial c}{\partial n} = 0$, dus blijft over Γ_3 . Daar geldt dat $\kappa \frac{\partial c}{\partial n} + \sigma c = 0$, dus $\frac{\partial c}{\partial n} = -\frac{\sigma c}{\kappa}$. Vullen we deze in in de randintegraal van 11, dan komen we tot de uiteindelijke zwakke formulering 12.

$$\int_{\Omega} \kappa\nabla\eta \cdot \nabla c \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla c \eta \, d\Omega + \int_{\Gamma_3} \eta\sigma c \, d\Gamma = 0 \quad (12)$$

Nu gaan we Galerkin toepassen. Daarvoor nemen we de testfunctie $\eta = \varphi_i$ en $c^n = \sum_{j=1}^n c_j \varphi_j(\mathbf{x})$. Wanneer we dit invullen in 12 komen we tot de volgende uitdrukking (reken maar na):

$$\sum_{j=1}^n \left[c_j \int_{\Omega} \kappa\nabla\varphi_i \cdot \nabla\varphi_j \, d\Omega + c_j + \int_{\Omega} (\mathbf{u} \cdot \nabla\varphi_j) \varphi_i \, d\Omega + \int_{\Gamma_3} \sigma\varphi_i\varphi_j \, d\Gamma \right] = 0 \quad (13)$$

Deze gaan we gebruiken voor de Eindige Elementen Methode. Hiertoe gebruiken we driehoekige elementen die lineair zijn in x en y . Als basisfuncties nemen we $\varphi_i(\mathbf{x}) = a_0^i + a_x^i x + a_y^i y$. We willen de oplossing c_j bepalen van 13 en moeten daarvoor elementmatrices en elementvectoren bepalen, zowel voor de interne elementen als voor de rand. We bekijken de integralen van 13 apart en per element j :

$$\int_{\Omega} \kappa\nabla\varphi_i \cdot \nabla\varphi_j \, d\Omega = \kappa \int_{\Omega} \begin{pmatrix} a_x^i \\ a_y^i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_x^j \\ a_y^j \end{pmatrix} \, d\Omega = \kappa \frac{|\Delta|}{2} (a_x^i a_y^i + a_x^j a_y^j) \quad (14a)$$

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} (\mathbf{u} \cdot \nabla \varphi_j) \varphi_i \, d\Omega &\stackrel{N.C.}{=} \frac{|\Delta|}{6} \mathbf{u}(\mathbf{x}_i) \cdot \nabla \varphi_j(\mathbf{x}_i) \\
&= \frac{|\Delta|}{6} \begin{pmatrix} u_x(\mathbf{x}_i) \\ u_y(\mathbf{x}_i) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_x^j \\ a_y^j \end{pmatrix} = \frac{|\Delta|}{6} (u_x(\mathbf{x}_i) a_x^j + u_y(\mathbf{x}_i) a_y^j) \quad (14b)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_{\Gamma_3} \sigma \varphi_i \varphi_j \, d\Gamma &\stackrel{N.C.}{=} \sigma \sum_{k=1}^2 \int_e \varphi_k(\mathbf{x}) \, d\Gamma \varphi_i(\mathbf{x}_k) \varphi_j(\mathbf{x}_k) \\
&= \sigma \sum_{k=1}^2 \int_e \varphi_k(\mathbf{x}) \, d\Gamma \delta_{ik} \delta_{jk} = \sigma \int_e \varphi_i \, d\Gamma \delta_{ij} = \sigma \frac{\text{lengte}}{2} \delta_{ij} \quad (14c)
\end{aligned}$$

We noemen s_{ij} de som van de vergelijkingen 14a en 14b. Gezien er geen elementvector is, is deze nul. De elementmatrix en elementvector voor de inwendige elementen worden dan gegeven door:

$$\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (15)$$

Op dezelfde manier wordt volgens 14c de elementmatrix en elementvector voor de randelementen geven door:

$$\begin{pmatrix} \sigma \frac{\text{lengte}}{2} & 0 \\ 0 & \sigma \frac{\text{lengte}}{2} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (16)$$

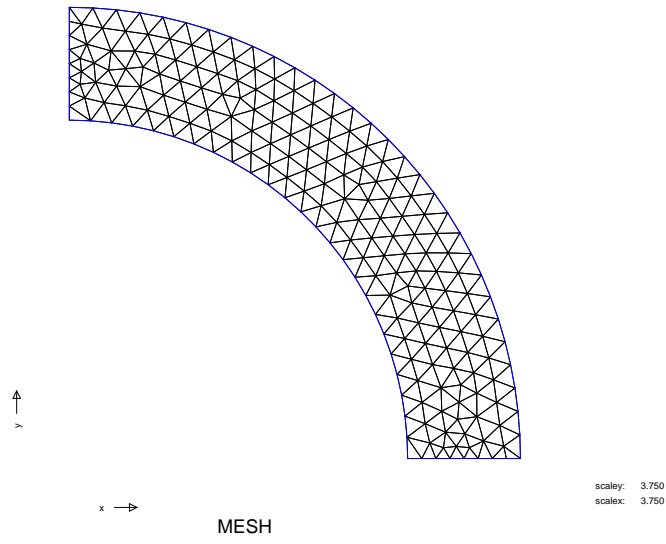
2.3 Sepran

Nu het theoretische gedeelte gedaan is kunnen we beginnen met het daadwerkelijke oplossen van het probleem. Alle Sepran sources zijn gegeven in Appendix A.

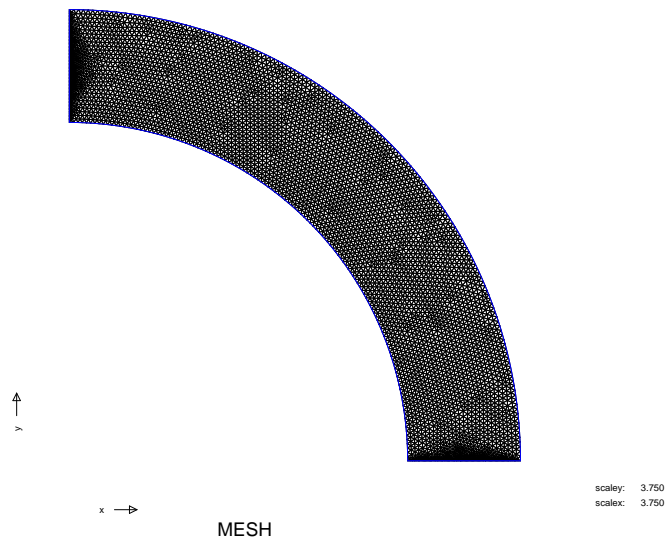
2.3.1 De mesh

We beginnen met het maken van de mesh. Deze is eenvoudig samengesteld uit 4 rechte lijntjes en twee cirkelboogjes. De curve $c2$ staat voor Γ_1 , de curven $c1$ en $c3$ voor Γ_2 en $c5$ voor Γ_4 . De twee kwartcirkelboogjes $c4$ en $c6$ staan uiteraard voor Γ_3 .

De fijnheid van het grid heb ik op gevoel vastgelegd. Ik heb een redelijk grof grid als uitgangspunt genomen en ben gaan schuiven met het aantal elementen per curve totdat alle driehoekjes evengroot oogden. Daarna heb ik het grid linear opgeschaald (alle getallen met 10 vermenigvuldigd). Het resultaat is te zien in figuur 6 (grof grid) en 7 (fijn grid).



Figuur 6: Grove mesh



Figuur 7: Fijne mesh

2.3.2 Fortran code

Ik heb geprobeerd zoveel mogelijk de structuur van de Fortran voorbeeldprogramma's aan te houden. Het commentaar dat ik in het programma heb geplaatst lijkt mij duidelijk genoeg wat betreft de genomen stappen. Enkele stappen moeten nog uitgewerkt worden.

Het snelheidsveld dat geven is in 4 staat ugedrukt in poolcoördinaten. Een standaard coördinatentransformatie met $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ en $x = r \cos \phi$, $y = r \sin \phi$ geeft ons $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ uitgedrukt in x en y coördinaten.

$$\begin{aligned}u_x &= -y u_\phi \\u_y &= x u_\phi \\u_\phi &= \frac{1}{4r}(r - (R + b))(r - R) \\r &= \sqrt{x^2 + y^2}\end{aligned}\tag{17}$$

De elementmatrix is letterlijk overgenomen uit de vergelijkingen 14a en 14b met 17 ingevuld. Evenzo is de elementmatrix voor de randelementen 14c zo overgenomen.

2.3.3 Het probleem definiëren

Ik heb mijn uitkomstvector heel toepasselijk *concentratie* genoemd. In dit probleem moet ik twee typen onderscheiden: inwendige elementen en randelementen. De inwendige elementen hebben type 1, de Robin randelementen worden gedefinieerd door type 2. Deze zitten op Γ_3 , volgens de mesh op curven $c4$ en $c6$. De rand Γ_4 wordt niet meegenomen: deze is gelijk aan 0 en in dit probleem een natuurlijke randvoorwaarde. Verder zijn er nog de Dirichlet randen, Γ_1 waar een vaste concentratie van 1 is en Γ_2 , waar een vaste concentratie van 0 heerst. De rest van dit bestand heb ik overgenomen uit de voorbeelden.

2.3.4 De postprocessor

Deze maakt twee plots, een contour en een regenboogplot.

3 Grote diffusie

Nu is alles klaargezet om opgelost te worden. Ik moet het probleem oplossen met twee verschillende gridverfijningen. De meshes zijn gegeven in de figuren 6 en 7. Het probleem voor $\kappa = 0,005$ en $\sigma = 0,01$ wordt netjes door de computer opgelost (`sepmesh warm.msh && seplink warm.f && warm < warm.prb && seppost warm.pst && sepview sepplot.001`). De plots zijn gegeven in figuren 8 en 9 op pagina 14 (zie ook respectievelijk de figuren 2 en 3 op pagina 6 voor de gekleurde plots).

We zien hier niet al te veel verschil tussen het gebruik van een fijne en een grove mesh. In het geval dat de mesh weinig elementen bevat zie je wel een hoekig concentratieverloop, maar verder geen discontinuïteiten. Ook de waarden van de concentraties liggen tussen de te verwachten waarden: 0 en 1. Dat er ook waarden voorkomen die kleiner zijn van 0 en groter dan 1 komt door de oplosmethode van de Sepran solver, maar deze waarden zijn niet buitensporig.

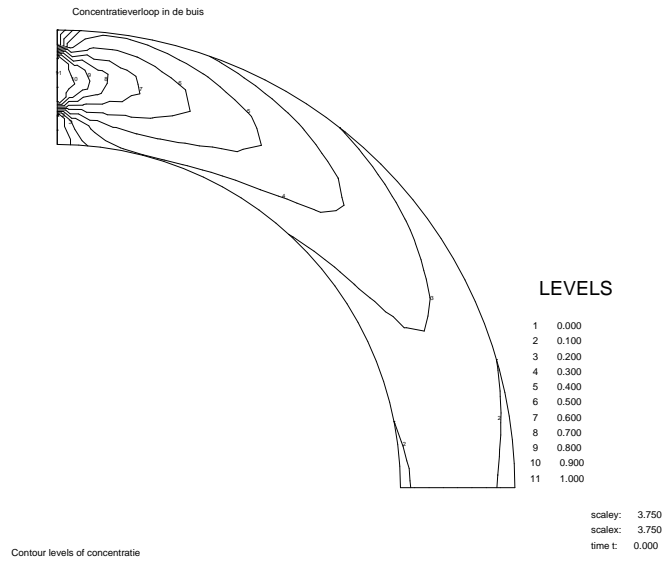
Ook wanneer we naar het verloop van de concentratie kijken zien we wat we op grond van de randvoorwaarden verwachten: aan het begin van de buis wordt een stukje opgelost in een vloeistof met concentratie 0. Deze lost langzaam op: er is duidelijk convectie en diffusie. De wanden van de buis zijn halfdoorlatend, en ook dit is te zien. Aan het uiteinde van de buis zijn geen randvoorwaarden opgelegd, de vloeistof heeft daar zijn natuurlijke verloop.

4 Kleine diffusie

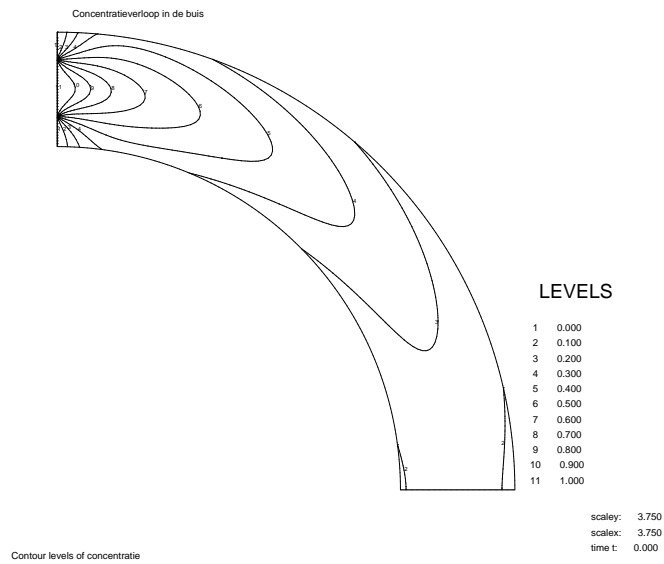
Nu moeten we hetzelfde probleem oplossen maar dan met andere waarden voor de constanten: $\kappa = 0.00005$ en $\sigma = 0.01$. Wanneer we Sepran dit weer laten oplossen komen we tot de volgende oplossingen, te zien in figuren 10 en 11 op pagina 15 (zie ook respectievelijk de figuren 4 en 5 op pagina 7).

Hier zien we hoe erg het mis kan gaan wanneer de mazen van het grid niet klein genoeg genomen zijn. Zo zien we in het begin van de buis enkele discontinuïteiten waar de concentratie stijgt tot boven de 1,5. Dit is natuurlijk een niet-natuurlijke situatie. Van de rest van het verloop klopt ook niet veel meer: overal in de buis zijn eilandjes te zien. Bovendien is het verloop naar de buitenste boog gedreven.

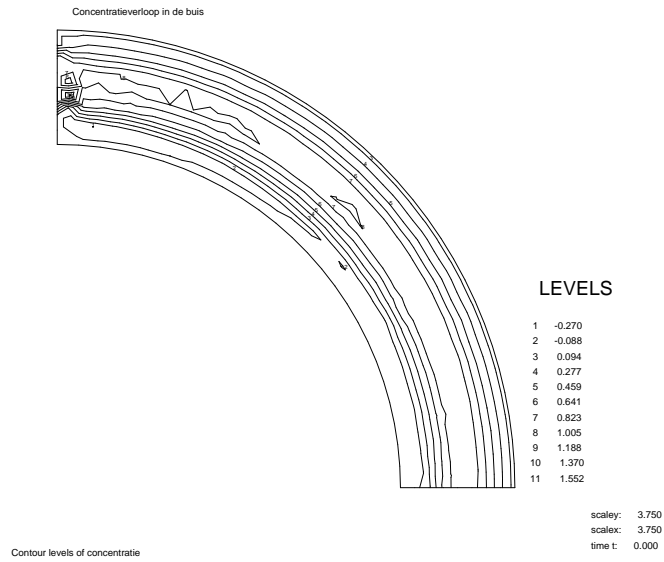
Als we kijken naar het concentratieverloop op het fijnere grid, zien we dat het er hier niet zo desastreus uitziet. Wat gelijk opvalt is dat er nauwelijks diffusie is. De vloeistof stroomt slechts door de buis heen. Ook hier gebeurt er aan het begin en aan de uitloop van de buis wat je zou verwachten. Over de randen is niet zo gek veel te zeggen: pas wanneer je goed kijkt zie je dat er nog wel enigszinds diffusie optreedt, maar die is klein.



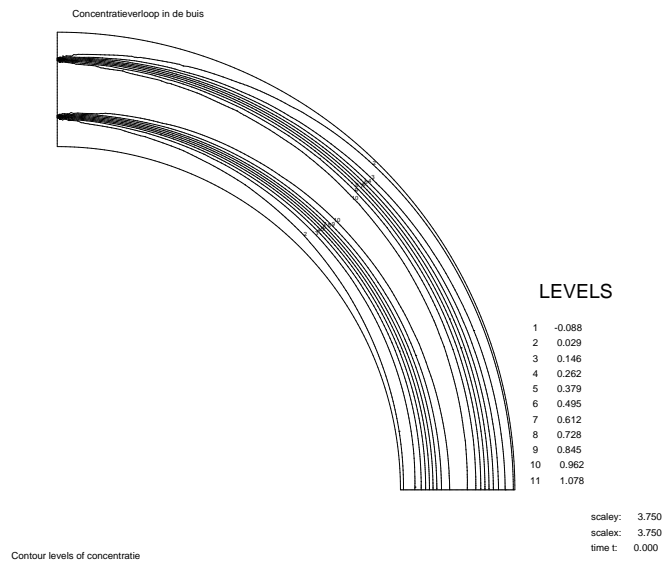
Figuur 8: Concentratieverloop op de grove mesh (zie ook figuur 2)



Figuur 9: Concentratieverloop op de fijne mesh (zie ook figuur 3)



Figuur 10: Concentratieverloop op de grove mesh (zie ook figuur 4)



Figuur 11: Concentratieverloop op de fijne mesh (zie ook figuur 5)

5 Conclusie

We hebben gezien dat de variabele κ de mate van diffusie representeert. Voor een grote waarde hebben we een grote diffusie, voor een kleine waarde minder diffusie. Ook hebben we gezien dat de oplossing bij een grove mesh erg onwaarschijnlijk kan zijn.

Conclusie: κ staat voor de mate van diffuse en gebruik een fijnmazig grid.

A Sepran sources

A.1 Mesh (warm.msh)

```
# Mesh voor Opgave 1.2.4
# Sebastiaan, december 2001

# enkele constanten
#
constants
  reals
    R = 3          # straal van de binnenbuis
    b = 1          # doorsnede buis
    Rb = 4         # buitenstraal buis = R+b
    R1 = 3.25     # beginstukje waar concentratie heesCHt
    R2 = 3.75     # eindstukje waar concentratie heersCHt
end

#
# definieer de mesh
#
mesh2d

#
# mijn punten
#
points
  p1=(0,0)
  p2=(0,$R)
  p3=($R,0)
  p4=(0,$Rb)
  p5=($Rb,0)
  p6=(0,$R1)
  p7=(0,$R2)

#
# mijn curven
#
curves
  c1=line (p4,p7,nelm=20)
  c2=line (p7,p6,nelm=40)
  c3=line (p6,p2,nelm=20)
  c4=arc (p3,p2,p1,nelm=125)
  c5=line (p3,p5,nelm=94)
```

```
c6=arc (p5,p4,p1,nelm=150)

#
# mijn oppervlakte
#
  surfaces
    s1 = general3 (c1,c2,c3,-c4,c5,c6)

#
# mijn plot
#
  plot

#
# mijn documenten
# aaaahh... mijn einde .-F (vampier die na een hoekstoot een dichtgeslagen
# oog heeft en een hoektand mist)
end
```

A.2 Fortran (warm.f)

```
program warm

c   Programma voor Opgave 1.2.4
c   Sebastiaan, december 2001

c   De volgende declaraties zijn standaard en behoeven geen extra commentaar

call sepcom ( 0 )
end

subroutine elemsubr ( ndim, npelm, x, nunk_pel, elem_mat,
+                   elem_vec, elem_mass, uold, itype )

implicit none
integer ndim, npelm, nunk_pel, itype
double precision x(npelm,ndim), elem_mat(nunk_pel,nunk_pel),
+                   elem_vec(nunk_pel), elem_mass(nunk_pel),
+                   uold(nunk_pel)

c   Locale parameters:
c   kappa      o   diffusieconstante
c   sigma      o   ook een constante
c   e          o   bevat de factoren  $e^{ij}$  voor  $i=1,2,3; j=1,2$ 
c   delta      o   Jacobiaan delta van het element
c   gradphi    o   bevat  $d(\phi_i)/dx_j$  voor  $i=1,2,3; j=1,2$ 
c   s          o   straal voor het element  $i=1,2,3$ 
c   l          o   lengte van een randelement
c   i, j       o   algemene lusvariabelen
c   R          o   straal van de binnencirkel
c   Rb         o   straal van de buitencirkel

double precision kappa, sigma, e(3,2), delta, gradphi(3,2), s(3),
+                   l, uphi(3)
integer i, j, R, Rb

c   toekenning van waarden zoals die in de opgave gegeven zijn
c   Noot: kappa is 0.005 of 0.00005 nagelang de vraag

R = 3d0
Rb = 4d0
kappa = 0.005d0
sigma = 0.01d0
```

c bereken de factoren e_{ij} zoals gegeven is op pagina 97 en 98 van
c het dictaat

$$\begin{aligned}e(1,1) &= x(2,2) - x(3,2) \\ e(2,1) &= x(3,2) - x(1,2) \\ e(3,1) &= x(1,2) - x(2,2)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}e(1,2) &= x(3,1) - x(2,1) \\ e(2,2) &= x(1,1) - x(3,1) \\ e(3,2) &= x(2,1) - x(1,1)\end{aligned}$$

$$\text{delta} = e(3,1) * e(1,2) - e(3,2) * e(1,1)$$

c bereken de straal $s(i)$ en $u_{\text{phi}}(i)$ voor het element i , zoals
c gegeven in de opgave

```
do i = 1, 3
  s(i) = sqrt( x(i,1)*x(i,1) + x(i,2)*x(i,2) )
  uphi(i) = 0.25d0 * 1/s(i) * ( s(i) - Rb)*(s(i) - R)
end do
```

c bereken de gradient zoals beschreven in het dictaat

```
do j = 1, 2
  do i = 1, 3
    gradphi(i,j) = e(i,j) / delta
  end do
end do
```

c type 1: voor de inwendige elementen

```
if ( itype.eq.1 ) then
```

c maak de element matrix zoals bescheven in het verslag

```
  do j = 1, 3
    do i = 1, 3
      elem_mat(i,j) = kappa * abs(delta)/2d0 *
+      ( gradphi(i,1)*gradphi(j,1) +
+      gradphi(i,2)*gradphi(j,2) ) +
```

```

+           (-x(i,2) * uphi(i) * gradphi(j,1) +
+           x(i,1) * uphi(i) * gradphi(j,2) ) *
+           abs(delta)/6d0
      end do
end do

```

c de elementvector is nul

```

do i = 1, 3
  elem_vec(i) = 0d0
end do
end if

```

c type 2: voor de randen

```

if (itype.eq.2) then
  l = sqrt( (x(2,1)-x(1,1))**2 + (x(2,2)-x(1,2))**2 )

```

c de randelementmatrix zoals beschreven in het verslag

```

elem_mat(1,1) = sigma*l/2
elem_mat(2,2) = sigma*l/2
elem_mat(1,2) = 0d0
elem_mat(2,1) = 0d0

```

c de randelementvector is ook gelijk aan nul

```

do i = 1, 2
  elem_vec(i) = 0d0
end do
end if

```

```

end

```

A.3 Problem (warm.prb)

```
# Probleem voor Opgave 1.2.4
# Sebastiaan, december 2001

# ik noem mijn vector 'concentratie'

constants
  vector_names
    1: concentratie
end

# mijn probleem
problem
  types
    elgrp1 = (type=1)          # het inwendige element
  natboundcond
    bnggrp1 = (type=2)        # de elementen op de Robin randen
    bnggrp2 = (type=2)
  bounelements
    belm1 = curves(c4)       # de Robin randen
    belm2 = curves(c6)
  essboundcond
    curves(c1)               # de randen met Dirichlet voorwaarden
    curves(c2)
    curves(c3)
end

# de matrix is symmetrisch
matrix
  method = 1
end

# de waarden op de Dirichlet randen
essential boundary conditions, sequence_number = 1
  curves(c1), value=0
  curves(c2), value=1
  curves(c3), value=0
end

# de matrix is positief definitief
solve, sequence_number = 1
  positive definite
end
```

```

# nog wat meer informatie voor de solver
output, sequence_number = 1
end

structure
    prescribe_boundary_conditions, sequence_number = 1, vector = %concentratie
    solve_linear_system, seq_solve = 1, vector = %concentratie
    output, sequence_number = 1, vector = %concentratie
end

end_of_sepran_input

```

A.4 Postporcessing (warm.pst)

```

# Postprocessing file voor Opgave 1.2.4
# Sebastiaan, december 2001

postprocessing
    print v%concentratie
    plot identification, text='Concentratieverloop in de buis', origin=(3,18)
    plot contour v%concentratie
    plot coloured contour v%concentratie
end

```

B Literatuur

Referenties

- [1] J. van Kan en A. Segal. *Numerieke methoden voor partiele differentiaalvergelijkingen*. Delftse Uitgevers Maatschappij, 1993.