



**Enkele methoden voor het
oplossen van de
een-dimensionale dispersie-
vergelijking**

TECHNISCHE HOGESCHOOL DELFT *
AFDELING DER CIVIELE TECHNIEK

ENKELE METHODEN VOOR HET OPLOSSEN VAN DE
EEN-DIMENSIONALE DISPERSIE-VERGELIJKING

december 1979

R. Soerjadi

ENKELE METHODEN VOOR HET OPLOSSEN VAN
DE EEN-DIMENSIONALE DISPERSIE-VERGELIJKING

	blz.
Voorwoord	1
1. Inleiding en probleemstelling	2
2. Tweede orde vergelijking	6
- Puntinjectie	6
- Twee (of meer) gelijktijdige puntinjecties	9
- Twee (of meer) niet-gelijktijdige puntinjecties	11
- Normale verdeling als beginvoorwaarde	13
3. Derde orde vergelijking	17
- Differentie-methode	17
- Afleiding molecule	18
- Stabiliteit	22
4. Vierde orde vergelijking	26
- Differentie-methode	26
- Afleiding molecule	26
- Stabiliteit	30
5. Rekenvoorbeeld	32
- Basisgegevens	32
- Berekening volgens 2	34
- Berekening volgens 3	36
- Berekening volgens 4	40
6. Verificatie uitkomsten rekenvoorbeeld	44
- Benadering door directe berekening van momenten	45
- Simulatie ongebalanceerd proces	45
- Simulatie gebalanceerd proces	47
7. Overzicht uitkomsten	53
8. Conclusies	57
Literatuur	59

VOORWOORD

In het algemeen is de dispersie-vergelijking niet analytisch oplosbaar. Deze studie beoogt enkele benaderingsmethoden te geven, zich beperkend tot ééndimensionale problemen met eenvoudige beginvoorwaarden. Schrijver dezes is erkentelijk voor de contacten met de vakgroep Geotechniek en de Onderafdeling der Wiskunde die hebben bijgedragen tot het ontstaan van dit rapport. In het bijzonder gaat zijn dank uit naar Prof.dr.ir. G. de Josselin de Jong wiens aantekeningen, onder andere betreffende het balanceren van het proces, hij heeft mogen gebruiken.

1. INLEIDING EN PROBLEEMSTELLING

Dispersie wordt in dit rapport gedefiniëerd als de verstrooiing van een wolk van deeltjes veroorzaakt door een stochastisch spreidingsmechanisme. In veel gevallen kan het dispersie-proces bij benadering worden beschreven door een differentiaalvergelijking, ook wel genoemd de dispersie-vergelijking. Zo'n vergelijking is in 1972, met behulp van Lagrange Correlatie Functies, door De Josselin de Jong (ref.1) afgeleid. Er was echter enige twijfel omtrent de juistheid van die differentiaalvergelijking. Op verzoek van en in samenwerking met genoemde auteur is toen door Soerjadi (ref.2) een studie opgezet, met als resultaat exact dezelfde differentiaalvergelijking, hoewel een andere weg is bewandeld. Een tijdsafhankelijk spreidingsmechanisme is eveneens in de beschouwing opgenomen. De dispersie-vergelijking is een partiële differentiaalvergelijking van oneindige orde met niet-constante coëfficiënten. In het één-dimensionale geval luidt de dispersie-vergelijking:

$$y_t = -(Ay)_x + (By)_{xx} - (Cy)_{xxx} + (Dy)_{xxxx} - (Ey)_{xxxxx} + \dots \quad (1.1)$$

In vergelijking (1.1) zijn x (=plaatscoördinaat) en t (=tijdsvariabele) onafhankelijk variabelen, terwijl $y=y(x,t)$ het aantal deeltjes voorstelt. Verder zijn $A=A(x,t)$, $B=B(x,t)$, enz. gegeven functies die het spreidingsmechanisme karakteriseren. Indices x of t betekenen partiële differentiatie naar die variabelen. Voor het gemak wordt y zo gedefiniëerd, dat

$$\int_{-\infty}^{\infty} y(x,t) dx = 1 \quad (1.2)$$

De uitdrukking (1.2) geldt voor elk tijdstip t , omdat er geen deeltjes bijkomen of verloren gaan. De aanduiding y ='aantal' deeltjes moet dus eigenlijk steeds tussen aanhalingstekens worden geplaatst; dit wordt echter verder in dit rapport niet gedaan.

Deze studie zal zich nu bezig houden met één-dimensionale dispersie ten gevolge van een plaats- en tijdsonafhankelijk spreidingsmechanisme. In plaats van (1.1) leidt dit tot een partiële differentiaalvergelijking met constante coëfficiënten,

$$y_t = -Ay_x + By_{xx} - Cy_{xxx} + Dy_{xxxx} - Ey_{xxxxx} + \dots \quad (1.3)$$

Fysisch stelt de coëfficiënt A voor de gemiddelde snelheid waarmee een deeltje zich verplaatst. De andere coëfficiënten B, C, D, E enz. kunnen worden genoemd de dispersie-coëfficiënten. Het is echter gebruikelijk dat slechts aan B die benaming wordt toegekend.

Beschouwd wordt nu slechts die klasse van problemen, beheerst door vergelijking (1.3), waarbij de coëfficiënten snel convergeren. In dat geval kan het probleem bij benadering worden beschreven door een differentiaalvergelijking van lage orde, bijvoorbeeld vierde, derde, of misschien zelfs tweede orde.

In hoofdstuk 2 zal een tweede orde vergelijking worden beschouwd. Deze vergelijking staat bekend als de warmtegeleidingsvergelijking of diffusie-vergelijking. Voor betrekkelijk eenvoudige begin- en randvoorwaarden kunnen analytische oplossingen worden gegeven. Met moeilijke begin- en randvoorwaarden kan het probleem vrijwel altijd numeriek worden opgelost.

Hoofdstuk 3 handelt over een derde orde vergelijking. Pogingen om hiervoor analytische oplossingen te vinden, zelfs bij zeer eenvoudige begin- en randvoorwaarden, zijn tot dusver zonder succes gebleven. Een numerieke methode kan hier uitkomst bieden.

Ten behoeve van de stabiliteit van zo'n numerieke procedure, kan vergelijking (1.3) worden omgewerkt tot een vergelijking waarbij de eerste orde term wegvalt. Immers, de transformatie

$$x' = x - At \quad (1.4)$$

$$t' = t \quad (1.5)$$

geeft

$$y_t = y_{x'} \cdot x'_t + y_{t'} \cdot t'_t = y_{x'}(-A) + y_{t'} \cdot 1 = -Ay_{x'} + y_{t'} \quad (1.6)$$

$$y_x = y_{x'} \cdot x'_x + y_{t'} \cdot t'_x = y_{x'} \cdot 1 + y_{t'} \cdot 0 = y_{x'} \quad (1.7)$$

$$y_{xx} = y_{x'x'} \quad \text{enz.}$$

zodat (1.3) overgaat in

$$-Ay_{x'} + y_{t'} = -Ay_{x'} + By_{x'x'} - Cy_{x'x'x'} + Dy_{x'x'x'x'} - \dots \quad (1.8)$$

waaruit volgt

$$y_{t'} = By_{x'x'} - Cy_{x'x'x'} + Dy_{x'x'x'x'} - \dots \quad (1.9)$$

De accenten in (1.9) kunnen eventueel worden weggelaten. Ter onderscheiding zal vergelijking (1.9) worden aangeduid met 'gecentreerde' vergelijking en (1.3) met niet-gecentreerde vergelijking. Deze benamingen zijn misschien niet gebruikelijk. Het kan echter enigszins worden gerechtvaardigd door de volgende overweging. De transformatie (1.4) betekent namelijk dat de oorsprong O' van de nieuwe coördinaat-as x' meereist over de gemiddelde afstand At , terwijl (1.5) geen verandering van de tijdschaal betekent. O' ligt dus in het centrum van de wolk van deeltjes.

Hoofdstuk 4 is gewijd aan een vierde orde vergelijking, die ook met behulp van een numerieke methode wordt opgelost.

Als rekenvoorbeeld wordt in hoofdstuk 5 uitgewerkt het probleem van een puntinjectie, dat is het plotseling loslaten van deeltjes, in een punt $x=0$ op een tijdstip $t=0$. Uitgaande van de basisgegevens worden eerst de constante coëfficiënten A, B, C, D, E van de differentiaalvergelijking bepaald. Vervolgens wordt deze vergelijking achtereenvolgens benaderd door een tweede, derde, en vierde orde differen-

tiaalvergelijking, en opgelost volgens de in vorige hoofdstukken behandelde methoden.

Het blijkt dat in het rekenvoorbeeld het numerieke proces voor het oplossen van de niet-gecentreerde vierde orde differentie-vergelijking niet stabiel te krijgen is; daarentegen verloopt het proces voor de gecentreerde vergelijking heel goed.

Ter verificatie van de in hoofdstuk 5 verkregen uitkomsten wordt in hoofdstuk 6 het proces gesimuleerd, en met de hand berekend. Een dergelijke simulatie is in het begin, dat wil zeggen voor kleine t , niet vergelijkbaar met een proces beschreven door een differentiaalvergelijking. Om voor kleine t toch zo eerlijk mogelijk te kunnen vergelijken, wordt een stationair of gebalanceerd proces gesimuleerd, waarbij de enkelvoudige puntinjectie wordt vervangen door verschillende puntinjecties op verschillende plaatsen.

Tenslotte worden in hoofdstuk 7 de uitkomsten, verkregen met behulp van verschillende methoden, met elkaar vergeleken en besproken.

2. TWEEDE ORDE VERGELIJKING

Het dispersie-proces kan bij benadering worden beschreven door vergelijking (1.3). Bij snelle convergentie van de coëfficiënten kan (1.3) op zijn beurt worden benaderd door de tweede orde vergelijking

$$y_t = -A y_x + B y_{xx} \quad (2.1)$$

of in gecentreerde vorm

$$y_t = B y_{xx} \quad (2.2)$$

Vergelijking (2.2) is niet anders dan de warmtegeleidingsvergelijking of diffusie-vergelijking. Uit het oogpunt van deze studie is de diffusie-vergelijking op te vatten als een bijzonder geval van de dispersie-vergelijking (1.8), waarbij de hogere orde termen worden verwaarloosd. In moleculaire diffusie is dit gerechtvaardigd, omdat de hogere machten van zeer kleine lengten, in feite lengten van moleculaire orde van grootte, verwaarloosbaar zijn ten opzichte van de lagere.

Puntinjectie als beginvoorwaarde

In een oneindige één-dimensionale ruimte, beheerst door vergelijking (2.1), wordt op het tijdstip $t=0$ in het punt $x=0$ een voldoende grote hoeveelheid deeltjes geïnjecteerd. Deze hoeveelheid is door de normering volgens (1.2) gelijk aan één. Mathematisch is deze beginvoorwaarde als volgt te formuleren.

$$t=0 \quad y(x,0) = \delta(x) \quad (2.3)$$

waarbij de delta-functie $\delta(x)$ de volgende betekenis heeft:

$$\int_{0-}^{0+} \delta(x) dx = 1 \quad \delta(x) = 0 \quad \text{voor } x \neq 0 \quad (2.4)$$

De analytische oplossing van dit probleem, (2.1) met (2.3), luidt:

$$y(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Bt}} \exp \left\{ -\frac{(x-At)^2}{4Bt} \right\} \quad (2.5)$$

Differentiatie van (2.5) geeft immers:

$$y_t = \frac{1}{2\sqrt{\pi Bt}} \left\{ -\frac{1}{2t} + \frac{(x-At)A}{2Bt} + \frac{(x-At)^2}{4Bt^2} \right\} \exp \left\{ -\frac{(x-At)^2}{4Bt} \right\} \quad (2.6)$$

$$-Ay_x = \frac{1}{2\sqrt{\pi Bt}} \cdot \frac{A(x-At)}{2Bt} \cdot \exp \left\{ -\frac{(x-At)^2}{4Bt} \right\} \quad (2.7)$$

$$By_{xx} = \frac{1}{2\sqrt{\pi Bt}} \left\{ -\frac{1}{2t} + \frac{(x-At)^2}{4Bt^2} \right\} \exp \left\{ -\frac{(x-At)^2}{4Bt} \right\} \quad (2.8)$$

De tweede term van (2.6) is gelijk aan (2.7), en de eerste en derde term van (2.6) samen is gelijk aan (2.8), zodat (2.5) voldoet aan de vergelijking (2.1).

Voor $t \rightarrow 0$ en $x \neq 0$ is $y(x,t)$ van de orde $\frac{1}{\sqrt{t}} \exp(-\frac{x^2}{t})$. De limiet hiervan is gelijk aan nul als t naar nul gaat. Indien echter x naar nul gaat wordt $y(x,t)$ oneindig groot. De integraal van $x=0^-$ tot $x=0^+$ blijft evenwel gelijk aan de integraal van (2.5) van $x=-\infty$ tot $x=+\infty$; er gaan immers geen deeltjes verloren en er komen geen deeltjes bij. De laatstgenoemde integraal is gelijk aan 1. Hiermee is aangetoond dat (2.5) zowel aan de differentiaalvergelijking (2.1) als aan de beginvoorwaarde (2.3) voldoet.

Voor een willekeurige waarde van t stelt de oplossing (2.5) een gaussische (of normale) verdelingsfunctie voor, met gemiddelde $\mu(x) = At$ en variantie $\sigma^2(x) = 2Bt$.

De gereduceerde momenten van (2.5), dat zijn de mathematische verwachtingswaarden van $(x-At)^n$ met $n = 0, 1, 2, \dots$, worden dan:

$$\overline{\mathcal{E}(x-At)^n} = \int_{-\infty}^{\infty} (x-At)^n y(x,t) dx \quad (2.9)$$

Er wordt hier opgemerkt dat in het hier beschouwde probleem mathematische verwachtingswaarden kunnen worden geïdentificeerd met gemiddelde waarden (aangegeven door een overstreep),

$$\overline{\mathcal{E}(x^n)} = \overline{x^n} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.10)$$

De berekening van (2.9) gaat als volgt. Substitutie van (2.5) in (2.9) geeft

$$\overline{(x-At)^n} = \int_{-\infty}^{\infty} (x-At)^n \frac{1}{2\sqrt{\pi Bt}} \exp\left\{-\frac{(x-At)^2}{4Bt}\right\} dx \quad (2.11)$$

De integrand is ten opzichte van $x=At$ symmetrisch voor even n , en antisymmetrisch voor oneven n . In het laatste geval is de integraal gelijk aan nul. Voor even n kan (2.11) worden vervangen door tweemaal de integraal van At tot ∞ . Met

$$\frac{(x-At)^2}{4Bt} = u \rightarrow (x-At) = 2(Bt)^{\frac{1}{2}} u^{\frac{1}{2}} \rightarrow dx = (Bt)^{\frac{1}{2}} u^{-\frac{1}{2}} du \quad (2.12)$$

gaat (2.11) over in

$$\begin{aligned} \overline{(x-At)^n} &= \int_0^{\infty} \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} (Bt)^{\frac{n}{2}} u^{\frac{n-1}{2}} \exp(-u) du = \\ &= \int_0^{\infty} \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} (Bt)^{\frac{n}{2}} u^{\frac{n+1}{2}-1} \exp(-u) du = \\ &= \frac{2^n}{\sqrt{\pi}} (Bt)^{\frac{n}{2}} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right) \quad \text{voor } n \text{ is even} \end{aligned} \quad (2.13)$$

waarbij Γ de gamma-functie voorstelt.

Voor $n=0$ is

$$\int_{-\infty}^{\infty} y(x,t) dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\pi} = 1 \quad (2.14)$$

overeenkomend met (1.2).

Voor $n=1$ is

$$\overline{x-At}=0 \text{ zodat } \bar{x}=\hat{E}(x)=\mu(x)=At \quad (2.15)$$

Voor $n=2$ is

$$\overline{(x-At)^2} = \frac{2^2}{\sqrt{\pi}} (Bt) \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{4 Bt}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\pi} = 2 Bt \quad (2.16)$$

overeenkomend met de variantie $\sigma^2(x) = 2 Bt$.

Voor $n=4$ is

$$\overline{(x-At)^4} = \frac{2^4}{\sqrt{\pi}} (Bt)^2 \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{16}{\sqrt{\pi}} (Bt)^2 \frac{3\sqrt{\pi}}{4} = 3 (2Bt)^2 \quad (2.17)$$

De oplossing van de gecentreerde vergelijking (2.2) met de beginvoorwaarde (2.3) luidt:

$$y(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Bt}} \exp\left\{-\frac{x^2}{4 Bt}\right\} \quad (2.18)$$

Dit is slechts een translatie over At van de oplossing (2.5).

Twee (of meer) gelijktijdige puntinjecties

Op het tijdstip $t=0$ worden er nu op twee verschillende plaatsen deeltjes geïnjecteerd, in het punt $x=x_1$ een hoeveelheid f_{01} deeltjes, en in het punt $x=x_2$ een hoeveelheid f_{02} . Er geldt

$$f_{01} + f_{02} = 1 \quad (2.19)$$

Mathematisch geformuleerd is de beginvoorwaarde

$$t=0 \quad y(x,0) = f_{01} \delta(x-x_1) + f_{02} \delta(x-x_2) \quad (2.20)$$

Volgens het superpositie-beginsel is nu de oplossing gelijk aan de som van de oplossingen van elke injectie apart:

$$y(x,t) = y_1(x,t) + y_2(x,t) \quad (2.21)$$

waarbij

$$y_1(x,t) = \frac{f_{01}}{2\sqrt{\pi Bt}} \exp \left\{ - \frac{(x-x_1-At)^2}{4 Bt} \right\} \quad (2.22)$$

$$y_2(x,t) = \frac{f_{02}}{2\sqrt{\pi Bt}} \exp \left\{ - \frac{(x-x_2-At)^2}{4 Bt} \right\} \quad (2.23)$$

Een uitbreiding naar een willekeurig aantal n gelijktijdige puntinjecties ter grootte f_{0k} in de punten x_k ($k=1,2,\dots,n$) ^{met} als beginvoorwaarde,

$$t=0 \quad y(x,0) = \sum_{k=1}^{k=n} f_{0k} \delta(x-x_k) \quad (2.24)$$

geeft als oplossing:

$$y(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Bt}} \sum_{k=1}^{k=n} f_{0k} \exp \left\{ - \frac{(x-x_k-At)^2}{4 Bt} \right\} \quad (2.25)$$

waarbij geldt

$$\sum_{k=1}^{k=n} f_{0k} = 1 \quad (2.26)$$

Dit geeft de mogelijkheid om een continue injectie (bedoeld wordt hier continu in de plaats x) gegeven door een willekeurige functie $f(x)$ in het interval (x_1, x_2) , aan te pakken. De beginvoorwaarde luidt nu:

$$\begin{aligned} t=0 \quad y(x,0) &= f(x) & \text{voor } x_1 < x < x_2 \\ &= 0 & \text{elders} \end{aligned} \quad (2.27)$$

De oplossing wordt dan:

$$y(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Bt}} \int_{x_1}^{x_2} f(\xi) \exp \left\{ -\frac{(x-\xi-At)^2}{4Bt} \right\} d\xi \quad (2.28)$$

waarbij ook gegeven is dat

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x) dx = 1 \quad (2.29)$$

In plaats van met behulp van de hierboven behandelde methode kan resultaat (2.28) ook worden gevonden door middel van een Fourier-transformatie (ref.3).

Aan het eind van dit hoofdstuk zal als voorbeeld de uitdrukking (2.28) worden uitgewerkt in het geval waarbij de beginvoorwaarde een normale verdelingsfunctie is.

Twee (of meer) niet-gelijktijdige puntinjecties

Er worden nu in het punt $x=0$ op twee verschillende tijdstippen deeltjes geïnjecteerd, op het tijdstip $t=t_1$ een hoeveelheid g_{01} deeltjes, en op het tijdstip $t=t_2$ een hoeveelheid g_{02} , waarbij voor $t > \max(t_1, t_2)$ geldt

$$g_{01} + g_{02} = 1 \quad (2.30)$$

De beginvoorwaarde wordt nu

$$t=t_k \quad y(x, t_k) = g_{0k} \delta(x) \quad k=1,2 \quad (2.31)$$

Superpositie geeft als oplossing, voor $t > \max(t_1, t_2)$,

$$y(x, t) = y_1(x, t) + y_2(x, t) \quad (2.32)$$

waarbij

$$y_k(x, t) = \frac{g_{0k}}{2\sqrt{\pi B(t-t_k)}} \exp \left[- \frac{\{x-A(t-t_k)\}^2}{4 B(t-t_k)} \right] \quad k=1,2 \quad (2.33)$$

Achtereenvolgende n injecties in het punt $x=0$ ter grootte g_{0k} deeltjes op de tijdstippen $t=t_k$ ($k=1,2,3, \dots, n$) geven dan als oplossing, voor $t > \max(t_k)$,

$$y(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi B}} \sum_{k=1}^{k=n} \frac{g_{0k}}{\sqrt{t-t_k}} \exp \left[- \frac{\{x-A(t-t_k)\}^2}{4 B(t-t_k)} \right] \quad (2.34)$$

Een continue injectie (bedoeld wordt nu: continu in de tijd t) in het punt $x=0$, ter grootte $g(t)$, gedurende het interval (t_1, t_2) , geeft nu als oplossing, voor $t > t_2$,

$$y(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi B}} \int_{t_1}^{t_2} \frac{g(\tau)}{\sqrt{t-\tau}} \exp \left[- \frac{\{x-A(t-\tau)\}^2}{4 B(t-\tau)} \right] d\tau \quad (2.35)$$

Analoog kunnen nu willekeurige beginvoorwaarden worden aangepakt, althans voor zover het probleem beheerst wordt door een tweede orde vergelijking.

Een normale verdeling als beginvoorwaarde

Een eenvoudig voorbeeld, waarbij de oplossing (2.28) analytisch kan worden uitgewerkt, is het geval waarbij de deeltjes op het tijdstip van injectie $t=t_0$, normaal zijn verdeeld. In formule:

$$t=t_0 \quad y(x, t_0) = f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_0} \exp \left\{ - \frac{(x-x_0)^2}{2 \sigma_0^2} \right\} \quad (2.36)$$

De beginverdeling is dus normaal, heeft een gemiddelde x_0 , en een variantie σ_0^2 .

Gevraagd is nu de verdeling van de deeltjes op een tijdstip $t (> t_0)$.

Het gemakkelijkst zou zijn, om de beginvoorwaarde (2.36) te beschouwen als het resultaat van een puntinjectie in het punt $x=0$ op het tijdstip $t=0$. Het resultaat van zo'n puntinjectie zou dan, op het tijdstip t_0 ,

$$y(x, t_0) = \frac{1}{2\sqrt{\pi B t_0}} \exp \left\{ - \frac{(x-At_0)^2}{4 B t_0} \right\} \quad (2.37)$$

Met $x_0=At_0$ en $\sigma_0^2=2Bt_0$ is (2.37) identiek met (2.36). De oplossing voor het tijdstip $t (> t_0)$ kan dan direct worden gevonden:

$$y(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi B t}} \exp \left\{ - \frac{(x-At)^2}{4 B t} \right\} \quad (2.38)$$

De vraag is nu of deze oplossing (2.38) ook kan worden verkregen door het uitwerken van (2.28).

Substitutie van (2.36) in (2.28), rekening houdend met $x_0=At_0$ en $\sigma_0^2=2Bt_0$, geeft:

$$y(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi B(t-t_0)}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\sqrt{\pi B t_0}} \exp \left\{ -\frac{(\xi - A t_0)^2}{4 B t_0} \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{\{x - \xi - A(t-t_0)\}^2}{4 B(t-t_0)} \right\} d\xi \quad (2.39)$$

De integraal in (2.39) wordt nu uitgewerkt. In de integrand is

$$\begin{aligned} \{x - \xi - A(t-t_0)\}^2 &= \{(\xi - A t_0) - (x - A t)\}^2 = \\ &= (\xi - A t_0)^2 - 2(\xi - A t_0)(x - A t) + (x - A t)^2 \end{aligned} \quad (2.40)$$

Met de substitutie

$$\xi - A t_0 = u \quad d\xi = du \quad (2.41)$$

gaat (2.39) over in:

$$y(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi B(t-t_0)}} \cdot \frac{1}{2\sqrt{\pi B t_0}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{u^2}{4 B t_0} \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{u^2 - 2u(x - A t) + (x - A t)^2}{4 B(t-t_0)} \right\} du \quad (2.42)$$

De integrand van (2.42) wordt

$$\begin{aligned} &\exp \left\{ -u^2 \left\{ \frac{1}{4 B t_0} + \frac{1}{4 B(t-t_0)} \right\} + u \frac{2(x - A t)}{4 B(t-t_0)} - \frac{(x - A t)^2}{4 B(t-t_0)} \right\} = \\ &= \exp \left\{ -u^2 \frac{t}{4 B t_0(t-t_0)} + 2u \frac{(x - A t)}{4 B(t-t_0)} - \frac{(x - A t)^2}{4 B(t-t_0)} \right\} \end{aligned} \quad (2.43)$$

Deze uitdrukking is direct integreerbaar. Wordt ter afkorting even gesteld

$$a = \frac{t}{4 B t_0 (t-t_0)} \quad (2.44)$$

$$b = \frac{(x-At)}{4 B (t-t_0)} \quad (2.45)$$

$$c = \frac{(x-At)^2}{4 B (t-t_0)} \quad (2.46)$$

dan is

$$-(au^2 - 2bu + c) = - \left\{ (\sqrt{a} \cdot u - \frac{b}{\sqrt{a}})^2 + \left(c - \frac{b^2}{a} \right) \right\} \quad (2.47)$$

Substitutie van

$$\sqrt{a} \cdot u - \frac{b}{\sqrt{a}} = v \quad dv = \sqrt{a} \cdot du \quad (2.48)$$

geeft, met (2.44),

$$du = 2 \sqrt{\frac{B t_0 (t-t_0)}{t}} \cdot dv \quad (2.49)$$

Met al deze substituties gaat tenslotte de integraal (2.42) over in:

$$\begin{aligned} y(x,t) &= \frac{1}{2\pi\sqrt{Bt}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -v^2 - \left(c - \frac{b^2}{a} \right) \right\} dv = \\ &= \frac{1}{2\pi\sqrt{Bt}} \exp \left(-c + \frac{b^2}{a} \right) \cdot 2 \int_0^{\infty} \exp(-v^2) dv = \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2\pi\sqrt{Bt}} \exp\left(-c + \frac{b^2}{a}\right) \cdot \sqrt{\pi} = \frac{1}{2\sqrt{\pi Bt}} \exp\left(-c + \frac{b^2}{a}\right) \quad (2.50)$$

Het laatste deel van (2.50) is wegens (2.44), (2.45), (2.46) gelijk aan

$$\begin{aligned} -c + \frac{b^2}{a} &= -\frac{(x-At)^2}{4B(t-t_0)} + \frac{(x-At)^2}{16B^2(t-t_0)^2} \cdot \frac{4Bt_0(t-t_0)}{t} = \\ &= -\frac{(x-At)^2}{4B(t-t_0)} \left(1 - \frac{t_0}{t}\right) = -\frac{(x-At)^2}{4Bt} \end{aligned} \quad (2.51)$$

zodat (2.50) wordt

$$y(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Bt}} \exp\left\{-\frac{(x-At)^2}{4Bt}\right\} \quad (2.52)$$

De uitdrukking (2.52) is identiek met (2.38), hetgeen te bewijzen was.

3. DERDE ORDE VERGELIJKING

Een volgende benadering van vergelijking (1.3) is de volgende derde orde vergelijking

$$y_t = -Ay_x + By_{xx} - Cy_{xxx} \quad (3.1)$$

of in gecentreerde vorm

$$y_t = By_{xx} - Cy_{xxx} \quad (3.2)$$

Er zijn pogingen ondernomen om (3.1) of (3.2) analytisch op te lossen. Bekende methoden, zoals Laplace-transformatie, Fourier-transformatie, zowel naar de tijd t als naar de plaats x , hebben tot dusver, zelfs met een zeer eenvoudige beginvoorwaarde, geen resultaten opgeleverd. Een numerieke methode is dan de aangewezen weg. Er wordt gekozen voor de differentie-methode.

Differentie-methode

De één-dimensionale plaats- en tijd-ruimte, of kortweg de xt -ruimte, wordt bedekt door een rooster met equidistante maaswijdten, $k=\Delta x$ in de x -richting en $h=\Delta t$ in de t -richting. Uit de aard van het probleem kan worden gesteld dat, als de situatie op een bepaald tijdstip t_1 bekend is, hieruit de situatie op het tijdstip $t_1 + \Delta t$ kan worden afgeleid.

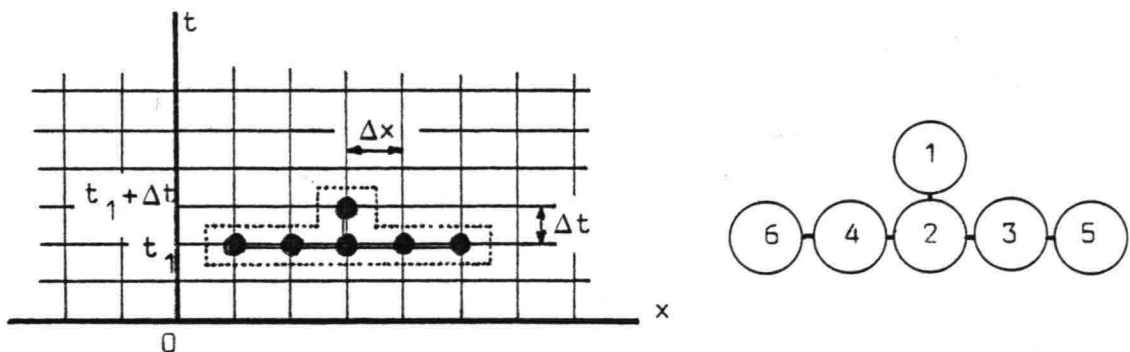


Fig.1. Roosterverdeling van de xt -ruimte, en molecuule-configuratie ten behoeve van de differentie-methode

Een derde orde vergelijking vereist een zodanige configuratie (zie figuur 1), dat de functiewaarde in punt 1 beïnvloed wordt door de functiewaarden in de punten 2,3, 4,5,6. Het is gebruikelijk om een dergelijke configuratie een molecule te noemen. Voor de diffusie-vergelijking, een tweede orde vergelijking, bestaat de molecule slechts uit de punten 1,2,3,4 (zie bijvoorbeeld ref.4, blz. 662). Wordt zo'n molecule nu in de x-richting bewogen, dan kunnen alle functiewaarden op het tijdstip $t_1 + \Delta t$ worden bepaald uit de functiewaarden op het tijdstip t_1 . Er wordt uiteraard gestart op het tijdstip $t=0$, waarbij de functiewaarden als beginvoorwaarden zijn gegeven. De benodigde molecule zal nu worden afgeleid. Daarna zal de stabiliteit van het numerieke proces worden beschouwd.

Afleiding van de molecule

Bij de gegeven vergelijking (3.1) of (3.2) moet er een betrekking worden afgeleid tussen de functiewaarden 1,2, 3,4,5,6. Dit kan met behulp van een ontwikkeling in een Taylor-reeks van de functies 1,3,4,5,6 in de omgeving van 2.

$$y_1 = y_2 + h(y_t)_2 + O(h^2) \quad (3.3)$$

Een cijfer-index geeft de plaats aan in de molecule, en een letter-index betekent partiële differentiatie. De term $O(h^2)$ geeft aan dat de afbreekfout in de reeks van Taylor van de orde h^2 is. Hoewel dit steeds wordt gedaan, zal er geen foutenanalyse in de beschouwing worden opgenomen. Uit (3.3) volgt

$$(y_t)_2 = (y_1 - y_2)/h + O(h) \quad (3.4)$$

Uit de Taylor-reeksontwikkeling in de x-richting, waarbij ter vereenvoudiging van de notatie partiële differentiatie naar x met een accent wordt aangegeven, wordt gevonden:

$$y_3 = y_2 + ky_2' + k^2 y_2''/2! + k^3 y_2'''/3! + O(k^4) \quad (3.5)$$

$$y_4 = y_2 - ky_2' + k^2 y_2''/2! - k^3 y_2'''/3! + O(k^4) \quad (3.6)$$

$$y_5 = y_2 + 2ky_2' + 4k^2 y_2''/2! + 8k^3 y_2'''/3! + O(k^4) \quad (3.7)$$

$$y_6 = y_2 - 2ky_2' + 4k^2 y_2''/2! - 8k^3 y_2'''/3! + O(k^4) \quad (3.8)$$

Optellen van (3.5) bij (3.6), en (3.7) bij (3.8), geeft:

$$y_3 + y_4 = 2y_2 + k^2 y_2'' + O(k^4) \quad (3.9)$$

$$y_5 + y_6 = 2y_2 + 4k^2 y_2'' + O(k^4) \quad (3.10)$$

De uitdrukking (3.6) van (3.5) afgetrokken, en (3.8) van (3.7), geeft:

$$y_3 - y_4 = 2ky_2' + k^3 y_2'''/3 + O(k^5) \quad (3.11)$$

$$y_5 - y_6 = 4ky_2' + 8k^3 y_2'''/3 + O(k^5) \quad (3.12)$$

De afbreekfout in (3.11) en (3.12) is van de orde k^5 , aangezien de termen met k^4 wegvallen.

Uit (3.9) en (3.10) volgen nu twee verschillende uitdrukkingen voor y_2'' :

$$y_2'' = (-2y_2 + y_3 + y_4)/k^2 + O(k^2) \quad (3.13)$$

$$y_2'' = (-2y_2 + y_5 + y_6)/(4k^2) + O(k^2) \quad (3.14)$$

De vrijheid om zowel (3.13) als (3.14) te gebruiken, biedt de mogelijkheid om een nader te kiezen parameter α in te voeren,

$$y_2'' = \alpha y_2''(3.13) + (1-\alpha)y_2''(3.14) \quad (3.15)$$

De parameter α kan worden gebruikt om de stabiliteit van het numerieke proces te beïnvloeden. In de regel zal α tussen 0 en 1 worden genomen.

Uit (3.11) en (3.12) kunnen y_2' en y_2'' worden 'opgelost':

$$y_2' = (8y_3 - 8y_4 - y_5 + y_6)/(12k) + O(k^4) \quad (3.16)$$

$$y_2'' = (-2y_3 + 2y_4 + y_5 - y_6)/(2k^3) + O(k^2) \quad (3.17)$$

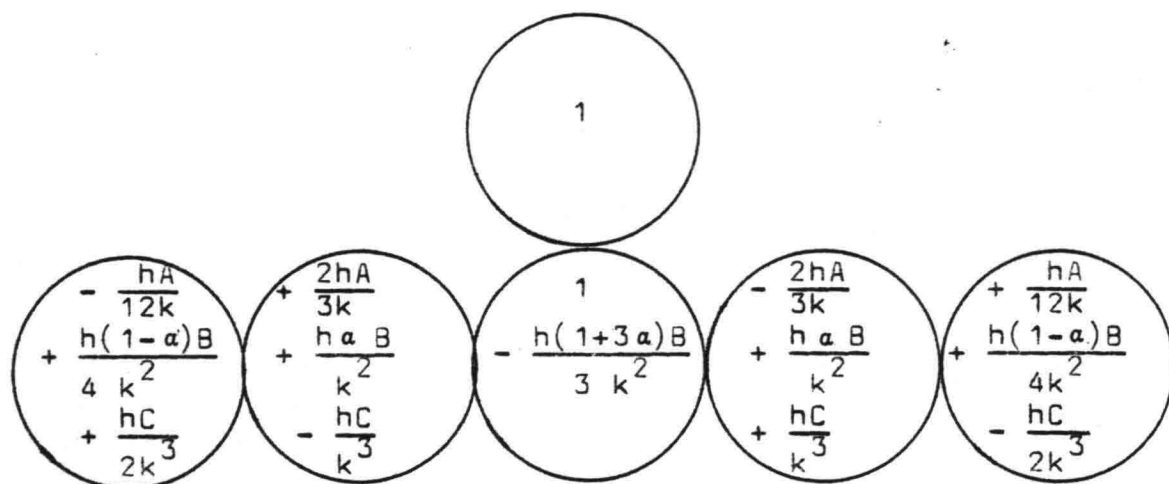
Substitutie van (3.4), (3.13), (3.14), (3.15), (3.16), en (3.17) in de differentiaalvergelijking (3.1) geeft

$$\begin{aligned} \frac{(y_1 - y_2)}{h} + O(h) = & -\frac{A}{12k} (8y_3 - 8y_4 - y_5 + y_6) + O(k^4) + \\ & + \frac{B}{4k^2} \left\{ -(2+6\alpha)y_2 + 4\alpha y_3 + 4\alpha y_4 + (1-\alpha)(y_5 + y_6) \right\} + O(k^2) + \\ & - \frac{C}{2k^3} (-2y_3 + 2y_4 + y_5 - y_6) + O(k^2) \end{aligned} \quad (3.18)$$

waaruit volgt:

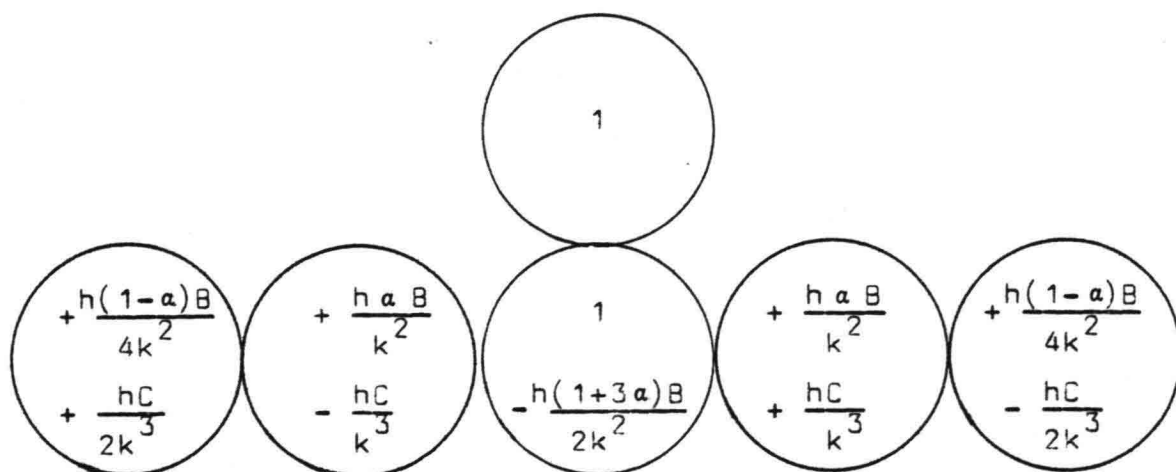
$$\begin{aligned} y_1 = y_2 + & \frac{hA}{12k} (-8y_3 + 8y_4 + y_5 - y_6) + \\ & + \frac{hB}{4k^2} \left\{ -(2+6\alpha)y_2 + 4\alpha y_3 + 4\alpha y_4 + (1-\alpha)y_5 + (1-\alpha)y_6 \right\} + \\ & + \frac{hC}{2k^3} (2y_3 - 2y_4 - y_5 + y_6) + O(h^2, hk^2) \end{aligned} \quad (3.19)$$

De molecule ziet er dan als volgt uit:

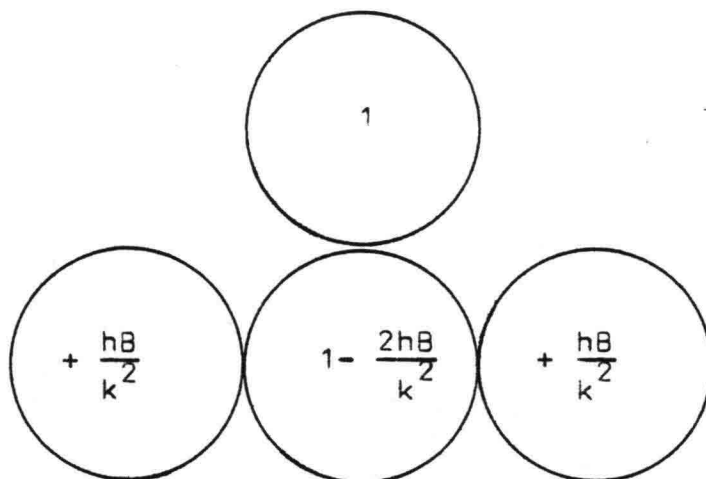


De molecule geldt voor willekeurige waarden van A, B, C. De som van de coëfficiënten van A, van B, en van C, is elk gelijk aan nul. In het dispersie-probleem betekent dit, dat er geen deeltjes bij komen of verloren gaan. Een onnauwkeurigheid in een numeriek proces is echter niet altijd te vermijden.

Voor de gecentreerde vergelijking (3.2) wordt de molecule:



Voor $C=0$ en $\alpha=1$ wordt de bekende molecule van de diffusie-vergelijking verkregen (zie bijvoorbeeld ref. 4 blz.662):



Stabiliteit van het numerieke proces

De stapgrootten h (in de t -richting) en k (in de x -richting) zijn per definitie groter dan nul. Ze mogen echter niet willekeurig gekozen worden. Ter wille van de stabiliteit van het proces moeten h en k aan ~~de volgende~~ ^{bepaalde} eisen voldoen.

Wordt het numerieke proces beschouwd als een zuiver wiskundige procedure, dan kan een fouten-analyse resulteren in voorwaarden waaraan h en k moeten voldoen om stabiliteit te verzekeren. In deze studie wordt echter de voorkeur gegeven aan fysische (achter-)gronden.

In het dispersie-probleem stellen de 'atomen' van de molecule voor de hoeveelheden deeltjes die worden verplaatst. Elk 'atoom' van de molecule moet derhalve altijd groter dan of gelijk aan nul zijn. Alle punten van de molecule zullen nu worden bekeken.

Naast h, k, α die altijd positief zijn, wordt hier er van uitgegaan dat ook de coëfficiënten A, B, C positief zijn. Dit laatste is bewerkstelligd door de keuze van de tekens in de differentiaalvergelijking.

Punt 1 (=1) geeft geen moeilijkheden.

$$\text{Punt 2: } 1 - h(1 + 3\alpha)B / (2k^2) \geq 0 \quad (3.20)$$

Hieruit volgt een voorwaarde voor de verhouding van h en k:

$$h \leq \frac{2}{(1+3\alpha)B} k^2 \quad (3.21)$$

$$\text{Punt 3: } -\frac{2h}{3k} A + \frac{ha}{k^2} B + \frac{h}{k^3} C \geq 0 \quad (3.22)$$

Hieruit volgt

$$k \leq \frac{3\alpha B + \sqrt{9\alpha^2 B^2 + 24 AC}}{4 A} \quad (3.23)$$

$$\text{Punt 4: } +\frac{2h}{3k} A + \frac{ha}{k^2} B - \frac{h}{k^3} C \geq 0 \quad (3.24)$$

Hieruit volgt

$$k \geq \frac{-3\alpha B + \sqrt{9\alpha^2 B^2 + 24 AC}}{4 A} \quad (3.25)$$

$$\text{Punt 5: } \frac{h}{12k} A + \frac{h(1-\alpha)}{4k^2} B - \frac{h}{2k^3} C \geq 0 \quad (3.26)$$

Hieruit volgt

$$k \geq \frac{-3(1-\alpha)B + \sqrt{9(1-\alpha)^2 B^2 + 24 AC}}{2 A} \quad (3.27)$$

$$\text{Punt 6: } -\frac{h}{12k} A + \frac{h(1-\alpha)}{4k^2} B + \frac{h}{2k^3} C \geq 0 \quad (3.28)$$

Hieruit volgt

$$k \leq \frac{3(1-\alpha)B + \sqrt{9(1-\alpha)^2 B^2 + 24 AC}}{2 A} \quad (3.29)$$

De stapgrootte k moet dus voldoen aan de voorwaarden (3.23),

(3.25), (3.27), (3.29). De grenzen, waartussen k moet liggen, hangen af van de coëfficiënten A, B, C van de differentiaalvergelijking, en van de parameter α . Is, voor een bepaald probleem, k eenmaal gekozen, dan moet h (stapgrootte in de tijd) voldoen aan de voorwaarde (3.21). In de praktijk kan men wel eens gedwongen worden om een zeer kleine stapgrootte h te nemen. Dit leed kan enigszins worden verzacht door, zonder de stabiliteit van het proces aan te tasten, een geschiktere α te kiezen.

In het bijzonder wordt nu gekeken naar de invloed van de coëfficiënt A op de stabiliteit. Voor zeer grote waarden van A bestaat de kans dat het proces niet stabiel te krijgen is. Immers, de voorwaarden (3.23) of (3.29) kunnen onverenigbaar blijken te zijn met de voorwaarden (3.25) of (3.27). Maar zelfs als het proces bij grote A stabiel te krijgen is, is het nog maar zeer de vraag of de invloed van A op de nauwkeurigheid van de numerieke uitkomsten niet een te grote rol gaat spelen. Fysisch betekent A de gemiddelde snelheid waarmee de deeltjes zich verplaatsen. Is deze snelheid groot, dan kan het numerieke proces het werkelijke proces als het ware niet bijhouden. Een onderzoek hieromtrent valt echter buiten het kader van deze verhandeling.

Tegen het hierbovengenoemde euvel is er een eenvoudig middel. De coëfficiënt A wordt gewoon geëlimineerd, met andere woorden: er wordt overgegaan op de gecentreerde vergelijking (3.2). Dit betekent dat de oorsprong van het coördinatenstelsel meereist over de gemiddelde afstand At . Voor de gecentreerde vergelijking (3.2) zijn de eisen voor de stapgrootte k wat milder. Na uitwerking komt dit neer op

$$k \geq \max \left\{ \frac{C}{\alpha B}, \frac{2C}{(1-\alpha)B} \right\} \quad (3.30)$$

Aan de voorwaarde (3.30) kan, bij redelijke keuze van α , vrijwel altijd worden voldaan. Uiteraard mag α niet gelijk zijn aan nul (zie ook punt 4 van de molecule), en ook niet gelijk zijn aan 1 (zie ook punt 6 van de molecule), aangezien het proces dan instabiel wordt.

Uit de beschouwing van de molecule voor de diffusie-verge-lijking, blijkt dat er aan de stapgrootte k geen eisen worden gesteld. Dit blijkt ook uit de voorwaarde (3.30) indien daarin $C=0$ wordt gesubstitueerd.

Vanzelfsprekend geldt nog steeds de voorwaarde (3.21) voor de stapgrootte h ,

$$h \leq \frac{k^2}{2B} \quad (3.31)$$

De voorwaarde (3.31) kan ook worden gevonden door de processen afrondfouten te schrijven als een Fourier-reeks (of, indien nodig als een Fourier-integraal), en aan de doorwerking hiervan beperkingen op te leggen (ref.4, blz.663 en 664).

4. VIERDE ORDE VERGELIJKING

Een volgende benadering van vergelijking (1.3) is de volgende vierde orde vergelijking

$$y_t = -Ay_x + By_{xx} - Cy_{xxx} + Dy_{xxxx} \quad (4.1)$$

of in gecentreerde vorm

$$y_t = By_{xx} - Cy_{xxx} + Dy_{xxxx} \quad (4.2)$$

Evenals bij de derde orde vergelijking, wordt voor het oplossen van (4.1) of (4.2) ook gekozen voor de differentiemethode.

Differentie-methode

Dezelfde molecule-configuratie als in het vorige hoofdstuk kan worden gebruikt. De 'atomen' van de molecule zien er echter anders uit; deze bevatten nu naast A,B,C ook de coëfficiënt D. Hierdoor worden de voorwaarden voor de stapgrootten h en k, ten behoeve van de stabiliteit van het proces, ook anders. Er volgt nu een betoog dat geheel analoog verloopt als bij de derde orde vergelijking.

Afleiding van de molecule

De Taylor-reeksontwikkeling in de t-richting in de omgeving van punt 2, zie figuur 1, resulteert in dezelfde uitdrukkingen (3.3) en (3.4). Maar in de x-richting moeten uit de reeks van Taylor nu ook de vierde afgeleiden worden meegenomen.

$$y_3 = y_2 + k y_2' + k^2 y_2''/2! + k^3 y_2'''/3! + k^4 y_2''''/4! + 0(k^5) \quad (4.3)$$

$$y_4 = y_2 - k y_2' + k^2 y_2''/2! - k^3 y_2'''/3! + k^4 y_2''''/4! + 0(k^5) \quad (4.4)$$

$$y_5 = y_2 + 2ky_2' + 4k^2 y_2''/2! + 8k^3 y_2'''/3! + 16k^4 y_2''''/4! + O(k^5) \quad (4.5)$$

$$y_6 = y_2 - 2ky_2' + 4k^2 y_2''/2! - 8k^3 y_2'''/3! + 16k^4 y_2''''/4! + O(k^5) \quad (4.6)$$

Optellen van (4.3) bij (4.4), en (4.5) bij (4.6) geeft

$$y_3 + y_4 = 2y_2 + k^2 y_2'' + \frac{k^4}{12} y_2'''' + O(k^6) \quad (4.7)$$

$$y_5 + y_6 = 2y_2 + 4k^2 y_2'' + \frac{4k^4}{3} y_2'''' + O(k^6) \quad (4.8)$$

De restterm van (4.7) en (4.8) is van de orde k^6 , aangezien de termen met k^5 wegvallen.

De uitdrukking (4.4) van (4.3) afgetrokken, en (4.6) van (4.5) geeft

$$y_3 - y_4 = 2ky_2' + \frac{k^3}{3} y_2''' + O(k^5) \quad (4.9)$$

$$y_5 - y_6 = 4ky_2' + \frac{8k^3}{3} y_2''' + O(k^5) \quad (4.10)$$

Uit (4.7) en (4.8) kunnen de afgeleiden y_2' en y_2'''' worden uitgedrukt in de functiewaarden y_2, y_3, y_4, y_5, y_6 .

$$y_2' = \frac{1}{12k^2} (-30y_2 + 16y_3 + 16y_4 - y_5 - y_6) + O(k^4) \quad (4.11)$$

$$y_2'''' = \frac{1}{4k} (+6y_2 - 4y_3 - 4y_4 + y_5 + y_6) + O(k^2) \quad (4.12)$$

Ook (4.9) en (4.10) kunnen worden opgevat als twee vergelijkingen in y_2' en y_2''' . Hieruit zijn deze afgeleiden uit te drukken in de functiewaarden y_3, y_4, y_5, y_6 .

$$y_2' = \frac{1}{12k} (+8y_3 - 8y_4 - y_5 + y_6) + O(k^4) \quad (4.13)$$

$$y_2''' = \frac{1}{2k^3} (-2y_3 + 2y_4 + y_5 - y_6) + O(k^2) \quad (4.14)$$

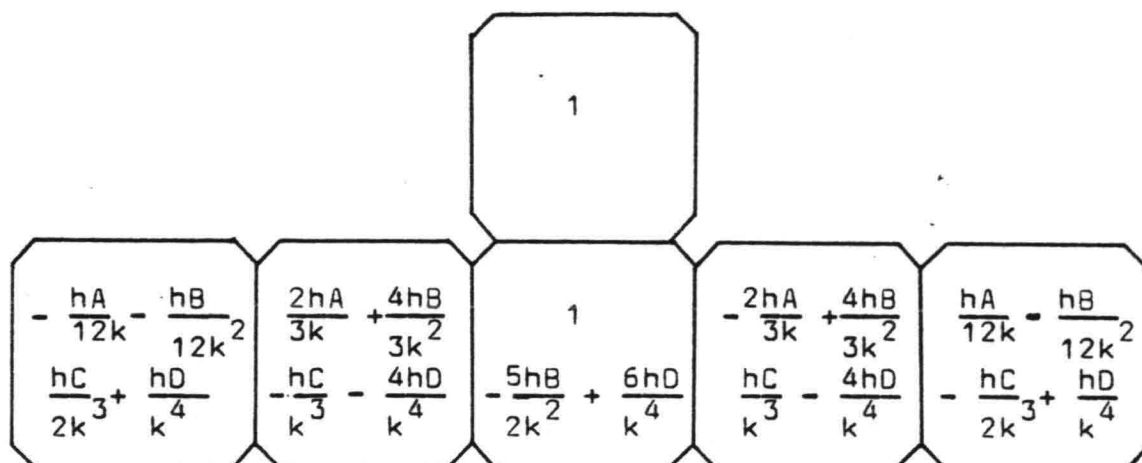
Substitutie van (3.4), (4.11), (4.12), (4.13), (4.14) in de differentiaalvergelijking (4.1) geeft

$$\begin{aligned} \frac{(y_1 - y_2)}{h} + O(h) = & -\frac{A}{12k} (8y_3 - 8y_4 - y_5 + y_6) + O(k^4) + \\ & + \frac{B}{12k^2} (-30y_2 + 16y_3 + 16y_4 - y_5 - y_6) + O(k^4) + \\ & - \frac{C}{2k^3} (-2y_3 + 2y_4 + y_5 - y_6) + O(k^2) + \\ & + \frac{D}{k^4} (+6y_2 - 4y_3 - 4y_4 + y_5 + y_6) + O(k^2) \end{aligned} \quad (4.15)$$

waaruit volgt

$$\begin{aligned} y_1 = y_2 + & \frac{hA}{12k} (-8y_3 + 8y_4 + y_5 - y_6) + \\ & + \frac{hB}{12k^2} (-30y_2 + 16y_3 + 16y_4 - y_5 - y_6) + \\ & + \frac{hC}{2k^3} (2y_3 - 2y_4 - y_5 + y_6) + \\ & + \frac{hD}{k^4} (6y_2 - 4y_3 - 4y_4 + y_5 - y_6) + O(h^2, hk^2) \end{aligned} \quad (4.16)$$

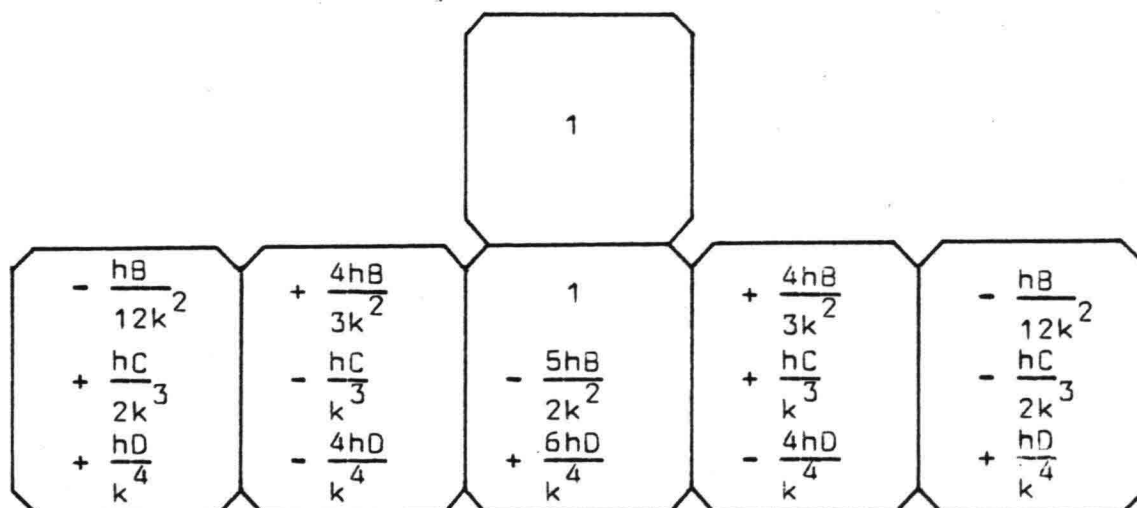
De molecule ziet er dan als volgt uit:



Evenals bij de derde orde vergelijking, geldt de molecule voor willekeurige waarden van A, B, C, D. De som van de coëfficiënten van A, van B, van C, en van D is elk gelijk aan nul. Er gaan geen deeltjes verloren, er komen ook geen deeltjes bij.

Er dient hier te worden opgemerkt, dat bij de vierde orde vergelijking de vrijheid om over een parameter α te beschikken, zoals dat het geval is bij de derde orde vergelijking, ontbreekt. De parameter α heeft hier als het ware een vaste waarde gekregen; voor $\alpha = \frac{4}{3}$ komen, afgezien van D, de overeenkomstige termen van beide moleculen, die van de derde en vierde orde vergelijking, overeen. Het gemis van α betekent, dat langs deze weg de stabiliteit van het proces niet te beïnvloeden is.

Voor de gecentreerde vergelijking wordt de molecule:



Stabiliteit van het numerieke proces

Elk 'atoom' van de molecule moet groter dan of gelijk aan nul zijn. Alle punten van de molecule zullen nu worden bekeken.

Punt 1 (=1) geeft geen moeilijkheden.

$$\text{Punt 2: } 1 - \frac{5hB}{2k^2} + \frac{6hD}{k^4} \geq 0 \quad (4.17)$$

waaruit volgt een voorwaarde voor de stapgrootte h bij gegeven stapgrootte k,

$$h \leq \frac{2k^4}{5Bk^2 - 12D} \quad (4.18)$$

$$\text{Punt 3: } -\frac{2hA}{3k} + \frac{4hB}{3k^2} + \frac{hC}{k^3} - \frac{4hD}{k^4} \geq 0 \quad (4.19)$$

Hieruit volgt

$$-2Ak^3 + 4Bk^2 + 3Ck - 12D \geq 0 \quad (4.20)$$

$$\text{Punt 4: } \frac{2hA}{3k} + \frac{4hB}{3k^2} - \frac{hC}{k^3} - \frac{4hD}{k^4} \geq 0 \quad (4.21)$$

Hieruit volgt

$$+ 2Ak^3 + 4Bk^2 - 3Ck - 12D \geq 0 \quad (4.22)$$

$$\text{Punt 5: } \frac{hA}{12k} - \frac{hB}{12k^2} - \frac{hC}{2k^3} + \frac{hD}{k^4} \geq 0 \quad (4.23)$$

Hieruit volgt

$$Ak^3 - Bk^2 - 6Ck + 12D \geq 0 \quad (4.24)$$

$$\text{Punt 6: } -\frac{hA}{12k} - \frac{hB}{12k^2} + \frac{hC}{2k^3} + \frac{hD}{k^4} \geq 0 \quad (4.25)$$

Hieruit volgt

$$-Ak^3 - Bk^2 + 6Ck + 12D \geq 0 \quad (4.26)$$

Het kan gebeuren, zoals later uit een rekenvoorbeeld zal blijken, dat er geen k te vinden is, die aan alle voorwaarden (4.20), (4.22), (4.24), (4.26) voldoet. Met andere woorden, wat men voor stapgrootte k ook kiest, het proces is, in zo'n geval, niet stabiel te krijgen. Er staan dan twee wegen open, een andere molecule-configuratie nemen, of met dezelfde molecule-configuratie overgaan op de gecentreerde vergelijking. Dan zijn, in het laatstgenoemde geval, de voorwaarden voor de stapgrootte k wat milder. Deze zijn:

$$4Bk^2 + 3Ck - 12D \geq 0 \quad (4.27)$$

$$4Bk^2 - 3Ck - 12D \geq 0 \quad (4.28)$$

$$-8k^2 - 6Ck + 12D \geq 0 \quad (4.29)$$

$$-8k^2 + 6Ck + 12D \geq 0 \quad (4.30)$$

In het rekenvoorbeeld zal blijken dat een stapgrootte k kan worden gekozen die aan deze voorwaarden voldoet.

5. REKENVOORBEELD

Probleemstelling

Ter illustratie van de in de vorige hoofdstukken behandelde methoden, zal een rekenvoorbeeld op verschillende manieren worden uitgewerkt. Hiervoor wordt genomen een sterk vereenvoudigd spreidingsmechanisme, opererend in de ééndimensionale ruimte. De plaats in de ruimte wordt bepaald door de coördinaat x . In het punt $x=0$ wordt nu een voldoende groot aantal deeltjes gelijktijdig, op het tijdstip $t=0$, losgelaten. Waar bevinden die deeltjes zich op een gegeven moment $t (> 0)$. Met andere woorden, hoe is de verdeling van de deeltjes in de ruimte x op een gegeven tijdstip t .

Uit de basisgegevens van het spreidingsmechanisme worden de coëfficiënten van de differentiaalvergelijking bepaald. Daarna kunnen de oplosmethoden op het probleem worden beproefd.

Basisgegevens van het spreidingsmechanisme

Het spreidingsmechanisme wordt gerepresenteerd door een mathematisch-fysisch model dat in 1957 door De Josselin de Jong is geïntroduceerd bij de berekening van de spreiding van zout door stromend water in een poreus medium (ref.5). Dit model zal hier worden gebruikt.

De ééndimensionale ruimte (met coördinaat x) wordt gelijkmatig bedekt door M soorten kanaaltjes, genummerd $m=1,2,\dots,M$. De kanaaltjes liggen alle in de x -richting en zijn onderling verbonden. Ze voldoen aan de volgende eisen:

1. Een deeltje, dat een kanaal van de m -de soort binnenkomt, doorloopt de gehele lengte ξ_m van het kanaal gedurende de tijd τ_m .
2. De kans, dat een deeltje een kanaal van de m -de soort kiest, bedraagt g_m . Er wordt aangenomen dat een deeltje altijd een kanaal kiest, zodat geldt:

$$\sum_{m=1}^{m=M} g_m = 1 \quad (5.1)$$

3. Treedt een deeltje uit een kanaal, dan is de kans g_m , dat het volgende er een van de m -de soort is, onafhan-

kelijk van de soort van het vorige kanaal.

In het hier beschouwde rekenvoorbeeld zijn gegeven:

$$\begin{array}{cccc}
 M=3 & \xi_1=0,4 & \tau_1=0,1 & g_1=0,4 \\
 & \xi_2=0,1 & \tau_2=0,2 & g_2=0,3 \\
 & \xi_3=0,2 & \tau_3=0,3 & g_3=0,3
 \end{array} \quad \left. \vphantom{\begin{array}{cccc} M=3 & \xi_1=0,4 & \tau_1=0,1 & g_1=0,4 \\ & \xi_2=0,1 & \tau_2=0,2 & g_2=0,3 \\ & \xi_3=0,2 & \tau_3=0,3 & g_3=0,3 \end{array}} \right\} \quad (5.2)$$

Differentiaalvergelijking

Uit de basisgegevens kunnen worden bepaald de constante coëfficiënten van de differentiaalvergelijking

$$y_t = -Ay_x + By_{xx} - Cy_{xxx} + Dy_{xxxx} - Ey_{xxxxx} + \dots \quad (5.3)$$

Hiertoe worden eerst de momenten $\overline{\xi^i \tau^j}$ ($i=0,1,2,\dots; j=0,1,2,\dots$) bepaald. Ze kunnen in dit probleem worden geïdentificeerd met gemiddelde waarden of mathematische verwachtingswaarden.

$$E(\xi^i \tau^j) = \overline{\xi^i \tau^j} = \sum_{m=1}^{m=M} g_m \xi^i \tau^j \quad (5.4)$$

Uit de eerste orde momenten $\overline{\xi}$ ($i=1; j=0$) en $\overline{\tau}$ ($i=0; j=1$) volgt de gemiddelde snelheid \overline{v} in een kanaal,

$$\overline{v} = \overline{\xi} / \overline{\tau} = \frac{0,25}{0,19} = 1,3157894 \quad (5.5)$$

Het aantal cijfers achter de komma is ietwat overdreven. Dit dient slechts ter vergelijking met andere uitkomsten, en heeft verder geen praktische betekenis.

De gemiddelde snelheid \overline{v} van een deeltje in een kanaal is tevens de gemiddelde snelheid van de deeltjes gedurende het gehele proces (ref.2), zodat de eerste coëfficiënt A van de differentiaalvergelijking bekend is,

$$A = \overline{v} = 1,3157894 \quad (5.6)$$

Voor de bepaling van de andere coëfficiënten worden eerst

de verwachtingswaarden of gemiddelde waarden van $(\xi - \bar{v}\tau)^i$ ($i=2,3, \dots$) bepaald (ref.2),

$$\overline{(\xi - \bar{v}\tau)^i} = \sum_{j=0}^{j=i} (-1)^j \xi^j \bar{v}^{i-j} \tau^{i-j} = \sum_{j=0}^{j=i} (-1)^j \bar{v}^{i-j} \overline{(\xi^j \tau^{i-j})} \quad (5.7)$$

Door substitutie van (5.4) in (5.7) zijn de gemiddelde waarden $\overline{(\xi - \bar{v}\tau)^i}$ volledig bepaald. Hieruit volgen de andere coëfficiënten van de differentiaalvergelijking (ref.2),

$$B = \overline{(\xi - \bar{v}\tau)^2} / (2!\bar{\tau}) = 0,1267969 \quad (5.8)$$

$$C = \overline{(\xi - \bar{v}\tau)^3} / (3!\bar{\tau}) = 0,00369948 \quad (5.9)$$

$$D = \overline{(\xi - \bar{v}\tau)^4} / (4!\bar{\tau}) = 0,00059660125 \quad (5.10)$$

$$E = \overline{(\xi - \bar{v}\tau)^5} / (5!\bar{\tau}) = 0,000019239759 \quad (5.11)$$

Het laat zich aanzien dat de coëfficiënten van de differentiaalvergelijking snel convergeren.

Benadering door tweede orde vergelijking

Zoals in hoofdstuk 2 is beschreven heeft de differentiaalvergelijking

$$y_t = -1,3157894 y_x + 0,1267969 y_{xx} \quad (5.12)$$

met beginvoorwaarde

$$t=0 \quad y(x,0) = \delta(x) \quad (5.13)$$

volgens (2.5), als oplossing, voor $t > 0$,

$$y(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sqrt{0,2535938 t}} \exp \left\{ - \frac{(x - 1,3157894 t)^2}{2 \cdot 0,2535938 t} \right\} \quad (5.14)$$

Voor elke $t > 0$ is (5.14) een normale (gaussische) verdeling. Ter vergelijking met andere uitkomsten wordt $t=0,35$ gekozen. Het gemiddelde $\mu(x)$ en de variantie $\sigma^2(x)$ worden dan:

$$\mu(x) = \bar{x} = At = 0,4605263 \quad (5.15)$$

$$\sigma^2(x) = \overline{(x-\bar{x})^2} = 2Bt = 0,088757837 \quad (5.16)$$

Het vierde orde gereduceerde moment bedraagt, volgens (2.17),

$$\overline{(x-\bar{x})^4} = 0,0236338 \quad (5.17)$$

De verdeling wordt hieronder in tabelvorm gegeven.

Tabel I

Oplossing voor $t=0,35$; tweede orde vergelijking

afstand x	aantal deeltjes y	afstand x	aantal deeltjes y
-0,5	0,00740674	0,8	0,69962396
-0,4	0,02066093	0,9	0,45112215
-0,3	0,05149234	1,0	0,25989227
-0,2	0,11465819	1,1	0,13377110
-0,1	0,22810629	1,2	0,06151782
0,0	0,40545173	1,3	0,02527606
0,1	0,64388868	1,4	0,00927871
0,2	0,91359172	1,5	0,00304323
0,3	1,15814582	1,6	0,00089177
0,4	1,31172885	1,7	0,00023347
0,5	1,32737803	1,8	0,00005461
0,6	1,20009302	1,9	0,00001141
0,7	0,96940426	2,0	0,00000213

Een grafiek hiervan zal worden geschetst en vergeleken met die van andere uitkomsten (zie figuur 3, hoofdstuk 7).

Benadering door derde orde vergelijking

Ook de derde orde term, met coëfficiënt C, van de differentiaalvergelijking wordt nu in de beschouwing opgenomen. De niet-gecentreerde vergelijking, waarbij alle drie coëfficiënten A,B,C meedoen, wordt aangepakt met behulp van de differentie-methode.

De berekening wordt uitgevoerd volgens de in hoofdstuk 3 behandelde methode. Eerst wordt een stapgrootte k gekozen. Bij een keuze van $\alpha = \frac{1}{2}$ moet k volgens (3.23), (3.25), (3.27), (3.29) voldoen aan

$$0,038181779 < k < 0,1104560175 \quad (5.18)$$

Het gelijkteken wordt achterwege gelaten in verband met de onnauwkeurigheid van de getallen. De stapgrootte k moet hoe dan ook voorzichtig worden gekozen, dus bij voorkeur niet te dicht bij de grenzen. Er wordt gekozen voor $k=0,1$. Hieruit volgt de voorwaarde voor de stapgrootte h volgens (3.21),

$$h < 0,0630930 \quad (5.19)$$

Wordt de gegeven tijdsduur $t=0,35$ in 40 stappen doorlopen, dan voldoet

$$h = \frac{0,35}{40} = 0,00875 \quad (5.20)$$

ruimschoots aan (5.19). Een dergelijke voorzichtigheid, namelijk het verdelen van het tijdsinterval in een zo groot aantal stappen, hoeft in de praktijk niet te worden betracht. In deze studie gaat het meer om de vergelijkbaarheid van de uitkomsten, dus indien mogelijk in een voldoende aantal decimalen.

De punten 6,4,2,3,5 van de differentie-molecule worden dan

$$0,0204593388 \quad 0,0998575839 \quad 0,8613158797 \quad 0,0110897124 \quad 0,0072774852$$

De som van deze getallen is gelijk aan 1. Als deze som < 1 is gaan er deeltjes verloren, en > 1 betekent dat er deeltjes bij komen. Dit zou in strijd zijn met het fysische proces.

Met de beginvoorwaarde

$$t=0 \quad y(x,0) = 1 \quad \text{voor } x=0 \\ \quad \quad \quad = 0 \quad \text{elders} \quad (5.21)$$

wordt het volgende resultaat (zie tabel II) verkregen.

Tabel II

Oplossing voor $t=0,35$; derde orde vergelijking, niet gecentreerd Differentie-methode; $k=0,1$; $h=0,00875$

afstand x	aantal deeltjes y	afstand x	aantal deeltjes y
-1,1	0,000000	0,7	0,090894
-1,0	0,000001	0,8	0,063765
-0,9	0,000002	0,9	0,040930
-0,8	0,000009	1,0	0,024215
-0,7	0,000034	1,1	0,013286
-0,6	0,000118	1,2	0,006796
-0,5	0,000381	1,3	0,003255
-0,4	0,001156	1,4	0,001466
-0,3	0,003183	1,5	0,000623
-0,2	0,008102	1,6	0,000250
-0,1	0,018359	1,7	0,000095
0,0	0,037225	1,8	0,000035
0,1	0,065627	1,9	0,000012
0,2	0,098732	2,0	0,000004
0,3	0,126816	2,1	0,000001
0,4	0,140611	2,2	0,000000
0,5	0,136478	2,3	0,000000
0,6	0,117537		

Het nulde orde moment is gelijk aan 1, en het eerste orde moment bedraagt

$$\bar{x} = 0,4605263 \quad (5.22)$$

De gereduceerde momenten van hogere orde zijn:

$$\overline{(x-\bar{x})^2} = 0,08345572 \quad (5.23)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^3} = 0,004825347 \quad (5.24)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^4} = 0,02230186 \quad (5.25)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^5} = 0,004011828 \quad (5.26)$$

Het eerste orde moment (5.22) is gelijk aan (5.15). Het tweede orde moment (5.23) is iets kleiner dan (5.16). Vermoedelijk wordt dit veroorzaakt door het meenemen van de eerste orde term van de differentiaalvergelijking. Het zal blijken dat de oplossing van de gecentreerde vergelijking vrijwel exact dezelfde waarde voor het tweede orde moment geeft.

De grafiek van de functiewaarden in tabel II zal worden vergeleken met die van andere uitkomsten (zie figuur 3). Voor de gecentreerde vergelijking worden alleen de coëfficiënten B en C in de beschouwing opgenomen. De beste keuze voor a is volgens (3.30)

$$\frac{C}{aB} = \frac{2C}{(1-a)B} \quad (5.27)$$

waaruit volgt

$$a = \frac{1}{3} \quad (5.28)$$

Volgens (3.30) is dan de voorwaarde voor de stapgrootte k ,

$$k > 0,0875292 \quad (5.29)$$

Om de uitkomsten gemakkelijk met elkaar te vergelijken, wordt ook hier gekozen voor $k = 0,1$. Zou $a = \frac{1}{2}$ zijn geno-

men, dan moest, in plaats van (5.29), $k > 0,1167031$ zijn, en was deze keuze ($k=0,1$) niet mogelijk geweest.

De stapgrootte h moet dan, volgens (3.21), voldoen aan

$$h < 0,07886627 \quad (5.30)$$

Wordt het tijdsinterval $t=0,35$ verdeeld in 20 stappen, dan voldoet de stapgrootte h ,

$$h = \frac{0,35}{20} = 0,0175 \quad (5.31)$$

ruimschoots aan de voorwaarde (5.30).

De punten 6,4,2,3,5 van de differentie-molecule worden nu

0,06935288 0,00922397 0,77810541 0,13870576 0,00461198

De som van deze getallen is gelijk aan 1; er gaan geen deeltjes verloren, er komen geen deeltjes bij.

Met de beginvoorwaarde (5.21) wordt het volgende resultaat (zie tabel III) verkregen.

Wederom is het nul-de orde moment gelijk aan 1. De gereduceerde momenten van hogere orde zijn:

$$\overline{(x-\bar{x})^2} = 0,88757837 \quad (5.32)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^3} = 0,007768908 \quad (5.33)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^4} = 0,025114903 \quad (5.34)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^5} = 0,006939184 \quad (5.35)$$

Als bijzonderheid zij vermeld dat het tweede orde gereduceerde moment (5.32) precies dezelfde waarde heeft als (5.16).

Tabel III

Oplossing voor $t=0,35$; derde orde vergelijking, gecentreerd
Differentie-methode; $k=0,1$; $h=0,0175$

afstand x	aantal deeltjes y	afstand x	aantal deeltjes y
-1,4	0,000000	0,3	0,072616
-1,3	0,000001	0,4	0,049967
-1,2	0,000006	0,5	0,031530
-1,1	0,000031	0,6	0,019077
-1,0	0,000139	0,7	0,010360
-0,9	0,000547	0,8	0,005056
-0,8	0,001880	0,9	0,002662
-0,7	0,005594	1,0	0,001338
-0,6	0,014305	1,1	0,000547
-0,5	0,031185	1,2	0,000257
-0,4	0,057542	1,3	0,000091
-0,3	0,089574	1,4	0,000041
-0,2	0,118162	1,5	0,000013
-0,1	0,134209	1,6	0,000005
0,0	0,134350	1,7	0,000001
0,1	0,120589	1,8	0,000001
0,2	0,097713	1,9	0,000000

De grafiek van de functiewaarden in tabel III zal worden vergeleken met die van andere uitkomsten (zie hoofdstuk 7, figuur 3).

Benadering door vierde orde vergelijking

De berekening wordt uitgevoerd volgens de in hoofdstuk 4 behandelde methode. Eerst wordt een stapgrootte k gekozen. Met de gegeven coëfficiënten A, B, C, D van de differentiaalvergelijking, moet volgens (4.20), (4.22), (4.24), (4.26) k voldoen aan de voorwaarden:

$$-2,6315789 k^3 + 0,50718764 k^2 + 0,01109844 k - 0,007159215 > 0 \quad (5.36)$$

$$+2,6315789 k^3 + 0,50718764 k^2 - 0,01109844 k - 0,007159215 > 0 \quad (5.37)$$

$$+1,31578947k^3 - 0,12679691 k^2 - 0,02219688 k + 0,007159215 > 0 \quad (5.38)$$

$$-1,31578947k^3 - 0,12679691 k^2 + 0,02219688 k + 0,007159215 > 0 \quad (5.39)$$

Deze eisen komen neer op

$$k < -0,1032592 \quad (5.40)$$

$$k > +0,1032592 \quad (5.41)$$

$$k > -0,1757565 \quad (5.42)$$

$$k < +0,1757565 \quad (5.43)$$

Er is geen k te vinden die hieraan voldoet. Een extra vrijheidsgraad, in de vorm van een parameter α zoals bij de derde orde vergelijking, om de stabiliteit van het proces te beïnvloeden, is hier ook niet beschikbaar. Een tweetal mogelijkheden staat nu ten dienste om uit deze impasse te geraken. De eerste mogelijkheid is het kiezen van een andere configuratie voor de differentie-molecule. Een andere mogelijkheid is overgang op de gecentreerde vergelijking. Gekozen wordt voor de laatstgenoemde, omdat het zich laat aanzien dat een andere differentie-molecule niet zo eenvoudig is. Dit kan het onderwerp zijn van een volgende studie.

Voor de gecentreerde vergelijking (4.2) moet k , volgens (4.27), (4.28), (4.29), (4.30), voldoen aan de voorwaarden

$$+0,50718764 k^2 + 0,01109844 k - 0,007159215 > 0 \quad (5.44)$$

$$+0,50718764 k^2 - 0,01109844 k - 0,007159215 > 0 \quad (5.45)$$

$$-0,12679691 k^2 - 0,02219688 k + 0,007159215 > 0 \quad (5.46)$$

$$-0,12679691 k^2 + 0,02219688 k + 0,007159215 > 0 \quad (5.47)$$

Deze eisen komen neer op

$$+0,1302524 < k < 0,1656965 \quad (5.48)$$

Gekozen wordt voor $k=0,15$. De stapgrootte h moet dan, volgens (4.18), voldoen aan

$$h < 0,1424965 \quad (5.49)$$

Wordt het tijdsinterval $t=0,35$ verdeeld in 40 stappen, dan voldoet de stapgrootte $h=0,35/40=0,00875$ ruimschoots aan (5.49).

De punten 6,4,2,3,5 van de differentie-molecule (zie hoofdstuk 3, figuur 1) worden dan

$$0,010998 \quad 0,014909 \quad 0,938595 \quad 0,034091 \quad 0,001407$$

De som van deze getallen is gelijk aan 1; er komen geen deeltjes bij, er gaan geen deeltjes verloren.

Met de beginvoorwaarde (5.21) wordt het volgende resultaat (zie tabel IV) verkregen.

Tabel IV

Oplissing voor $t=0,35$; vierde orde vergelijking, gecentreerd Differentie-methode; $k=0,15$; $h=0,00875$

afstand x	aantal deeltjes y
-1,65	0,000000
-1,50	0,000003
-1,35	0,000015
-1,20	0,000083
-1,05	0,000402
-0,90	0,001744
-0,75	0,006610
-0,60	0,021457
-0,45	0,057876
-0,30	0,124300
-0,15	0,199690
0,00	0,220005
0,15	0,158668

afstand x	aantal deeltjes y
0,30	0,107355
0,45	0,055267
0,60	0,027785
0,75	0,011535
0,90	0,004707
1,05	0,001664
1,20	0,000578
1,35	0,000180
1,50	0,000055
1,65	0,000015
1,80	0,000004
1,95	0,000001
2,10	0,000000

Het nul-de orde moment is gelijk aan 1, terwijl het eerste orde moment, zoals dat hoort bij een gecentreerde vergelijking, nul bedraagt.

De (gereduceerde) momenten van hogere orde zijn

$$\overline{(x-\bar{x})^2} = 0,088757837 \quad (5.50)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^3} = 0,007768908 \quad (5.51)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^4} = 0,028054454 \quad (5.52)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^5} = 0,007597129 \quad (5.53)$$

Opmerkelijk is de overeenkomst tussen het tweede orde moment (5.50) met (5.16) en (5.32), terwijl het derde orde moment (5.51) dezelfde waarde heeft als (5.33).

De grafiek van de functiewaarden in tabel IV zullen worden vergeleken met die van andere uitkomsten (zie hoofdstuk 7, figuur 4). Voordat deze getabelleerde waarden in de grafiek worden uitgezet, dienen ze eerst te worden vermenigvuldigd met een schaalfactor 0,1/0,15 (dat is de verhouding van de stapgrootten k); dan pas kunnen ze worden vergeleken met de waarden uit tabel III.

6. VERIFICATIE UITKOMSTEN REKENVOORBEELD

Bij een vereenvoudigd probleem als een puntinjectie, dat is een probleem met beginvoorwaarde (2.3) of (5.21), kunnen, op elk tijdstip na de injectie, de momenten bij benadering worden bepaald (ref. 6). Dit opent de mogelijkheid om de verdeling van de deeltjes direct te bepalen uit deze momenten. Een aparte studie kan hieraan worden gewijd. Er wordt hier volstaan met de bepaling van deze momenten ter vergelijking met uit andere methoden verkregen uitkomsten. Verder zal worden nagegaan, in hoeverre de uitkomsten van het rekenvoorbeeld in hoofdstuk 5, verkregen met behulp van de benaderingsmethoden zoals besproken in hoofdstuk 4, overeen komen met de 'werkelijkheid'. Hiertoe wordt een gedachten-experiment uitgevoerd, waarbij de losgelaten deeltjes op hun reis worden gevolgd. Het proces wordt dus gesimuleerd. Het woord simulatie is hier niet helemaal op zijn plaats, aangezien het gedachten-experiment in feite in deterministische vorm wordt uitgevoerd. Met deze aantekening wordt het woord 'simulatie' hier gehanteerd.

Op het tijdstip $t=0$ wordt in het punt $x=0$ een voldoende groot aantal deeltjes losgelaten. Het loslaten gebeurt op een plaats waar de deeltjes direct een kanaalsoort kunnen kiezen. Met andere woorden, alle deeltjes worden bij de uitgang van een kanaal losgelaten. In het begin, dat wil zeggen na de eerste paar stappen, is de verdeling van de deeltjes zeer geprononceerd. Na verloop van tijd is dit niet meer het geval, omdat de deeltjes na elke stap zich herverdelen over alle kanaalsoorten. Het proces heet dan gebalanceerd. De situatie korte tijd na bovenbedoelde injectie wordt ongebalanceerd genoemd. Maar ook in het begin kan een gebalanceerd proces worden verkregen, indien de deeltjes, op het tijdstip $t=0$ in het punt $x=0$, zich niet allemaal bij de uitgang van een kanaal bevinden. Met andere woorden, een gedeelte van de deeltjes wordt binnen in een kanaal geïnjecteerd.

Eerst zal de directe berekening van de momenten worden uitgevoerd, waarna zowel het ongebalanceerde als het gebalanceerde proces zullen worden beschouwd.

Directe berekening van de momenten

Voor een puntinjectie kunnen uit de basisgegevens (5.4) de (gereduceerde) momenten voor elk tijdstip na de injectie bij benadering direct worden bepaald. Deze momenten zijn evenredig met een kleine verplaatsingsduur (ref.6). Er kan worden aangenomen dat ze dan ook evenredig zijn met een willekeurige verplaatsingsduur. In dat geval wordt gevonden:

$$\bar{x} = t \frac{\bar{\xi}}{\bar{\tau}} = t \bar{v} = 0,4605263 \quad (6.1)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^2} = t \frac{(\bar{\xi} - \bar{v}\bar{\tau})^2}{\bar{\tau}} = 0,088757837 \quad (6.2)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^3} = t \frac{(\bar{\xi} - \bar{v}\bar{\tau})^3}{\bar{\tau}} = 0,007768908 \quad (6.3)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^4} = t \frac{(\bar{\xi} - \bar{v}\bar{\tau})^4}{\bar{\tau}} = 0,0050114498 \quad (6.4)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^5} = t \frac{(\bar{\xi} - \bar{v}\bar{\tau})^5}{\bar{\tau}} = 0,00080806985 \quad (6.5)$$

De gemiddelde waarde (6.1) komt overeen met (5.15) en (5.22), terwijl het eerste gereduceerde moment (6.2) gelijk is aan (5.16), (5.32) en (5.50). Het derde orde gereduceerde moment (6.3) blijkt overeen te komen met (5.33) en (5.51).

Simulatie ongebalanceerd proces

Uit de basisgegevens (5.2) kan het proces worden geschematiseerd zoals in figuur 2 is aangegeven. In de figuur kunnen direct worden afgelezen het aantal deeltjes en de afstand die ze hebben afgelegd op het tijdstip $t=0,35$. Deze waarden vindt men in tabel v.

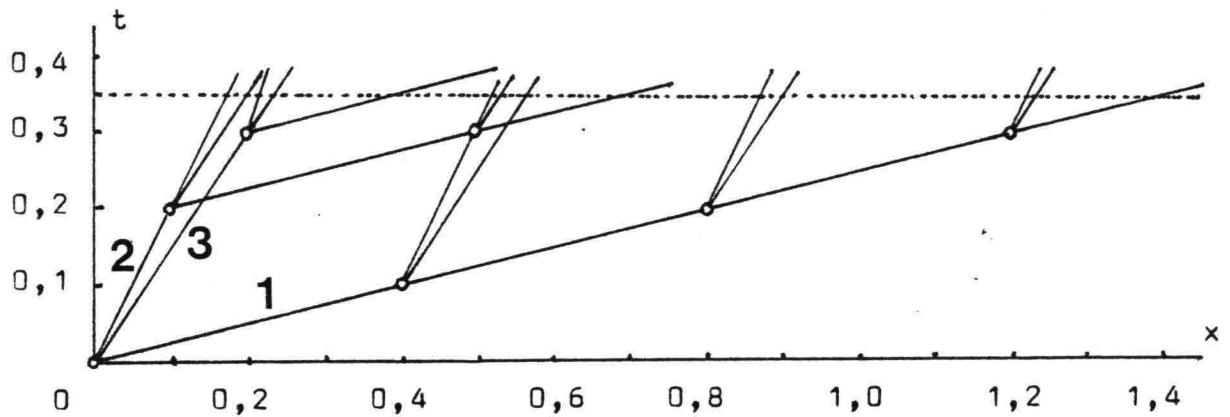


Fig.2. Situatie op $t=0,35$ van het ongebalanceerde proces.

Tabel V

Oplissing voor $t=0,35$

Simulatie ongebalanceerd proces

afstand x	aantal deeltjes y
0,175	0,09
0,2	0,09
0,225	0,09
0,2333	0,09
0,4	0,12
0,525	0,072
0,5333	0,072

afstand x	aantal deeltjes y
0,5667	0,12
0,7	0,096
0,875	0,048
0,9	0,048
1,225	0,0192
1,2333	0,0192
1,4	0,0256

De som van het aantal deeltjes, of het nul-de orde moment, is gelijk aan 1. De hogere orde momenten zijn:

$$\bar{x} = 0,50624 \quad (6.6)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^2} = 0,092087 \quad (6.7)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^3} = 0,030014 \quad (6.8)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^4} = 0,032382 \quad (6.9)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^5} = 0,022674 \quad (6.10)$$

Hoewel het weinig scheelt, blijken deze waarden niet overeen te stemmen met eerder gevonden waarden voor de momenten.

Simulatie gebalanceerd proces

Over dit onderwerp heeft De Josselin de Jong een studie verricht. Het is echter (nog) niet tot een publicatie gekomen. Een gedeelte van zijn ideeën is hier opgenomen. Om een gebalanceerd proces te verkrijgen dienen niet alle deeltjes bij de uitgang van een kanaal te worden losgelaten. Er dient dus te worden nagegaan waar en hoe de deeltjes moeten worden geïnjecteerd.

Het proces wordt gebalanceerd genoemd indien de kans h_m ($m=1,2,\dots$) dat een deeltje in een kanaal van de m -de soort wordt aangetroffen niet (meer) afhankelijk is van de tijd. De kans dat een deeltje een kanaal van de m -de soort kiest (en binnen gaat) bedraagt g_m . Kiest een deeltje eenmaal een kanaal van de m -de soort, dan blijft hij in dat kanaal gedurende de tijd τ_m . De kans h_m dat een deeltje in een kanaal van de m -de soort wordt aangetroffen, in een gebalanceerd proces, bedraagt dan

$$h_m = \frac{g_m \tau_m}{\sum_{m=1}^{m=M} g_m \tau_m} = \frac{g_m \tau_m}{\bar{\tau}} \quad (6.11)$$

Uit (6.11) blijkt

$$\sum_{m=1}^{m=M} h_m = 1 \quad (6.12)$$

of, in woorden, het is zeker dat een deeltje in een willekeurige soort kanaal wordt aangetroffen.

In het rekenvoorbeeld zullen de deeltjes nu op een zodanige manier worden geïnjecteerd, dat h_m ($m=1,2,3$) constant blijft.

Dit kan als volgt worden gerealiseerd.

Uit de verblijftijden $\tau_1=0,1$ $\tau_2=0,2$ $\tau_3=0,3$ (5.2), blijkt dat na elk tijdsinterval van 0,1 een herverdeling van de deeltjes plaats vindt. Een tijdstap van 0,1 komt overeen met de afstanden ξ_1 , $\frac{1}{2} \xi_2$, $\frac{1}{3} \xi_3$. Er wordt nu, op het tijdstip $t=0$, geïnjecteerd:

α deeltjes bij de uitgang van een kanaal,

β deeltjes op een afstand $\frac{2}{3} \xi_3$ van de ingang van kanalen van de 3-de soort,

γ deeltjes op een afstand $\frac{1}{3} \xi_3$ van de ingang van kanalen van de 3-de soort,

en de rest van de deeltjes op een afstand $\frac{1}{2} \xi_2$ van de ingang van kanalen van de 2-de soort.

Deze laatstgenoemde hoeveelheid is gelijk aan $1-\alpha-\beta-\gamma$. De voorlopig nog onbekende hoeveelheden α, β, γ kunnen worden bepaald uit de voorwaarde dat h_m constant is. Beschouwd wordt nu de situatie op een tijdstip tussen $t=0$ en $t=0,1$. In de kanalen van de 1-ste soort bevinden zich op dat moment $g_1\alpha$ deeltjes. Dit moet gelijk zijn aan h_1 . Er geldt dus, in verband met (6.11),

$$g_1\alpha = h_1 = \frac{g_1\tau_1}{\tau} \quad (6.13)$$

waaruit volgt

$$\alpha = \frac{\tau_1}{\tau} \quad (6.14)$$

In de kanalen van de 2-de soort bevinden zich op dat moment $g_2\alpha+1-\alpha-\beta-\gamma$ deeltjes, die dus gelijk moet zijn aan h_2 . In verband met (6.11) vindt men dan

$$g_2\alpha + 1 - \alpha - \beta - \gamma = \frac{g_2\tau_2}{\tau} \quad (6.15)$$

Na enige uitwerking, en gebruik makend van $g_1+g_2+g_3=1$ en van (6.14), wordt gevonden

$$\beta + \gamma = \frac{g_3(\tau_3 - \tau_1)}{\bar{\tau}} \quad (6.16)$$

Beschouwing van de deeltjes in de kanalen van de 3-de soort levert:

$$g_3 \alpha + \beta + \gamma = h_3 = \frac{g_3 \tau_3}{\bar{\tau}} \quad (6.17)$$

Uitwerking van (6.17) geeft dezelfde uitdrukking als (6.16). Beschouwd wordt vervolgens de situatie op een tijdstip tussen $t=0,1$ en $t=0,2$. Uit de aanwezige deeltjes in de kanalen van de 1-ste soort vindt men

$$g_1 \alpha^2 + g_1 \beta + g_1(1 - \alpha - \beta - \gamma) = h_1 = \frac{g_1 \tau_1}{\bar{\tau}} \quad (6.18)$$

waaruit volgt, in verband met (6.14),

$$\gamma = \frac{g_2(\tau_2 - 2\tau_1) + g_3(\tau_3 - 2\tau_1)}{\bar{\tau}} \quad (6.19)$$

Uit (6.16) en (6.19) wordt β gevonden:

$$\beta = \frac{2g_2 \tau_1 + g_3 \tau_1 - g_2 \tau_2}{\bar{\tau}} \quad (6.20)$$

In het rekenvoorbeeld geldt bovendien

$$2\tau_1 = \tau_2 \quad (6.21)$$

zodat (6.19) en (6.20) overgaan in

$$\gamma = \frac{g_3(\tau_3 - 2\tau_1)}{\bar{\tau}} \quad (6.22)$$

$$\beta = \frac{g_3\tau_1}{\bar{\tau}} \quad (6.23)$$

De waarden van α , β , γ zijn nu bekend. Er wordt verder nog nagegaan of deze waarden kloppen indien nog meer kanaal-soorten worden beschouwd. Uit de aanwezige deeltjes in de kanalen van de 2-de resp. 3-de soort vindt men:

$$g_2\alpha + g_1g_2\alpha + g_2\beta + g_2(1-\alpha-\beta-\gamma) = h_2 = \frac{g_2\tau_2}{\bar{\tau}} \quad (6.24)$$

$$g_3\alpha + g_1g_3\alpha + g_3\beta + \gamma + g_3(1-\alpha-\beta-\gamma) = h_3 = \frac{g_3\tau_3}{\bar{\tau}} \quad (6.25)$$

De reeds gevonden α (6.14), β (6.23), γ (6.22) voldoen inderdaad aan (6.24) en (6.25). Ook in de volgende tijdstappen blijkt h_m constant te zijn. Met genoemde beginvoorwaarden is het proces meteen al gebalanceerd.

Het laat zich aanzien, dat deze ad hoc oplossing eventueel ook kan worden uitgebouwd voor meer gecompliceerde problemen; dit vergt echter een aparte studie.

In het rekenvoorbeeld worden gevonden:

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= 0,52631578 \\ \beta &= 0,15789474 \\ \gamma &= 0,15789474 \end{aligned} \right\} \quad (6.26)$$

$$\left. \begin{aligned} h_1 &= 0,2105263 \\ h_2 &= 0,3157895 \\ h_3 &= 0,4736842 \end{aligned} \right\} \quad (6.27)$$

De oplossing voor $t=0,35$, waarbij het proces door de beginvoorwaarde direct gebalanceerd is, vindt men in tabel VI.

Tabel VI

Oplossing voor $t=0,35$

Simulatie gebalanceerd proces

afstand x	aantal deeltjes y	afstand x	aantal deeltjes y
0,175	0,061579	0,550	0,018947
0,183	0,014211	0,558	0,018947
0,192	0,014211	0,567	0,101052
0,200	0,061579	0,700	0,050526
0,208	0,047368	0,733	0,025263
0,217	0,047368	0,875	0,032842
0,225	0,047368	0,883	0,007579
0,233	0,142104	0,892	0,007579
0,350	0,018947	0,900	0,032842
0,367	0,018947	1,050	0,010105
0,400	0,063158	1,067	0,010105
0,525	0,056841	1,225	0,010105
0,533	0,037894	1,233	0,010105
0,542	0,018947	1,400	0,013474

De som van het aantal deeltjes blijft 1. De hogere orde momenten zijn:

$$\bar{x} = 0,4605263 \quad (6.28)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^2} = 0,080357753 \quad (6.29)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^3} = 0,02548805 \quad (6.30)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^4} = 0,02489889 \quad (6.31)$$

$$\overline{(x-\bar{x})^5} = 0,01762203 \quad (6.32)$$

Het blijkt dat het 1-ste orde moment (6.28) gelijk is aan (6.1), (5.22) en (5.15).

7. OVERZICHT UITKOMSTEN

Oplossingen voor $t=0,35$ van het rekenvoorbeeld uit hoofdstuk 5, verkregen met behulp van verschillende rekenmethoden, worden in grafiek gebracht. Ter vergelijking wordt in dezelfde grafiek ook aangegeven de verdeling van de deeltjes gevonden uit een simulatie van het gebalanceerde proces zoals in hoofdstuk 6 is besproken.

In figuur 3 (zie bladzijde 54) is te zien de (analytisch verkregen) symmetrische oplossing van de niet-gecentreerde 2-de orde vergelijking en de (met behulp van de differentie-methode verkregen) niet-symmetrische oplossing van de niet-gecentreerde 3-de orde vergelijking. Een oplossing van de niet-gecentreerde 4-de orde vergelijking ontbreekt, aangezien het numerieke proces behorende bij de differentie-methode, bij de gegeven molecule-configuratie (zie hoofdstuk 3, figuur 1), niet stabiel te krijgen is.

De grafiek van de oplossingen van de gecentreerde vergelijkingen vindt men in figuur 4 (zie bladzijde 55). Hier is wel een oplossing van de gecentreerde 4-de orde vergelijking aanwezig; het numerieke proces kan voor deze vergelijking, bij dezelfde molecule-configuratie, stabiel worden gemaakt.

Voorts worden de momenten van de diverse oplossingen beschouwd. Deze zijn verzameld in tabel VII (zie bladzijde 56). Alle methoden, op het niet-gebalanceerde simulatieproces na, geven dezelfde waarde voor het eerste orde moment. Er zij hier opgemerkt dat de gecentreerde vergelijkingen uiteraard als eerste orde moment de waarde nul hebben. Opvallend is de exacte overeenkomst van zowel het 3-de orde gereduceerde moment als het 4-de orde gereduceerde moment dat door de 3-de orde vergelijking en de 4-de orde vergelijking is geproduceerd. Een betere overeenkomst voor wat betreft het 4-de orde moment kan vermoedelijk worden verkregen, indien, bij het oplossen van de gecentreerde 4-de orde vergelijking met behulp van de differentie-methode, een andere (uitgebreide) molecule-configuratie wordt gebruikt.

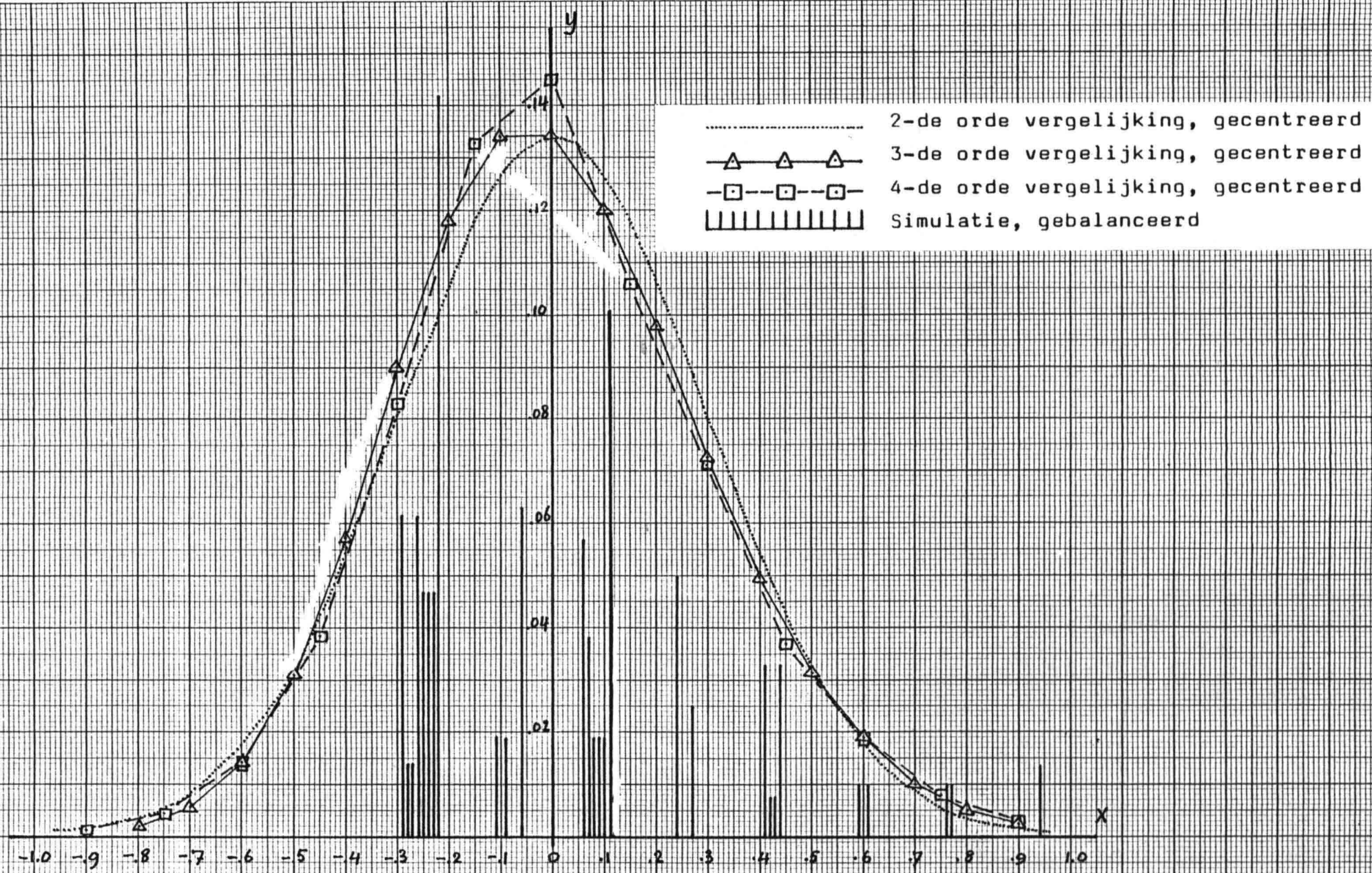


Fig.4. Verdeling van de deeltjes op $t=0,35$

Tabel VII

nr	methode	\bar{x}	$\overline{(x-\bar{x})^2}$	$\overline{(x-\bar{x})^3}$	$\overline{(x-\bar{x})^4}$	$\overline{(x-\bar{x})^5}$
1	2-de orde vergelijking niet gecentreerd analytische oplossing	0,4605263	0,0887578	0	0,02363386	0
2	2-de orde vergelijking gecentreerd analytische oplossing	0	0,0887578	0	0,02363386	0
3	3-de orde vergelijking niet gecentreerd differentie-methode	0,4605263	0,0834557	0,00482535	0,02230186	0,00401183
4	3-de orde vergelijking gecentreerd differentie-methode	0	0,0887578	0,00776891	0,02511490	0,00693918
5	4-de orde vergelijking niet gecentreerd differentie-methode (niet stabiel)	-	-	-	-	-
6	4-de orde vergelijking gecentreerd differentie-methode	0	0,0887578	0,00776891	0,02805445	0,00759713
7	directe berekening momenten (ref. 6)	0,4605263	0,0887578	0,00776891	0,00501145	0,00080807
8	simulatie niet gebalanceerd handberekening	0,50264	0,0920872	0,03001434	0,03238174	0,02267406
9	simulatie gebalanceerd handberekening	0,4605263	0,0803575	0,02548805	0,02489889	0,01762203

8. CONCLUSIES

Enkele benaderingsmethoden voor het oplossen van de één-dimensionale dispersie-vergelijking met eenvoudige beginvoorwaarden zijn in deze studie behandeld. Hierbij wordt de partiële differentiaalvergelijking van oneindige orde (ref. 1 en 2), die bij benadering het fysische dispersieverschijnsel beschrijft, op zijn beurt benaderd door een vergelijking van eindige orde. De onderhavige studie gaat niet verder dan de vierde orde. Niet bestudeerd is de vraag wanneer en tot welke orde de vergelijking moet worden afgebroken. Dit is afhankelijk van

- de convergentie-snelheid van de coëfficiënten van de differentiaalvergelijking, en
- of men geïnteresseerd is in het beginstadium dan wel een veel later stadium na het loslaten van de deeltjes.

De convergentie-snelheid van de coëfficiënten kan voldoende groot zijn dat het probleem goed kan worden benaderd door een tweede orde vergelijking, zoals bij diffusie-problemen het geval is. De oplossing op een willekeurig tijdstip is dan, bij een beginvoorwaarde in de vorm van een puntinjectie, een normale verdeling (zie hoofdstuk 2).

Is de convergentie-snelheid van de coëfficiënten niet erg groot, maar is men slechts geïnteresseerd in de oplossing voor grote t , dan kan ook worden volstaan met een tweede orde vergelijking. Immers, de daaruit voortvloeiende normale verdeling is, volgens de centrale limietstelling uit de waarschijnlijkheidsrekening, een goede benadering voor de door het mathematisch-fysische model bepaalde multinomiale verdeling. Een hogere orde differentiaalvergelijking komt pas tot zijn recht bij niet al te snelle convergentie van de coëfficiënten, en bij een gewenste oplossing voor een niet al te grote t . Het is een groot voordeel indien het probleem uit fysische overwegingen kan worden benaderd door een tweede orde vergelijking. Een analytische oplossing ligt dan binnen bereik, althans wanneer de begin- en/of randvoorwaarden zich daartoe lenen (zie hoofdstuk 2). Bovendien ligt de weg open voor een uitbreiding naar meerdimen-

sionale gevallen.

In sommige gevallen is men aangewezen op een hogere orde vergelijking. Het is helaas niet gelukt om voor de derde of vierde orde vergelijking een oplossing in gesloten vorm te vinden. De differentie-methode, zoals besproken in de hoofdstukken 3 en 4, blijkt goed bruikbaar te zijn (zie hoofdstuk 5). Hierbij zij opgemerkt dat de molecule-configuratie voor de vierde orde vergelijking vermoedelijk uitgebreid dient te worden tot acht punten. Daarmee kan waarschijnlijk ook de niet-gecentreerde vierde orde vergelijking met succes worden geëntammeerd, en kunnen de hogere orde momenten, althans tot en met de vierde orde, nauwkeuriger worden bepaald.

In hoofdstuk 5 is een eenvoudig rekenvoorbeeld uitgewerkt. De getallen in het voorbeeld hebben geen werkelijk fysische achtergrond. Deze zijn slechts gekozen ter illustratie van de besproken berekeningsmethoden. De verificatie daarvan kan derhalve slechts plaats vinden door middel van een gedachtenexperiment (zie hoofdstuk 6). Er kan worden opgemerkt dat de uitkomsten verkregen met behulp van de berekeningsmethoden redelijk overeenkomen met die van het gedachtenexperiment. Hopelijk kunnen deze methoden ook op een reëel probleem worden toegepast.

LITERATUUR

1. De Josselin de Jong, G.
Dispersion described by differential equation developed with Lagrangian Correlation Functions.
Delft Univ. of Technology, Dep. of Civ. Eng.
Geotechn. Lab., 1972.
2. Soerjadi, R.
A derivation of the Dispersion Equation.
Delft Progress Report, Volume 4, Number 3, 1979.
3. Sneddon, Ian N.
Fourier Transforms.
Mc Graw-Hill Book Company Inc., New York, Toronto, London, 1951.
4. Kuipers, R. Timman & L.
Handboek der Wiskunde.
Scheltema & Holkema N.V., Amsterdam, 1963.
5. De Josselin de Jong, G.
Longitudinal and transverse diffusion in granular deposits.
Laboratorium voor Grondmechanica, Delft, 1957.
6. Soerjadi, R.
Een benaderingsmethode voor dispersie.
Techn. Hogesch. Delft, Afd. Civ. Techn., 1978.

