

Numerieke Partiële Differentiaalvergelijkingen

Arthur van Dam

Mei 2000

Samenvatting

Geschikte methoden voor het numeriek oplossen van PDV'en¹ hangen sterk af van de gedaante van de PDV. Gekeken wordt naar de numerieke theorie achter de stationaire en tijdsafhankelijke convectie-diffusie vergelijking. Ook wordt geëxperimenteerd met enkele oplossmethoden voor een geliniariseerd convectie-diffusie model en het Stokes-model.

1 De twee-dimensionale, stationaire convectie-diffusie vergelijking

Gekeken wordt naar de volgende stationaire convectie-diffusie vergelijking:

$$-\Delta u + \beta \cdot \nabla u = g(x, y), \quad (x, y) \in [0, 1] \times [0, 1] := \Omega, \quad (1)$$

met $g \in L_2(\Omega)$, constante snelheidsvector β en homogene Dirichlet randvoorwaarde $u|_{\partial\Omega} = 0$.

De PDV in (1) kan ook opgelost worden, door het om te schrijven naar een variationeel probleem $\boxed{\nabla}$. Dit komt neer op het vermenigvuldigen van de PDV met testfuncties v uit een zekere testruimte V , en vervolgens te integreren over het domein Ω :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (-\Delta u + \beta \cdot \nabla u) v \, d\Omega &= \int_{\Omega} g v \, d\Omega \\ \int_{\Omega} -\Delta u v \, d\Omega + \int_{\Omega} (\beta \cdot \nabla u \cdot v) \, d\Omega &= \int_{\Omega} g v \, d\Omega \\ - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial n} v \, ds + \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega + \int_{\Omega} (\beta \cdot \nabla u \cdot v) \, d\Omega &= \int_{\Omega} g v \, d\Omega, \end{aligned} \quad (2)$$

en aangezien $v = 0$ op de rand, vanwege de Dirichlet voorwaarde, levert dit onderstaande variationale vorm::

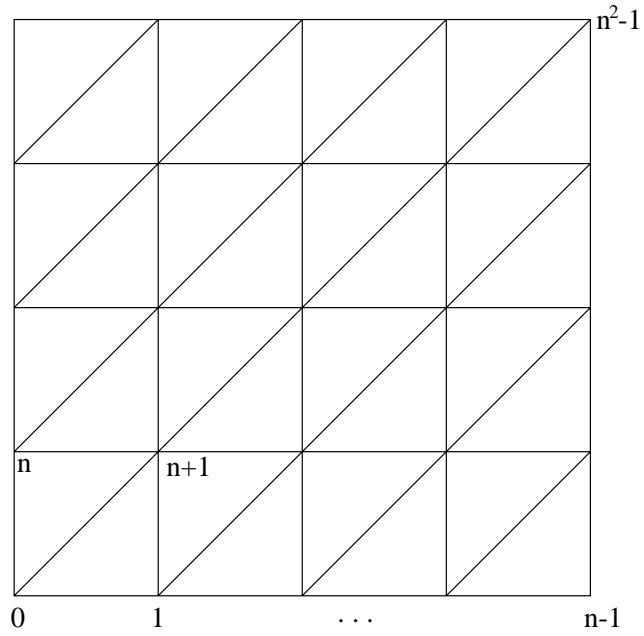
$$b(u, v) = (g, v) \quad (3)$$

$$\text{met } b(u, v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega + \int_{\Omega} (\beta \cdot \nabla u \cdot v) \, d\Omega \text{ en } (g, v) = \int_{\Omega} g(x, y) v \, d\Omega$$

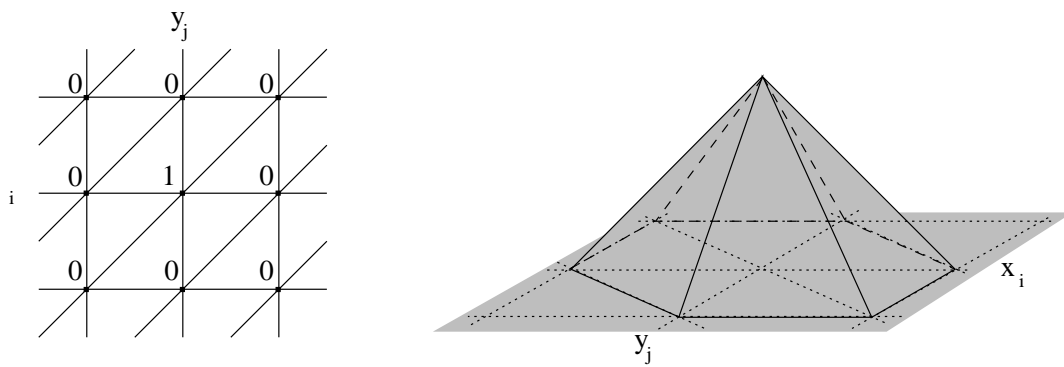
Gezien de Dirichlet randvoorwaarde, ligt het hier voor de hand om voor V de Sobolev-ruimte $V = H_0^1(\Omega)$ te kiezen. In de komende formules wordt de bijbehorende norm gebruikt:

$$\|h\|_V = \sqrt{\|h\|_{L_2(\Omega)}^2 + \left\| \frac{\partial h}{\partial x} \right\|_{L_2(\Omega)}^2 + \left\| \frac{\partial h}{\partial y} \right\|_{L_2(\Omega)}^2} = \sqrt{\int_{\Omega} (h^2 + h_x^2 + h_y^2) \, d\Omega}$$

Hiermee is het equivalente variationele probleem verkregen. Om dit echter op te lossen met een eindige-elementen benadering wordt het functie-domein ingeperkt tot een eindig grote ruimte V_h . Een eenvoudige discretisatie van het domein is hier een homogene verdeling van Ω in rechthoekige driehoeken, zoals in figuur 1. Op dit gediscretiseerde domein, heeft de lineaire basis-functie ϕ_{ij}



Figuur 1: Een homogene opdeling van het domein Ω in rechthoekige driehoekjes.



Figuur 2: Een basisfunctie ϕ_{ij} op het domein Ω .

waarde 1 in het punt (x_i, y_j) , loopt lineair naar 0 in de zes direct omliggende punten en is 0 op de rest van het domein (zie fig. 2). In het vervolg wordt een basisfunctie door één index j geïdentificeerd. Deze index j is niet wezenlijk verschillend van ij , de nummering wordt nu topologisch gedaan ($j = \text{rij} * \text{ncols} + \text{col}$).

Wanneer in (1) $\beta = (0, 0)^T$ genomen wordt, kunnen een aantal nuttige eigenschappen bewezen worden:

Stelling 1 (V-ellipticiteit) Wanneer $\beta = (0, 0)^T$, is $b(\cdot, \cdot)$ uit (3) V-elliptisch, m.a.w.:

$$\exists \alpha > 0 \text{ zodanig dat } b(v, v) \geq \alpha \cdot \|v\|_V^2 \quad \forall v \in V$$

Bewijs Er geldt:

$$u(x, y) = u(0, y) + \int_0^x \frac{\partial u}{\partial x}(\xi, y) d\xi = \int_0^x \frac{\partial u}{\partial x}(\xi, y) d\xi$$

Dit kwadrateren en integreren over Ω , en vervolgens gebruik maken van de ongelijkheid van Cauchy-Schwarz levert:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} |u(x, y)|^2 dx dy &= \int_0^1 \int_0^1 \left| \int_0^x \frac{\partial u}{\partial x}(\xi, y) d\xi \right|^2 dx dy \\ &\leq \int_0^1 \int_0^1 x \left(\int_0^x \left| \frac{\partial u}{\partial x}(\xi, y) \right|^2 d\xi \right) dx dy \\ &\leq \int_0^1 x dx \left(\int_0^1 \int_0^1 \left| \frac{\partial u}{\partial x}(\xi, y) \right|^2 d\xi dy \right) \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left| \frac{\partial u}{\partial x}(x, y) \right|^2 dx dy. \end{aligned}$$

Op een zelfde wijze in de y-richting integreren levert:

$$\int_{\Omega} |u(x, y)|^2 dx dy \leq \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left| \frac{\partial u}{\partial y}(x, y) \right|^2 dx dy.$$

De twee ongelijkheden opgeteld, leveren:

$$\int_{\Omega} |u(x, y)|^2 dx dy \leq \frac{1}{4} \int_{\Omega} \left(\left| \frac{\partial u}{\partial x}(x, y) \right|^2 + \left| \frac{\partial u}{\partial y}(x, y) \right|^2 \right) dx dy.$$

En dan uiteindelijk de norm uitschrijven met deze laatste ongelijkheid levert:

$$\begin{aligned} \|u\|_{H_0^1}^2 &\equiv \int_{\Omega} \left(\left| \frac{\partial u}{\partial x}(x, y) \right|^2 + \left| \frac{\partial u}{\partial y}(x, y) \right|^2 + |u(x, y)|^2 \right) dx dy \\ &\leq \left(1 + \frac{1}{4} \right) \int_{\Omega} \left(\left| \frac{\partial u}{\partial x}(x, y) \right|^2 + \left| \frac{\partial u}{\partial y}(x, y) \right|^2 \right) dx dy \\ \|u\|_{H_0^1}^2 &\leq \frac{5}{4} b(u, u). \end{aligned}$$

De constante is hiermee gevonden ($\alpha = 4/5$).

□

Stelling 2 (Continuïteit van $b(\cdot, \cdot)$) Wanneer $\beta = (0, 0)^T$, is $b(\cdot, \cdot)$ uit (3) continu, m.a.w.:

$$\exists \gamma > 0 \text{ zodanig dat } |b(v, w)| \leq \gamma \|v\|_V \|w\|_V \quad \forall v \in V$$

¹In het vervolg wordt een differentiaalvergelijking met 'DV' aangeduid, en een partiële DV met 'PDV'.

Bewijs Uit (3) volgt:

$$|b(v, w)| = \left| \int_{\Omega} (\nabla v \cdot \nabla w) \, d\Omega \right|$$

en met behulp van de ongelijkheid van Cauchy-Schwarz geldt dan:

$$\begin{aligned} |b(v, w)| &\leq \|\nabla v\|_{L_2} \|\nabla w\|_{L_2} \\ &\leq \|v\|_{H_0^1} \|w\|_{H_0^1} \end{aligned}$$

De constante is hier dus $\gamma = 1$.

□

Stelling 3 (Stabiliteit van de oplossing van het variationele probleem) Wanneer $\beta = (0, 0)^T$, voldoet de oplossing van het variationele probleem in (3) aan de stabiliteitseigenschap:

$$\|u\|_V \leq \frac{\Lambda}{\alpha}$$

Bewijs Allereerst wordt de continuïteit van $L(\cdot)$ bewezen:

$$L(u) \equiv \int_{\Omega} gu \, d\Omega$$

Wegens Cauchy-Schwarz geldt: $L(u) \leq \|g\|_{L_2} \|u\|_{L_2} \leq \|g\|_{L_2} \|u\|_{H_0^1}$, dus is bewezen dat:

$$L(u) \leq \Lambda \|u\|_{H_0^1} \text{ voor } \Lambda = \|g\|_{L_2}$$

Terug naar de oorspronkelijke stelling;

Uit de ellipticiteit van $b(\cdot, \cdot)$ en de continuïteit van $L(\cdot)$ volgt:

$$\begin{aligned} \alpha \|u\|_V^2 &\leq b(u, u) \\ &= L(u) \\ &\leq \Lambda \|u\|_V \\ \|u\|_V &\leq \frac{\Lambda}{\alpha} \end{aligned}$$

□

De constante Λ in bovenstaande uitdrukking geeft aan hoe sterk de bronterm g de oplossing beïnvloedt, α heeft te maken met de norm van u en de afgeleide ∇u .

Stelling 4 (Stabiliteit van de oplossing van het discrete variationele probleem) Wanneer $\beta = (0, 0)^T$, voldoet de oplossing u_h van het discrete stelsel

$$b(u_h, v) = (g, v) \quad \forall v \in V_h \subset V \tag{4}$$

aan de stabiliteitseigenschap:

$$\|u_h\|_V \leq \frac{\Lambda}{\alpha}$$

Bewijs Het bewijs verloopt op dezelfde wijze als dat van stelling 3, maar nu wordt een $v = u_h \in V_h$ gekozen (waarvoor $\|u_h\|_V \neq 0$, in verband met de laatste deling).

Stelling 5 (Discrete oplossing is beste benadering) De oplossing van het gediscrètiseerde stelsel in (4) is de beste benadering van de exacte oplossing van het oorspronkelijke stelsel (3), m.a.w.:

$$\|u - u_h\|_V \leq \frac{\gamma}{\alpha} \|u - v\|_V \quad \forall v \in V_h, \gamma > 0.$$

Bewijs Er geldt $b(u, w) = L(w) \forall w \in V_h$, zo ook voor de discrete oplossing: $b(u_h, w) = L(w) \forall w \in V_h$, dus geldt: $b(u - u_h, w) = 0 \forall w \in V_h$.

Definieer nu $w = u_h - v$. Vanwege de ellipticiteit van $b(\cdot, \cdot)$ geldt:

$$\begin{aligned} \alpha \|u - u_h\|_V^2 &\leq b(u - u_h, u - u_h) \\ &= b(u - u_h, u - u_h + w), \text{ omdat } b(u - u_h, w) = 0 \\ &= b(u - u_h, u - v) \end{aligned}$$

en vanwege de continuïteit van $b(\cdot, \cdot)$ geldt dan:

$$\begin{aligned} \alpha \|u - u_h\|_V^2 &\leq \gamma \|u - u_h\|_V \|u - v\|_v \\ \|u - u_h\|_V^2 &\leq \frac{\gamma}{\alpha} \|u - u_h\|_V \|u - v\|_v \quad (\forall v \in V_h, \text{ want } w \text{ willekeurig gekozen}). \end{aligned}$$

□

Op de eindige (M-dimensionale) functieruimte V_h wordt u_h gedefinieerd door:

$$u_h = \sum_{j=1}^M \xi_j \phi_j$$

Dit levert, voor $v = \phi_i$ en ingevuld in (4) een lineair stelsel op:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^M b(\phi_i, \phi_j) \xi_j &= (g, \phi_j) \quad \forall i \in 1 \dots M \\ A\xi &= c \\ \text{waarin } A &= (b(\phi_i, \phi_j)), \text{ een } M \times M \text{ matrix,} \\ \xi &= (\xi_j) \in \mathbb{R}^M, \\ c &= (c_j), \text{ met } (c_j) = (g, \phi_j) \in \mathbb{R}^M. \end{aligned} \tag{5}$$

De matrix A heeft een '7-diagonaal-blok-structuur', zoals te zien is in figuur 3.

De element verdeling is symmetrisch, maar de waarden zijn niet symmetrisch:

$$b(\phi_i, \phi_j) = \int_{\Omega} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \cdot \frac{\partial \phi_j}{\partial x} + \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \cdot \frac{\partial \phi_j}{\partial y} + \beta_1 \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \phi_j + \beta_2 \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \phi_j \neq b(\phi_j, \phi_i)$$

Vanwege de asymmetrie van A is een oplosmethode als CG hier niet toepasbaar. Andere iteratieve oplosmethoden als BiCG en QMR kunnen wel gebruikt worden.

2 De tijdsafhankelijke convectie-diffusie vergelijking

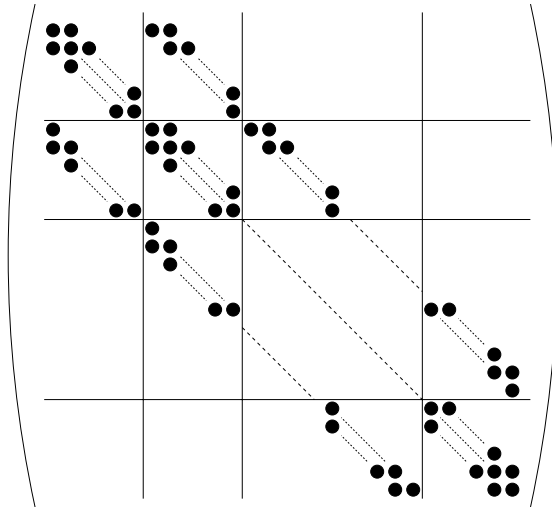
Gekeken wordt naar de volgende tijdsafhankelijke convectie-diffusie vergelijking:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \epsilon \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \beta \frac{\partial u}{\partial x} + f(t), \quad t \in (0, T) := I \quad x \in [0, \pi] := \Omega, \tag{6}$$

met constante $\epsilon > 0$, constante β , beginvoorwaarde $u(x, 0) = u^0(x)$, en homogene Dirichlet randvoorwaarde $u|_{\partial\Omega} = 0$.

Voor de vereenvoudigde vorm van (6) met $\beta = f = 0$ en $\epsilon = 1$ is analytisch een oplossing af te leiden. Met behulp van scheiding van variabelen $u(x, t) = X(x)T(t)$ wordt verkregen:

$$\frac{T'}{T}(t) = \frac{X''}{X}(x) = c \tag{7}$$



Figuur 3: De gedaante van de matrix uit (5)

De oplossing hiervan moet ook voldoen aan de Dirichlet randvoorwaarde $X(0)T(t) = X(\pi)T(t) = 0$. Aangezien $t = 0$ geen zinnige oplossing is, blijft $X(0) = X(\pi) = 0$ over. Het is bekend dat er alleen zinnige oplossing zijn in het geval $c > 0$. Voor de duidelijkheid wordt c hier geschreven als $c = \lambda^2$. Oplossen van de twee DV'en in (7) levert dan:

$$X(x) = c_1 \cos(\lambda x) + c_2 \sin(\lambda x) \quad T(t) = c_3 e^{-\lambda^2 t}$$

Vanwege de Dirichlet voorwaarde moet gelden $c_1 = 0$ en $\lambda \in \mathbb{N}$. Vervolgens wordt met superpositie een oplossing verkregen (de coëfficiënten komen uit de Fourier-theorie):

$$u(x, t) = \sum_{j=1}^{\infty} n k_j e^{-j^2 t} \sin(jt), \text{ met } k_j = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} u^0(x) \sin(jx) dx$$

De factor n is nodig om van de basisfuncties $\sin(jx)$ een orthonormale basis in de L_2 -norm te maken. Aangezien

$$\int_0^{\pi} \sin^2(jx) dx = \frac{\pi}{2},$$

moet er genormeerd worden met een factor $1/(\sqrt{\pi/2})$. Dit levert de uiteindelijke oplossing:

$$u(x, t) = \sum_{j=1}^{\infty} u_j^0 e^{-j^2 t} \sin(jt), \text{ met } u_j^0 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\pi} u^0(x) \sin(jx) dx \quad (8)$$

Er geldt $t \geq 0$, dus geldt ook: $e^{-j^2 t} \leq 1$, hierdoor is een bovengrens voor u te vinden:

$$u(x, t) = \sum_{j=1}^{\infty} u_j^0 e^{-j^2 t} \sin(jt) \leq \sum_{j=1}^{\infty} u_j^0 \sin(jt) = u^0(x) \\ \|u(t)\|_{L_2} \leq \|u^0\|_{L_2} \quad (9)$$

Wanneer niet de aanname $\beta = f = 0, \epsilon = 1$ gemaakt kan worden, is het eenvoudiger om (6) om te schrijven naar de variationale vorm. Vanwege de Dirichlet randvoorwaarde worden testfuncties v uit de de ruimte $V = H_0^1$ gekozen. De termen in (6) worden met een testfunctie v vermenigvuldigd en geïntegreerd over Ω :

$$\int_{\Omega} (\dot{u}(t)v - \epsilon u_{xx}(x)v + \beta u_x v) dx = \int_{\Omega} f(t)v dx$$

Met behulp van de Stelling van Green wordt de dubbele afgeleide herschreven en wordt de variationele vorm verkregen:

$$\begin{aligned} (\dot{u}(t), v) + a(u(t), v) &= (f(t), v) \quad \forall v \in V, t \in I, \\ \text{met } (p, q) &= \int_{\Omega} pq \, dx \text{ en } a(u(t), v) = \epsilon \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx + \beta \int_{\Omega} u_x v \, dx \end{aligned} \quad (10)$$

Om (10) numeriek op te lossen, wordt een eindige ruimte $V_h \in V$ gebruikt. Wanneer voor V_h de ruimte van stuksgewijs lineaire functies wordt gekozen, bestaat deze uit basisfuncties ϕ_i (ook wel hoedfuncties genoemd),

$$\phi_i(x) = \begin{cases} \frac{x-x_{i-1}}{h_i} & \text{als } x \in [x_{i-1}, x_i] \quad (h_i = x_i - x_{i-1}), \\ \frac{x_{i+1}-x}{h_{i+1}} & \text{als } x \in [x_i, x_{i+1}], \\ 0 & \text{anders.} \end{cases}$$

Wanneer het domein Ω gelijkmatig in $N + 1$ roosterpunten wordt verdeeld, is de benaderde oplossing u_h van u te schrijven als:

$$u_h(x) = \sum_{j=1}^{N+1} \xi_j(t) \phi_j(x)$$

Het semi-discrete analogon van het continue variationele probleem luidt nu:
Vind $u_h \in V_h$ zodanig dat:

$$\begin{aligned} (u_h(t), v) + a(u_h(t), v) &= (f(t), v) \quad \forall v \in V_h, t \in I \\ \text{en } (u_h(0), v) &= (u^0, v) \end{aligned}$$

Wanneer nu $v = \phi_j \in V_h$, ontstaat een stelsel van gewone differentiaalvergelijkingen:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{N+1} \dot{\xi}_i(t) (\phi_i, \phi_j) + \sum_{i=1}^{N+1} \xi_i(t) a(\phi_i, \phi_j) &= (f(t), \phi_j) \quad \forall j \in 1 \dots N + 1, t \in I \\ \sum_{i=1}^{N+1} \xi_i(0) (\phi_i, \phi_j) &= (u^0, \phi_j) \quad \forall j \in \dots N + 1 \end{aligned}$$

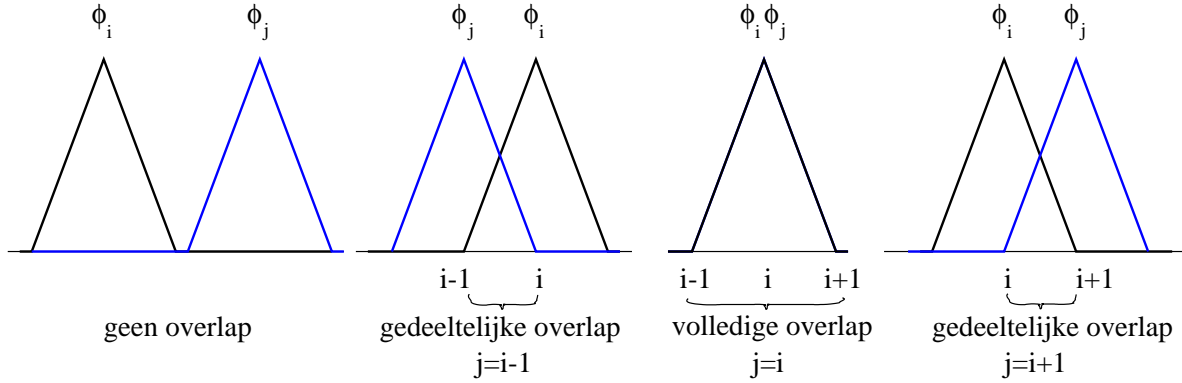
In matrixnotatie:

$$\begin{aligned} M \dot{\xi}(t) + S \xi(t) &= F(t) \quad \forall t \in I, \\ M \xi(0) &= u^0, \end{aligned} \quad (11)$$

waarin

$$\begin{aligned} M &= (m_{ij}), \text{ met } m_{ij} = (\phi_i, \phi_j) = \int_{\Omega} \phi_i \phi_j \, dx \\ S &= (s_{ij}), \text{ met } s_{ij} = a(\phi_i, \phi_j) = \epsilon \int_{\Omega} \phi'_i \phi'_j \, dx + \beta \int_{\Omega} \phi'_i \phi_j \, dx \\ F &= (f_i), \text{ met } f_i = (f(t), \phi_i) = \int_{\Omega} f(t) \phi_i \, dx \\ u^0 &= (u_i^0), \text{ met } u_i^0 = (u^0, \phi_i) = \int_{\Omega} u^0(x) \phi_i \, dx \end{aligned}$$

De matrix M wordt massa-matrix genoemd en S de stijfheids-matrix; de namen zijn afkomstig uit het 'massa-veer-probleem', waarbij de uitwijking van een veer vanuit de evenwichtsstand wordt



Figuur 4: De overlap van functies ϕ_i en ϕ_j bepaalt het niet-nul-zijn van $\phi_i\phi_j$

beschreven door een DV, deze uitwijking wordt beïnvloed door de massa die aan de veer hangt en de stijfheid van de veer.

Voor het matrixstelsel in (11) is bekend dat:

$$\kappa_{SP}(S) \equiv \frac{\lambda_{\max}(S)}{\lambda_{\min}(S)} = \mathcal{O}(h^{-2})$$

Voor kleinere h wordt $\kappa_{SP}(S)$ steeds groter en dit maakt het oplossen moeilijker; het wordt ook wel een 'stijf probleem' genoemd. Euler-Backward is nog redelijk geschikt om een stijf probleem op te lossen.

De gedaante van de stijfheidsmatrix is niet langer symmetrisch. Dit door de aanwezigheid van een extra convectieterm:

$$a(\phi_i, \phi_j) = \epsilon \int_{\Omega} \phi'_i \phi'_j dx + \beta \int_{\Omega} \phi'_i \phi_j dx \neq \epsilon \int_{\Omega} \phi'_i \phi'_j dx + \beta \int_{\Omega} \phi_i \phi'_j dx = a(\phi_j, \phi_i)$$

De structuur van de matrix – of een element nul of niet-nul is – blijft wel symmetrisch. Dit is in te zien door de matrixelementen uit te schrijven.

Als eerste de massamatrix; de term (ϕ_i, ϕ_j) levert alleen niet-nul op wanneer de hoedfuncties elkaar (gedeeltelijk) overlappen, dus als $j = i - 1$, $j = i$ en $j = i + 1$ (zie fig. 4):

$$\begin{aligned} j = i - 1 : \quad m_{ij} &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{x - x_{i-1}}{h} \frac{x_i - x}{h} dx = \frac{1}{6}h, \\ j = i : \quad m_{ij} &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \left(\frac{x - x_{i-1}}{h}\right)^2 dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(\frac{x_{i+1} - x}{h}\right)^2 dx = \frac{2}{3}h, \\ j = i + 1 : \quad m_{ij} &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{x_{i+1} - x}{h} \frac{x - x_i}{h} dx = \frac{1}{6}h. \end{aligned}$$

Dit levert de massamatrix:

$$M = \frac{h}{6} \begin{pmatrix} 4 & 1 & & & \\ 1 & 4 & 1 & & \\ & 1 & 4 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & 1 & 4 \end{pmatrix}$$

Ook bij de stijfheids matrix S zijn de elementen alleen niet-nul voor naburige i en j :

$$\begin{aligned}
 j = i - 1 : \quad s_{ij} &= \epsilon \int_{x_{i-1}}^{x_i} -\frac{1}{h^2} dx + \beta \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{1}{h} \frac{x_i - x}{h} dx = -\frac{\epsilon}{h} + \frac{\beta}{2}, \\
 j = i : \quad s_{ij} &= \epsilon \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{1}{h^2} dx + \beta \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{1}{h} \frac{x - x_{i-1}}{h} dx + \epsilon \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{1}{h^2} dx + \beta \int_{x_i}^{x_{i+1}} -\frac{1}{h} \frac{x_{i+1} - x}{h} dx = \frac{2\epsilon}{h}, \\
 j = i + 1 : \quad s_{ij} &= \epsilon \int_{x_i}^{x_{i+1}} -\frac{1}{h^2} dx + \beta \int_{x_i}^{x_{i+1}} -\frac{1}{h} \frac{x - x_i}{h} dx = -\frac{\epsilon}{h} - \frac{\beta}{2}.
 \end{aligned}$$

Dit levert de stijfheidsmatrix:

$$S = \frac{\epsilon}{h} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} + \frac{\beta}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 & & & \\ 1 & 0 & -1 & & \\ & 1 & 0 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Voorgaande twee matrices worden in het vervolg S_1 , resp. S_2 genoemd.

In plaats van het semi-gediscretiseerde variationele probleem, had ook de oorspronkelijk DV (6) met een eindige differentie methode opgelost kunnen worden, de afgeleiden worden met differentie-quotienten benaderd:

$$\frac{du_i}{dx} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} \quad \frac{d^2u_i}{dx^2} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2}$$

Dit levert, ingevuld in (6):

$$\frac{du_h}{dt} = -\frac{\epsilon}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \cdot u_h + \frac{\beta}{2h} \begin{pmatrix} 0 & -1 & & & \\ 1 & 0 & -1 & & \\ & 1 & 0 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot u_h + f(t)$$

Deze twee matrices worden A , resp. B genoemd. Duidelijk is dat geldt: $A = S_1$ en $B = S_2$. Ter vergelijking van de twee methoden:

$$M\dot{u} = -\frac{\epsilon}{h}S_1u - \frac{\beta}{2}S_2u + F \tag{12}$$

$$\dot{u} = -\frac{\epsilon}{h^2}Au + \frac{\beta}{2h}B + f \tag{13}$$

In de matrix M staat een factor h , wanneer (12) aan beide zijden door h wordt gedeeld, heeft de resulterende vergelijking vrijwel dezelfde gedaante als (13). Het verschil zit nog in de overgebleven coëfficiëntenmatrix M/h voor de tijdsafgeleide in (12), Verder is het teken voor de $S_1 (=A)$ -matrix tegengesteld. Tot slot wordt in de variationele vergelijking de vector F door h gedeeld. De elementen van F waren de $L_2(\Omega)$ -norm, dus gedeeld door h , levert dit een soort 'gemiddelde waarde' van f , terwijl in (13) de echte f staat.

In plaats van de hiervoor beschreven eindige elementen-formulering, had ook een Petrov-Galerkin methode gebruikt kunnen worden. Het verschil zit in de functieruimten. Bij de eindige elementen-formulering komen de basisfuncties uit dezelfde ruimte als de testfuncties. Bij Petrov-Galerkin is dit niet zo, bijvoorbeeld de basisfuncties zijn stuksgewijs lineair en de testfuncties zijn stuksgewijs kwadratisch.

Een andere techniek voor het beter conditioneren van het matrixstelsel is het zogenaamde 'lumpen' van de massamatrix. Hierbij wordt de massamatrix M op diagonaalvorm gebracht door voor het i -e diagonaalelement de i -e rij som te nemen, en de rest van de elementen 0:

$$m_{ii} = \sum_{j=1}^{N+1} m_{ij}$$

Tot slot kan naar analogie met de 'stabiliteitsafschatting' in (9) een stabiliteitsafschatting voor de semi-discrete eindige-elementen oplossing gevonden worden.

Stelling 6 (Stabiliteit van de semi-discrete eindige-elementen oplossing) Wanneer $\beta = f = 0$ en $\epsilon = 1$ geldt:

$$\|u_h(t)\|_{L_2(\Omega)} \leq \|u^0\|_{L_2(\Omega)} \quad (14)$$

Bewijs Doordat $\beta = f = 0$ en $\epsilon = 1$, reduceert de variationele formulering naar:

$$(\dot{u}_h, v) + (u'_h, v') = 0 \quad (15)$$

Wanneer $v = u_h$ wordt gekozen levert de integraal van de eerste term over Ω :

$$\int_{\Omega} \dot{u}_h u_h \, dx = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{d}{dt} (u_h^2) \, dx = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u_h\|_{L_2}^2$$

Integreren van de laatste term over het tijdsdomein, laat de tijdsafgeleide wegvallen en introduceert de integratieconstante $1/2 \|u^0\|_{L_2(\Omega)}^2$. Dit ingevuld in (15) levert:

$$\|u_h\|_{L_2(\Omega)}^2 + 2(u'_h, u'_h) = \|u^0\|_{L_2(\Omega)}^2$$

En aangezien $2(u'_h, u'_h) \geq 0$, geldt:

$$\begin{aligned} \|u_h\|_{L_2(\Omega)}^2 &\leq \|u^0\|_{L_2(\Omega)}^2 \\ \|u_h\|_{L_2(\Omega)} &\leq \|u^0\|_{L_2(\Omega)} \end{aligned}$$

□

3 Numerieke experimenten met convectie-diffusie en Stokes

Gekeken wordt naar problemen, afgeleid van incompressibele stromingsproblemen, beschreven door de Navier-Stokes vergelijking op een 2-dimensionaal domein Ω , met stuksgewijs gladde rand $\partial\Omega$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u - \nu \nabla^2 u + \nabla p = 0 \quad \text{in } \mathcal{W} \equiv \Omega \times [0, T] \quad (16)$$

$$\nabla \cdot u = 0 \quad \text{in } \mathcal{W} \quad (17)$$

Incompressibel betekent 'niet-samendrukbaar', oftewel de dichtheid van de vloeistof is constant, $\partial\rho/\partial t = 0$ (vandaar de simpele gedaante van (17)).

Op de randen geldt $u(x, t) = g(x, t)$ op $\overline{\mathcal{W}} \equiv \partial\Omega \times [0, T]$ en de beginvoorwaarde luidt: $u(x, 0) = u_0(x)$ op Ω . In voorgaande vergelijkingen is u de snelheid van de vloeistof (een twee-dimensionale vector), p is de druk, $\nu > 0$ de viscositeitsparameter en $T > 0$ een eindtijd van de simulatie.

3.1 Het gelineariseerde convectie-diffusie probleem

Wanneer² in (16) de snelheid $\partial u/\partial t = 0$ wordt genomen (stationair) en de drukverandering wordt verwerkt in een rechterlid f , ontstaat een lineaire convectie-diffusie vergelijking:

$$-\nu \nabla^2 u + w \cdot \nabla u = f \quad \text{op } \Omega \quad (18)$$

Hierin is w een twee-dimensionaal snelheidsveld ('convectie' of 'wind') zodanig dat $\nabla \cdot w = 0$, en u stelt nu de getransporteerde hoeveelheid aan (en is dus een scalar).

De variationele vorm van (18) is gedefinieerd op $X \equiv H_0^1(\Omega)$ en luidt:

$$a(u, v) = (f, v) \quad \forall v \in X, \quad (19)$$

met $a(\cdot, \cdot)$ de bilineaire vorm $a(u, v) = \nu(\nabla u, \nabla v) + (w \cdot \nabla u, v)$, en (\cdot, \cdot) is het scalaire $L_2(\Omega)$ -inproduct. Net als in stelling 2 kan de continuïteit van deze bilineaire vorm bewezen worden:

$$|a(u, v)| \leq C_w \|\nabla u\| \|\nabla v\| \quad \forall u \in X, v \in X,$$

waarbij de continuïteitsconstante C_w gegeven wordt door:

$$C_w = \nu + C_\Omega \|w\|_{L^\infty(\Omega)},$$

waarin C_Ω de Poincaré constante voorstelt.

Voor de nauwkeurigheid van de numerieke benadering u_h van de oplossing is nu de volgende afschatting te maken (indien $g = 0$):

$$\|\nabla(u - u_h)\| \leq \frac{C_w}{\nu} \inf_{v \in X_h} \|\nabla(u - v)\|.$$

Natuurlijk wordt de oplossing nauwkeuriger naarmate h kleiner wordt, maar de factor C_w/ν heeft ook een belangrijke invloed. Instabiliteit van de oplossing door oscilleren, blijkt op te treden zodra het 'Peclet-getal' P_e groot is, bijvoorbeeld:

$$P_e \equiv \frac{h\|w\|}{2\nu} > 1$$

Wanneer de convectieterm overheerst, is de oplossing al snel instabiel.

Een andere techniek om de nauwkeurigheid te verhogen is het toevoegen van een extra 'stroomlijn-term' $\delta w \cdot \nabla v$:

$$a(u_h, v + \delta w \cdot \nabla v) = (f_h, v + \delta w \cdot \nabla v) \quad \forall v \in X_h \quad (20)$$

Deze term werkt alleen in de richting van de stromingslijnen, waardoor betere stabiliteits-eisen worden verkregen. De parameter δ – ook wel 'upwind-parameter' genoemd – heeft als optimale waarde:

$$\delta = \frac{\alpha h}{\|w\|} \quad \text{voor alle } P_e > 1.$$

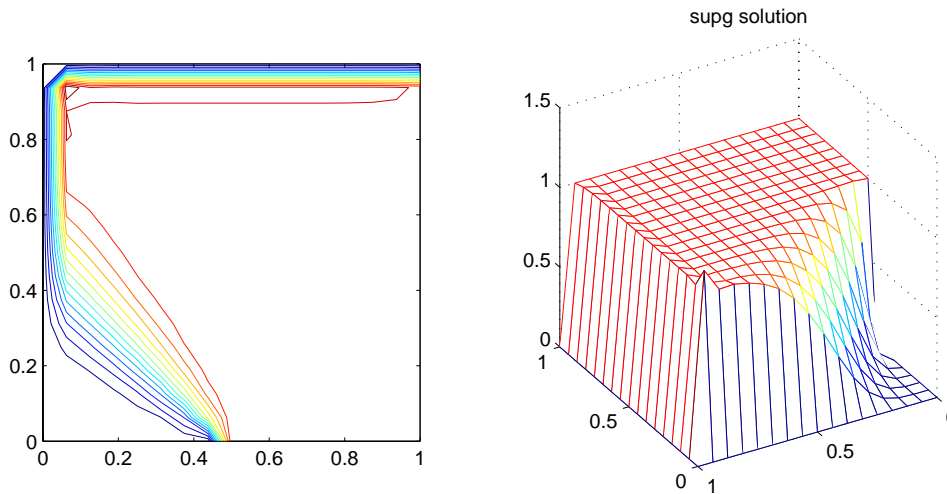
In de gedane experimenten zal de α automatisch gekozen worden, en is h de celgrootte van het rooster.

Experimenten

Met behulp van de Matlab-programma's behorende bij [1] zijn experimenten uitgevoerd voor het beschreven model, en is gekeken naar de invloed van de diverse parameters. De wind w is een constante vector $(-\sqrt{2}/2, \sqrt{2}/2)^T$. $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$, op de rechter-rand en een deel van de onder-rand is $u = 1$ en op de rest van de randen is $u = 0$.

De mogelijke instellingen zijn:

²De beschreven theorie in deze sectie is een samenvatting van sectie 2.1 uit [1].



Figuur 5: Het convectie-diffusie systeem met de standaardwaarden voor de parameters

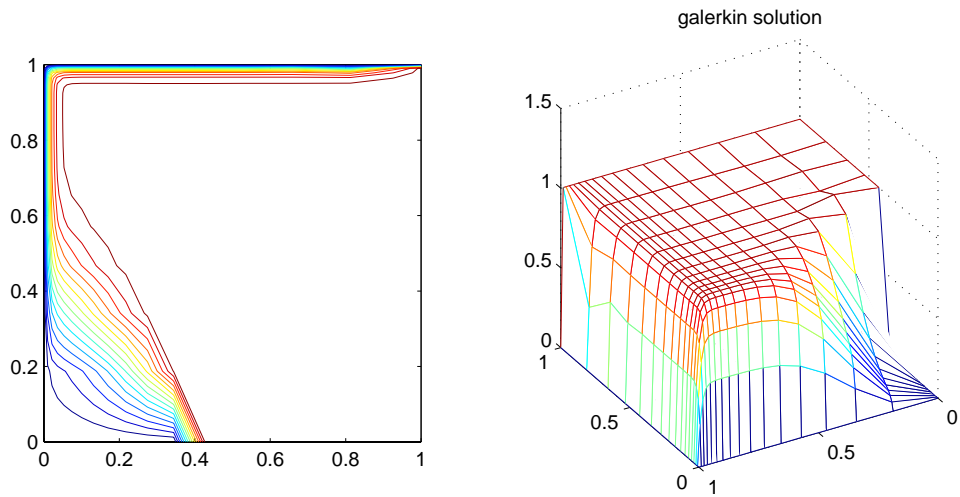
- Uniform rooster: een gelijke verdeling van de roosterpunten. Het is ook mogelijk om automatisch het rooster te schalen waar meer of minder detail is vereist.
- Roostergrootte: de breedte/hoogte van het rooster in aantal roostercellen.
- Viscositeits-parameter: bevat de waarde van ν .
- Convectie: aan- of afwezigheid van convectie.
- Upwind-parameter: De waarde van δ .
- Oplosmethode: Het verkregen gediscrètiseerde stelsel kan met CG, MinRes, en CR opgelost worden.

Een aantal van deze parameters zal in de volgende sectie bij het Stokes-probleem bekeken worden.

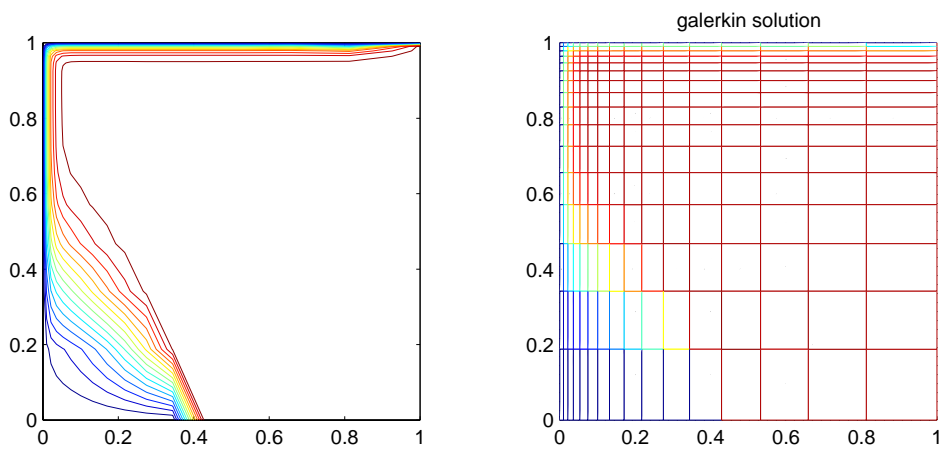
De standaardinstellingen, uniform 16×16 -rooster met convectie, $\nu = 0.01$ en $\delta = 0.34$, leveren de toestand afgebeeld in figuur 5.

Wanneer een niet-uniform rooster wordt gebruikt, wordt bekeken hoe sterk de oplossing varieert op een gebied. Bij grote verandering wordt het rooster fijner gemaakt en bij weinig verandering, grover. Dit wordt gedaan door de roostergrootte ten opzichte van die bij buurcellen met een bepaalde factor te 'stretchen'. Het piekje in $(0,1)$ is weg en ook is op de randen (links en achter) waar de oplossing een val van 1 naar 0 maakt meer detail te zien. In figuur 6 zit deze factor tussen $1/1.2$ en 1.2 . Het is duidelijk dat op het groter vlakke gebied de roostergrootte grover is dan waar de oplossing een snelle val naar 0 maakt. In figuur 7 zit de factor tussen $1/2$ en 2 , nu is de oplossing van bovenaf getoond, zodat de verandering van roostergrootte duidelijk is.

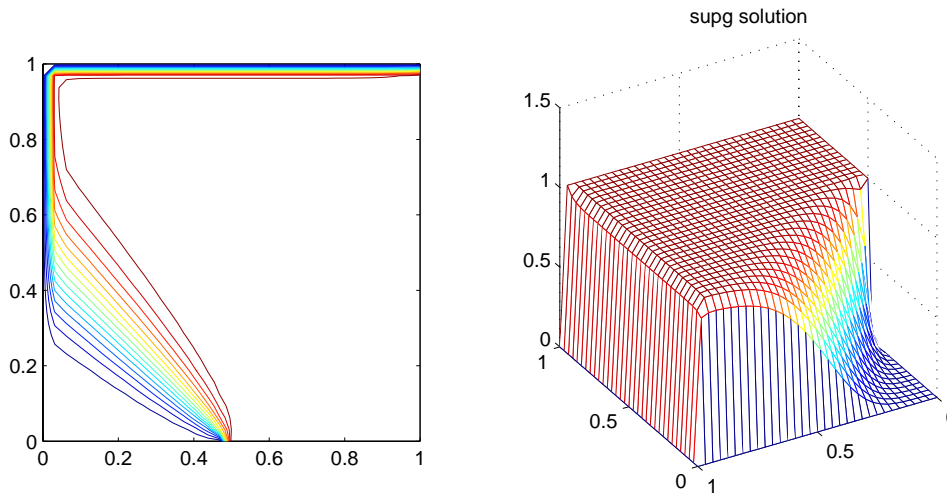
Aanpassen van de roostergrootte geeft hoger detail en kleinere fouten, maar erg duidelijk is dit niet te zien aan figuur 8. Enige opvallende verbetering is de verdwijning van het piekje in $(0,1)$.



Figuur 6: Het convectie-diffusie systeem met een gestretched rooster, factor 1.2

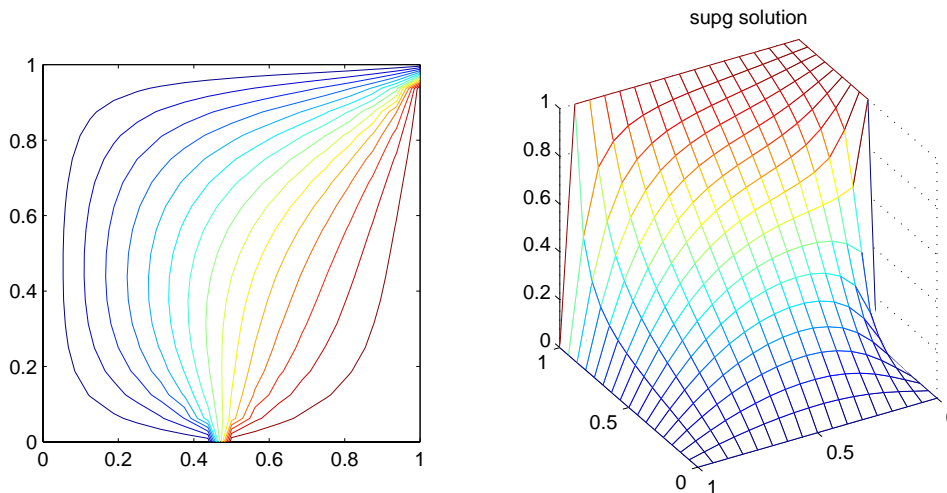


Figuur 7: Het convectie-diffusie systeem met een gestretched rooster, factor 2



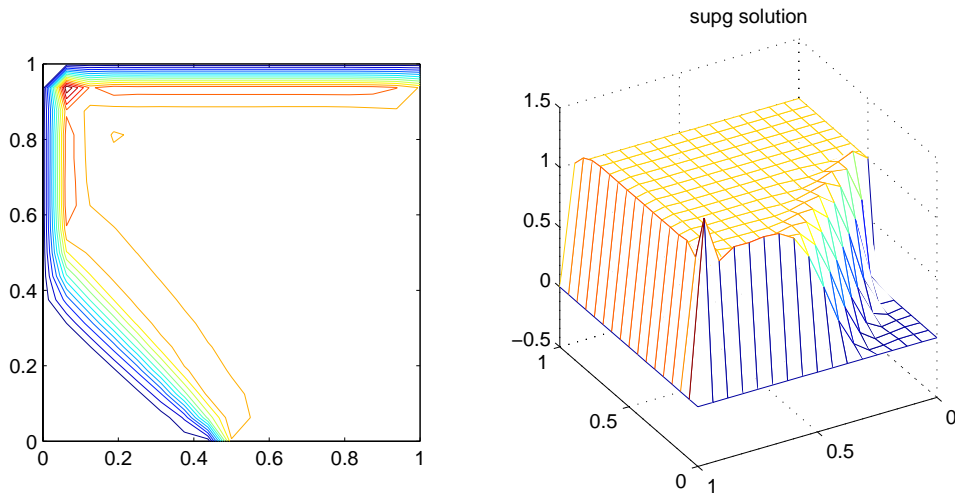
Figuur 8: Het convectie-diffusie systeem met een fijner rooster: 32×32

De viscositeit geeft de 'stroperigheid' van de vloeistof aan. Bij grote viscositeit ($\nu = 0.5$, fig. 9) is de wind niet sterk genoeg om de vloeistof omhoog te stuwen en ontstaat dus een gelijkmatig verloop van de vloeistof tussen de verschillende randvoorwaarden.



Figuur 9: Het convectie-diffusie systeem met een hoge viscositeit $\nu = 0.5$

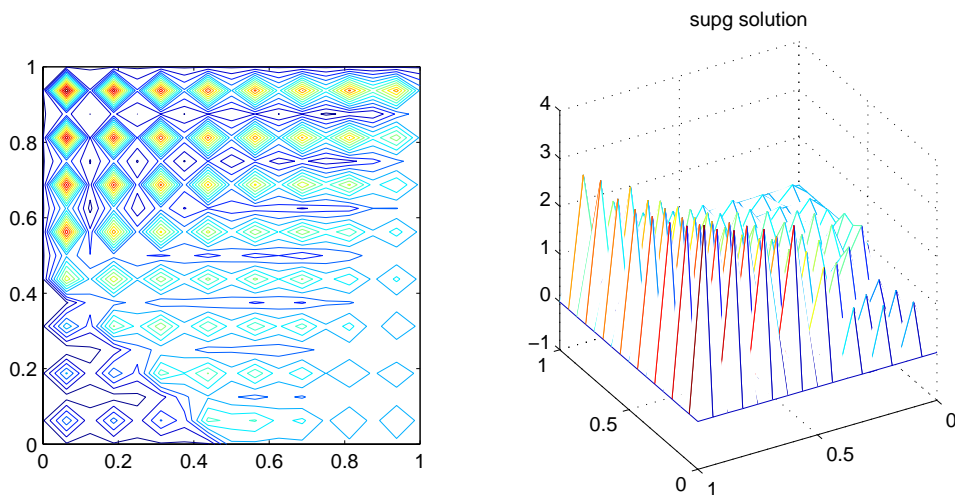
Vervolgens wordt ook nog een zeer lage viscositeit genomen ($\nu = 1/1000$). Het Peclet-getal van het ontstane probleem is nu 32, en uit de theorie is dan al instabiliteit te verwachten. In figuur 10 is de oplossing afgebeeld. Het iso-lijnen plaatje laat gesloten lijnen zien ('ovalen' of 'eilandjes'). Dit duidt op oscillaties in de oplossing. De optimale 'opwinding-parameter' kan deze zelfs niet helemaal weg krijgen. Wanneer deze 'opwinding-parameter' op 0 wordt gezet, zijn de oscillaties helemaal enorm (zie fig.11).



Figuur 10: Het convectie-diffusie systeem met een lage viscositeit $\nu = 0.001$

Wanneer de convectieterm wordt uitgeschakeld, ontbreekt de 'stuwende kracht' en is het verloop van de oplossing vergelijkbaar met die van de hoge viscositeit (fig. 9).

Tot slot wordt nog naar de invloed van de 'opwinding-parameter' gekeken. Voor het standaardprobleem wordt als optimale waarde 0.34 voorgesteld, wanneer voor het eerder bekeken 'lage-viscositeit'-probleem (fig. 8) geen streamline-opwinding wordt toegepast, wordt de oplossing extreem instabiel (zie fig. 11).



Figuur 11: Het convectie-diffusie systeem met lage viscositeit $\nu = 0.001$ en opwind-parameter 0

3.2 Het Stokes-model

Een³ andere variant op het Navier-Stokes probleem (16) is het Stokes probleem. Dit is een stationair probleem ($\partial u/\partial t = 0$) zonder convectie-term $u \cdot \nabla u$ en de viscositeits-constante ν in de

³De beschreven theorie in deze sectie is een samenvatting van sectie 2.2 uit [1].

bronterm f verwerkt:

$$-\nabla^2 u + \nabla p = f \in \Omega \quad (21)$$

$$\nabla \cdot u = 0 \in \Omega, \quad (22)$$

met randvoorwaarde $u(x) = g(x)$ op $\partial\Omega$. Ook hier kan weer een variationele formulering opgesteld worden, in termen van de Sobolev-ruimten $X \equiv H_0^1(\Omega)$ en $M \equiv L_0^2(\Omega)$:

$$(\nabla u, \nabla v) - (p, \nabla \cdot v) = (f, v) \quad \forall v \in X \quad (23)$$

$$(\nabla \cdot u, q) = 0 \quad \forall q \in M, \quad (24)$$

De gediscretiseerde vorm van (23) en (24) kan in matrix-vorm geformuleerd worden als (25):

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B}^* \\ \mathcal{B} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_h \\ p_h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_h \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (25)$$

met de discrete operatoren $(\mathcal{A}v_h, w_h) = (\nabla v_h, \nabla w_h) \quad \forall v_h, w_h \in X_h$ en $(\mathcal{B}v_h, q_h) = -(\nabla v_h, q_h) \quad \forall v_h \in X_h, q_h \in M_h$.

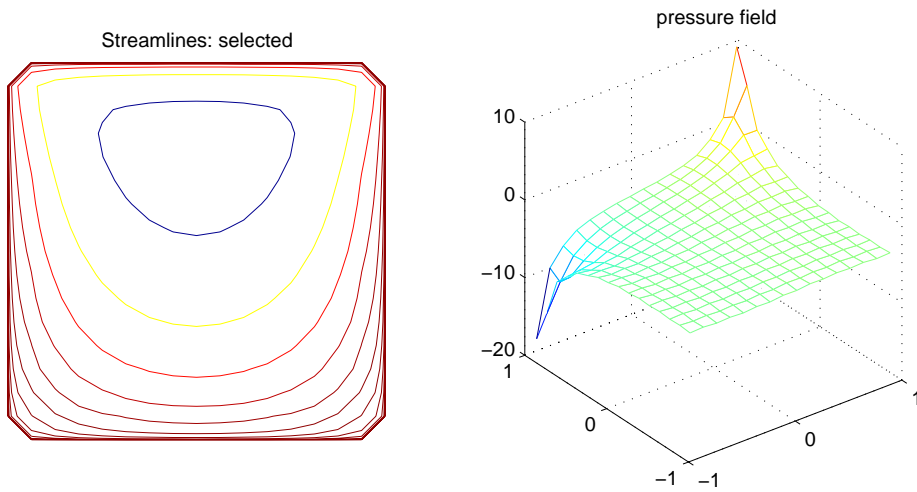
Echter, zowel in (23),(24) als in (25) zorgt de druk-term voor instabiliteit, omdat de druk-ruimte te groot is vergeleken met de snelheids-ruimte. In [1] staat uitgewerkt hoe dit gestabiliseerd kan worden met een correctieterm S . Wanneer de operatoren \mathcal{A} en \mathcal{B} geschreven worden ten opzichte van de eindige set van basisfuncties ϕ_i en ψ_i , en de 'druk-stabilisator' S wordt meegenomen, ontstaat het uiteindelijke stelsel:

$$\begin{pmatrix} A & B^T \\ B & -\beta S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (26)$$

Experimenten

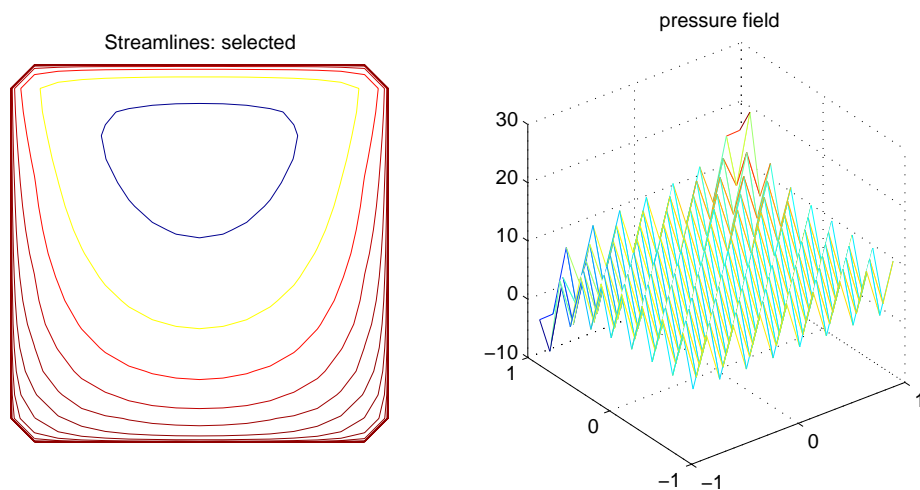
Het aldus verkregen model wordt weer met bij [1] behorende Matlab-programma's bestudeerd aan de hand van enkele experimenten.

De effecten van de parameters bij het convectie-diffusieprobleem worden hier niet nogmaals onderzocht. Wel nieuw is de stabilisatiefactor β uit (26). De optimale waarde kan analytisch gevonden worden en is $\beta = 1/4$. Wanneer de parameter kleiner gemaakt wordt ($\beta = 10^{-6}$) is het systeem nog steeds erg stabiel (fig. 12).



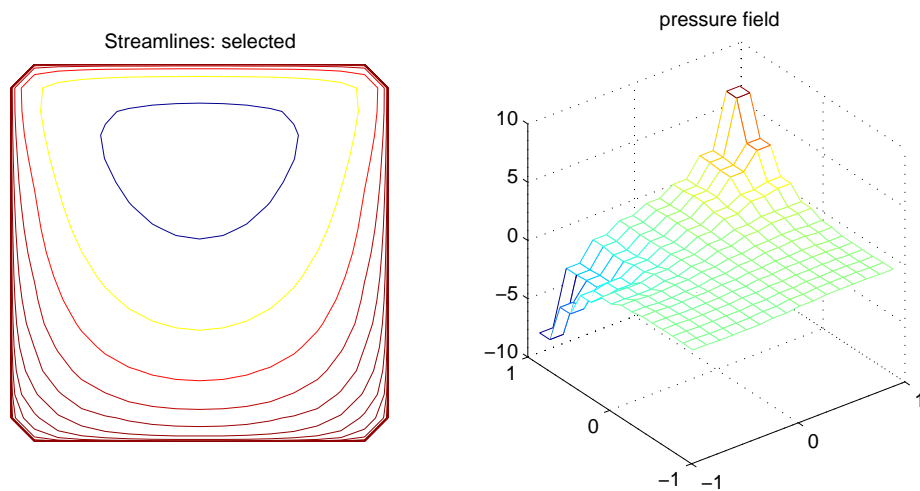
Figuur 12: Het Stokes systeem met een stabilisatieparameter $\beta = 1/1000000$

Opvallend is, dat wanneer de stabilisatie helemaal wordt weggehaald ($\beta = 0$), de oplossing – ondanks het kleine verschil met $\beta = 10^{-6}$ – sterk instabiel is (fig. 13).



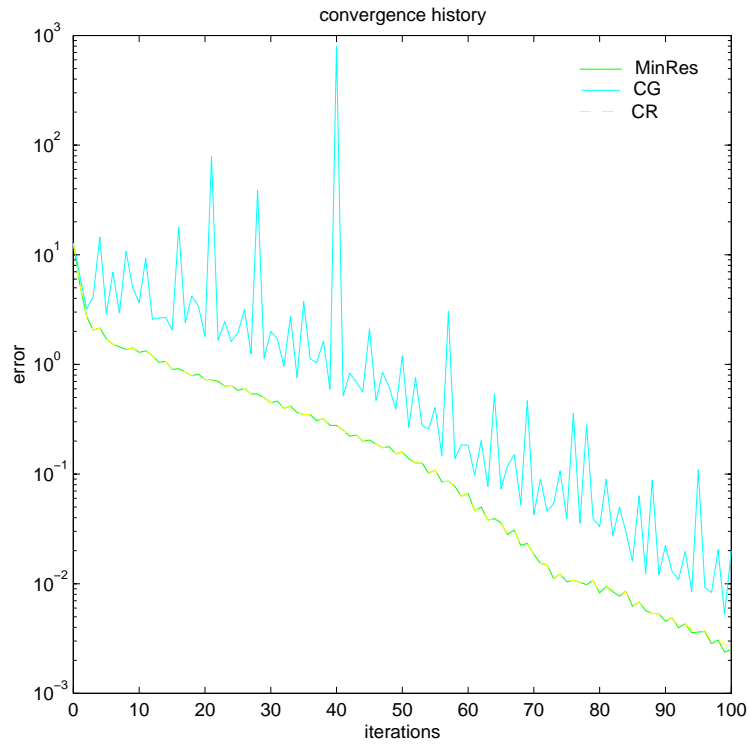
Figuur 13: Het Stokes systeem zonder extra stabilisatie ($\beta = 0$)

Voor sterke stabilisatie ($\beta = 100$) tenslotte, blijkt de extra stabilisatie-term het systeem iets te veel te verstoren, de oplossing heeft nog wel ongeveer de juiste gedaante, maar 'golft' iets op het rooster, zie figuur 14.



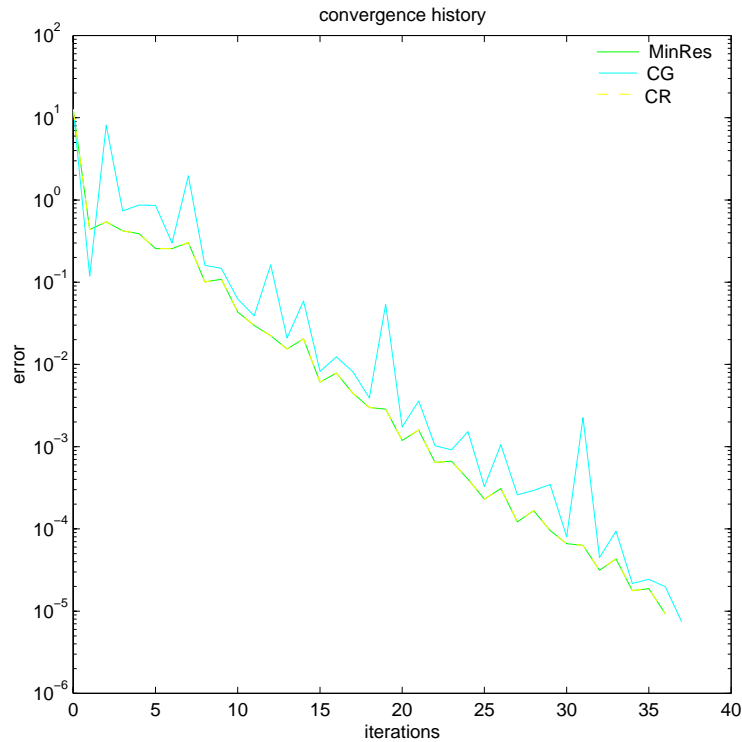
Figuur 14: Het Stokes systeem met een stabilisatieparameter $\beta = 100$

De gebruikte oplosmethode voor het verkregen lineaire systeem is ook van invloed op de nauwkeurigheid van de oplossing. Er is geëxperimenteerd met drie oplosmethoden: MinRes, CG en CR. Ook zijn er twee verschillende vormen van preconditionering onderzocht: diagonaal preconditionering en blok-diagonaal preconditionering. De methoden MinRes en CR lijken wel wat op elkaar en vertonen bij beide preconditioneringen ook hetzelfde convergentieverloop (zie fig. 15 en 16). CG blijkt bij blok-diagonaal preconditionering vrijwel even efficiënt, maar vertoont pieken in de dalende lijn. Deze zijn afkomstig van de 'bijna-singulariteiten' die tijdens de iteratie tegengekomen worden.



Figuur 15: Convergentie bij het Stokes probleem opgelost met 3 verschillende iteratieve methoden en diagonaal preconditionering

Wanneer de twee methoden van preconditionering met elkaar worden vergeleken is te zien dat blok-diagonaal preconditionering duidelijk beter is dan diagonaal preconditionering, na het maximale aantal van 100 stappen is in fig. 15 de fout nog slechts gedaald tot $\mathcal{O}(10^{-2})$, terwijl in fig. 16 al na ca. 30 stappen $\mathcal{O}(10^{-6})$ wordt bereikt. Uit verdere experimenten met CG bleek dat deze pas na 500 slagen een fout van $\mathcal{O}(10^{-6})$ bereikt.



Figuur 16: Convergentie bij het Stokes probleem opgelost met 3 verschillende iteratieve methoden en blok-diagonaal preconditionering

4 Conclusie

In de eerste twee secties is duidelijk geworden hoe uitgebreid de theorie achter numerieke partiële differentiaalvergelijkingen is; slechts een zeer klein deel kon worden belicht. Met deze kennis konden echter een aantal nuttige experimenten gedaan worden, zoals beschreven in sectie 3.

Uit deze experimenten bleek hoe belangrijk het is om in bepaalde situaties een stabiliserende factor in te bouwen om goede resultaten te verkrijgen, omdat louter verkleinen van de stapgrootte h lang niet altijd werkt, en soms zelfs averechts werkt.

Verder kwamen een aantal eigenschappen van de convergentie-diffusievergelijking en het Stokes-model aan de orde, zoals de sterke invloed van de viscositeits-parameter en de convectie-term.

Ook werden in het kort de effecten gezien van een aantal oplosmethoden. Deze blijken elkaar onderling niet al te veel te ontlopen, maar de gebruikte preconditionering is van groot belang; blok-diagonaal is veel beter dan diagonaal.

Tot slot kan geconcludeerd worden, dat ieder deelmodel zijn eigen aanpak vereist, en dat goed gekeken moet worden naar welke stabilisatie-methoden en -parameters worden gekozen, teneinde een nauwkeurige oplossing te verkrijgen.

Referenties

- [1] H.C.Elman, D.J.Silvester, A.J.Wathen, *Iterative Methods for Problems in Computational Fluid Dynamics*, July 1996