



Traditionele upwind *vs* symmetrie-behoudende upwind discretisatie

Ka-Wing Lam



Traditionele upwind vs symmetrie-behoudende upwind discretisatie

Ka-Wing Lam

Begeleider:
A.E.P. Veldman
Rijksuniversiteit Groningen
Instituut voor Wiskunde en Informatica
Postbus 800
9700 AV Groningen
Nederland

Februari 2007

Inhoudsopgave

1	Probleemstelling	2
2	Traditionele upwind discretisatie (Lagrange)	4
2.1	Eerste orde upwind	4
2.1.1	Lokale afbreekfout	5
2.2	Tweede orde upwind	6
2.2.1	Lokale afbreekfout	7
3	Symmetrie behoudende upwind discretisatie	8
3.1	Inleiding	8
3.2	Eindige volume methode	9
3.3	Eerste orde upwind	10
3.3.1	De discretisatie van de fluxfunctie	11
3.3.2	Lokale afbreekfout	13
3.4	Tweede orde upwind	13
3.4.1	De discretisatie van de fluxfunctie	13
3.4.2	Lokale afbreekfout	15
4	De gebruikte roosters	17
4.1	Het gerekte rooster	17
4.2	Speciale roosters	18
4.3	Willekeurige roosters	18
5	Resultaten	19
5.1	De eigenwaarden	19
5.1.1	Op een gerekt rooster	19
5.1.2	Op speciale roosters	20
5.1.3	Op een willekeurig rooster	24
5.2	De nauwkeurigheid	25
5.2.1	Eerste orde upwind	25
5.2.2	Tweede orde upwind	26
6	Conclusie	29

Hoofdstuk 1

Probleemstelling

Opmerking Tijdens dit verslag zal in alle gevallen de volgende convectie-diffusie vergelijking beschouwd worden.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} = k \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$$

op interval $x \in [0, 1]$, met randvoorwaarden $\phi(0, t) = 0$ en $\phi(1, t) = 1$, en de beginvoorwaarde $\phi(x, 0) = x$. $u, k \in \mathbb{R}$ en $k > 0$.

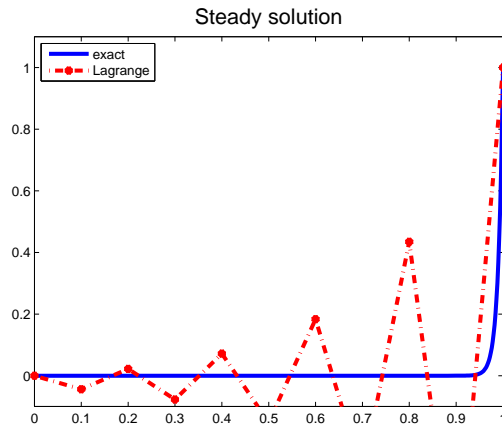
Voor het discretiseren van de convectieve term van de convectie-diffusie vergelijking bestaan vele mogelijkheden. In het collegedictaat *Computational Fluid Dynamics* (Veldman [2]) wordt de centrale discretisatie vergeleken met een eerste orde upwind discretisatie van de convectieve term. Bij de centrale discretisatie is de operator $(L_h \phi)_{ij} = \sum_{k,l} c_{ij}^{kl} \phi_{kl}$ positief

wanneer $P = \frac{|u|h}{k} < 2$ (P is het maas-Péclet getal).

De operator L_h is positief wanneer geldt

$$\begin{aligned} \sum_{k,l} c_{ij}^{kl} &= 0, (i, j) \in \Omega_h^0 \cup \Gamma_h^N \\ c_{ij}^{kl} &\leq 0, (i, j) \in \Omega_h^0 \cup \Gamma_h^N, (k, l) \neq (i, j) \end{aligned}$$

Een mooie eigenschap van een operator die positief is, is dat de oplossing van $L_h \phi_h = 0$ slingervrij is.



Oplossingen met slingers, en exacte oplossing.

Uiteraard is het mogelijk om h zo klein te kiezen zodat $P < 2$, maar een kleine h betekent een groot aantal roosterpunten, en dus wordt de berekening duur.

Een andere methode om de convectieve term te discretiseren is met behulp van een upwind discretisatie. Deze discretisatie geeft altijd een positieve operator.

Op een uniform rooster gaat het voor de eerste orde upwind discretisatie altijd goed, maar uit de literatuur (Golub [1]) is bekend dat de traditionele eerste orde upwind discretisatie op speciaal gerekte roosters ook voor problemen kan zorgen, in de zin dat het symmetrische deel van de coëfficiënten matrix instabiel wordt ('heeft negatieve eigenwaarden'). De symmetrie behoudende eerste orde upwind methode kent dat probleem niet (Veldman [3]). Bij mijn onderzoek moest ik kijken of dit ook hetzelfde is bij de tweede orde upwind discretisatie. Zo ja, kan het probleem weer verholpen worden met behulp van een symmetrie behoudende discretisatie?

In dit verslag zullen eerst de vier upwind discretisaties worden afgeleid, daarna worden de resultaten van de berekeningen, in de vorm van plaatjes, gepresenteerd.

Eerst wil ik graag meneer A.E.P. Veldman bedanken voor zijn begeleiding en geduld.

Hoofdstuk 2

Traditionele upwind discretisatie (Lagrange)

In dit hoofdstuk zullen eerst de traditionele eerste en tweede orde upwind discretisatie worden afgeleid. Dat gaat met behulp van Lagrange interpolatie. Daarna zullen de symmetrie behoudende eerste en tweede orde upwind discretisaties worden afgeleid. Dat wordt gedaan met behulp van een eindige volume methode.

Verder is de diffusieve term in alle gevallen centraal gediscrètiseerd. Deze is

$$\left. \frac{d^2\phi}{dx^2} \right|_{x_i} = \frac{2}{h_i(h_i + h_{i+1})} \phi_{i-1} - \frac{2}{h_i h_{i+1}} \phi_i + \frac{2}{h_{i+1}(h_i + h_{i+1})} \phi_{i+1} \quad (2.1)$$

Lagrange interpolatie: Gegeven $k + 1$ punten $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_k, y_k)$, met $x_i \neq x_j$ als $i \neq j$.

Dan is het Lagrange interpolatie polynoom gelijk aan

$$L(x) = \sum_{j=0}^k y_j \cdot l_j(x) \quad (2.2)$$

waar

$$l_j(x) = \prod_{i=0, i \neq j}^k \frac{x - x_i}{x_j - x_i} = \frac{x - x_0}{x_j - x_0} \dots \frac{x - x_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} \frac{x - x_{j+1}}{x_j - x_{j+1}} \dots \frac{x - x_k}{x_j - x_k} \quad (2.3)$$

is.

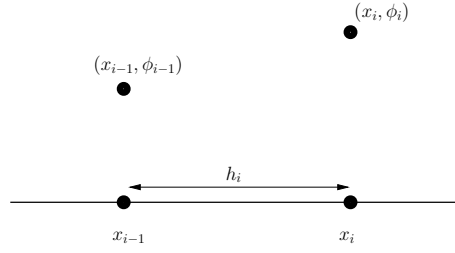
2.1 Eerste orde upwind

We hebben twee punten (x_{i-1}, ϕ_{i-1}) en (x_i, ϕ_i) . Dus met (2.2) en (2.3) komen we op het volgende

$$L(x) = \frac{\phi_{i-1}(x - x_i)}{x_{i-1} - x_i} + \frac{\phi_i(x - x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} = \frac{\phi_i(x - x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} - \frac{\phi_{i-1}(x - x_i)}{x_i - x_{i-1}}$$

We krijgen dan

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x_i}^{(Lup1)} \approx \frac{dL(x)}{dx} = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h_i} \quad (2.4)$$

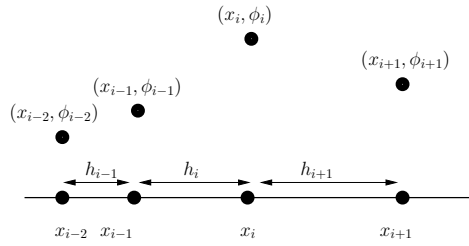


Figuur 2.1: situatie met 2 punten

(2.1) en (2.4) invullen in de stationaire convectie-diffusie vergelijking levert de volgende ge-discretiseerde vergelijking op

$$-\left(\frac{u}{h_i} + \frac{2k}{h_i(h_i + h_{i+1})}\right)\phi_{i-1} + \left(\frac{u}{h_i} + \frac{2k}{h_i h_{i+1}}\right)\phi_i - \frac{2k}{h_{i+1}(h_i + h_{i+1})}\phi_{i+1} = 0 \quad (2.5)$$

2.1.1 Lokale afbreekfout



Figuur 2.2: de punten met afstanden

Om de lokale afbreekfout te bepalen zal gebruik gemaakt worden van de volgende Taylorreeksen.

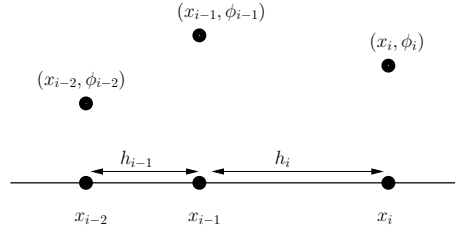
$$\begin{aligned} \phi_{i+1} &= \phi_i + h_{i+1} \frac{d\phi}{dx} \Big|_i + \frac{1}{2} h_{i+1}^2 \frac{d^2\phi}{dx^2} \Big|_i + \frac{1}{6} h_{i+1}^3 \frac{d^3\phi}{dx^3} \Big|_i + \dots \\ \phi_i &= \phi_i \\ \phi_{i-1} &= \phi_i - h_i \frac{d\phi}{dx} \Big|_i + \frac{1}{2} h_i^2 \frac{d^2\phi}{dx^2} \Big|_i - \frac{1}{6} h_i^3 \frac{d^3\phi}{dx^3} \Big|_i + \dots \\ \phi_{i-2} &= \phi_i - (h_i + h_{i-1}) \frac{d\phi}{dx} \Big|_i + \frac{1}{2} (h_i + h_{i-1})^2 \frac{d^2\phi}{dx^2} \Big|_i - \frac{1}{6} (h_i + h_{i-1})^3 \frac{d^3\phi}{dx^3} \Big|_i + \dots \end{aligned} \quad (2.6)$$

Om de lokale afbreekfout te berekenen van de eerste orde methode, gebruiken we (2.6)

$$\begin{aligned}
\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x_i}^{(Lup1)} &= \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h_i} \\
&= \frac{\phi_i - \phi_i + h_i \phi_x - \frac{1}{2} h_i^2 \phi_{xx} + \dots}{h_i} \\
&= \phi_x - \frac{1}{2} h_i \phi_{xx} + \dots
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Hier is te zien dat de lokale afbreekfout van orde 1 is.

2.2 Tweede orde upwind



Figuur 2.3: situatie met 3 punten

We hebben nu drie punten (x_{i-2}, ϕ_{i-2}) , (x_{i-1}, ϕ_{i-1}) en (x_i, ϕ_i) . Het Lagrange interpolatie polynoom wordt dan

$$L(x) = \frac{\phi_{i-2}(x - x_{i-1})(x - x_i)}{(x_{i-2} - x_{i-1})(x_{i-2} - x_i)} + \frac{\phi_{i-1}(x - x_{i-2})(x - x_i)}{(x_{i-1} - x_{i-2})(x_{i-1} - x_i)} + \frac{\phi_i(x - x_{i-2})(x - x_{i-1})}{(x_i - x_{i-2})(x_i - x_{i-1})}$$

We krijgen dan

$$\begin{aligned}
\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x_i} &\approx \left. \frac{dL(x)}{dx} \right|_{x_i} \\
&= \frac{\phi_{i-2}((x - x_{i-1}) + (x - x_i))}{(x_{i-2} - x_{i-1})(x_{i-2} - x_i)} + \frac{\phi_{i-1}((x - x_{i-2}) + (x - x_i))}{(x_{i-1} - x_{i-2})(x_{i-1} - x_i)} + \\
&\quad \frac{\phi_i((x - x_{i-2}) + (x - x_{i-1}))}{(x_i - x_{i-2})(x_i - x_{i-1})}
\end{aligned}$$

En nu x_i invullen geeft

$$\begin{aligned}
\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x_i}^{(Lup2)} &\approx \left. \frac{dL(x)}{dx} \right|_{x_i} = \frac{2h_i + h_{i-1}}{h_i(h_i + h_{i-1})} \phi_i - \left(\frac{h_i + h_{i-1}}{h_{i-1}h_i} \right) \phi_{i-1} + \\
&\quad \frac{h_i}{h_{i-1}(h_i + h_{i-1})} \phi_{i-2}
\end{aligned} \tag{2.8}$$

(2.1) en (2.8) invullen in de stationaire convectie-diffusie vergelijking $u \frac{d\phi}{dx} - k \frac{d^2\phi}{dx^2} = 0$ geeft de volgende gediscretiseerde vergelijking.

$$\begin{aligned} \frac{uh_i}{h_{i-1}(h_i + h_{i-1})} \phi_{i-2} - \left(u \left(\frac{h_i + h_{i-1}}{h_{i-1}h_i} \right) + \frac{2k}{h_i(h_i + h_{i+1})} \right) \phi_{i-1} \\ + \left(\frac{u(2h_i + h_{i-1})}{h_i(h_i + h_{i-1})} + \frac{2k}{h_i h_{i+1}} \right) \phi_i - \frac{2k}{h_{i+1}(h_i + h_{i+1})} \phi_{i+1} = 0 \end{aligned} \quad (2.9)$$

2.2.1 Lokale afbreekfout

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x_i}^{(Lup2)} &= \frac{h_i}{h_{i-1}(h_i + h_{i-1})} \phi_{i-2} - \frac{h_i + h_{i-1}}{h_{i-1} \cdot h_i} \phi_{i-1} + \\ &\quad \frac{2h_i + h_{i-1}}{h_i(h_{i-1} + h_i)} \phi_i \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$= \phi_x - \frac{1}{6} h_i (h_i + h_{i-1}) \phi_{xxx} + \dots \quad (2.11)$$

Om van (2.10) naar (2.11) te komen moeten weer de reeksen uit (2.6) ingevuld worden. Nu is te zien dat de lokale afbreekfout van tweede orde is.

Hoofdstuk 3

Symmetrie behoudende upwind discretisatie

3.1 Inleiding

Hoewel upwind discretisatie een diagonaal dominante matrix geeft, hoeft die matrix niet positief reëel te zijn, dus het symmetrische gedeelte van matrix hoeft niet positief definit te zijn. Dat is wel een wenselijke eigenschap omdat de stabiliteit van de discrete oplossing hiervan afhangt. Om dit te begrijpen kijken we naar een instationaire half-gediscretiseerde vergelijking.

$$\frac{d\phi_h}{dt} + L\phi_h = 0 \quad (3.1)$$

Hier is L de discretisatie matrix. De kinetische energie $\|\phi_h\|^2$ wordt gegeven door

$$\|\phi_h\|_h^2 = \phi_h^T H \phi_h \quad (3.2)$$

waar H een diagonaal matrix is met op de diagonaal de maaswijdtes.

Als we nu kijken naar de verandering van (3.2) in de tijd

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \|\phi_h\|_h^2 &= \frac{d\phi_h^T}{dt} H \phi_h + \phi_h^T H \frac{d\phi_h}{dt} = -(L\phi_h)^T H \phi_h - \phi_h^T H L \phi_h \\ &= -\phi_h^T ((HL)^T + HL) \phi_h \end{aligned} \quad (3.3)$$

zien we dat (3.3) negatief is (dus damping, dus stabiel), voor alle $\phi_h \neq 0$, dan en slechts dan als het symmetrische gedeelte van HL positief definit is. (Dus als HL is positief reëel)¹.

We gaan nu verder met een definitie van Verstappen en Veldman.

Definitie *Een discretisatie van de convectie-diffusie vergelijking heet symmetrie behoudend wanneer de discrete convectieve operator scheef symmetrisch is, en de discrete diffusieve operator symmetrisch positief definit is.*

¹Een matrix is positief reëel wanneer de eigenwaarden van het symmetrische deel van de matrix allemaal in het positieve halfvlak liggen.

Een matrix die symmetrisch positief definit is, heeft positieve reële eigenwaarden. Om te zien waarom dit een mooie eigenschap is, gebruiken we het *inclusie lemma van Bendixson*.

Lemma *Alle eigenwaarden van een matrix A liggen in of op de kleinste rechthoek die gevormd wordt door lijnen, waarbinnen de eigenwaarden van het symmetrisch deel en scheef symmetrische deel van de matrix A liggen. Deze lijnen zijn of parallel aan de reële as of parallel aan de imaginaire as.*

Voor de lezers die het niet meer weten, een willekeurige matrix A kan gesplitst worden in een symmetrisch deel en een scheef symmetrisch deel, waarbij $\frac{1}{2}(A + A^T)$ het symmetrische deel geeft, en $\frac{1}{2}(A - A^T)$ het scheef symmetrische deel geeft.

De eigenwaarden van een symmetrische matrix zijn reëel, en de eigenwaarden van een scheef symmetrische matrix zijn zuiver imaginair.

Stelling *Elk symmetrie behoudende discretisatie van de convectie-diffusie vergelijking geeft een positief reële matrix.*

Bewijs Het symmetrische deel van de matrix is eigenlijk de som van twee (dezelfde) positief definitie matrices. Het convectieve deel, die scheef symmetrisch is, valt immers weg.

Uit het *lemma van Bendixson* volgt dat de matrix niet singulier is.

3.2 Eindige volume methode

We gaan nu beginnen met het afleiden van de symmetrie behoudende upwind discretisaties. De symmetrie behoudende upwind discretisaties zullen afgeleid worden met behulp van een eindige volume methode. Een eindige volume methode begint met een behoudswet

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \phi d\Omega = - \int_{\Gamma} F(\phi) \cdot nd\Gamma + \int_{\Omega} f d\Omega \quad (3.4)$$

De integraal over Γ beschrijft de netto uitstroom van ϕ , die gegeven wordt door de fluxfunctie $F(\phi)$. In dit verslag geldt $f = 0$. Wanneer de fluxfunctie differentieerbaar is kan Gauss' divergentiestelling toegepast worden. We krijgen dan

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} \text{div} F(\phi) d\Omega = 0 \quad (3.5)$$

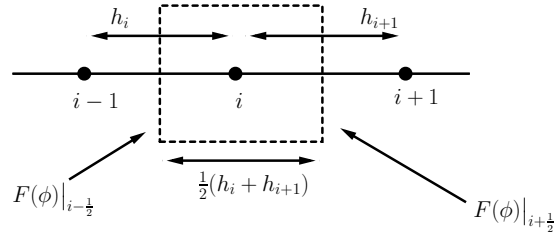
Gezien dit geldt voor willekeurige volumes Ω kan de behoudsvorm geschreven worden als een partiële differentiaal vergelijking in divergentie vorm

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \text{div} F(\phi) = 0 \quad (3.6)$$

In dit verslag geldt

$$\text{div} F(\phi) = u \frac{d\phi}{dx} - k \frac{d^2 \phi}{dx^2} \Rightarrow F(\phi) = u\phi - k \frac{d\phi}{dx} \quad (3.7)$$

met $\Omega = [0, 1]$ en Γ de randpunten van Ω .



Figuur 3.1: 1 dimensionaal behoudsvolume

In een eindige volume discretisatie wordt elk roosterpunt omgeven door een behoudsvolume, waar de zwakke vorm van de behoudswet op toegepast wordt. Wanneer het toegepast wordt op een behoudsvolume Ω_h met rand Γ_h , kan de behoudsvorm van de convectie-diffusie vergelijking geschreven worden als

$$\int_{\Omega_h} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega_h + \int_{\Gamma_h} (\phi u - k \text{grad} \phi) \cdot n d\Gamma_h = 0 \quad (3.8)$$

Waarbij $\phi u - k \text{grad} \phi = F(\phi)$ de fluxfunctie is. De vorm van (3.8) na discretisatie is

$$h \frac{d\phi_h}{dt} + M\phi_h = 0 \quad (3.9)$$

In het 1-dimensionale geval is $h = \frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})$ {lengte van het behoudsvolume}, en M de systeem matrix.

3.3 Eerste orde upwind

Centraal discretiseren van de eerste en tweede afgeleides van ϕ , op een uniform rooster met maaswijdte h , geeft

$$\begin{aligned} \frac{d\phi}{dx} &\approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2h} \\ \frac{d^2\phi}{dx^2} &\approx \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{h^2} \end{aligned}$$

Upwind discretiseren van de eerste afgeleide van ϕ , op hetzelfde uniforme rooster, geeft

$$\begin{aligned} \frac{d\phi}{dx} &\approx \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h} & (u > 0) \\ \frac{d\phi}{dx} &\approx \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{h} & (u < 0) \end{aligned}$$

En als we kijken naar

$$u \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h} = u \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2h} - \frac{uh}{2} \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{h^2}$$

en

$$u \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{h} = u \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2h} + \frac{uh}{2} \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{h^2}$$

dan kunnen we zien dat upwind discretisatie van

$$u \frac{d\phi}{dx} - \frac{d}{dx} \left(k \frac{d\phi}{dx} \right)$$

dezelfde discretisatie geeft als wanneer we

$$u \frac{d\phi}{dx} - \frac{d}{dx} \left((k + k_{art}) \frac{d\phi}{dx} \right)$$

centraal discretiseren, waarbij $k_{art} = \frac{1}{2}|u|h$ de artificiële diffusie voorstelt.

3.3.1 De discretisatie van de fluxfunctie

Nu gaan we gebruik maken van de eindige volume methode om een symmetrie behoudende upwind discretisatie te krijgen. Om een upwind discretisatie van de convectieve term te krijgen, hoeven we alleen maar naar de termen met een u te kijken. De bijbehorende fluxfunctie is

$$F^{(up1)}(\phi) = u\phi - \frac{1}{2}|u|h \frac{d\phi}{dx} \quad (3.10)$$

Centraal discretiseren in celwand $i + 1/2$ (zie figuur 3.1) geeft de discrete fluxfunctie

$$F_{i+\frac{1}{2}}^{(up1)}(\phi) = \frac{1}{2}u(\phi_i + \phi_{i+1}) - \frac{1}{2}|u|h_+ \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{h_+} = \frac{1}{2}u(\phi_i + \phi_{i+1}) - \frac{1}{2}|u|(\phi_{i+1} - \phi_i)$$

waarbij de eerste term van de convectie komt, en de tweede van de artificiële diffusie. Nu centraal discretiseren in celwand $i - 1/2$ (zie ook figuur 3.1).

$$F_{i-\frac{1}{2}}^{(up1)}(\phi) = \frac{1}{2}u(\phi_{i-1} + \phi_i) - \frac{1}{2}|u|h_- \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h_-} = \frac{1}{2}u(\phi_{i-1} + \phi_i) - \frac{1}{2}|u|(\phi_i - \phi_{i-1})$$

Ook hier komt de eerste term van de convectie en de tweede van de artificiële diffusie. Door de linker flux af te trekken van de rechter flux krijgen we een eerste orde upwind discretisatie

$$\begin{aligned} h \frac{du\phi}{dx} \Big|_{x_i}^{(Sup1)} &\approx F_{i+\frac{1}{2}}^{(up1)} - F_{i-\frac{1}{2}}^{(up1)} \\ &= \frac{1}{2}u(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) - \frac{1}{2}|u|(\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}) \end{aligned} \quad (3.11)$$

In (3.11) komt de eerste term van de convectie, en is scheef-symmetrisch, en de tweede term, die van de artificiële diffusie komt, is symmetrisch. Nu moet nog aangetoond worden dat het ook nog positief definitief is. Dat kan bijvoorbeeld gedaan worden met behulp van de volgende drie stellingen. We hebben dus een tridiagonale matrix $\{-1, 2, -1\}^2$. Door de volgende stelling te gebruiken zien we dat de matrix irreducibel is.

Stelling Een matrix A van de orde N is dan en slechts dan irreducibel als voor iedere keuze van i en j met $1 \leq i, j \leq N$ en $i \neq j$ geldt dat of dat $a_{ij} \neq 0$ of dat $(\exists k_1, k_2, \dots, k_p)$ zodat $a_{ik_1} a_{k_1 k_2} \dots a_{k_p j} \neq 0$.

²{a,b,c} met a de onderdiagonaal, b de diagonaal en c de bovendiaagonaal.

Stelling van Gerschgorin Zij A een willekeurige matrix van de orde N en laat de grootheden Λ_i gegeven worden door

$$\Lambda_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N |a_{ij}|, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

dan liggen alle eigenwaarden λ van A in de vereniging van de Gerschgorin-cirkels

$$|z - a_{ii}| \leq \Lambda_i, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

Stelling van Taussky Voor een irreducibel matrix A van de orde N geldt dat een randpunt λ van de vereniging van alle Gerschgorin-cirkels slechts dan een eigenwaarde van A kan zijn, als de randen van alle Gerschgorin-cirkels door λ gaan.

Met de stelling van Gerschgorin zien we dat het reële deel van alle eigenwaarden van A op het interval $[0, 4]$ liggen. En met de stelling van Taussky wordt 0 uitgesloten. Dus zijn alle eigenwaarden van de tridiagonale matrix $\{-1, 2, -1\}$ positief en dus is de matrix positief definitief.

Opmerking We hebben nu aangetoond dat $\{-1, 2, -1\}$ positief definitief is, maar dit komt alleen maar van de convectieve-term van de convectie-diffusie vergelijking. We hebben tot nu toe de diffusieve term, van de convectie-diffusie vergelijking, buiten beschouwing gelaten omdat dit minder formules geeft in de afleiding. Op dezelfde manier als voor $\{-1, 2, -1\}$, kunnen we aantonen dat de matrix die komt van de gediscrètiseerde diffusie-term (2.1) (maar dan met een min-teken ervoor, vanwege de convectie-diffusie vergelijking) positief definitief is. De matrix is nu $\left\{ -\frac{2}{h_i(h_i+h_{i+1})}, \frac{2}{h_i h_{i+1}}, -\frac{2}{h_{i+1}(h_i+h_{i+1})} \right\}$. Met de stelling van Gerschgorin hebben we nu dat alle eigenwaarden van de matrix op het interval $[0, 4/h_i h_{i+1}]$ liggen, en ook hier wordt 0 met behulp van de stelling van Taussky uitgesloten. Dus de matrix is positief definitief, en we weten dat de som van twee positieve matrices ook weer positief definitief is, dus is de "totale" diffusieve term positief definitief.

Nu lijkt het een beetje raar omdat in (3.11) zowel ϕ_{i-1} en ϕ_{i+1} staan, maar u kan uiteraard niet positief en negatief tegelijk zijn, en zal een van beide wegvallen. Bijvoorbeeld voor het geval $u > 0$ krijgen we

$$h \frac{du\phi}{dx} \Big|_{x_i}^{(Sup1)} \approx u\phi_i - u\phi_{i-1} = u(\phi_i - \phi_{i-1}) \quad (3.12)$$

Verder delen we nu beide kanten van (3.12) door $h(= \frac{1}{2}(h_i + h_{i+1}))$, dan krijgen we

$$\frac{du\phi}{dx} \Big|_{x_i}^{(Sup1)} \approx \frac{u(\phi_i - \phi_{i-1})}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} \quad (3.13)$$

Als we (3.13) gaan vergelijken met (2.4) dan lijkt (3.13) toch vreemder, omdat daar niet gedeeld wordt door de afstand tussen de 2 roosterpunten, terwijl dat wel gebeurt in (2.4). Toch zullen de resultaten, later in het verslag, laten zien dat (3.13) toch helemaal niet zo'n slecht keuze is.

Als we nu (2.1) en (3.13) invullen in de stationaire convectie-diffusie vergelijking komen we op de volgende gediscretiseerde vergelijking.

$$-\left(\frac{2h_i u + 2k}{h_i(h_i + h_{i+1})}\right)\phi_{i-1} + \left(\frac{2u}{h_i + h_{i+1}} + \frac{2k}{h_i h_{i+1}}\right)\phi_i - \frac{2k}{h_{i+1}(h_i + h_{i+1})}\phi_{i+1} = 0 \quad (3.14)$$

3.3.2 Lokale afbreekfout

$$\begin{aligned} \left.\frac{d\phi}{dx}\right|_{x_i}^{(Sup1)} &= \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} \\ &= \frac{h_i}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} \left.\frac{d\phi}{dx}\right|_i - \frac{h_i^2}{h_i + h_{i+1}} \left.\frac{d^2\phi}{dx^2}\right|_i + \dots \end{aligned}$$

De coëfficiënt voor de term $\left.\frac{d\phi}{dx}\right|_i$ herschrijven geeft

$$\begin{aligned} \frac{h_i}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} &= \frac{h_i}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} - \frac{\frac{1}{2}h_i + \frac{1}{2}h_{i+1}}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} + \frac{\frac{1}{2}h_i - \frac{1}{2}h_{i+1}}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} \\ &= 1 + \frac{h_i - h_{i+1}}{h_i + h_{i+1}} \end{aligned} \quad (3.15)$$

Dus de lokale afbreekfout van de eerste orde symmetrie behoudende upwind methode is $\frac{h_i - h_{i+1}}{h_i + h_{i+1}}\phi_x$. De methode lijkt nu van orde nul te zijn! Terwijl dat bij de traditionele upwind discretisatie nog orde 1 was.

3.4 Tweede orde upwind

3.4.1 De discretisatie van de fluxfunctie

Hogere orde upwind methoden worden verkregen door aan de convectie-diffusie vergelijking oneven afgeleides (voor de scheef-symmetrie) en even afgeleides (voor symmetrisch positief definit) toe te voegen. Er zijn vele mogelijkheden, maar niet alle mogelijkheden geven een mooi resultaat, het volgende voldoet genoeg (hier is een derde en een vierde afgeleide bij de convectie-term opgeteld).

$$F^{(up2)} = u\phi - \frac{1}{2}h \frac{d}{dx} \left(u - \frac{1}{2}|u|h \frac{d}{dx} \right) \left(h \frac{d\phi}{dx} \right)$$

Nu (3.10) gebruiken geeft

$$F^{(up2)}(\phi) = u\phi - \frac{1}{2}h \frac{d}{dx} \left(F^{(up1)} \left(h \frac{d\phi}{dx} \right) \right) \quad (3.16)$$

Centraal discretiseren in celwand $i + \frac{1}{2}$ geeft

$$\begin{aligned} F_{i+\frac{1}{2}}^{(up2)} &= u(\phi_i + \phi_{i+1}) - \frac{1}{2}h_+ \frac{d}{dx} \left(F^{(up1)} \left(h \frac{d\phi}{dx} \right)_{i+\frac{1}{2}} \right) \\ &= u(\phi_i + \phi_{i+1}) - \frac{1}{2} \left(F_{i+1}^{(up1)} \left(h \frac{d\phi}{dx} \right) - F_i^{(up1)} \left(h \frac{d\phi}{dx} \right) \right) \end{aligned} \quad (3.17)$$

Als we alleen de tweede term van (3.17) uitschrijven komen we op

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \left(F_{i+1}^{(up1)} \left(h \frac{d\phi}{dx} \right) - F_i^{(up1)} \left(h \frac{d\phi}{dx} \right) \right) &= \frac{1}{4} u \left(\left(h \frac{d\phi}{dx} \right)_{i+\frac{1}{2}} + \left(h \frac{d\phi}{dx} \right)_{i+\frac{3}{2}} \right) \\
&\quad - \frac{1}{4} |u| \left(\left(h \frac{d\phi}{dx} \right)_{i+\frac{3}{2}} - \left(h \frac{d\phi}{dx} \right)_{i+\frac{1}{2}} \right) \\
&\quad - \frac{1}{4} u \left(\left(h \frac{d\phi}{dx} \right)_{i-\frac{1}{2}} + \left(h \frac{d\phi}{dx} \right)_{i+\frac{1}{2}} \right) \\
&\quad + \frac{1}{4} |u| \left(\left(h \frac{d\phi}{dx} \right)_{i+\frac{1}{2}} - \left(h \frac{d\phi}{dx} \right)_{i-\frac{1}{2}} \right) \tag{3.18}
\end{aligned}$$

En nu de gediscretiseerde versies van $\frac{d\phi}{dx}$, in de celwanden $i - \frac{1}{2}$, $i + \frac{1}{2}$ en $i + \frac{3}{2}$, invullen in (3.18) geeft

$$\begin{aligned}
F_{i+\frac{1}{2}}^{(up2)} &= \frac{1}{2} u (\phi_i + \phi_{i+1}) \\
&\quad - \frac{1}{4} u (\phi_{i+2} - \phi_i) + \frac{1}{4} |u| (\phi_{i+2} - 2\phi_{i+1} + \phi_i) \\
&\quad + \frac{1}{4} u (\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) - \frac{1}{4} |u| (\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}) \tag{3.19}
\end{aligned}$$

Als we nu op dezelfde manier in celwand $i - \frac{1}{2}$ gaan discretiseren (of de indices van de ϕ 's in (3.19) met 1 verlagen) krijgen we

$$\begin{aligned}
F_{i-\frac{1}{2}}^{(up2)} &= \frac{1}{2} u (\phi_{i-1} + \phi_i) \\
&\quad - \frac{1}{4} u (\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) + \frac{1}{4} |u| (\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}) \\
&\quad + \frac{1}{4} u (\phi_i - \phi_{i-2}) - \frac{1}{4} |u| (\phi_i - 2\phi_{i-1} + \phi_{i-2}) \tag{3.20}
\end{aligned}$$

Door nu de linker flux (3.20) van de rechter flux (3.19) af te trekken komen we op

$$\begin{aligned}
h \frac{du\phi}{dx} \Big|_{x_i}^{(Sup2)} &= F_{i+\frac{1}{2}}^{(up2)}(\phi) - F_{i-\frac{1}{2}}^{(up2)}(\phi) \\
&= \frac{1}{2} u \left(-\frac{1}{2} \phi_{i+2} + 2\phi_{i+1} - 2\phi_{i-1} + \frac{1}{2} \phi_{i-2} \right) + \tag{3.21}
\end{aligned}$$

$$\frac{1}{4} |u| \phi_{i+2} - |u| \phi_{i+1} + \frac{3}{2} |u| \phi_i - |u| \phi_{i-1} + \frac{1}{4} |u| \phi_{i-2} \tag{3.22}$$

In (3.21) is te zien dat het scheefsymmetrisch is (komt van de convectie), en in (3.22) is te zien dat het symmetrisch is (komt van de artificiële diffusie). Nu moet nog aangetoond worden dat (3.22) positief definitief is.

We merken het volgende op.

$$(3.22) = \frac{1}{4} |u| (C + W). \text{ Met } C = \{-1, 2, -1\} \cdot \{-1, 2, -1\}, \text{ het produkt van twee } n \times n$$

tridiagonale matrices $\{-1, 2, -1\}$. W is hier een $n \times n$ matrix, met $w_{11} = w_{nn} = 1$ en verder alleen maar nullen. $\frac{1}{4}|u|C$ is positief definitief (want C is het product van 2 dezelfde positief definitieve matrices). Dus hebben we

$$x^T \frac{1}{4}|u|Cx > 0 \quad \forall x \neq 0 \in \mathbb{R}^n$$

We hebben ook $x^T Wx = x_1^2 + x_n^2 \geq 0$. Dus $x^T (3.22)x > 0$. Dus is (3.22) positief definitief.

Ook in (3.21) + (3.22) vallen termen weg bij een keuze voor u . Voor het geval $u > 0$ krijgen we

$$\left. \frac{du\phi}{dx} \right|_{x_i}^{(Sup2)} = \frac{\frac{3}{2}u\phi_i - 2u\phi_{i-1} + \frac{1}{2}u\phi_{i-2}}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} \quad (3.23)$$

Ook hier in (3.23) zien we dat deze formule niet veel te maken heeft met de afstand van de punten, zo komt de afstand h_{i-1} er niet eens in voor, maar net als in het geval bij de eerste orde methoden zullen we zien dat de resultaten van de symmetrie behoudende upwind discretisatie beter kunnen zijn dan de resultaten van de traditionele upwind discretisatie.

Als we (2.1) en (3.23) invullen in de stationaire convectie-diffusie vergelijking krijgen we

$$\begin{aligned} \frac{u}{h_i + h_{i+1}}\phi_{i-2} - \left(\frac{4u}{h_i + h_{i+1}} + \frac{2k}{h_i(h_i + h_{i+1})} \right)\phi_{i-1} + \\ \left(\frac{3u}{h_i + h_{i+1}} + \frac{2k}{h_i h_{i+1}} \right)\phi_i - \frac{2k}{h_{i+1}(h_i + h_{i+1})}\phi_{i+1} = 0 \end{aligned} \quad (3.24)$$

Opmerking Als we terugkijken naar (2.8), dan zien we dat (2.8) voor wilde roosters verkeerd kan gaan. Neem bijvoorbeeld roosters waarbij $h_{i-1} \ll h_i$ geldt. Dan zijn de coëfficiënten van de termen ϕ_{i-2} en ϕ_{i-1} veel groter dan de coëfficiënt van de term ϕ_i . Daarmee is de systeem matrix sowieso al niet diagonaal dominant. Kijken we naar (3.23). Dan zien we dat de verhouding tussen de coëfficiënten onafhankelijk is van de "wildheid" van het rooster. Immers de coëfficiënten worden allemaal gedeeld door $\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})$.

3.4.2 Lokale afbreekfout

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x_i}^{(Sup2)} &= \frac{\frac{3}{2}\phi_i - 2\phi_{i-1} + \frac{1}{2}\phi_{i-2}}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} \\ &= \frac{\frac{3}{2}\phi_i - 2(\phi_i - h_i\phi_x) + \frac{1}{2}(\phi_i - (h_i + h_{i+1})\phi_x)}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} \\ &= \frac{\frac{3}{2}h_i - \frac{1}{2}h_{i+1}}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i \end{aligned}$$

We kunnen de factor voor $\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_i$ verder schrijven als

$$\begin{aligned}
\frac{\frac{3}{2}h_i - \frac{1}{2}h_{i-1}}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} &= \frac{\frac{3}{2}h_i - \frac{1}{2}h_{i-1}}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} - \frac{h_i + \frac{1}{2}h_{i-1} + \frac{1}{2}h_{i+1}}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} \\
&\quad + \frac{h_i - \frac{1}{2}h_{i-1} - \frac{1}{2}h_{i+1}}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} \\
&= 1 + \frac{\frac{1}{2}h_i - \frac{1}{2}h_{i-1}}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} + \frac{\frac{1}{2}h_i - \frac{1}{2}h_{i+1}}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})} \tag{3.25}
\end{aligned}$$

Dus de lokale afbreekfout bij deze methode is $\left(\frac{h_i - h_{i-1}}{h_i + h_{i+1}} + \frac{h_i - h_{i+1}}{h_i + h_{i+1}}\right)\phi_x$. Ook hier lijkt de methode, net als in het eerste orde symmetrie behoudende geval, van orde nul te zijn.

Hoofdstuk 4

De gebruikte roosters

4.1 Het gerekte rooster

Het interval $[0, 1]$ wordt verdeeld over N ongelijke subintervallen. In dit verslag wordt het gerekte rooster gebruikt, waarbij twee opeenvolgende maaswijdtes een constante factor van elkaar verschillen.

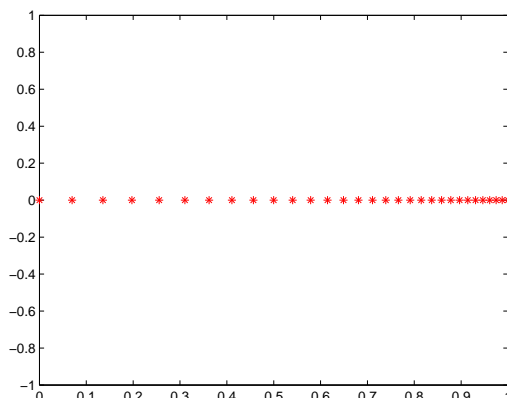
Het is eigenlijk een coördinaten transformatie van het uniforme grid. De transformatie ziet er als volgt uit

$$x = \frac{1 - c^\psi}{1 - c}, \quad \psi \in [0, 1] \quad (4.1)$$

met $c = \left(\frac{1 - x_s}{x_s}\right)^2$. c is zo gekozen dat $\psi = \frac{1}{2}$ correspondeert met het punt $x = x_s \in [0, 1]$.

Door nu x_s vlakbij $x = 1$ te leggen, zal de helft van de roosterpunten in de grenslaag, met dikte $1 - x_s$, terechtkomen.

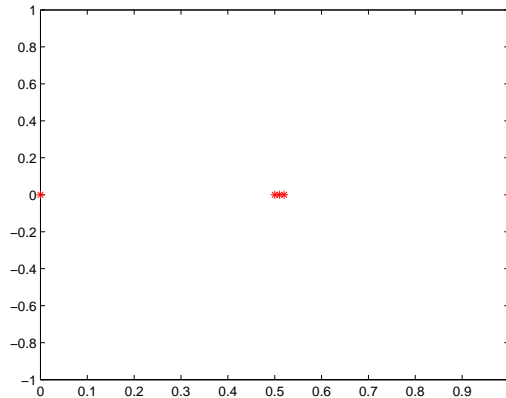
In de figuur hieronder is een voorbeeld gegeven.



Gerekt rooster op $[0, 1]$

4.2 Speciale roosters

Op het interval $[0, 1]$ worden clusters van roosterpunten geplaatst. Het is dus een rooster dat zowel contractie als expansie bevat. Golub *et al.* [1] hebben, met het onderstaande rooster, laten zien dat bij discretiseren met de eerste orde traditionele upwind methode, het symmetrische deel van de matrix een negatieve eigenwaarde heeft.

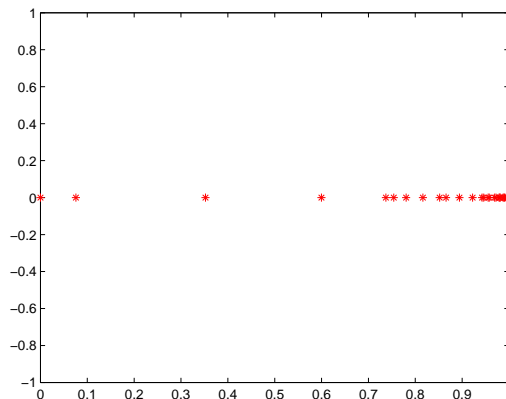


Rooster van Golub *et al.* $[0, 0.5, 0.51, 0.52, 1]$

4.3 Willekeurige roosters

Het willekeurige rooster wordt op de zelfde manier verkregen als het gerekte rooster. Ook nu gaat het weer met dezelfde transformatie (4.1). Alleen is het nu niet een transformatie van een uniform rooster, maar van een willekeurig rooster. Het willekeurig rooster wordt verkregen door een uniform willekeurig verdeling. Dus naar verwachting zullen er evenveel roosterpunten op interval $[0, \frac{1}{2}]$ als $[\frac{1}{2}, 1]$ van het uniform willekeurig rooster liggen. Op interval $[1 - x_s, 1]$ van het willekeurig rooster zullen ongeveer de helft van de roosterpunten liggen.

Hieronder zien we een voorbeeld.



Willekeurig rooster op $[0, 1]$

Hoofdstuk 5

Resultaten

In dit hoofdstuk worden de resultaten in de vorm van plaatjes getoond. Voor de constanten u en k , uit de convectie-diffusie vergelijking, zijn de waarden $u = 1$ en $k = 0.001$ genomen. Als we kijken naar (3.3) zien we dat we het daar over HL hebben, hierom zijn de traditionele vergelijkingen (2.5) en (2.9), voor de berekeningen, geschaald met factor $h = \frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})$ (lengte van het behoudsvolume). De gediscretiseerde vergelijking bij de symmetrie behoudende methode zijn bij het afleiden al geschaald, vanwege (3.9).

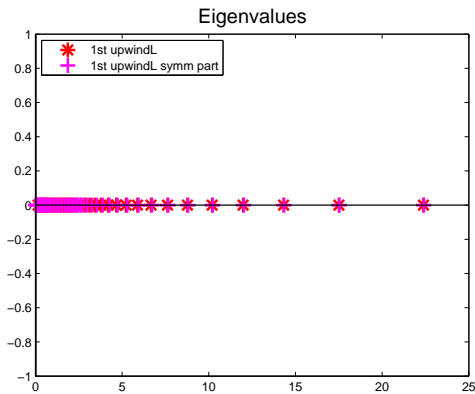
We beginnen met de berekeningen van de eigenwaarden. Dit is gedaan op gerekte, speciale en willekeurige roosters. Daarna komen de resultaten van de berekeningen van de nauwkeurigheid. Dit is gedaan op gerekte en willekeurige roosters. De speciale roosters zijn gebruikt om roosters met "verkeerde" eigenwaarden te vinden, daarom zijn ze niet gebruikt voor de berekeningen van de nauwkeurigheid.

5.1 De eigenwaarden

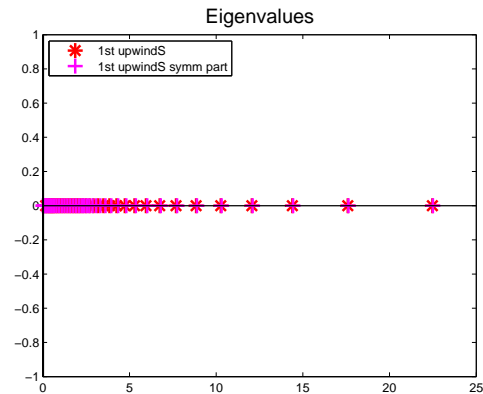
We beginnen dus met de resultaten van de berekeningen van de eigenwaarden in de vorm van plaatjes. Eerst komen de plaatjes van eigenwaarden op een gerekt rooster, daarna op speciaal gekozen roosters en ten slotte op een willekeurig rooster. Telkens zijn de bovenste twee plaatjes van de eerste orde methoden, waarbij de linker van de traditionele methode is, daarna komen de tweede orde methoden. Ook hierbij is de linker van de traditionele methode.

5.1.1 Op een gerekt rooster

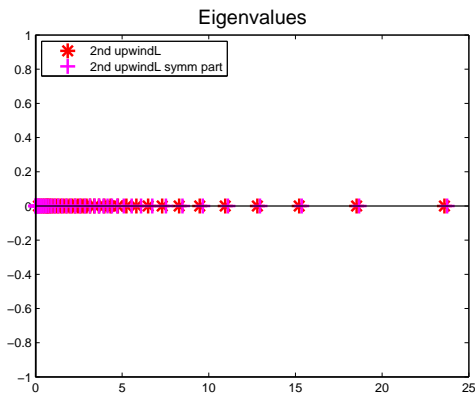
Voor alle vier methoden is hier gebruik gemaakt van het gerekte rooster met 40 roosterpunten. Zoals we kunnen zien, zijn er voor geen van de vier methoden negatieve eigenwaarden van het symmetrische deel van de matrix zichtbaar. Dus zijn er geen problemen voor deze methoden op een gerekt rooster.



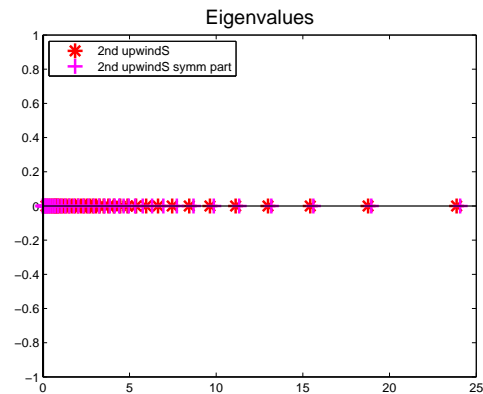
Figuur 5.1: De eigenwaarden van trad. eerste orde upwind op een gerekt rooster.



Figuur 5.2: De eigenwaarden van symm. beh. eerste orde upwind op een gerekt rooster.



Figuur 5.3: De eigenwaarden van trad. tweede orde upwind op een gerekt rooster.



Figuur 5.4: De eigenwaarden van symm. beh. tweede orde upwind op een gerekt rooster.

5.1.2 Op speciale roosters

Eerst gaan we naar het rooster van Golub *et al.* ($[0, 0.5, 0.51, 0.52, 1]$) kijken. (Het rooster heeft 1 cluster).

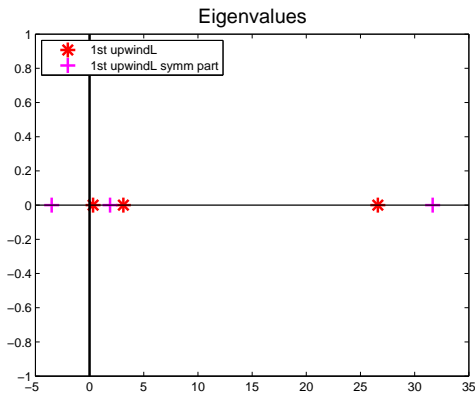
We zien dat in figuur 5.5 en figuur 5.7 negatieve eigenwaarden voorkomen. Golub *et al.* [1] beweren dat het door de onregelmatigheid in het rooster komt. (De maaswijdte wordt groter en kleiner in de positieve richting.)

De eigenwaarden van het symmetrische deel van de matrix, van de traditionele eerste orde upwind methode (zie figuur 5.5), zijn

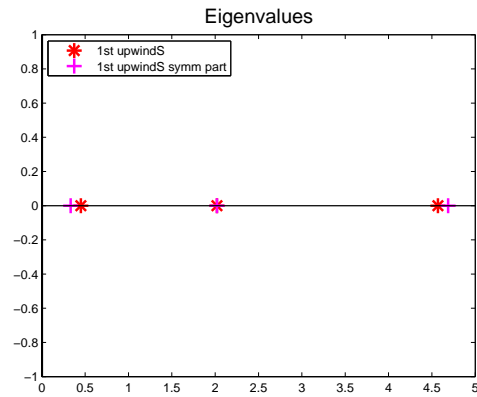
$$\lambda(1upLsymm) = \{-3.4976, 1.8863, 31.6621\}$$

De eigenwaarden van het symmetrische deel van de matrix, van de traditionele tweede orde upwind methode (zie figuur 5.7), zijn

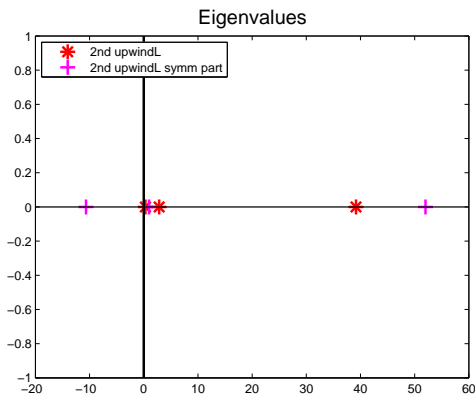
$$\lambda(2upLsymm) = \{-10.6633, 0.9886, 51.9952\}$$



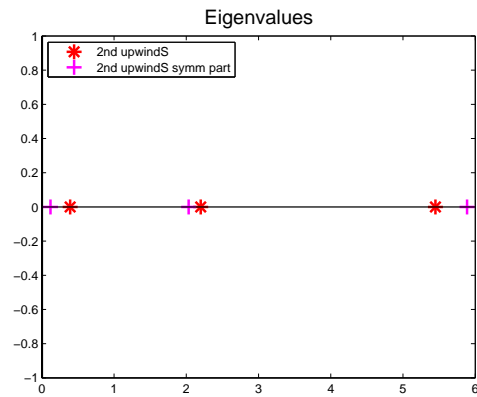
Figuur 5.5: De eigenwaarden van trad. eerste orde upwind op $[0, 0.5, 0.51, 0.52, 1]$ (Golub *et al.*).



Figuur 5.6: De eigenwaarden van symm. beh. eerste orde upwind op $[0, 0.5, 0.51, 0.52, 1]$ (Golub *et al.*).



Figuur 5.7: De eigenwaarden van trad. tweede orde upwind op $[0, 0.5, 0.51, 0.52, 1]$ (Golub *et al.*).



Figuur 5.8: De eigenwaarden van symm. beh. tweede orde upwind op $[0, 0.5, 0.51, 0.52, 1]$ (Golub *et al.*).

Dus voor beide methoden heeft het symmetrische deel van de matrix 1 negatieve eigenwaarde. We gaan nu verder met het rooster $[0, 0.5, 0.51, 0.52, 0.7, 0.71, 0.72, 1.0]$, dus het rooster van Golub *et al.* waaraan een cluster is toegevoegd. Hieronder zijn de bijbehorende figuren.

We zien bij de traditionele methoden (figuren 5.9 en 5.11), dat het symmetrische deel van de matrices weer negatieve eigenwaarden heeft.

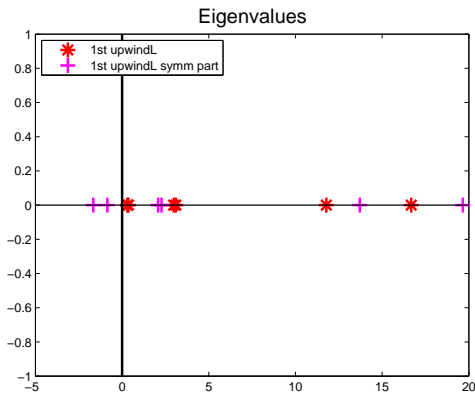
De eigenwaarden van het symmetrische deel van de matrix, van de traditionele eerste orde upwind methode, zijn

$$\lambda(1upLsymm) = \{-1.6583, -0.8481, 2.0752, 2.2759, 13.7064, 19.6535\}.$$

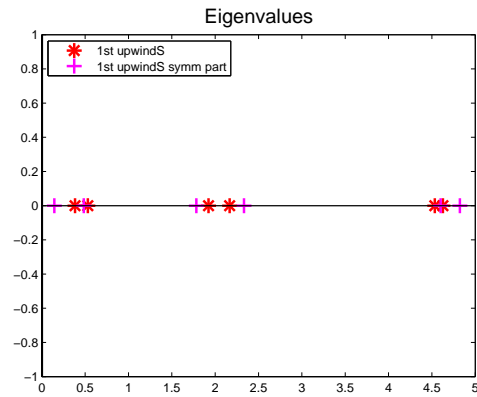
De eigenwaarden van het symmetrische deel van de matrix, van de traditionele tweede orde upwind methode, zijn

$$\lambda(2upLsymm) = \{-5.4898, -3.5793, -0.2044, 1.5870, 23.5693, 31.8941\}.$$

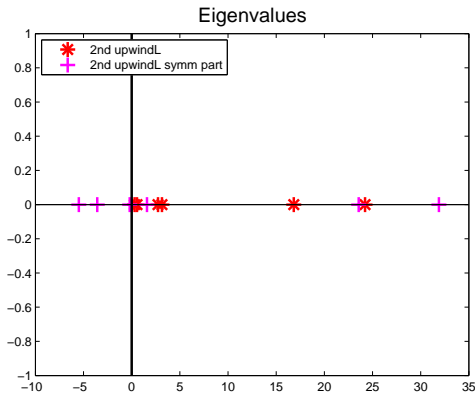
Nu zien we dat het symmetrische deel van de matrix, van de eerste orde methode, 2 negatieve eigenwaarden heeft. Het symmetrische deel van de matrix, van de tweede orde methode, heeft



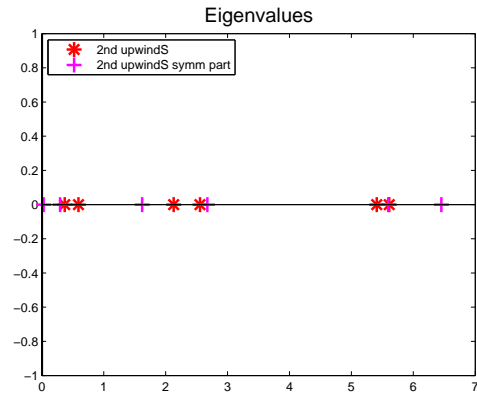
Figuur 5.9: Trad. eerste orde upwind op rooster met twee clusters.



Figuur 5.10: Symm. beh. eerste orde upwind op rooster met twee clusters.



Figuur 5.11: Trad. tweede orde upwind op rooster met twee clusters.



Figuur 5.12: Symm. beh. tweede orde upwind op rooster met twee clusters.

3 negatieve eigenwaarden.

We gaan nu naar nog een speciaal rooster kijken. Namelijk $[0, 0.3, 0.31, 0.32, 0.5, 0.51, 0.52, 0.7, 0.71, 0.72, 1.0]$. Weer zien we negatieve eigenwaarden in het symmetrische deel van de matrices van de traditionele methoden.

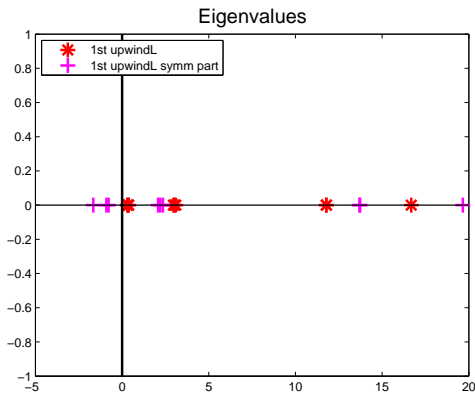
De eigenwaarden van het symmetrische deel van de matrix, van de traditionele eerste orde upwind methode, zijn

$$\lambda(1upLsymm) = \{-1.6583 -0.9023 -0.7806 2.0761 2.2065 2.3556 13.6899 13.7231 19.6535\}.$$

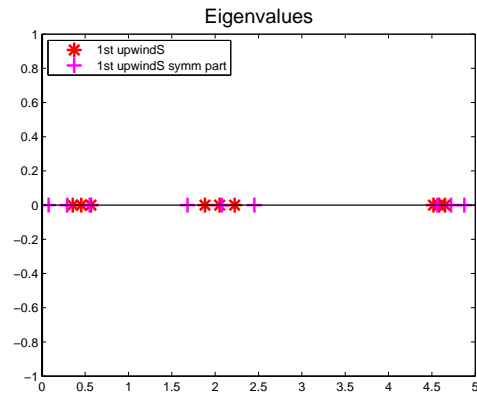
De eigenwaarden van het symmetrische deel van de matrix, van de traditionele tweede orde upwind methode, zijn

$$\lambda(2upLsymm) = \{-5.4900, -3.7218, -3.4142, -0.5254, 0.5203, 1.7215, 22.8461, 24.4198, 31.8947\}.$$

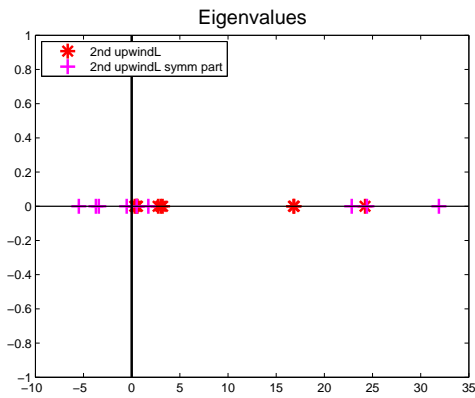
Nu zien we dat het symmetrische deel van de matrix, van de eerste orde methode, 3 negatieve eigenwaarden heeft. Het symmetrische deel van de matrix, van de tweede orde methode, heeft



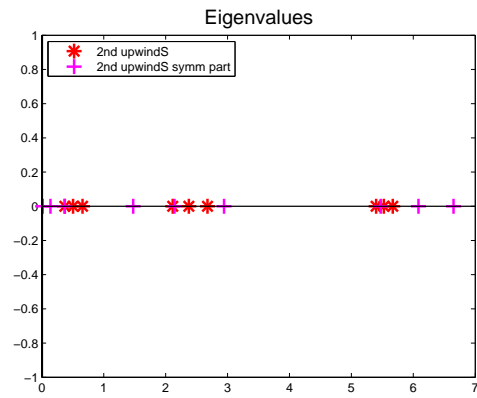
Figuur 5.13: Trad. eerste orde upwind op rooster met drie clusters.



Figuur 5.14: Symm. beh. eerste orde upwind op rooster met drie clusters.



Figuur 5.15: Trad. tweede orde upwind op rooster met drie clusters.



Figuur 5.16: Symm. beh. tweede orde upwind op rooster met drie clusters.

4 negatieve eigenwaarden.

Als we nu naar het aantal negatieve eigenwaarden gaan kijken, en daarbij ook kijken naar het aantal clusters die het rooster heeft. Dan lijkt het alsof het een regel is, dat bij de traditionele eerste orde upwind methode, het aantal negatieve eigenwaarden gelijk is aan het aantal clusters in het rooster. En dat voor de traditionele tweede orde upwind methode, behalve voor het rooster met 1 cluster, het aantal negatieve eigenwaarden 1 plus het aantal clusters is.

Zeker als we kijken naar de volgende berekening die op het rooster $[0, 0.1, 0.11, 0.12, 0.3, 0.31, 0.32, 0.5, 0.51, 0.52, 0.7, 0.71, 0.72, 1.0]$ is gedaan.

De eigenwaarden van het symmetrische deel van de matrix, van de eerste orde methode, zijn

$$\lambda(1upLsymm) = \{-1.6583, -0.9208, -0.8314, -0.7470, 2.0761, 2.1927, 2.3160, 2.4017, 13.6832, 13.7067, 13.7300, 19.6535\}.$$

De eigenwaarden van het symmetrische deel van de matrix, van de tweede orde methode zijn

$$\lambda(2upLsymm) = \{-5.4901, -3.7856, -3.5282, -3.3491, -0.6495, 0.0004, 0.9633, 1.8168, 22.5414, 23.6687, 24.7683, 31.8947\}.$$

Het rooster heeft 4 clusters van rooster punten, dus volgens de "regel" zou het symmetrische deel van de matrix van de eerste orde methode 4 negatieve eigenwaarden moeten hebben, 5 negatieve eigenwaarden voor het symmetrische deel van de matrix van de tweede orde methode. Als we kijken is dat ook zo.

Maar de volgende berekening gooit roet in het eten. Deze is gedaan op $[0, 0.1, 0.11, 0.12, 0.2, 0.21, 0.22, 0.3, 0.31, 0.32, 0.4, 0.41, 0.42, 1.0]$ (dus ook 4 clusters).

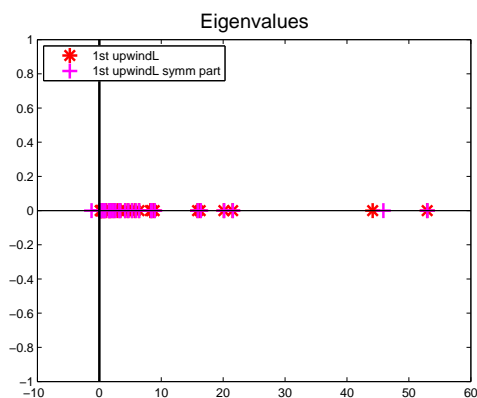
Maar nu zijn de eigenwaarden van het symmetrische deel van de matrices

$$\lambda(1\text{upLsymm}) = \{-4.4594, -0.2512, -0.1265, 0.0166, 1.9176, 2.2907, 2.4994, 2.6808, 7.8876, 7.9519, 8.0146, 37.6825\}.$$

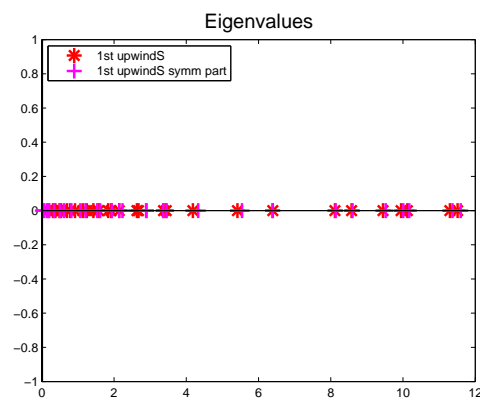
$$\lambda(2\text{upLsymm}) = \{-13.1792, -1.0346, -0.7997, -0.6332, 0.4785, 0.8407, 1.4386, 1.9651, 12.0408, 12.7814, 13.4843, 62.1463\}.$$

Als we nu de negatieve eigenwaarden gaan tellen klopt de "regel" niet meer. Het kan komen doordat de clusters niet meer mooi verspreid zijn, maar we gaan hier niet meer verder op in.

5.1.3 Op een willekeurig rooster



Figuur 5.17: De eigenwaarden van trad. eerste orde upwind op een willekeurig rooster.

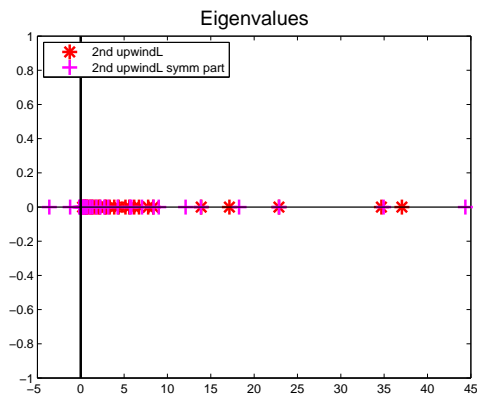


Figuur 5.18: De eigenwaarden van symm. beh. eerste orde upwind op een willekeurig rooster.

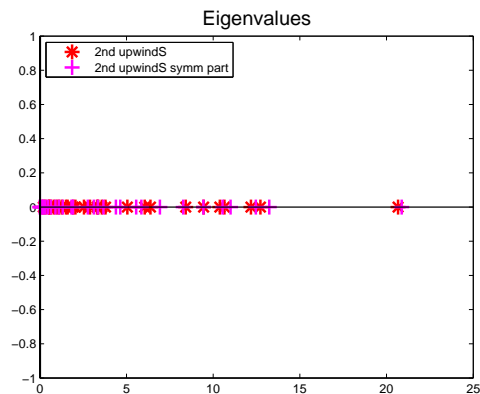
Hier is voor alle methoden een willekeurig rooster gebruikt met 30 roosterpunten. We kunnen nu zien dat voor zowel de eerste als de tweede orde traditionele upwind, het symmetrische deel van de matrix negatieve eigenwaarden heeft. Voor de symmetrie behoudende upwind methoden gaat het allemaal goed (allemaal positieve eigenwaarden).

Opmerking Wat we in de figuren van de eigenwaarden kunnen zien, is dat wanneer er ge-discretiseerd wordt met een symmetrie behoudende methode, de meest rechtse eigenwaarden naar de oorsprong verschuift. De stabiliteits limiet van expliciete tijd integratie methoden is afhankelijk van deze eigenwaarden. Wanneer deze eigenwaarden richting de oorsprong verschuift, wordt de stabiliteits limiet vergroot.

Als we goed kijken naar de spectra van de traditionele en de symmetrie behoudende upwind methoden, lijken deze gelijk, wanneer de berekening gedaan is op een gerekt rooster. Dat komt omdat een gerekt rooster een net rooster is (maaswijdte wordt niet groter en kleiner).



Figuur 5.19: De eigenwaarden van trad. tweede orde upwind op een willekeurig rooster.

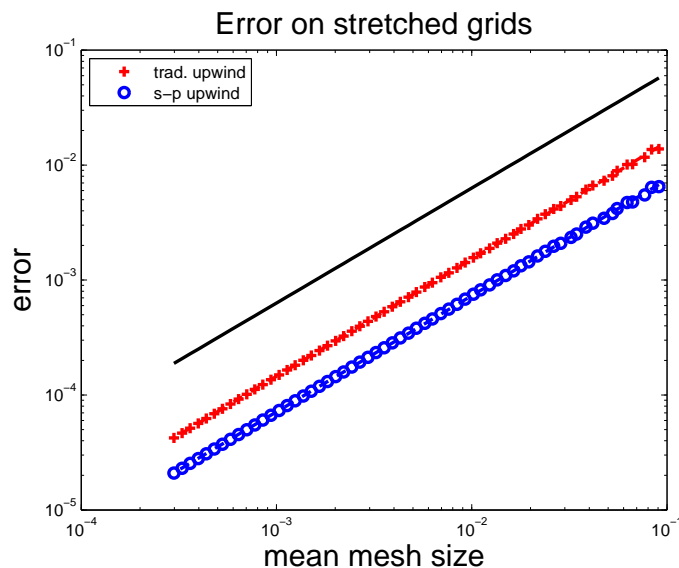


Figuur 5.20: De eigenwaarden van symm. beh. tweede orde upwind op een willekeurig rooster.

5.2 De nauwkeurigheid

5.2.1 Eerste orde upwind

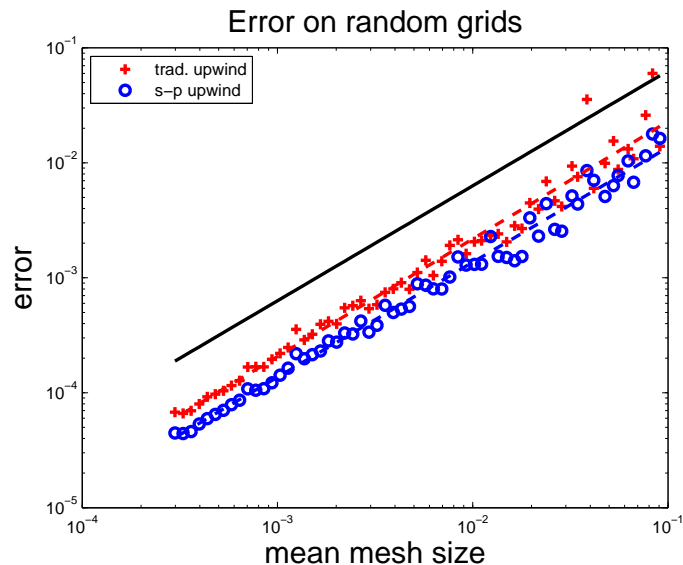
We gaan nu verder met de sommetjes van de nauwkeurigheid. Hieronder, in de figuren, is de fout uitgezet tegen de gemiddelde maaswijdte.



Figuur 5.21: De fout van eerste orde methoden op gerekte roosters, waarbij boven van trad. upwind is.

In figuur 5.21 is te zien dat op het gerekte rooster de symmetrie behoudende methode altijd beter is dan de traditionele methode. Met behulp van de Matlab-commando's **polyfit** en **polyval** is de orde van een methode bepaald. Deze commando's maken gebruik van de kleinste kwadraten methode van Gauss. De orde van een methode is gelijk aan de helling van de lijn, die met behulp van de kleinste kwadraten methode verkregen wordt. We zien een lijn getekend in figuur 5.21. Deze lijn heeft een helling van exact 1. We kunnen nu dus met het oog zien dat de 2 methoden van orde 1 zijn. (Ze lopen ongeveer parallel aan de lijn met

helling 1). De hellingen die met behulp van de Matlab-commando's verkregen zijn, is voor de traditionele methode 1.0196, en voor de symmetrie behoudende methode 1.0096. Door naar de getallen te kijken, zien we ook dat de ordes van de methoden ongeveer 1 is.



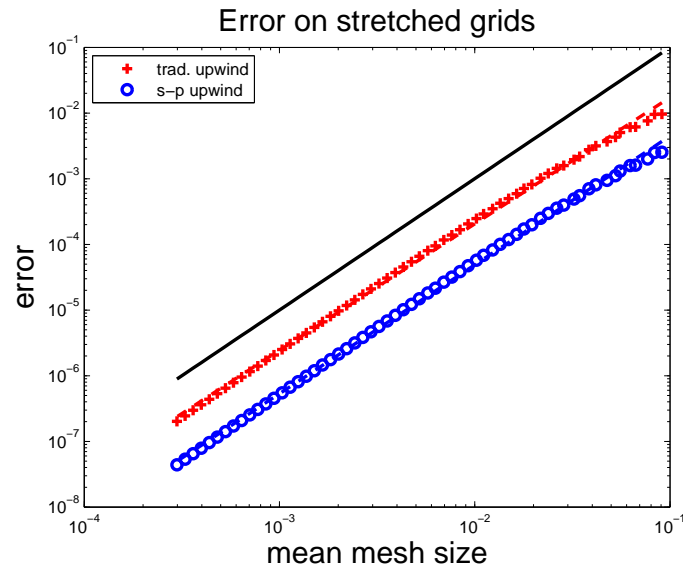
Figuur 5.22: De fout van eerste orde methoden op willekeurige roosters, waarbij boven van trad. upwind is.

Ook op het willekeurige rooster (figuur 5.22) zien we dat de symmetrie behoudende eerste orde methode over het algemeen beter is dan de traditionele methode. Alleen zien we dat het voor een enkel rooster niet geldt. Het is duidelijk in figuur 5.22 te zien dat er soms een rondje (van de symmetrie behoudende methode) boven een kruisje zit (van de traditionele methode), zoals het meest rechtsliggende punt.

Ook hier zijn, met behulp van dezelfde Matlab-commando's de hellingen bepaald (om de ordes van de methoden te krijgen). Ook hier is een lijn getrokken met exact helling 1, zodat we hier ook met het oog kunnen zien dat de 2 methoden van orde 1 zijn. De hellingen die met behulp van de Matlab-commando's verkregen worden zijn voor de traditionele upwind methode 1.0224, en voor de symmetrie behoudende methode 0.9997. Dus ook hier zeggen de getallen dat de methoden ongeveer van orde 1 zijn. Door naar de lokale afbreekfout (3.15) te kijken, zouden we verwachten dat de symmetrie behoudende upwind methode het slechter zou doen. We hebben immers gezien dat de lokale afbreekfout van orde 0 is. Maar zoals we zien is de methode toch van orde 1.

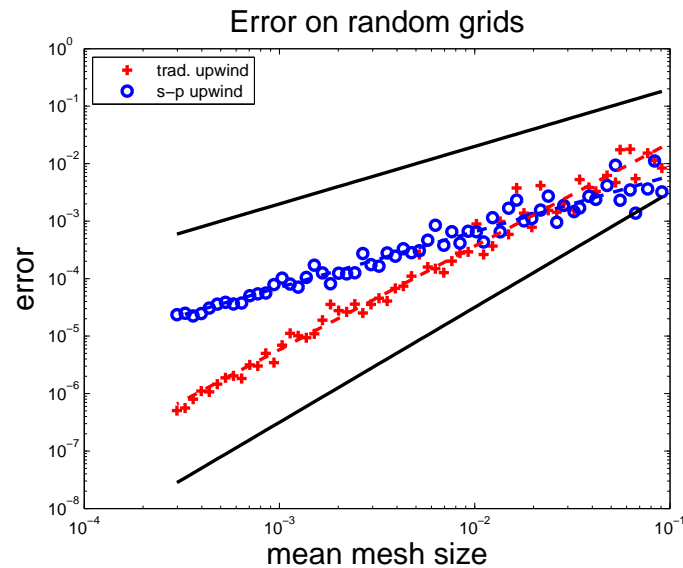
5.2.2 Tweede orde upwind

We gaan nu kijken naar figuur 5.23. Hier gebeurt hetzelfde als bij de eerste orde methoden, hier is op het gerekte rooster in alle gevallen de symmetrie behoudende tweede orde upwind methode beter dan de traditionele tweede orde upwind methode. Net als bij de plaatjes van de eerste orde upwind methoden is hier een lijn getekend. Deze lijn in figuur 5.23 heeft een helling van exact 2. We zien dat het patroon van de punten ongeveer parallel lopen aan de lijn. Dus zowel de traditionele upwind methode als de symmetrie behoudende methode oogt



Figuur 5.23: De fout van tweede orde methoden op gerekte roosters, waarbij boven van trad. upwind is.

tweede orde. Met behulp van dezelfde Matlab-commando's zijn de hellingen van de lijnen door de punten bepaald. De helling van het patroon van de punten van de traditionele upwind methode is 1.9253. De helling van het patroon van de punten van de symmetrie behoudende methode is 1.9618. Zoals we nu kunnen zien liggen de waarden dichtbij 2. Ook hier kunnen we zeggen dat de symmetrie behoudende methode het beter doet dan verwacht. Als we alleen naar de lokale afbreekfout (3.25) kijken, zouden we verwachten dat het een methode is van orde 0.



Figuur 5.24: De fout van tweede orde methoden op willekeurige roosters, waarbij de plusjes van trad. upwind zijn.

Op het willekeurige rooster (figuur 5.24) valt het op dat de symmetrie behoudende tweede orde upwind methode het minder goed doet, op roosters met een grotere aantal roosterpunten, dan de traditionele tweede orde upwind methode. Vanaf 10^{-2} lijkt de symmetrie behoudende methode het vaker beter te doen dan de traditionele methode. In figuur 5.24 zijn twee lijnen getekend. De bovenste lijn heeft exact helling 1, de onderste lijn heeft exact helling 2. We zien dus dat de symmetrie behoudende tweede orde methode van eerste orde is, en de traditionele tweede orde methode van tweede orde lijkt. De hellingen, die zijn bepaald met de Matlab-commando's, zijn voor de traditionele upwind methode 1.7608 en voor de symmetrie behoudende methode 0.9864.

Dus voor het gerekte rooster lijken zowel de traditionele methode als de symmetrie behoudende methode tweede orde te zijn, en op het willekeurige rooster lijkt de symmetrie behoudende methode van orde 1 te zijn. (Toch beter dan verwacht).

Hoofdstuk 6

Conclusie

Net zoals bij de traditionele eerste orde upwind discretisatie, blijkt ook de traditionele tweede orde upwind methode aan het zelfde probleem te lijden. We zien in de figuren 5.7, 5.11 en 5.15 (plaatjes van de eigenwaarden op speciale roosters) dat het symmetrische deel van de matrix negatieve eigenwaarden heeft. Datzelfde geldt ook op een willekeurig rooster (zie figuur 5.19). Daardoor zijn de matrices niet positief reëel, hetgeen wenselijk is (zie (3.3)). We zien ook, net zoals bij de traditionele eerste orde upwind methode, dat als we gaan discretiseren met een symmetrie behoudende upwind methode, dat het symmetrische deel van de matrix alleen maar positieve eigenwaarden heeft. (Zie in de figuren 5.8, 5.12, 5.16 (plaatjes van de eigenwaarden op de speciale roosters) en figuur 5.20 (eigenwaarden op het willekeurig rooster)). Dus dan gaat het goed, zoals in hoofdstuk 4 is gezegd.

We gaan nu naar de formules (3.13) en (3.23) kijken. We hadden toen opgemerkt dat deze formules er vreemder uitzagen dan (2.4) en (2.8), omdat (3.13) en (3.23) niet veel te maken hebben met de afstand tussen de bijbehorende roosterpunten. Toch hebben we in de figuren van de nauwkeurigheid gezien dat het resultaat niet heel slecht is. Sterker nog, op een fatsoenlijk gerekt rooster zien we in de figuren 5.21 en 5.23 dat de symmetrie behoudende upwind methoden in alle gevallen beter zijn. Op een willekeurig rooster geldt dit, voor de eerste orde upwind methoden, over het algemeen (zie figuur 5.22). We zien als we goed kijken, dat voor enkele roosters de traditionele eerste orde upwind methode beter is dan de symmetrie behoudende eerste orde upwind methode. Voor de tweede orde upwind methoden op een willekeurig rooster zien we iets compleet anders (zie figuur 5.24). Voor kleinere gemiddelde maaswijdtes heeft de symmetrie behoudende tweede orde upwind methode een grotere fout, dan de traditionele tweede orde upwind methode. Maar voor gemiddelde maaswijdtes groter dan 10^{-2} lijkt de symmetrie behoudende upwind methode het ook hier beter te doen dan de traditionele upwind methode.

Bibliografie

- [1] G. Golub, D. Silvester en A. Wathen. Diagonal dominance and positive definiteness of upwind approximations for advection diffusion problems, in: D.F. Griffiths and G.A. Watson, eds., *Numerical Analysis: A R. Mitchell 75th Birthday Volume* (World Scientific, Singapore, 1996) 125-132
- [2] A.E.P. Veldman. *Computational Fluid Dynamics*, Colledictaat RuG, (2004)
- [3] A.E.P. Veldman. *Symmetry-preserving upwind discretization of convection on non-uniform grids*, (2006)
- [4] F.W. Wubs. *Computational methods of Science*, Colledictaat RuG, (2004)
- [5] E. Kreyszig. *Advanced Engineering Mathematics, 8th. ed.*, (Wiley, 1997)
- [6] J.E. Marsden, A.J. Tromba. *Vector Calculus, 4th. ed.*, (W.H Freeman and Company, 1996)
- [7] R.L. Burden, J.D. Fairy. *Numerical Analysis, 7th. ed.*, (Brooks/Cole, 2001)
- [8] Gilbert Strang. *Linear algebra and its applications*, (Academic Press, 1976)