Samenvatting

In het dagelijkse leven hebben we veel te maken met stromingen van vloeistoffen en gassen. Men kan hierbij denken aan de stroming van lucht om een auto, vliegtuig of gebouw, de stroming van water in rivieren en oceanen en natuurlijk de stromingen in de atmosfeer. Een manier om inzicht te krijgen in het gedrag van stromingen is het uitvoeren van experimenten. Hierbij kan men denken aan het doen van metingen aan stromingen rond een auto of vliegtuig in een windtunnel. Dit soort experimenten is echter vaak duur, tijdrovend, of soms zelfs gevaarlijk (denk bijvoorbeeld aan onderzoek aan verbrandingsprocessen of explosies). Daarom worden stromingen tegenwoordig veelvuldig gesimuleerd met behulp van een computer; hiervoor zijn krachtige computers en snelle numerieke algoritmen nodig. De ontwikkeling van dergelijke algoritmen is nog steeds in volle gang en dit proefschrift hoopt hieraan een bijdrage te kunnen leveren.

De beweging van een vloeistof of gas wordt beschreven door de tijdsafhankelijke Navier-Stokes vergelijkingen. Deze vergelijkingen zijn reeds in de eerste helft van de negentiende eeuw opgesteld. Ze worden gevormd door de behoudswetten voor massa en impuls, die in het geval van een samendrukbaar gas aangevuld worden met de behoudswet voor energie. In dit proefschrift beperken we ons tot de onsamendrukbare vergelijkingen. Om de koppeling tussen de afzonderlijke behoudswetten goed weer te geven hebben we er voor gekozen om alle vergelijkingen van het stelsel tegelijk op te lossen, dit in tegenstelling tot een aanpak waarbij de vergelijkingen alternerend worden opgelost. Voor de tijdsintegratie gebruiken we een impliciete methode. Na discretisatie en linearisatie ontstaan hierdoor grote lineaire stelsels, waarvan (gelukkig) de meeste elementen gelijk zijn aan nul.

Het is derhalve belangrijk om snelle algoritmen voor het oplossen van lineaire stelsels $Ax = b$, met de matrix A groot en ijl, te ontwikkelen. Dergelijke stelsels kunnen met een directe of een iteratieve methode opgelost worden. Met een directe methode wordt door middel van Gauss eliminatie een onderdriehoeksmatrix L en een bovendriehoeksmatrix U geconstrueerd zodanig dat $A = LU$. Vervolgens wordt de oplossing van het lineaire stelsel verkregen door de twee stelsels $Ly = b$ en $Ux = y$ op te lossen. Het nadeel van deze methode is dat, alhoewel de matrix A ijl is, de matrices L en U dat niet hoeven te zijn, waardoor veel geheugencapaciteit nodig is. Verder is het maken van een LU ontbinding voor grote matrices erg duur. Hierdoor is het aantrekkelijker om de stelsels met een iteratieve methode op te lossen.

De convergentiesnelheid van iteratieve methoden hangt af van de eigenwaarden van de matrix A; het is met name ongunstig wanneer het spectrale conditiegetal, het quotiënt van de grootste en kleinste eigenwaarde, groot is. Om de convergentiesnelheid te verhogen kan gebruik worden gemaakt van preconditionering. In plaats van het oorspronkelijke stelsel wordt dan het stelsel $P^{-1}Ax = P^{-1}b$ opgelost. De preconditioner P moet een benadering zijn van A; hierdoor lijkt het gepreconditioneerde stelsel op een identiteitsmatrix, waardoor het spectrale conditiegetal veel gunstiger wordt. Verder moet het oplossen van $Py = r$, voor gegeven r, goedkoper zijn dan het oplossen van $Ay = r$.

In dit proefschrift worden preconditioners gebaseerd op een incomplete LU ontbinding van de matrix A beschouwd: $A = LU + R$, waarbij de matrix R de fout in de ontbinding representeert. De incomplete ontbinding wordt door middel van Gauss eliminatie geconstrueerd: er wordt een LU ontbinding van A gemaakt waarbij tijdens het eliminatieproces matrixelementen weggegooid worden. De ordening van de onbekenden en de weggooistrategie van elementen is van grote invloed op de kwaliteit van de preconditioner. Het verkrijgen van meer inzicht in deze afhankelijkheid vormt een belangrijk onderdeel van het onderzoek dat in dit proefschrift wordt beschreven.

In hoofdstuk 2 worden preconditioners beschouwd waarbij de onbekenden genummerd zijn volgens een herhaalde schaakbordvolgorde. Tijdens het eliminatieproces worden elementen weggegooid op basis van hun positie. Een aantrekkelijk punt van deze preconditioner is dat hij eenvoudig te construeren is. Doordat het criterium om elementen weg te gooien niet is gebaseerd op de grootte van de elementen, functioneert de preconditioner niet goed als de elementen sterk van grootte verschillen (bijvoorbeeld als gevolg van een discretisatie op een sterk gerekt rooster).

Om de kwaliteit van de preconditioners te verklaren is in hoofdstuk 3 een theoretische analyse uitgevoerd waarbij we een verzameling afleiden waarin de eigenwaarden van het gepreconditioneerde systeem bevat zijn. Vervolgens is met behulp van Fourier analyse voor verschillende testproblemen een afschatting gemaakt van deze verzameling. Het blijkt dat we op deze manier het convergentiegedrag redelijk kunnen verklaren.

In hoofdstuk 4 wordt een meer geavanceerde preconditioner, de MRILU (matrix renumbering ILU) preconditioner, beschouwd. In deze preconditioner wordt de nummering van de onbekenden bepaald tijdens de factorisatie. Verder wordt de beslissing om een element weg te gooien gebaseerd op zijn verhouding tot de diagonaal van de matrix en op de som van de elementen die reeds weggegooid zijn. Hierdoor ontstaat een accurate factorisatie. Deze preconditioner is in een aantal toepassingen getest en geeft goede resultaten.

Zoals reeds vermeld worden stromingen van vloeistoffen en gassen beschreven door de Navier-Stokes vergelijkingen. In deze vergelijkingen bevindt zich een parameter, het Reynolds getal. Dit getal kan beschouwd worden als een maat voor de snelheid van de stroming; hoe sneller de stroming beweegt, hoe hoger het Reynolds getal is. Het uitvoeren van een bifurcatieanalyse, d.w.z. het berekenen van stromingen voor een reeks Reynolds getallen, de stabiliteit van die stromingen (d.w.z. of ze in de praktijk kunnen voorkomen) en de waarde van het Reynolds getal waarbij de stroming van karakter verandert (bifurcatiepunt), is zowel vanuit theoretisch als praktisch oogpunt interessant. Voor bijvoorbeeld de stroming om een object is het van belang of een stationaire stroming rond dit object kan veranderen in een periodieke stroming. In dat geval gaat de stroming een periodieke kracht uitoefenen op het object waardoor dit beschadigd kan raken (bijvoorbeeld door vermoeidheidsverschijnselen van het materiaal).

Een numerieke techniek waarmee een bifurcatieanalyse uitgevoerd kan worden is een continuatiemethode. Continuatiemethoden worden reeds veelvuldig gebruikt voor problemen met een klein aantal (circa 10) vrijheidsgraden. Pas recent worden ze ook toegepast in problemen met een groot aantal vrijheidsgraden (circa 10^5), waaronder problemen uit de stromingsleer. Door de ontwikkeling van snelle numerieke algoritmen en de toename van de geheugencapaciteit van computers zijn berekeningen aan dergelijke grote systemen mogelijk geworden.

Hoofdstuk 5 beschrijft een bifurcatieanalyse voor het Rayleigh-Bénard probleem: een rechthoekige bak is gevuld met een vloeistof, de temperatuur van de onderkant van de bak is hoger dan de temperatuur van de bovenkant. De relevante parameter in dit probleem is het Rayleigh getal. Dit getal is een maat voor het temperatuurverschil tussen de bovenkant en onderkant van de bak. Als het temperatuurverschil hoog genoeg is zal de vloeistof gaan bewegen. Afhankelijk van het temperatuurverschil kunnen verschillende stromingspatronen ontstaan. In dit specifieke probleem zijn de stromingspatronen niet afhankelijk van de tijd. Hierdoor wordt de stabiliteit van een stromingspatroon bepaald door de eigenwaarden van de Jacobiaan van het systeem. Deze eigenwaarden berekenen we met de Jacobi-Davidson QZ methode, waarbij we de MRILU ontbinding als preconditioner gebruiken. De MRILU preconditioner passen we tevens toe om de stromingspatronen zelf te berekenen.

Vervolgens wordt in hoofdstuk 6 een bifurcatieanalyse beschreven voor het driven-cavity probleem: de bovenkant van een vierkante bak wordt met constante snelheid naar rechts bewogen, waardoor de vloeistof in de bak gaat ronddraaien. De snelheid waarmee de bovenkant van de bak naar rechts wordt bewogen bepaalt hoe de stroming er uit zal zien; het Reynolds getal is een maat voor die snelheid en fungeert derhalve als continueringsparameter. Ondanks dat het driven-cavity probleem veel gebruikt wordt om nieuwe methoden voor het oplossen van de Navier-Stokes vergelijkingen te testen is er nog weinig bekend over zijn bifurcatiegedrag. Als de bovenkant harder gaat bewegen zullen de stromingen afhankelijk worden van de tijd: er ontstaan periodieke stromingen en uiteindelijk zelfs turbulente stromingen. Hierdoor is de methode van hoofdstuk 5 niet meer bruikbaar; er is een krachtigere methode nodig om het bifurcatiegedrag te kunnen bepalen. De bifurcatieanalyse wordt uitgevoerd met de Newton-Picard methode van Lust en Roose. Deze methode maakt gebruik van het feit dat, ondanks dat we te maken hebben met een hoog-dimensionaal systeem, de dynamica van het systeem laag-dimensionaal is. Als gevolg hiervan vormen de eigenvectoren behorende bij de eigenwaarden die verantwoordelijk zijn voor de bifurcaties en de instabiliteit een relatief laag-dimensionale ruimte. Door gebruik te maken van deze eigenschap kunnen de periodieke stromingen en hun stabiliteit efficiënt berekend worden.

Met dit proefschrift hopen we een bijdrage te hebben geleverd aan de ontwikkeling van goede preconditioners voor het oplossen van stelsels lineaire vergelijkingen. Doordat we de beschikking hebben over goede continuatiemethoden en snelle methoden voor het oplossen van lineaire stelsels zijn we in staat om bifurcatieanalyses uit te voeren. We hebben dit gedaan voor zowel tijdsonafhankelijke als tijdsafhankelijke problemen. Verder onderzoek is nodig om de kwaliteit van preconditioners verder te verbeteren; de strategie voor het ordenen van de onbekenden en het weggooien van elementen tijdens de factorisatie spelen hierbij een belangrijke rol.