

Bachelorarbeit

Galerkin-Methode und Dünngitterquadratur: Uncertainty Quantification mit Stochastic Collocation bei elliptischen Differentialgleichungen

Philipp Felsen

17.07.2024

Betreuung:
Prof. Dr. Christian Wieners,
David Schneiderhan (M.Sc.)

Fakultät für Mathematik

Karlsruher Institut für Technologie

Ich versichere wahrheitsgemäß, die Arbeit selbstständig verfasst, alle benutzten Hilfsmittel vollständig und genau angegeben und alles kenntlich gemacht zu haben, was aus Arbeiten anderer unverändert oder mit Abänderungen entnommen wurde, sowie die Satzung des KIT zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis in der jeweils gültigen Fassung beachtet zu haben.

Karlsruhe, den 26.07.2024

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	6
2 Mathematische Grundlagen	8
2.1 Notation	8
2.2 Analysis	8
2.3 Wahrscheinlichkeitstheorie	12
2.4 Quadraturformeln in höheren Dimensionen	14
3 Hierarchische Basen und Interpolation	17
3.1 Hierarchische Basen auf dem Einheitsintervall	17
3.2 Mehrdimensionale hierarchische Basen auf dem Einheitswürfel	20
3.3 Hierarchische Interpolation auf dem Einheitswürfel	22
3.4 Hierarchische Interpolation auf d-dimensionalen Rechtecken	25
4 Dünne Gitter	26
4.1 Interpolation auf dünnen Gittern	27
4.2 Interpolationsfehler auf dünnen Gittern	30
4.3 Dünngitterquadratur	31
4.3.1 Ausblick: Adaptive Dünngitterquadratur	32
4.4 Ausblick: Weitere Methoden zur Erzeugung von dünnen Gittern	33
4.4.1 Dünne Gitter nach Clenshaw-Curtis	33
5 Das Potentialströmungsproblem	38
5.1 Physikalische Grundlagen	38
5.2 Mathematische Modellierung	39
6 Schwache Formulierung und Lösbarkeit des deterministischen Potentialströmungsproblems	41
6.1 Schwache Formulierung	41
6.2 Theoretische Lösbarkeit	42
7 Numerische Lösung des deterministischen Potentialströmungsproblems	46
7.1 Ritz-Galerkin-Verfahren	46
7.2 Finite-Elemente-Methode mit Lagrange Elementen erster Ordnung	48
7.2.1 Lagrange Elemente höherer Ordnung	51
7.3 Das Lemma von Céa	52
8 Uncertainty Quantification mit Stochastic Collocation	54
8.1 Stochastic Collocation	54
8.2 Stochastic Collocation via Interpolation	55
8.3 Quantities of Interest des Modellproblems	57

9 Stochastische Modellierung der Permeabilität	58
9.1 Theoretische Grundlagen	58
9.2 Kosambi–Karhunen–Loève-Expansion	59
10 Numerische Ergebnisse	61
10.1 Dünn- und Vollgitterquadratur - Fehleranalyse	61
10.1.1 Tests für Polynomfunktionen	62
10.1.2 Tests für allgemeine Funktionen	64
10.1.3 Schachbrett-Funktion	67
10.1.4 Fazit	68
10.2 Modellproblem in M++	69
10.2.1 Stochastische Permeabilität und Lösung des Modellproblems	70
10.3 Stochastische Fehlergröße	71
10.3.1 UQ - RMSE und räumliche Diskretisierung	71
10.3.2 UQ - RMSE und stochastische Dimension	73
10.4 Quantities of Interest	75
10.4.1 Referenzgrößen	75
10.4.2 UQ - Einfluss des SpaceLevels auf Erwartungswert und Varianz	76
10.4.3 UQ - Erwartungswert	77
10.4.4 UQ - Varianz	80
10.4.5 Zusammenfassung Stochastic Collocation	82
10.5 Vergleich zwischen Stochastic Collocation und Monte-Carlo	83
10.5.1 UQ - Vergleich RMSE	83
10.5.2 UQ - Vergleich Erwartungswert	85
10.5.3 UQ - Vergleich Varianz	87
10.5.4 Zusammenfassung Vergleich Stochastic Collocation und Monte-Carlo	89
10.6 Verhalten für verschiedene Kovarianzkerne	90
10.6.1 Korrelationslänge	91
10.6.2 Glättungsparameter	91
10.6.3 Varianzparameter	92
10.7 Konvergenzanalyse	93
10.7.1 Standard Kovarianzkern	93
10.7.2 Verschiedene Kovarianzkerne	94
10.7.3 Zusammenfassung Konvergenzanalyse	97
11 Zusammenfassung und Ausblick	98
12 Anhang	100
Abbildungsverzeichnis	100
Tabellenverzeichnis	103
Literaturverzeichnis	105

1 Einleitung

Moderne mathematische Modelle in den Ingenieur- und Naturwissenschaften berücksichtigen zunehmend Unsicherheiten in Messdaten, um realistischere und robustere Vorhersagen zu ermöglichen. Das Teilgebiet Uncertainty Quantification (UQ) der Mathematik beschäftigt sich mit der Quantifizierung von genau diesen Unsicherheiten und verbessert so die Zuverlässigkeit und Genauigkeit von Modellen, die auf unsicheren oder variablen Eingabedaten basieren. Unter Hinzunahme dieser stochastischen Modellierung und dem damit verbundenen stochastischen Wahrscheinlichkeitsraum ist es hierbei häufig notwendig, hochdimensionale Integrale numerisch zu approximieren. Diese treten insbesondere bei Berechnungen von Erwartungswerten und Varianzen von Kenngrößen auf. Traditionelle Quadraturmethoden stoßen bei hoher Dimension häufig auf den sogenannten 'Fluch der Dimensionen', einem exponentiellen Anstieg des Rechenaufwands mit der Dimension.

Eine Methode, um diese Herausforderung zu umgehen, ist die Dünngitterquadratur. Sie ermöglicht, hochdimensionale Integrale effizient zu berechnen. Die Methode reduziert den benötigten Rechenaufwand erheblich im Vergleich zu herkömmlichen, dichten beziehungsweise vollen Gittermethoden. Die Dünngitterquadratur wurde erstmals 1991 von Zenger in [1] vorgestellt und seither vielfach in Werken wie 'Sparse Grids in a Nutshell' von Jochen Garcke [2] und 'Sparse Grids' in Acta Numerica von Michael Griebel [3] vorangetrieben.

In dieser Bachelorarbeit wird die Anwendung der Dünngitterquadratur im Kontext der Uncertainty Quantification bei elliptischen Differentialgleichungen untersucht. Konkret werden wir ein mathematisches Modellproblem der Regenwasserversickerung herleiten, es mithilfe von Finiten Elementen lösen und die Dünngitterquadratur zur Quantifizierung des Modellproblems unter Unsicherheit verwenden. Diese Unsicherheit spiegelt sich in einer stochastisch beeinflussten Kenngröße der Lösung des elliptischen Modellproblems wider. Sie zu quantifizieren, also das Verhalten in Abhängigkeit von der Stochastik zu bestimmen, ist das Ziel dieser Arbeit.

Die vorliegende Arbeit beginnt zunächst mit einer theoretischen Einführung und den notwendigen mathematischen Grundlagen in Abschnitt 2. Ferner wird dort ein kurzer Überblick über mehrdimensionale numerische Quadratur sowie den Fluch der Dimensionen gegeben. Abschnitt 3 legt dann die Grundlage für hierarchische Basen sowie die sich daraus ableitende hierarchische Interpolation von Funktionen. Die dort gewonnenen Interpolanten werden in Abschnitt 4 zur Konstruktion von dünnen Gittern verwendet. Die Integration dieser Interpolanten führt zur Dünngitterquadratur in Abschnitt 4.3. Um diese Quadraturformel anwenden zu können, wird in Abschnitt 5 das Modellproblem der Regenwasserversickerung physikalisch und mathematisch hergeleitet. Abschnitt 6 wandelt das gewonnene Modellproblem in die sogenannte schwache Formulierung um, und Abschnitt 7 beschäftigt sich anschließend mit der numerischen Lösung durch die Ritz-Galerkin-Methoden sowie mit der Finite-Elemente-Approximation im deterministischen Fall. Der theoretische Hintergrund der Stochastic Collocation, die zur Uncertainty

Quantification verwendet wird, ist in Abschnitt 8 dargestellt. Dort wird das stochastische Modellproblem hergeleitet und die sogenannten Quantities of Interest, also die stochastischen Kenngrößen, an denen wir schlussendlich interessiert sind, benannt. Abschnitt 9 stellt die theoretischen Grundlagen der stochastischen Modellierung beziehungsweise der konkreten numerischen Umsetzung der Unsicherheitskomponente dar.

Der praktische Teil der Arbeit, zu finden in Abschnitt 10, wird dabei in der von Professor Wieners am Institut für Angewandte und Numerische Mathematik am Karlsruher Institut für Technologie entwickelten parallelisierten Finite-Elemente Software M++ [4] umgesetzt: *M++ (Meshes, Multigrid and more) ist ein paralleles Finite-Elemente-Programm zur Lösung partieller Differentialgleichungen, das am Institut für Angewandte und Numerische Mathematik in der Arbeitsgruppe Wissenschaftliches Rechnen entwickelt wird. Die zugrunde gelegte Programmiersprache ist C++. Für die parallele Verarbeitung wird MPI verwendet.* (aus [4])

Die numerischen Ergebnisse und die dort verwendeten Programme finden sich im GitLab-Repository [5] inklusive M++ Software zur Reproduktion der Ergebnisse.

2 Mathematische Grundlagen

Es folgen zunächst einige grundlegende Definitionen und Notationen, welche im weiteren Verlauf der Arbeit als bekannt vorausgesetzt werden.

2.1 Notation

Definition 2.1 (Zahlenmengen): *Seien \mathbb{N} die Menge der natürlichen Zahlen und \mathbb{R} der Körper der reellen Zahlen. Setze dann*

$$\begin{aligned}\overline{\mathbb{R}} &= \mathbb{R} \cup \{\infty\} \\ \mathbb{N}_0 &= \mathbb{N} \cup \{0\}.\end{aligned}$$

Definition 2.2 (Multiindex): *Seien $d \in \mathbb{N}$ die Dimension, $J = (j_1, \dots, j_d), K = (k_1, \dots, k_d) \in \mathbb{N}_0^d$ Multiindizes. Es gelten im Folgenden die Konventionen*

$$\begin{aligned}J \leq K &\Leftrightarrow j_i \leq k_i \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, d\}, \\ 0 \leq K &\Leftrightarrow 0 \leq k_i \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, d\}\end{aligned}$$

und ferner für $L = (l_1, \dots, l_d) \in \mathbb{N}_0^d$

$$2^L = (2^{l_1}, \dots, 2^{l_d}).$$

Ferner sei noch

$$|L| = |L|_1 = \sum_{j=1}^d |l_j|.$$

Definition 2.3 (Kronecker-Delta): *Wir setzen*

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{falls } i = j \\ 0 & \text{falls } i \neq j. \end{cases}$$

2.2 Analysis

Hier folgt eine Auflistung wichtiger Resultate aus der Analysis, die als bekannt vorausgesetzt werden. Für Beweise wird auf die Standardwerke *Analysis I, II, III* [6, 7, 8] von Herbert Amann und Joachim Escher verwiesen. Ergänzend sei das Werk *Funktionalanalysis* [9] von Dirk Werner erwähnt.

Satz 2.4 (Satz von Fubini, Riemann-Integral): *Sei $f: [a, b] \times [c, d] \rightarrow \mathbb{R}$ stetig. Dann ist $F: [c, d] \rightarrow \mathbb{R}$ mit $F(y) = \int_a^b f(x, y) dx$ stetig und es gilt*

$$\begin{aligned}\int_c^d F(y) dy &= \int_c^d \int_a^b f(x, y) dx dy \\ &= \int_a^b \int_c^d f(x, y) dy dx \\ &= \int_{[a,b] \times [c,d]} f(x, y) d(x, y).\end{aligned}$$

Definition 2.5 (Gradient): Sei $D \subseteq \mathbb{R}^d$ offen und $f: D \rightarrow \mathbb{R}$ differenzierbar in $x \in D$. Der Gradient ist definiert durch

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \partial_1 f(x) \\ \vdots \\ \partial_d f(x) \end{pmatrix}.$$

Definition 2.6 (Divergenz-Operator): Für $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ ist die Divergenz von f definiert durch

$$\operatorname{div}: (\mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}) \quad f \mapsto \operatorname{div} f = \nabla \cdot f = \sum_{i=1}^d \frac{\partial f_i}{\partial x_i}.$$

Definition 2.7 (Laplace-Operator): Sei $D \subseteq \mathbb{R}^d$ offen und $f \in C^2(D, \mathbb{R})$. Der Laplace-Operator ist die Spur der Hessematrix und definiert durch

$$\Delta f(x) = \sum_{j=1}^d \partial_j^2 f(x).$$

Definition 2.8 (Maßraum): Sei X eine Menge und \mathcal{A} eine σ -Algebra auf X (siehe Definition 2.21). Dann heißt das Tupel (X, \mathcal{A}) ein Messraum, und die Mengen aus \mathcal{A} heißen messbare Mengen. Ist $\mu: \mathcal{A} \rightarrow [0, \infty]$ ein Maß, das heißt es gelten folgenden Eigenschaften:

$$(M1) \quad \mu(\emptyset) = 0$$

$$(M2) \quad \mu\left(\bigcup_{j=1}^{\infty} A_j\right) = \sum_{j=1}^{\infty} \mu(A_j) \text{ für jede Folge paarweise disjunkter Mengen } A_j \in \mathcal{A}, \\ j \in \mathbb{N} \text{ (}\sigma\text{-Additivität),}$$

so nennt man (X, \mathcal{A}, μ) einen Maßraum.

Definition 2.9 (Messbarkeit): Es seien (X, \mathcal{A}) und (Y, \mathcal{B}) Messräume und $f: X \rightarrow Y$ eine Funktion. Dann heißt f ($\mathcal{A} - \mathcal{B}$ -)messbar, falls

$$f^{-1}(B) \in \mathcal{A} \quad \forall B \in \mathcal{B}$$

gilt.

Definition 2.10 (Wesentlich beschränkt): Es seien $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ ein Maßraum und X ein Banachraum. Wir nennen eine Funktion $f: \Omega \rightarrow X$ wesentlich beschränkt, falls ein $M \in \mathbb{R}$ existiert so, dass

$$\mu(\{x \in \Omega \mid \|f(x)\|_X > M\}) = 0$$

gilt. M heißt dann wesentliche Schranke.

Definition 2.11 (L^p -Räume): Sei (X, \mathcal{A}, μ) ein Maßraum. Für $p \in [1, \infty]$ ist

$$L^p(X, \mathcal{A}, \mu) = \{f: X \rightarrow \mathbb{R} \mid f \text{ messbar}, \|f\|_p < \infty\},$$

wobei wir häufig kurz die Bezeichnungen $L^p(\mu)$ oder $L^p(X)$ verwenden, und

$$\|f\|_p = \left(\int_X |f|^p d\mu \right)^{1/p}, \quad p \in [1, \infty),$$

$$\|f\|_\infty = \text{ess sup}_{x \in X} |f(x)| \quad (\text{essentiell Supremum im } L^p\text{-Raum}).$$

mit $\text{ess sup}_{x \in X} |f(x)| = \inf\{M \geq 0 \mid M \text{ ist wesentliche Schranke}\}$. Es sei $p \in [1, \infty]$, und sei $N \subseteq L^p(X)$ definiert durch

$$N = \{f: X \rightarrow \mathbb{R} \text{ messbar} \mid f = 0 \text{ } \mu\text{-fast überall}\}.$$

Dann heißt der Quotientenraum

$$L^p(X, \mathcal{A}, \mu) = L^p(\mu) = L^p(X) = L^p(\mu)/N = \left\{ \hat{f} = f + N \mid f \in L^p(\mu) \right\}$$

L^p -Raum über X . Für $\hat{f} \in L^p(\mu)$ setzen wir

$$\|\hat{f}\|_p = \|f\|_p, \quad f \in \hat{f}.$$

Wir benötigen noch eine Verallgemeinerung von L^p -Räumen, deren Funktionen nicht Reellwertig sondern Werte in Banachräumen, also vollständigen und normierten Vektorräumen, annehmen.

Definition 2.12 (Bochner Räume): Es sei $(\Xi, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ ein Maßraum und $(X, \|\cdot\|_X)$ ein Banachraum. Für $1 \leq p < \infty$ definieren wir

$$L^p(\Xi; X) = \left\{ f: \Xi \rightarrow X \mid f \text{ ist messbar}, \|f\|_{L^p(\Xi; X)} = \left(\int_{\Xi} \|f(\xi)\|_X^p d\mathbb{P}(\xi) \right)^{\frac{1}{p}} < \infty \right\}$$

und für $p = \infty$ setzen wir

$$L^\infty(\Xi; X) = \left\{ f: \Xi \rightarrow X \mid f \text{ ist messbar}, \|f\|_{L^\infty(\Xi; X)} = \text{ess sup}_{\xi \in \Xi} \|f(\xi)\|_X < \infty \right\}$$

Definition 2.13 (Funktionenräume für Testfunktionen): Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ und es bezeichne $\text{supp}(\phi)$ den Träger der Funktion ϕ . Definiere dann

$$C^\infty(\Omega) = C^\infty(\Omega; K)$$

$$C_c^\infty(\Omega) = \{\phi \in C^\infty(\Omega) \mid \text{supp}(\phi) \subset \Omega \text{ kompakt}\}$$

$$L^1_{loc}(\Omega) = \{f: \Omega \rightarrow \mathbb{K} \text{ messbar} \mid f \chi_K \in L^1(\Omega) \text{ für alle } K \subset \Omega \text{ kompakt}\}$$

wobei χ_K die Indikatorfunktion auf der Menge K bezeichnet.

Definition 2.14 (Schwache Ableitung): Es sei $f \in L^1_{loc}(\Omega)$ und $j \in \{1, \dots, d\}$. Existiert ein $g \in L^1_{loc}(\Omega)$ mit

$$\int_{\Omega} f \cdot \partial_j \phi \, dx = - \int_{\Omega} g \cdot \phi \, dx \quad \text{für alle } \phi \in C_c^{\infty}(\Omega),$$

so heißt f schwach nach x_j differenzierbar, und $\partial_j f = g$ heißt j -te schwache Ableitung von f .

Für $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{N}_0^d$ definiert man analog die α -te schwache Ableitung von f durch

$$\partial^{\alpha} f = g \in L^1_{loc}(\Omega) \quad \text{mit} \quad \int_{\Omega} f \cdot \partial^{\alpha} \phi \, dx = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} g \cdot \phi \, dx \quad \text{für alle } \phi \in C_c^{\infty}(\Omega).$$

Satz 2.15 (Fundamentallemma): Es sei $g \in L^1_{loc}(\Omega)$. Ist

$$\int_{\Omega} g \cdot \phi \, dx = 0 \quad \text{für alle } \phi \in C_c^{\infty}(\Omega),$$

so ist $g = 0$ fast überall.

Definition 2.16 (Sobolevräume): Sei $p \in [1, \infty]$. Der Sobolevraum erster Ordnung $W^{1,p}(\Omega)$ ist definiert durch

$$W^{1,p}(\Omega) = \{f \in L^p(\Omega) \mid \partial_j f \text{ existiert und } \partial_j f \in L^p(\Omega) \quad \forall j \in \{1, \dots, d\}\}.$$

Dabei bezeichnet $\partial_j f$ die schwache Ableitung von f . Für $k \in \mathbb{N}$ definiert man allgemein den Sobolevraum k -ter Ordnung durch

$$W^{k,p}(\Omega) = \{f \in L^p(\Omega) \mid \partial^{\alpha} f \text{ existiert, } \partial^{\alpha} f \in L^p(\Omega) \quad \forall \alpha \in \mathbb{N}_0^d, |\alpha| \leq k\}.$$

Auf $W^{1,p}(\Omega)$ definiert man ferner

$$\|f\|_{W^{1,p}} = \|f\|_{1,p} = \begin{cases} \left(\|f\|_{L^p}^p + \left(\sum_{j=1}^d \|\partial_j f\|_{L^p}^p \right)^{p/2} \right)^{1/p}, & p \in [1, \infty), \\ \max\{\|f\|_{\infty}, \|\partial_1 f\|_{\infty}, \dots, \|\partial_d f\|_{\infty}\}, & p = \infty, \end{cases}$$

und auf $W^{k,p}(\Omega)$ für $k \in \mathbb{N}$

$$\|f\|_{W^{k,p}} = \|f\|_{k,p} = \begin{cases} \left(\sum_{|\alpha| \leq k} \|\partial^{\alpha} f\|_{L^p}^p \right)^{1/p}, & p \in [1, \infty), \\ \max_{|\alpha| \leq k} \|\partial^{\alpha} f\|_{\infty}, & p = \infty. \end{cases}$$

Ferner setzen wir $H^k(\Omega) = W^{k,2}(\Omega)$. Dann ist $H^k(\Omega)$ ein Banachraum mit dem Skalarprodukt

$$(f, g)_{H^k(\Omega)} = \sum_{|\alpha| \leq k} (\partial^{\alpha} f, \partial^{\alpha} g)_{L^2(\Omega)}$$

wobei $(\cdot, \cdot)_{L^2(\Omega)}$ das $L^2(\Omega)$ Skalarprodukt ist. Sei außerdem

$$H_0^k(\Omega) = \{\phi \in H^k(\Omega) \mid \phi|_{\partial\Omega} = 0\}.$$

Definition 2.17 (Beschränktheit, Operatornorm und Stetigkeit von Operatoren): *Es seien X, Y normierte Vektorräume. Eine lineare Abbildung $T: X \rightarrow Y$ heißt beschränkt, falls eine Konstante $C \geq 0$ existiert mit*

$$\|Tx\| \leq C\|x\|, \quad \forall x \in X.$$

Wir definieren ferner die Operatornorm durch

$$\|T\| = \sup_{x \in X, x \neq 0} \frac{\|Tx\|}{\|x\|}.$$

Ein Operator ist genau dann stetig, wenn er beschränkt ist.

Wir bezeichnen die Menge der stetigen Operatoren $T: X \rightarrow Y$ durch

$$L(X, Y) = \{T: X \rightarrow Y \mid T \text{ linear und beschränkt}\}.$$

Ist $X = Y$ so schreiben wir auch kurz $L(X) = L(X, X)$.

Definition 2.18 (Dualraum): *Es sei X ein normierter Raum über einem Körper \mathbb{K} . Dann heißt $X' = L(X, \mathbb{K})$ der Dualraum von X . Elemente aus dem Dualraum sind lineare Funktionale auf X .*

Definition 2.19 (Isometrische Operatoren): *Ein Operator $T: X \rightarrow Y$ heißt isometrisch, falls*

$$\|Tx\| = \|x\| \quad \forall x \in X.$$

Definition 2.20 (Annihilator): *Es sei X ein normierter Raum, und $U \subseteq X, V \subseteq X'$ Teilmengen. Definiere*

$$U^\perp = \{x' \in X' \mid x'(x) = 0 \ \forall x \in U\},$$

$$V_\perp = \{x \in X \mid x'(x) = 0 \ \forall x' \in V\}.$$

U^\perp heißt der Annihilator von U in X' , und V_\perp heißt der Annihilator von V in X .

2.3 Wahrscheinlichkeitstheorie

Ziel der Arbeit ist es, eine numerische Problemstellung unter stochastischen Unsicherheiten zu modellieren, wofür einige Grundlagen aus der Stochastik sowie der weiterführenden Wahrscheinlichkeitstheorie benötigt werden. Grundlage hierfür ist die Veranstaltung *Einführung in die Stochastik* [10], gehalten im Sommersemester 2022 von Prof. Dr. Nicole Bäuerle, sowie die Vorlesung *Wahrscheinlichkeitstheorie* [11], gehalten im Wintersemester 2022/2023 von Prof. Dr. Mathias Trabs mit der Grundlagenliteratur [12].

Die maßtheoretische Grundlage sind sogenannte σ -Algebren als Mengensysteme.

Definition 2.21 (Sigma-Algebra): *Sei X eine nichtleere Menge, $\mathcal{P}(X)$ die Potenzmenge von X und $\mathcal{A} \subseteq \mathcal{P}(X)$. \mathcal{A} heißt σ -Algebra in X , falls gilt:*

- (A1) $X \in \mathcal{A}$,
- (A2) $A \in \mathcal{A} \Rightarrow A^c = X \setminus A \in \mathcal{A}$,
- (A3) $\forall n \in \mathbb{N} : A_n \in \mathcal{A} \Rightarrow (\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n) \in \mathcal{A}$.

Ferner benötigen wir die Definition eines Wahrscheinlichkeitsraumes sowie Wahrscheinlichkeitsmaßes.

Definition 2.22 (Wahrscheinlichkeitsraum): Ein Wahrscheinlichkeitsraum ist ein Tripel $(\Xi, \mathcal{A}, \mathbb{P})$. Dabei sind $\Xi \neq \emptyset$ und $\mathcal{A} \subset \mathcal{P}(\Xi)$ eine σ -Algebra über Ξ . Weiter ist $\mathbb{P}: \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion mit folgenden Eigenschaften:

- a) $\mathbb{P}(A) \geq 0, A \in \mathcal{A}$ (Nichtnegativität),
- b) $\mathbb{P}(\Xi) = 1$ (Normierung),
- c) $\mathbb{P}\left(\bigcup_{j=1}^{\infty} A_j\right) = \sum_{j=1}^{\infty} \mathbb{P}(A_j), A_1, A_2, \dots \in \mathcal{A}$ paarweise disjunkt (σ -Additivität).

\mathbb{P} heißt Wahrscheinlichkeitsmaß auf \mathcal{A} . Jedes $A \in \mathcal{A}$ heißt Ereignis.

Wir benötigen ferner die Definition eines Zufallsfeldes und verwenden dafür die folgende Definition direkt aus [13].

Definition 2.23 (Zufallsfelder): Sei $\Xi \neq \emptyset$.

- (a) Sei $D \subset \mathbb{R}^d$ eine nichtleere Menge und $d \geq 1$. Wir nennen $X: \Xi \times D \rightarrow \mathbb{R}$ ein Zufallsfeld, wenn für jedes feste $x \in D$ die Funktion $X(x) = X(\cdot, x)$ eine Zufallsvariable ist. Ist speziell $d = 1$, so wird die Parametermenge auch oft mit T bezeichnet und man spricht von einem stochastischen Prozess. In der Literatur findet man Zufallsfelder vor allem unter der englischen Bezeichnung random fields. Außerdem definieren wir die Erwartung eines Zufallsfeldes durch $\mu(x) = \mathbb{E}[X(x)] = \int_{\Xi} X(w, x) d\mathbb{P}(\xi)$ für $x \in D$ und die zu einem Zufallsfeld gehörige Kovarianzfunktion $C: D \times D \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$C(x, y) = \text{Cov}[X(x), X(y)] = \mathbb{E}[(X(x) - \mathbb{E}[X(x)])(X(y) - \mathbb{E}[X(y)])].$$

- (b) Ein Zufallsfeld X heißt weiter Gauß'sches Zufallsfeld, falls für jede Wahl $n \in \mathbb{N}$ und $x = (x_1, \dots, x_n) \in D$ der Zufallsvektor $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)^{\top} = (X(x_1), \dots, X(x_n))$ eine (nicht ausgearzte) multivariate Normalverteilung mit Parametern $\mu(x)$ und $C(x, y)$ besitzt.
- (c) Ein Zufallsfeld $Y: \Xi \times D \rightarrow \mathbb{R}$ heißt hingegen log-normal verteilt oder kurz lognormal-Feld, falls das durch $X: \Xi \times D \rightarrow \mathbb{R}$, $(\xi, x) \mapsto \log(Y(\xi, x))$ definierte Feld ein Gauß'sches Zufallsfeld ist. Umgekehrt lässt sich also jedes lognormal-Feld durch ein Gauß'sches Zufallsfeld X erzeugen. So ist dann $\tilde{Y}: \Xi \times D \rightarrow \mathbb{R}$, $(\xi, x) \mapsto \exp(X(\xi, x))$ auch ein lognormal-Feld.

2.4 Quadraturformeln in höheren Dimensionen

Der folgende Abschnitt dient der allgemeinen Betrachtung von mehrdimensionalen numerischen Integralen und soll das grundlegende Problem hochdimensionaler Anwendungen (Stichwort: Fluch der Dimensionen) aufzeigen.

Zur Lösung hochdimensionaler numerischer Probleme wie stochastischen partiellen Differentialgleichungen werden häufig effiziente Quadraturalgorithmen zur Approximation von Integralwerten benötigt. Die bekannten Quadraturregeln für integrierbare Funktionen $f: [a, b] \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zur Approximation von

$$\int_a^b f(x) dx$$

diskretisieren das Intervall $[a, b]$ in Stützstellen und bestimmen dann mithilfe einer gewichteten Summe der Funktionswerte an diesen Stützstellen eine Approximation des Integrals. Dieses Vorgehen legt nahe, mehrdimensionale Funktionen über d -dimensionale Gebiete durch die Anwendung von Quadraturregeln in jeder einzelnen Dimension numerisch zu integrieren. Sei $f \in L^1(\Omega)$, wobei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ eine offene Menge ist. Sei ferner

$$[a_1, b_1] \times \dots \times [a_d, b_d] \subseteq \Omega \subseteq \mathbb{R}^d$$

ein Rechteck-Gebiet, über welches die Funktion f integriert werden soll. Der Satz von Fubini liefert

$$\int_{[a_1, b_1] \times \dots \times [a_d, b_d]} f(x_1, \dots, x_d) d(x_1, \dots, x_d) = \int_{a_1}^{b_1} \dots \int_{a_d}^{b_d} f(x_1, \dots, x_d) dx_d \dots dx_1.$$

Für $k \in \{1, \dots, d\}$ definieren wir ferner eine eindimensionale Quadraturformel durch

$$I_{\Delta}^{(k)}: C([a_k, b_k]) \rightarrow \mathbb{R}, I_{\Delta}^{(k)}(g) = \sum_{i=0}^n w_i^{(k)} g(x_i^{(k)}).$$

mit zugehörigen Gewichten $w_i^{(k)} \in \mathbb{R}$ und Stützstellen $x_i^{(k)} \in [a_k, b_k]$, $i = 1, \dots, n$. Die komponentenweise Anwendung dieser Quadraturformel auf das Integral ergibt

$$\int_{a_1}^{b_1} \dots \int_{a_d}^{b_d} f(x_1, \dots, x_d) dx_d \dots dx_1 \approx \sum_{i_1=0}^n \dots \sum_{i_d=0}^n (w_{i_1}^{(1)} \dots w_{i_d}^{(d)}) f(x_{i_1}^{(1)}, \dots, x_{i_d}^{(d)}).$$

Hieraus definiert sich eine Quadraturformel gemäß

$$(I_{\Delta}^{(1)} \otimes \dots \otimes I_{\Delta}^{(d)}): C([a_1, b_1] \times \dots \times [a_d, b_d]) \rightarrow \mathbb{R},$$

$$(I_{\Delta}^{(1)} \otimes \dots \otimes I_{\Delta}^{(d)})(f) = \sum_{i_1=0}^n \dots \sum_{i_d=0}^n (w_{i_1}^{(1)} \dots w_{i_d}^{(d)}) f(x_{i_1}^{(1)}, \dots, x_{i_d}^{(d)}).$$

Beispielhaft kann dieser Ansatz am d-dimensionalen Einheitswürfels $[0, 1]^d \subseteq \mathbb{R}^d$ und der Trapezsumme betrachtet werden. Für $k \in \{1, \dots, d\}$ seien $n + 1$ äquidistante Stützstellen auf dem Intervall $[0, 1]$ gegeben durch

$$\Delta^k = \{x_j^{(k)} \mid x_j^{(k)} = j \cdot h^{(k)}, h^{(k)} = \frac{1}{n^{(k)}}, i \in \{1, \dots, n^{(k)}\}\}.$$

Dabei ist der Exponent (k) als Index zu betrachten und nicht als x^k im klassischen Sinne. Für jedes $k \in \{1, \dots, d\}$ sei ferner die Trapezsumme zu den jeweiligen Stützstellen und Gewichten für Funktionen $g: [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben durch

$$T_{n^{(k)}}^{(k)}[g] = \sum_{i=1}^{n^{(k)}} \frac{x_i^{(k)} - x_{i-1}^{(k)}}{2} \left(f(x_i^{(k)}) + f(x_{i-1}^{(k)}) \right).$$

Betrachtet man den Fall $n^k = 2^j$ für ein $j \in \mathbb{N}$ und $d = 2$, so ergibt sich nach [14] die Tensorprodukt-Trapezsumme gemäß der Vorschrift

$$(T_n \otimes T_n)[f] = 2^{-2j} \sum_{k_x=0}^{2^j} \sum_{k_y=0}^{2^j} w_{k_x, k_y} f(2^{-j} k_x, 2^{-j} k_y),$$

wobei die Quadraturgewichte gegeben sind durch

$$w_{k_x, k_y} = \begin{cases} \frac{1}{4}, & \text{falls } k_x, k_y \in \{0, 2j\}, \\ \frac{1}{2}, & \text{falls entweder } k_x \in \{0, 2j\} \text{ oder } k_y \in \{0, 2j\}, \\ 1, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Ebenfalls aus [14] stammen die beiden nachfolgenden Resultate, welche eine Abschätzung für den Quadraturfehler liefern. Hierbei ist

$$\|f\|_{C([0,1]^2)} = \max_{(x,y) \in [0,1]^2} \{|f(x, y)|\} \quad f \in C([0, 1]^2, \mathbb{R}).$$

Satz 2.24: Ist $f \in C^2([0, 1]^2)$ so genügt die Tensorprodukt-Trapezsumme $T_n \otimes T_n$ der Fehlerabschätzung

$$|(I \otimes I)[f] - (T_n \otimes T_n)[f]| \leq \frac{4^{-j}}{6} \max \left\{ \left\| \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right\|_{C([0,1]^2)}, \left\| \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right\|_{C([0,1]^2)} \right\}.$$

Für einen Beweis der Aussage sei auf [14] verwiesen. Mittels vollständiger Induktion über $d \in \mathbb{N}$ lässt sich diese Fehlerabschätzung für den Fall $d \geq 2$ verallgemeinern:

Satz 2.25: Sei $d \in \mathbb{N}$. Ist $f \in C^2([0, 1]^d)$, so genügt die Tensorprodukt-Trapezsumme $T_n \otimes T_n \otimes \dots \otimes T_n$ der Fehlerabschätzung

$$|(I \otimes I \otimes \dots \otimes I)[f] - (T_n \otimes T_n \otimes \dots \otimes T_n)[f]| \leq \frac{4^{-j}}{12} \sum_{i=1}^d \left\| \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} \right\|_{C([0,1]^d)}.$$

Die Tensorprodukt-Trapezsumme hat den Nachteil, dass für die numerische Integration Funktionsauswertungen auf einem vollen Gitter benötigt werden. Im Fall $d = 2$ sind nach [14] $(n + 1)^2$, wobei $n = 2^j$, Funktionsauswertungen notwendig, bei einem Fehler von $\mathcal{O}(h^2)$. Mit wachsendem Level j steigert sich folglich der numerische Aufwand erheblich. Im allgemeinen d -dimensionalen Fall bleibt die Fehlerordnung identisch, der Aufwand wächst allerdings mit $\mathcal{O}(n^d)$.

Diese exponentielle Zunahme des Rechenaufwands mit der Dimension, bekannt als Fluch der Dimensionen, macht die hergeleiteten Tensorprodukt-Quadraturregeln für die Anwendung in hohen Dimensionen unpraktikabel. Die vorliegende Arbeit stellt die sogenannte Dünngitterquadratur vor. Eine Methode, welche den Aufwand der Quadratur im mehrdimensionalen Fall durch Veränderung der Raumdiskretisierung erheblich verkleinern kann und so eine Alternative zu Tensorprodukten darstellt.

3 Hierarchische Basen und Interpolation

Im folgenden Abschnitt werden die sogenannten hierarchischen Basen eingeführt, welche im weiteren Verlauf zur Interpolation von Funktionen und zur anschließenden Dünngitterquadratur führen werden. Hierarchische Basen sind dabei Basen, welche mit wachsender Dimension des betrachteten Vektorraumes durch die Hinzunahme von weiteren Basiselementen erweitert werden, ohne die vorherigen Elemente zu verändern. Graphisch kann man diese Basen oft als Baum oder pyramidenförmig anordnen. Wir betrachten in diesem Abschnitt Teilräume des Raums der d-linearen Funktionen. Dies sind Funktionen $\varphi: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, welche für $x = (x_1, \dots, x_d)^T \in \mathbb{R}^d$ in jeder Komponente x_j linear sind. Beliebige Funktionen werden dann bezüglich der Teilräume der d-linearen Funktionen auf vollen Gittern interpoliert.

3.1 Hierarchische Basen auf dem Einheitsintervall

Die in diesem Abschnitt vorgestellten Ergebnisse sind in vielen Standardwerken über hierarchische Basen zu finden. Für den eindimensionalen Fall sei insbesondere auf [14] verwiesen, während mehrdimensionale hierarchische Basen in Funktionenräumen unter anderem in [15, 16, 17] sowie den Standardwerken [2] und [3].

Begonnen wird mit dem Einheitsintervall $[0, 1] \subseteq \mathbb{R}$. Dieses wird mit einem vorgegebenen Level $l \in \mathbb{N}_0$ durch eine Schrittweite $h_l = 2^{-l}$ in ein Gitter mit $2^l + 1$ Gitterpunkten gemäß

$$G_l = \{x_{l,i} = i \cdot 2^{-l} \mid i = 0, 1, \dots, 2^l\}$$

diskretisiert. Betrachte ferner den linearen B-Spline (auch Hutfunktion genannt), definiert durch

$$\varphi(x) = \begin{cases} 1 - |x|, & -1 \leq x \leq 1, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Definiere schließlich zu jedem Knotenpunkt $x_{l,i}$ aus dem Gitter G_l noch die gestauchte Funktion

$$\varphi_{l,i}(x) = \varphi\left(\frac{x - x_{l,i}}{h_l}\right).$$

Mithilfe dieser Funktion können wir den Raum der stückweise linearen Funktionen bezüglich des Gitters G_l betrachten. Dieser ist wie folgt definiert:

$$V_l = \{f \in C([0, 1]) \mid f|_{[2^{-l}k, 2^{-l}(k+1)]} \in \mathbb{P}_1 \text{ für alle } k \in \{0, 1, \dots, 2^l - 1\}\}.$$

Es lässt sich zeigen, dass die Menge

$$M_l = \{\varphi_{l,k} \mid k \in \{0, 1, \dots, 2^l\}\}$$

die sogenannte nodale Basis (auch Knotenbasis) in V_l bildet. Die folgende Abbildung 1 zeigt diese nodale Basis für das Level $l = 3$.

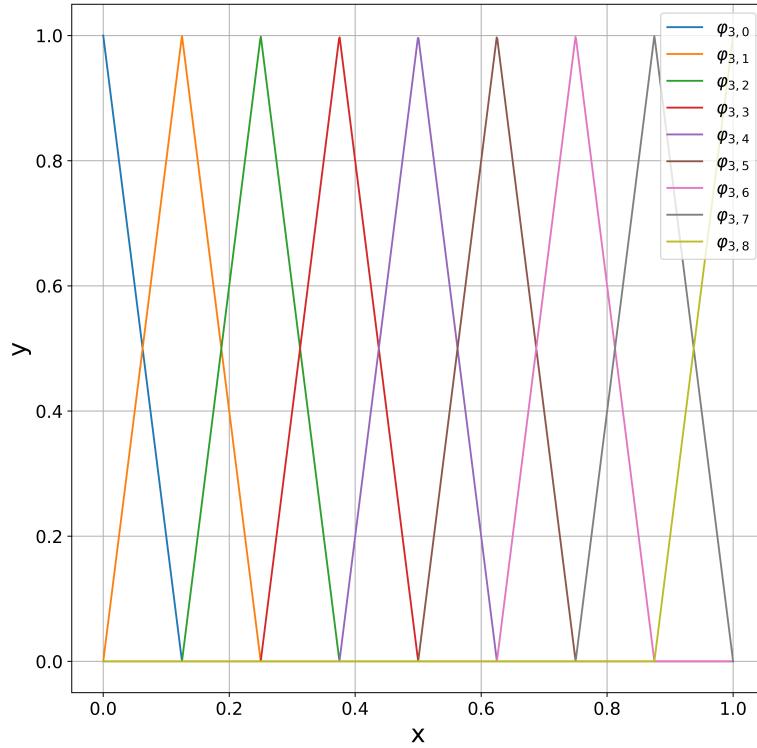


Abbildung 1: Plot der nodalen Basisfunktionen $\varphi_{l,k}$ für $l = 3$ und $k = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$ aus der Hutfunktion im Raum V_3 .

Ausgehend von der nodalen Basis wird nun eine hierarchisch angeordnete Basis, die sogenannte hierarchische Basis konstruiert. Dafür betrachten wir für $l \in \mathbb{N}_0$ die Indexmenge

$$J_l = \begin{cases} \{0, 1\}, & \text{falls } l = 0 \\ \{j \in \mathbb{N} \mid j \text{ ungerade}, 1 \leq j \leq 2^l - 1\}, & \text{falls } l \geq 1. \end{cases} \quad (3.1)$$

Um die hierarchische Struktur zu erreichen, wird eine Zerlegung von V_l gesucht, welche

$$V_l = V_{l-1} \oplus W_l$$

erfüllt für zu definierende hierarchische Inkremente W_l . Die Konstruktion dieser Struktur liefert schließlich die Definition

$$W_k = \text{span}\{\varphi_{k,j} \mid j \in J_k\}$$

Mit den so definierten Teilmengen erhält man dann die gewünschte Zerlegung und es ergibt sich

$$V_l = \bigoplus_{k \leq l} W_k.$$

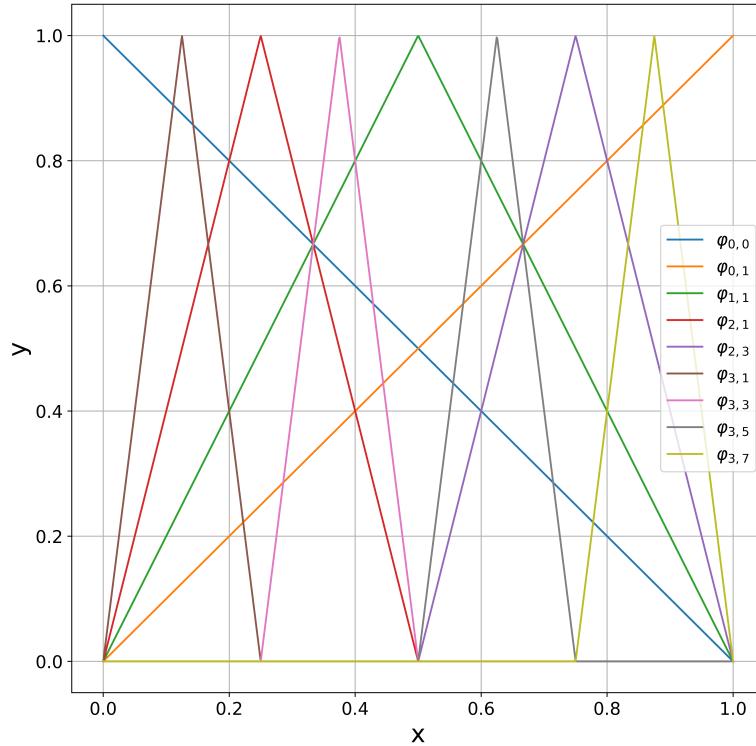


Abbildung 2: Hierarchische Basisfunktionen $\varphi_{j,k}$ im Raum V_3 der stückweise linearen Funktionen bezüglich des Gitters G_l .

Diese Herangehensweise liefert nun die hierarchische Basis im Raum V_l gemäß

$$B_l = \{\varphi_{k,i} \mid i \in J_k, 0 \leq k \leq l\},$$

wobei J_k für $k \in \mathbb{N}_0$ die entsprechende Indexmenge aus (3.1) ist. Wir greifen erneut das Beispiel V_3 auf. Die hierarchische Basis B_3 ist dann gegeben durch

$$B_3 = \{\varphi_{0,0}, \varphi_{0,1}, \varphi_{1,1}, \varphi_{2,1}, \varphi_{2,3}, \varphi_{3,1}, \varphi_{3,3}, \varphi_{3,5}, \varphi_{3,7}\}.$$

Zur Visualisierung zeigt Abbildung 2 diese hierarchische Funktionenbasis des Raumes V_3 .

3.2 Mehrdimensionale hierarchische Basen auf dem Einheitswürfel

Die im vorherigen Abschnitt hergeleitete hierarchische Basis für den Raum der stückweise linearen und eindimensionalen Funktionen wird nun mithilfe eines Tensorproduktes auf beliebige Dimensionen erweitert. Der Aufbau und die Resultate in diesem Abschnitt stammen aus [15].

Sei $L = (l_1, \dots, l_d) \in \mathbb{N}_0^d$ ein Multiindex, welcher die Schrittweite zur Diskretisierung des d -dimensionalen Einheitswürfels $[0, 1]^d$ in jede Dimensionsrichtung angibt. Setze dann

$$G_L = G_{l_1} \times \cdots \times G_{l_d}$$

wobei

$$G_{l_j} = \{x_{l_j, i} = i \cdot 2^{-l_j} \mid i = 0, 1, \dots, 2^{l_j}\}$$

als sogenanntes volles Gitter im Einheitswürfel. Für weitere Multiindizes $I = (i_1, \dots, i_d)$, $K = (k_1, \dots, k_d) \in \mathbb{N}_0^d$ betrachten wir dann die eindimensionale gestauchte Hutfunktion und definiere mittels eines Tensorproduktes

$$\varphi_{K,I} = \varphi_{k_1, i_1} \otimes \cdots \otimes \varphi_{k_d, i_d}.$$

Damit gilt für $x = (x_1, \dots, x_d) \in \mathbb{R}^d$

$$\varphi_{K,I}(x) = \prod_{j=1}^d \varphi_{k_j, i_j}(x_j).$$

Die so gewonnenen Funktionen sind komponentenweise linear. Betrachtet man das Beispiel $d = 2$ sowie $K = (2, 1)$ und $I = (2, 2)$, so ist $\varphi_{K,I}$ gegeben durch

$$\varphi_{(2,1),(2,2)}(x_1, x_2) = \varphi_{(2,1)}(x_1) \varphi_{2,2}(x_2).$$

Zur Visualisierung zeigt Abbildung 3 diese Funktion.

Analog wie im eindimensionalen Fall betrachten wir den Raum

$$V_L = \text{span}\{\varphi_{L,I} \mid 0 \leq I \leq 2^L\}$$

und wollen eine hierarchische Zerlegung erreichen. Betrachte hierfür die Indexmengen

$$J_0 = \{0, 1\} \text{ und } J_n = \{i \in \mathbb{N} \mid 0 < i < 2^n, i \text{ ungerade}\} \text{ für } n \in \mathbb{N}$$

mit entsprechender Verallgemeinerung für Multiindizes $L \in \mathbb{N}_0^d$ gemäß der Vorschrift

$$J_L = J_{L_1} \times \cdots \times J_{L_d}.$$

Definiert man schließlich die hierarchischen Inkremente durch

$$W_L = \text{span}\{\varphi_{L,I} \mid I \in J_L\},$$

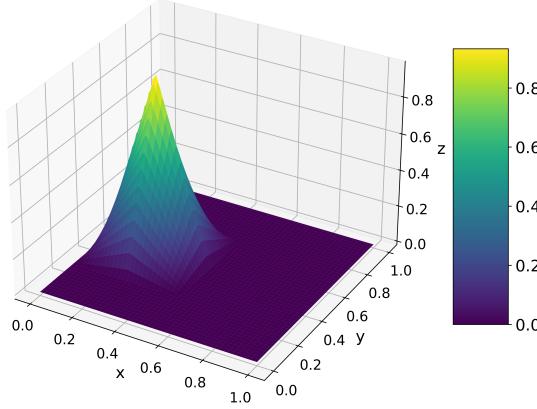


Abbildung 3: Plot der zweidimensionalen Hutfunktion $\varphi_{(2,1),(2,2)}$ als Tensorprodukt der eindimensionalen gestauchten Hutfunktionen $\varphi_{(2,1)}$ und $\varphi_{(2,2)}$.

so ergibt sich die gewünschte hierarchische Zerlegung durch

$$V_L = \bigoplus_{0 \leq K \leq L} W_K.$$

Die aufsteigenden Mengen

$$B_L = \{\varphi_{K,I} \mid I \in J_L, 0 \leq K \leq L\}$$

bilden dann die hierarchische Basis von V_L . Zum Schluss definieren wir noch den Raum der stückweise d-linearen Funktionen gemäß der folgenden Definition.

Definition 3.1: Sei $d \in \mathbb{N}$, $M \in \mathbb{N}_0^d$ ein Multiindex und $0 = (0, \dots, 0) \in \mathbb{N}_0^d$. Der Raum der stückweise d-linearen Funktionen ist dann definiert durch

$$V = \bigoplus_{M \geq 0} W_l.$$

Vervollständigt man diesen Raum bezüglich der H^1 Sobolenorm, so erhält man gemäß [2] wieder den Raum H^1 , also

$$\overline{V}^{H^1} = H^1.$$

3.3 Hierarchische Interpolation auf dem Einheitswürfel

Mithilfe des letzten Ergebnisses aus dem vorherigen Abschnitt können die stückweise d-linearen Funktionen zur Interpolation von Funktionen verwendet werden. Bezuglich der nodalen Basis $\{\varphi_{l,i} \mid 0 \leq i \leq 2^l\}$ im eindimensionalen Fall mit $l \in \mathbb{N}$ hat der Interpolant für Funktionen $u \in C([0, 1])$ die Darstellung

$$I_l(u) = \sum_{i=0}^{2^l} u(x_{l,i}) \cdot \varphi_{l,i}.$$

Bezuglich der eindimensionalen hierarchischen Basis ergibt sich

$$I_l(u) = \sum_{k=0}^l \sum_{i \in J_k} v_{k,i} \cdot \varphi_{k,i},$$

wobei die hierarchischen Überschüsse gegeben sind durch

$$v_{l,i} = \delta_{l,i}(u) = \begin{cases} u(x_{l,i}), & \text{falls } l = 0, \\ u(x_{l,i}) - \frac{1}{2} (u(x_{l,i} - h_l) + u(x_{l,i} + h_l)), & \text{falls } l \geq 1. \end{cases}$$

Hierbei bezeichnet $h_l = 2^{-l}$ die Schrittweite. Diese hierarchischen Überschüsse haben die Eigenschaft, mit wachsendem Level l schnell abzufallen. Mit einer Taylorentwicklung zeigt sich das folgende Resultat.

Satz 3.2: Sei $u \in C^2([0, 1])$. Dann gilt für die hierarchischen Überschüsse

$$|v_{l,i}| \leq 2^{-2l-1} \cdot \|u''\|_\infty.$$

Beweis. Eine Taylorentwicklung liefert

$$\begin{aligned} u(x_{l,i} + h_l) &= u(x_{l,i}) + u'(x_{l,i})h_l + \int_{x_{l,i}}^{x_{l,i} + h_l} (x_{l,i} + h_l - s)u''(s) ds \\ &= u(x_{l,i}) + u'(x_{l,i})h_l + \int_0^{h_l} (h_l - s)u''(x_{l,i} + s) ds. \end{aligned}$$

Analog folgt

$$\begin{aligned} u(x_{l,i} - h_l) &= u(x_{l,i}) - u'(x_{l,i})h_l + \int_{x_{l,i}}^{x_{l,i} - h_l} (x_{l,i} - h_l - s)u''(s) ds \\ &= u(x_{l,i}) - u'(x_{l,i})h_l + \int_0^{h_l} (h_l - s)u''(x_{l,i} - s) ds. \end{aligned}$$

Insgesamt ergibt sich damit

$$v_{l,i} = -\frac{1}{2} \int_0^{h_l} (h_l - s)(u''(x_{l,i} - s) + u''(x_{l,i} + s)) ds,$$

also:

$$|v_{l,i}| \leq \|u''\|_\infty \left| \int_0^{h_l} (h_l - s) \, ds \right| = 2^{-2l-1} \cdot \|u''\|_\infty.$$

□

Analog werden wir die hierarchische Basis im mehrdimensionalen Fall verwenden, um Funktionen in mehreren Veränderlichen zu interpolieren. Sei $L = (l_1, \dots, l_d) \in \mathbb{N}_0^d$ ein Multiindex und $2^L = (2^{l_1}, \dots, 2^{l_d})$ der Multiindex mit Diskretisierungsschrittweiten für jede Raumdimension. Gemäß der hierarchischen Zerlegung des Raumes V_L ergibt sich ein Interpolant aus d-linearen Funktionen durch die Vorschrift

$$I_L(u) = \sum_{0 \leq K \leq L} \sum_{I \in J_K} v_{K,I} \varphi_{K,I},$$

wobei die hierarchischen Überschüsse gegeben sind durch

$$v_{L,I} = \delta_{L,I}(u) = \left(\bigoplus_{j=1}^d \delta_{l_j, i_j} \right) (u).$$

Konkret bedeutet diese Vorschrift, dass zur Bestimmung der hierarchischen Überschüsse schrittweise vorgegangen wird. Es wird zunächst in einer Dimension hierarchisiert, anschließend jeder auftretende Term in der nächsten Dimension und dies so lange, bis alle Dimensionen abgearbeitet sind.

Wir betrachten diese hierarchischen Überschüsse genauer und führen dazu für hinreichend glatte u die folgende Notation ein:

$$D^2 u(x) = \frac{\partial^{2d} u(x)}{\partial x_1^2 \dots \partial x_d^2}.$$

Damit erhalten wir die nachfolgende Integraldarstellung der hierarchischen Überschüsse. Satz und Beweis stammen dabei aus [16].

Satz 3.3: *Seien $L, I \in \mathbb{N}^d$ Multiindizes und $v_{L,I}$ die hierarchischen Überschüsse wie oben. Dann gilt die Darstellung*

$$v_{L,I} = \frac{2^{-|L|_1}}{2^d} \cdot \int_{[0,1]^d} \varphi_{L,I}(x) \cdot D^2 u(x) \, dx.$$

Beweis.

$$\begin{aligned}
 & \frac{2^{-|L|_1}}{2^d} \int_{[0,1]^d} \varphi_{L,I}(x) \cdot D^2 u(x) dx = \prod_{j=1}^d \frac{1}{2^{l_j+1}} \int_{\frac{i_j-1}{2^{l_j}}}^{\frac{i_j+1}{2^{l_j}}} \varphi_{l_j,i_j}(x_j) \frac{\partial^2 u(x_j)}{\partial x_j^2} dx_j \\
 &= \prod_{j=1}^d \frac{1}{2^{l_j+1}} \left(\int_{\frac{i_j-1}{2^{l_j}}}^{\frac{i_j+1}{2^{l_j}}} \varphi(2^{l_j}x_j - i_j) \frac{\partial^2 u(x_j)}{\partial x_j^2} dx_j \right) \\
 &= \prod_{j=1}^d \frac{1}{2^{l_j+1}} \left(\underbrace{\left[\varphi(2^{l_j}x_j - i_j) \frac{\partial u(x_j)}{\partial x_j} \right]_{\frac{i_j-1}{2^{l_j}}}^{\frac{i_j+1}{2^{l_j}}} - \int_{\frac{i_j+1}{2^{l_j}}}^{\frac{i_j}{2^{l_j}}} \frac{\partial \varphi(2^{l_j}x_j - i_j)}{\partial x_j} \frac{\partial u(x_j)}{\partial x_j} dx_j}_{=0} \right) \\
 &= \prod_{j=1}^d \left(\frac{1}{2^{l_j+1}} \left[\int_{\frac{i_j-1}{2^{l_j}}}^{\frac{i_j}{2^{l_j}}} 2^{l_j} \frac{\partial u(x_j)}{\partial x_j} dx_j - \int_{\frac{i_j}{2^{l_j}}}^{\frac{i_j+1}{2^{l_j}}} 2^{l_j} \frac{\partial u(x_j)}{\partial x_j} dx_j \right] \right) \\
 &= \prod_{j=1}^d \left(\frac{1}{2} \left[\int_{\frac{i_j-1}{2^{l_j}}}^{\frac{i_j}{2^{l_j}}} \frac{\partial u(x_j)}{\partial x_j} dx_j - \int_{\frac{i_j}{2^{l_j}}}^{\frac{i_j+1}{2^{l_j}}} \frac{\partial u(x_j)}{\partial x_j} dx_j \right] \right) \\
 &= \prod_{j=1}^d \left[u\left(\frac{i_j}{2^{l_j}}\right) - \frac{u\left(\frac{i_j-1}{2^{l_j}}\right) + u\left(\frac{i_j+1}{2^{l_j}}\right)}{2} \right] = \prod_{j=1}^d v_{l_j,i_j} = v_{L,I}
 \end{aligned}$$

□

Das bereits angesprochene Verhalten, dass die hierarchischen Überschüsse mit wachsendem Level stark abfallen, zeigt sich auch im mehrdimensionalen Fall. Entsprechend ist das Hauptresultat dieses Abschnittes die folgende Abschätzung aus [15], welche im nächsten Abschnitt als Basis für die Dünngitterquadratur dient.

Satz 3.4: Sei u eine hinreichend glatte Funktion. Für $L, I \in \mathbb{N}^d$ gilt:

$$|v_{L,I}| \leq 2^{-d} \cdot 2^{-2|L|_1} \cdot \left\| \frac{\partial^{2d} u}{\partial x_1^2 \cdots \partial x_d^2} \right\|_\infty.$$

Beweis. Mithilfe der Darstellung

$$v_{L,I} = \frac{2^{-|L|_1}}{2^d} \cdot \int_{[0,1]^d} \varphi_{L,I}(x) \cdot D^2 u(x) dx$$

folgt unmittelbar

$$\begin{aligned}
 |v_{L,I}| &\leq 2^{-d} 2^{-|L|_1} \int_{[0,1]^d} |\varphi_{L,I}(x) \cdot D^2 u(x)| dx \\
 &\leq 2^{-d} 2^{-|L|_1} \int_{[0,1]^d} |D^2 u(x)| dx \leq 2^{-d} 2^{-|L|_1} \|D^2 u(x)\|_\infty.
 \end{aligned}$$

□

3.4 Hierarchische Interpolation auf d-dimensionalen Rechtecken

Im Folgenden werden die gewonnenen Resultate der vorherigen Abschnitte kurz vom d-dimensionalen Einheitswürfel auf allgemeine Rechteckgebiete $\Omega = \prod_{j=1}^d [a_j, b_j]$, wobei $[a_j, b_j] \subseteq \mathbb{R}$ verallgemeinert. Die Resultate stammen vollständig aus [18], sowie den dort verwendeten Quellen, speziell [19].

Sei $[a, b] \subseteq \mathbb{R}$ und die Hutfunktion $\varphi(x)$ definiert wie in den vorherigen Abschnitten. Definiere nun die gestauchte Funktion für $l \geq 1$ durch

$$\varphi_{l,i}(x) = \varphi\left(\frac{x-a}{b-a} \cdot 2^l - i\right).$$

Im Spezialfall $l = 0$ sei

$$\varphi_{0,0}(x) = \frac{x-b}{a-b}, \quad \varphi_{0,1}(x) = \frac{x-a}{b-a}.$$

Für einen Multiindex $L = (l_1, \dots, l_d) \in \mathbb{N}_0^d$ mit Levels in jeder Dimension sei die Schrittweite gegeben durch

$$h_L = (h_{l_1}, \dots, h_{l_d}),$$

wobei

$$h_{l_j} = (b_j - a_j) \cdot 2^{-l_j}.$$

Mithilfe eines Tensorproduktes kann dann eine eindimensionale Diskretisierung des Intervalls $[a, b] \subseteq \mathbb{R}$ durch Knotenpunkte

$$x_{l,i} = a + i \cdot 2^{-l}$$

zu einer Diskretisierung von Ω verallgemeinert werden. Unter Hinzunahme der über das Tensorprodukt definierten Funktionen $\varphi_{L,K}$ für Multiindizes $L, K \in \mathbb{N}_0^d$ können dann komplett analog zur vorherigen Vorgehensweise die Teirläume

$$W_L = \text{span}\{\varphi_{L,I} \mid I \in J_L\}$$

definiert werden und damit die Zerlegung

$$V_L = \bigoplus_{0 \leq K \leq L} W_K.$$

Die hierarchische Interpolation ist dann definiert durch

$$I_L(u) = \sum_{0 \leq K \leq L} \sum_{I \in J_K} v_{K,I} \varphi_{K,I},$$

wobei die hierarchischen Überschüsse gegeben sind durch

$$v_{L,I} = \delta_{L,I}(u) = \left(\bigoplus_{j=1}^d \delta_{l_j, i_j} \right)(u).$$

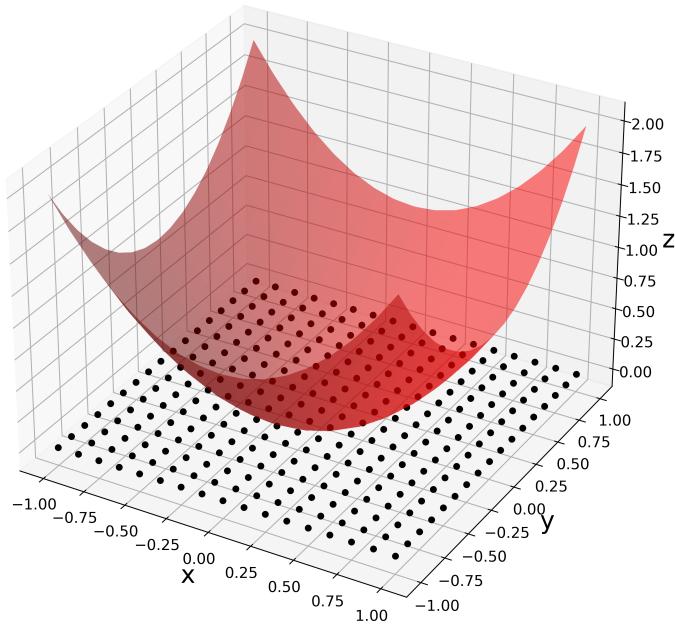


Abbildung 4: Hierarchische Interpolation und verwendete Interpolationspunkte auf vollem Gitter mit Level $L = (4, 4)$ der Funktion $f(x, y) = x^2 + y^2$.

4 Dünne Gitter

Das Diskretisieren des Einheitswürfels in eine volle Gitterstruktur durch Diskretisierung bezüglich einer konstanten Schrittweite in jede Raumdimension verursacht das Problem, dass der numerische Aufwand zur Berechnung des Interpolanten mit der Dimension stark wächst. Abbildung 4 zeigt die Interpolation der Funktion

$$f: [-1, 1] \times [-1, 1], \quad f(x, y) = x^2 + y^2$$

auf einem vollen Gitter mit Gitterweite 2^{-4} in x- und y-Richtung. Deutlich zu erkennen ist, dass bereits ein niedriges Level zu einer hohen Anzahl an Funktionsauswertungen führt. Ziel dieses Abschnitts ist es, die hierarchische Interpolation nur auf Teilräumen des Raums der stückweise d-linearen Funktionen zu betrachten, um die Gitterstruktur zu vereinfachen und entsprechend Funktionsauswertungen und Rechenzeit zu sparen. Hauptquellen für diesen Abschnitt sind die Ausarbeitungen [2] sowie [19] und der auf letztgenannter Quelle aufbauenden Arbeit [18].

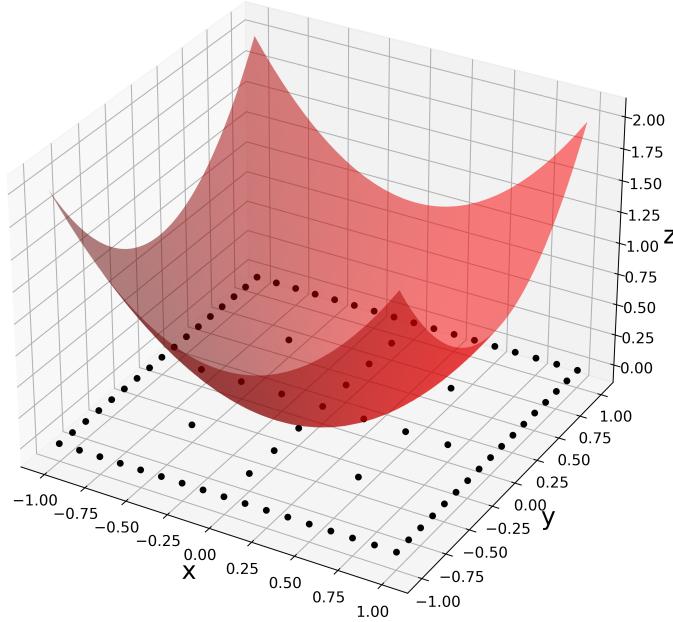


Abbildung 5: Hierarchische Interpolation und verwendete Interpolationspunkte auf dünnem Gitter mit Level $L = 4$ der Funktion $f(x, y) = x^2 + y^2$.

4.1 Interpolation auf dünnen Gittern

Im vorherigen Abschnitt wurde ein Interpolant auf Grundlage von hierarchischen Basisfunktionen hergeleitet und für die hierarchischen Überschüsse ein Abfallen mit wachsendem Feinheitsgrad gezeigt. Die Idee der Dünngitterinterpolation ist es, gewisse hierarchische Überschüsse zu vernachlässigen, ohne Genauigkeit beim Interpolationsfehler einzubüßen. Im Folgenden wird auf die Möglichkeit verzichtet, die einzelnen Raumdimensionen mit unterschiedlichen Schrittweiten zu diskretisieren. Entsprechend wird statt einem Multiindex $L \in \mathbb{N}_0^d$ eine globale Schrittweite $h_L = 2^{-L}$ mit $L \in \mathbb{N}_0$ festgelegt. Gemäß [3] ist der optimale Dünngitter-Raum zur Minimierung des Interpolationsfehlers bezüglich der $\|\cdot\|_{L^2}$ Norm dann gegeben durch

$$V_L^s = \bigoplus_{\substack{K \in \mathbb{N}_0^d, \\ |K|_1 \leq L+d-1}} W_K \subseteq V_L, \quad (4.1)$$

wobei $|K|_1 = \sum_{i=1}^d |k_i|$. Der Raum V_L^s bezeichnet dann den Dünngitter-Teilraum des ursprünglichen Raumes V_L . Abbildung 5 zeigt dieselbe Interpolation wie in Abbildung

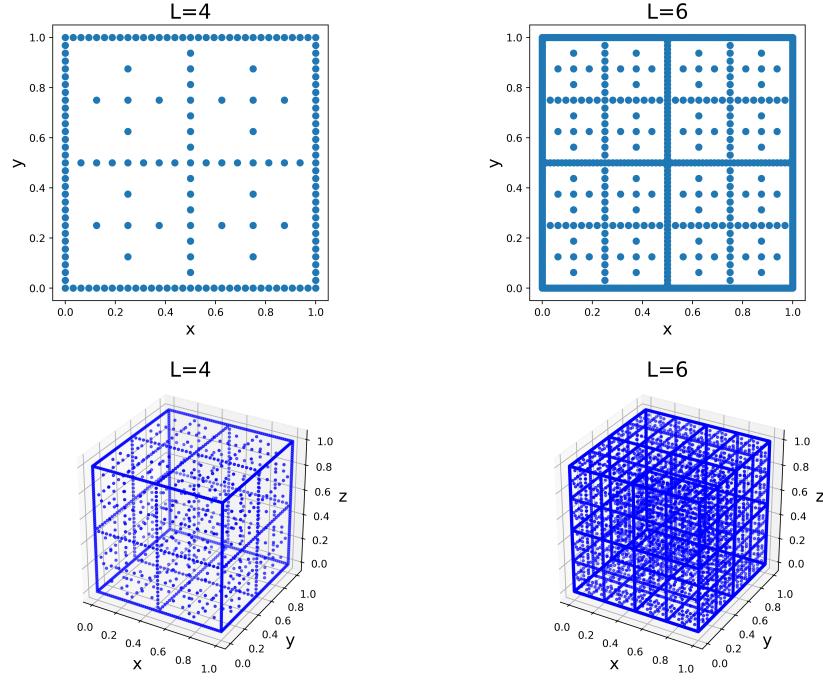


Abbildung 6: Beispielhafte erzeugte dünne Gitter für die Level $L = 4$ und $L = 6$ auf $[0, 1]^2$ beziehungsweise $[0, 1]^3$.

4, reduziert auf das dünne Gitter für V_4^s . Abbildung 6 veranschaulicht zusätzlich die Gitterstruktur in $[0, 1]^2$ und $[0, 1]^3$. An dieser Stelle sei angemerkt, dass für die Konstruktion von dünnen Gittern in der Literatur verschiedene Varianten zu finden sind. Wir beschränken uns in diesem Abschnitt auf die Methode aus (4.1) und gehen in Abschnitt 4.4 auf Weitere ein. Die Anzahl der Funktionsauswertungen unterscheidet sich bei den Gittern drastisch, vergleiche Tabelle 1.

d = 2	L = 6	L = 8	L = 10	L = 12	L = 14
Full grid	4 225	66 049	1 050 625	16 785 409	268 468 225
Sparse grid	385	1 793	8 193	36 865	163 841
d = 3	L = 6	L = 8	L = 10	L = 12	L = 14
Full grid	274 625	16 974 593	1 076 890 625	6.876e + 10	4.398e + 12
Sparse grid	8 705	44 289	219 137	1 060 865	5 046 273

Tabelle 1: Vergleich der Anzahl an Gitterpunkten zwischen vollem und dünnem Gitter für die Dimensionen 2 und 3 und verschiedene Gitterlevel L .

Um die hierarchische Struktur der Level zu verdeutlichen, betrachten wir Abbildung 7. Dort ist zu sehen, welche Gitterpunkte jeweils zur Interpolation der Funktion in jedem Schritt für das Level $L = 7$ verwendet werden. Zu erkennen ist, dass jeder Schritt in der Hierarchie zusätzliche Punkte hinzufügt. Sie werden verwendet, um die Funktionsauswertungen zu verfeinern. Die Punkte sind dabei hierarchisch angeordnet. Auf einem höheren Level werden die im vorherigen Schritt verwendeten Interpolationspunkte (jeweils rot eingefärbt) wiederverwendet und Neue (blau) hinzugefügt.

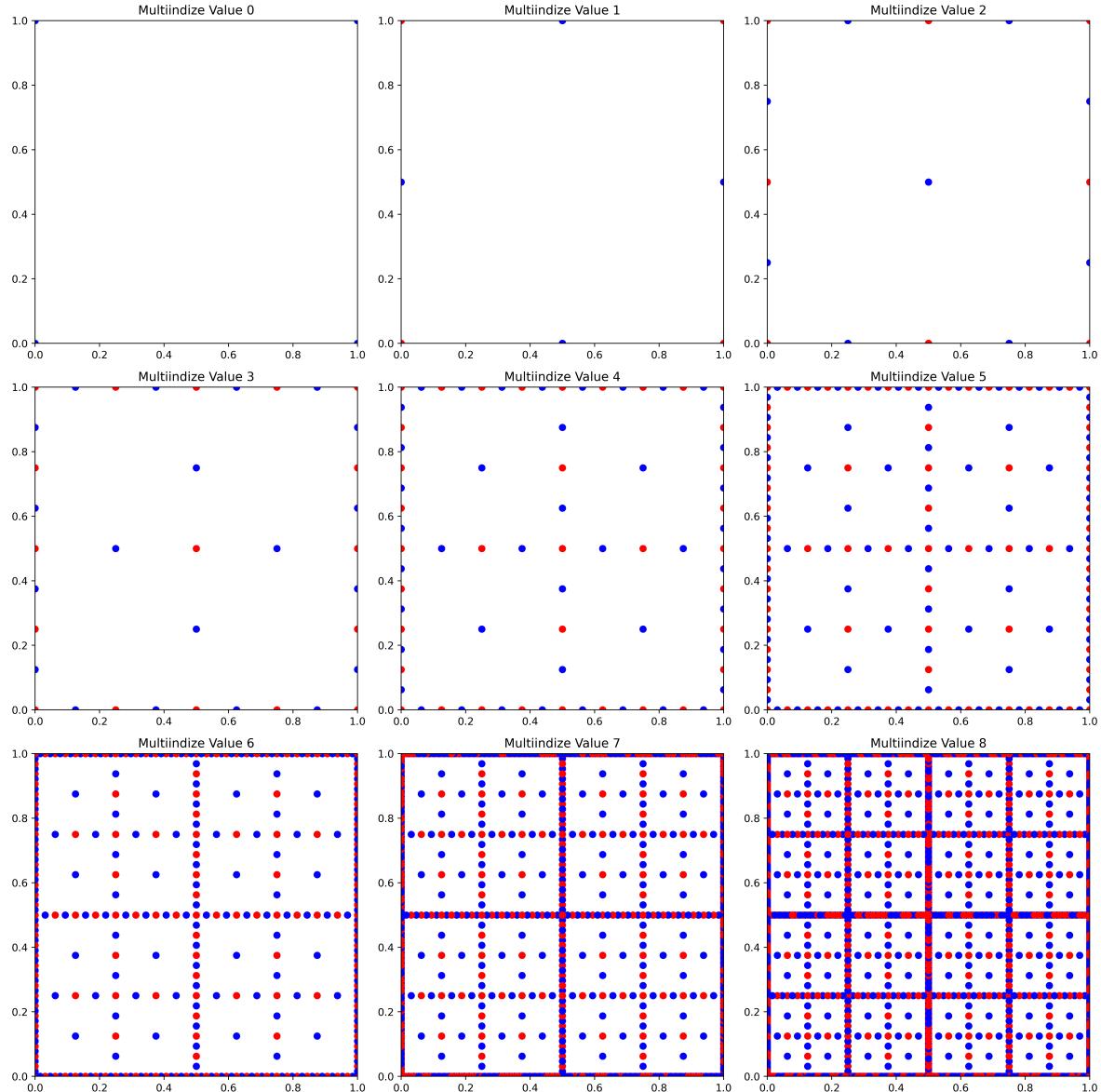


Abbildung 7: Interpolationspunkte eines dünnen Gitters auf dem Einheitsquadrat $[0, 1]^2$ in Abhängigkeit des Multiindex.

4.2 Interpolationsfehler auf dünnen Gittern

Im Folgenden wird der Interpolationsfehler auf dünnen Gittern betrachtet. Die Resultate sind alle, sofern nicht explizit anders erwähnt, eine Wiedergabe aus [16].

Seien $\Omega = [0, 1]^d \subseteq \mathbb{R}^d$. Für hinreichend glatte Funktionen wird noch eine gemischte Ableitung wie folgt definiert.

Definition 4.1: Sei $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d)$ ein Multiindex. Dann definieren wir den Operator $D^\alpha f$ als

$$D^\alpha f = \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_d^{\alpha_d}} f.$$

Wir arbeiten im Folgenden auf den Räumen $X^p(\Omega)$ und $X_0^p(\Omega)$.

Definition 4.2: Sei $p \in \{2, \infty\}$ und $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d)$ ein Multiindex. Definiere den Raum $X^p(\Omega)$ gemäß

$$X^p(\Omega) = \{u \in L^p(\Omega) \mid D^\alpha u \in L^p(\Omega) \text{ existiert } \forall \alpha \in \mathbb{N}_0^d \text{ mit } \|\alpha\|_\infty < \infty\}.$$

Setze

$$X_0^p(\Omega) = \{u \in X^p(\Omega) \mid u|_{\partial\Omega} = 0\}.$$

Nach Konstruktion ist dann $X^p(\Omega) \subset W^{2,p}(\Omega)$. Zu Funktionen aus $X_0^p(\Omega)$ definieren wir noch zwei Seminormen.

Definition 4.3: Sei $p \in \{0, \infty\}$ und $\alpha = (2, \dots, 2) \in \mathbb{N}^d$. Dann setzen wir

$$|u|_p = \begin{cases} \|D^\alpha u\|_\infty, & \text{für } u \in X_0^\infty(\Omega) \\ \|D^\alpha u\|_2 = \left(\int_\Omega |D^\alpha u|^2 dx\right)^{\frac{1}{2}}, & \text{für } u \in X_0^2(\Omega). \end{cases}$$

Wiederum nach [16] ergeben sich damit die folgenden Schranken für den Interpolationsfehler. Für einen Beweis sei ebenfalls auf [16] verwiesen.

Satz 4.4: Sei $u \in X_p^0(\Omega)$, $p \in \{2, \infty\}$. Dann gelten für den Interpolationsfehler auf einem vollen Gitter, gemessen in der L^∞ -Norm und in der L^2 -Norm, folgende Abschätzungen:

$$|u - \tilde{u}_{n,P}|_\infty \leq \frac{d}{6^d} \cdot 2^{-2n} \cdot |u|_\infty = \mathcal{O}(h_n^2), \quad |u - \tilde{u}_{n,P}|_2 \leq \frac{d}{9^d} \cdot 2^{-2n} \cdot |u|_2 = \mathcal{O}(h_n^2),$$

wobei $\tilde{u}_{n,P}$ der Interpolant zu u auf einem vollen Gitter mit maximalem Level n ist.

Satz 4.5: Sei $u \in X_p^0(\Omega)$, $p \in \{2, \infty\}$. Dann gelten für den Interpolationsfehler auf dünnen Gittern, gemessen in der L^∞ -Norm und in der L^2 -Norm, folgende obere Schranken:

$$\begin{aligned} |u - \tilde{u}_{n,D}|_\infty &\leq \frac{4}{3} \cdot 8^{-d} \cdot 2^{-2n} \cdot |u|_\infty \cdot A(d, n) = \mathcal{O}(h_n^2 \cdot n^{d-1}), \\ |u - \tilde{u}_{n,D}|_2 &\leq \frac{4}{3} \cdot 12^{-d} \cdot 2^{-2n} \cdot |u|_2 \cdot A(d, n) = \mathcal{O}(h_n^2 \cdot n^{d-1}), \end{aligned}$$

wobei $\tilde{u}_{n,D}$ der Interpolant zu u auf einem dünnen Gitter mit maximalem Level n ist und

$$A(d, n) = \sum_{k=0}^{d-1} \binom{n+d-1}{k} = \frac{n^{d-1}}{(d-1)!} + \mathcal{O}(n^{d-2}).$$

4.3 Dünngitterquadratur

Nachdem im vorherigen Abschnitt bereits die Interpolation von Funktionen auf dünnen Gittern erläutert wurde, gehen wir einen Schritt weiter und verwenden diese Interpolation zur Integration von Funktionen auf dünnen Gittern. Diese Vorgehensweise nutzt die Vorteile der Interpolation auf dünnen Gittern (weniger Funktionsauswertungen, geringerer Rechenaufwand) und definiert einen Quadraturalgorithmus durch Integrieren des Interpolanten.

Wir betrachten in diesem Abschnitt den allgemeinen d -dimensionalen Fall und die Integration von Funktionen über allgemeine Rechteckgebiete.

Sei $d \in \mathbb{N}$ die Dimension und $L' = (l'_1, \dots, l'_d) \in \mathbb{N}_0^d$ der Multiindex mit Schrittweiten für jede Dimension. Sei

$$\Omega = [a_1, b_1] \times \cdots \times [a_d, b_d] \subseteq \mathbb{R}^d$$

ein rechteckiges Integrationsgebiet. Sei $n \in \{1, \dots, d\}$ und $h_n = 2^{-l'_n}$ die Gitterweite. Diskretisiere das Intervall $[a_n, b_n]$ gemäß

$$G_n = \{x_{n,i} = a_n + i \cdot 2^{-l'_n} \mid i = 0, 1, \dots, 2^{l'_n}\}$$

und Ω entsprechend durch

$$G_L = G_{l'_1} \times \cdots \times G_{l'_d}.$$

Setze $L = \|L'\|_\infty$ und betrachte den Dünngitter-Raum gemäß der Vorschrift

$$V_L^s = \bigoplus_{\substack{K \in \mathbb{N}_0^d, \\ \|K\|_1 \leq L+d-1}} W_K \subseteq V_L.$$

Der Dünngitterinterpolant für $u: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ergibt sich dann zu

$$I_L(u) = \sum_{\substack{K \in \mathbb{N}_0^d, \\ \|K\|_1 \leq L+d-1}} \sum_{i \in J_k} v_{K,i} \varphi_{K,i},$$

wobei die hierarchischen Überschüsse gegeben sind durch

$$v_{K,i} = \delta_{K,i}(u) = \left(\bigoplus_{j=1}^d \delta_{K_j, i_j} \right) (u).$$

Zur Integration des Dünngitterinterpolanten benötigen wir die Integralwerte der hierarchischen Basisfunktionen. Sei $l, i \in \mathbb{N}$, dann gilt für die eindimensionale Basisfunktion über ein beliebiges Intervall $[a, b] \subseteq \mathbb{R}$

$$\int_a^b \varphi_{l,i}(x) dx = \int_a^b \varphi \left(\frac{x-a}{b-a} \cdot 2^l - i \right) dx = (b-a) \cdot 2^{-l}.$$

Ist $l = 0$ so folgt

$$\int_a^b \varphi_{0,0}(x) dx = \int_a^b \varphi_{0,1}(x) dx = \frac{b-a}{2}.$$

Entsprechend gilt für die Multiindizes $L = (l_1, \dots, l_d), K = (k_1, \dots, k_d) \in \mathbb{N}_0^d$

$$\int_{\Omega} \varphi_{L,I}(x) dx = \int_{\Omega} \prod_{k=1}^d \varphi_{l_k,i_k}(x_k) dx = \prod_{k=1}^d \int_{a_k}^{b_k} \varphi_{l_k,i_k}(x_k) dx_k.$$

Das Produkt und die Integrationsgrenze können dabei vertauscht werden, da die einzelnen Funktionen φ_{l_k,i_k} nur von einer einzigen Dimension abhängen. Diese Konstruktion legt den folgenden Quadraturalgorithmus zur Integration von Funktionen über Rechtecksgebiete $[a_1, b_1] \times \dots \times [a_d, b_d] \subseteq \mathbb{R}^d$ nahe.

```

Input : Function  $f$ , integration domain  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ , Level  $L$ 
Output: integral_value
integral_value  $\leftarrow 0$ 
foreach  $K \in \mathbb{N}_0^d$  with  $\|K\|_1 \leq L + d - 1$  do
    foreach  $I \in J_K$  do
        | Calculate hierarchical surpluses  $v_{K,I}$ 
        | Calculate  $\int_{\Omega} \varphi_{K,I}(x) dx$ 
        | integral_value  $\leftarrow$  integral_value +  $v_{K,I} \int_{\Omega} \varphi_{K,I}(x) dx$ ;
    end
end
return integral_value;

```

Algorithm 1: SparseGrid Quadrature

4.3.1 Ausblick: Adaptive Dünngitterquadratur

Die hier hergeleitete Dünngitterquadratur verwendet ein fest gewähltes Gitter, welches unabhängig von der zu integrierenden Funktion generiert wird. Eine mögliche Erweiterung dieser Methode ist als adaptive Dünngitterquadratur bekannt. Für weitere Informationen sei beispielsweise auf [20] verwiesen. Wie bereits bei der normalen Dünngitterquadratur basiert die Idee der adaptiven Variante auf der Verwendung hierarchischer Basisfunktionen. Die Interpolationsstellen werden jedoch durch die Adaptivität dynamisch gewählt. Abhängig von der Komplexität der zu integrierenden Funktion wird das Gitter lokal verfeinert, um beispielsweise Abschnitte mit sehr steilen Gradienten oder Unstetigkeitsstellen besser interpolieren zu können. Vorteilhaft ist dieses Verfahren insbesondere dann, wenn Funktionen nur lokal große Variationen aufweisen. Das Gitter kann dann an anderen Stellen dünner gewählt werden und so effektiv die Anzahl an Gitterpunkten weiter reduziert werden.

4.4 Ausblick: Weitere Methoden zur Erzeugung von dünnen Gittern

Die im vorherigen Abschnitt dargestellte Konstruktion von dünnen Gittern steht beispielhaft für eine ganze Klasse von Methoden zur Interpolation und anschließenden Konstruktion von dünnen Gittern. Da die numerische Umsetzung in M++ [4] stattfindet und dort das Paket *Tasmanian* [21] zur Dünngitterquadratur verwendet wird, stellen wir hier kurz die dort verwendeten Ansätze vor. Die Resultate sind dabei vollständig aus dem Handbuch zu *Tasmanian* [22] entnommen.

Prinzipiell unterscheidet man zwischen vier Varianten dünne Gitter zu erzeugen.

Globale Gitter: Der Interpolant der zu Quadratur verwendet wird, wird hierbei auf Basis von Lagrange-Polynomen hergeleitet. Durch Verallgemeinerung auf mehrdimensionale Funktionen entsteht ein Tensorprodukt über eine Indexmenge Θ aus Multiindizes und eine Dünngitter wird durch geeignete Auswahl einer Teil-Indexmenge $S \subset \Theta$ konstruiert. Die entstehenden Gitter sind besonders geeignet für glatte und analytische Funktionen.

Sequenzielle Gitter: Die Konstruktion erfolgt hierbei über Newton-Polynome welche eine schnellere Implementierung auf Kosten von höherem Speicheraufwand als globale Gitter bieten. Die grundsätzliche Idee bleibt identisch.

Lokale polynomiale Gitter: Der Ansatz, welcher in der vorliegenden Arbeit ausführlich erläutert wurde. Die Interpolation basiert auf hierarchisch angeordneten, stückweise polynomiaellen Basisfunktionen mit lokalem (also beschränktem) Träger. Hierbei kann der Grad der Polynome variabel gewählt werden. Die Erzeugung von dünnen Gittern erfolgt dann wieder analog über ein Tensorprodukt.

Wavelet Gitter: Sind analog zu lokal polynomiaellen Gittern, verwenden aber sogenannte Wavelet-Basen, zu finden unter anderem in [14].

4.4.1 Dünne Gitter nach Clenshaw-Curtis

In der numerischen Umsetzung in M++ verwenden wir die nach C. W. Clenshaw und A. R. Curtis genannten und in [23] erstmals vorgestellte Clenshaw-Curtis-Quadratur. Diese Methode fällt in die Kategorie der global grids, welche im Folgenden vorgestellt wird. Hierbei handelt es sich um eine direkte Wiedergabe der Ergebnisse aus [22].

Global Grids sind eine Methode zur Interpolation und Quadratur, die auf einer Folge $\{x_j\}_{j=1}^{\infty} \in \mathbb{R}$ von eindeutig definierten Punkten basiert. Für eine eindimensionale Interpolation wird eine Familie von interpolierenden Funktionen $\{U^{m(l)}\}_{l=0}^{\infty}$ definiert, wobei $U^{m(l)}$ den ersten $m(l)$ Punkten $\{x_j\}_{j=1}^{m(l)}$ zugeordnet ist und die Lagrange-Basisfunktionen $\{\phi_j^l(x)\}_{j=1}^{m(l)}$ verwendet werden. Die Funktion $m: \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N}$ ist dabei eine strikt monoton wachsende *growth-function*. Die Interpolation ist dann gegeben durch:

$$f^{(l)}(x) = U^{m(l)}[f](x) = \sum_{j=1}^{m(l)} f(x_j) \phi_j^l(x).$$

Die entsprechende numerische Quadratur wird durch

$$\int f(x)\rho(x) dx \approx Q[f] = \sum_{j=1}^{m(l)} w_j^l f(x_j)$$

ausgedrückt, wobei $w_j^l = \int \phi_j^l(x)\rho(x) dx$. Diese punktweise Approximation kann in Operatorschreibweise mit dem Operator

$$\Delta^{m(l)} = U^{m(l)} - U^{m(l-1)}$$

ausgedrückt werden. Soll eine numerische Quadratur stattfinden verwendet man die Schreibweise

$$\Delta^{m(l)} = Q^{m(l)} - Q^{m(l-1)}.$$

In beiden Fällen gilt die Konvention $\Delta^{m(0)} = U^{m(0)}$ beziehungsweise $\Delta^{m(0)} = Q^{m(0)}$.

In höheren Dimensionen werden Tensorprodukt-Operatoren für Multiindizes i, j verwendet:

$$\Delta^{m(i)} = \bigotimes_{k=1}^d \Delta^{m(i_k)}, \quad U^{m(i)} = \bigotimes_{k=1}^d U^{m(i_k)}.$$

Ein Sparse Grid Operator wird definiert als

$$G_\Theta[f] = \sum_{i \in \Theta} \Delta^{m(i)}, \tag{4.2}$$

wobei Θ ein sogenanntes *lower set*, also eine Menge von Multiindizes ist. Dabei wird eine Menge Θ als *lower* oder *admissible* bezeichnet, wenn die folgende Bedingung erfüllt ist:

$$\nu \in \Theta \implies \{\nu \in \mathbb{N}^d \mid i \leq \nu\} \subseteq \Theta.$$

Die zu (4.2) gehörenden Punkte sind gegeben durch $\{x_j\}_{j \in X(\Theta)}$, wobei

$$X(\Theta) = \bigcup_{i \in \Theta} \{1 \leq j \leq m(i)\}$$

und die Tensoren definiert sind durch

$$m(i) = \bigotimes_{k=1}^d m(i_k), \quad x_j = \bigotimes_{k=1}^d x_{j_k}.$$

Im nicht-nested Fall besteht $X(\Theta)$ aus Paaren von Multiindizes

$$X(\Theta) = \bigcup_{i \in \Theta} \bigcup_{1 \leq j \leq m(i)} \{(i, j)\},$$

und die Punkte sind $\{x_j^i\}_{(i, j) \in X(\Theta)}$ wobei $x_j^i = \bigotimes_{k=1}^d x_{j_k}^{i_k}$.

Es lässt sich zeigen, dass für jedes lower set Θ eine Menge von (ganzzahligen) Gewichten $\{t_j\}_{j \in \Theta(L)}$ existiert, die die Bedingung

$$\sum_{i \leq j, j \in \Theta(L)} t_j = 1$$

für jedes $i \in \Theta(L)$ erfüllen. Dann gilt

$$G_\Theta[f] = \sum_{i \in \Theta} \Delta^{m(i)} = \sum_{i \in \Theta} t_i U^{m(i)},$$

oder im Kontext der Integration

$$G_\Theta[f] = \sum_{i \in \Theta} t_i Q^{m(i)}.$$

Somit schreiben wir die Lagrange-Basisfunktionen und die Quadraturgewichte explizit als

$$\phi_j(x) = \sum_{i \in \Theta, m(i) \geq j} t_i \prod_{k=1}^d \phi_{j_k}^{i_k},$$

wobei jede $\phi_{j_k}^{i_k}$ an der entsprechenden k -ten Komponente von x ausgewertet wird. Ebenso sind die Quadraturgewichte gegeben durch

$$w_j = \sum_{i \in \Theta, m(i) \geq j} t_i \prod_{k=1}^d w_{j_k}^{i_k}.$$

Daher ergibt sich die explizite Form der Sparse Grids Approximation zu

$$\tilde{f}_\Theta(x) = \sum_{j \in X(\Theta)} f(x_j) \phi_j(x), \quad Q_\Theta[f] = \sum_{j \in X(\Theta)} f(x_j) w_j.$$

Für die Fehlerabschätzung gelten die folgenden Resultate:

Für Polynome liefert die punktweise Interpolation

$$G_\Theta[p] = p, \quad \text{für alle } p \in P_{\Lambda^m(\Theta)},$$

wobei $\Lambda_m(\Theta) = \bigcup_{i \in \Theta} \{j \mid j \leq m(i) - 1\}$.

Für die numerische Quadratur gilt

$$G_\Theta[p] = p, \quad \text{für alle } p \in P_{\Lambda^q(\Theta)},$$

gegeben, wobei $\Lambda^q(\Theta) = \bigcup_{i \in \Theta} \{j \mid j \leq q(i)\}$ und $q: \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{N}$ eine nicht negative Funktion ist mit $Q^{m(l)}[p] = p$ für alle $p \in P^{q(l)}$ mit $P^l = \text{span}\{x^v \mid v \leq l\}$ ist.

Der punktweise Approximationsfehler eines Sparse Grids ist für stetige Funktionen auf dem Interpolationsgebiet Γ durch

$$\|f - G_\Theta[f]\|_{C_0(\Gamma)} \leq (1 + \|G_\Theta\|_{C_0(\Gamma)}) \inf_{p \in P^{\Lambda_m(\Theta)}} \|f - p\|_{C_0(\Gamma)}$$

beschränkt, wobei $\|G_\Theta\|_{C_0(\Gamma)}$ die Operatornorm von G_Θ ist, auch Lebesgue-Konstante genannt:

$$\|G_\Theta\|_{C_0(\Gamma)} = \sup_{g \in C_0(\Gamma)} \frac{\|G_\Theta[g]\|_{C_0(\Gamma)}}{\|g\|_{C_0(\Gamma)}}.$$

Der Fehler in der Quadraturapproximation lässt sich folgendermaßen abschätzen.

$$\left| \int_{\Gamma} f(x) \rho(x) dx - G_\Theta[f] \right| \leq \left(\int_{\Gamma} \rho(x) dx + \sum_{j \in X(\Theta)} |w_j| \right) \inf_{p \in P^{\Lambda_q(\Theta)}} \|f - p\|_{C_0(\Gamma)}$$

Die Clenshaw-Curtis Regel verwendet die Extremstellen der Chebyshev-Polynome zur Konstruktion der Interpolations- und Integrationspunkte. Diese Punkte sind nested, das heißt, jede feinere Gitterebene enthält die Punkte der größeren Ebenen. Wir erhalten wieder analog zur vorherigen Variante der Dünngitterquadratur ein großen Effizienzgewinn im Hinblick auf die Anzahl an Funktionsauswertungen, dargestellt in Tabelle 2. Verglichen wird dort die Anzahl an Gitterpunkten in einem Clenshaw-Curtis-Sparse-Grid und einem vollen Gitter der Gitterweite 2^{-L} . Abbildung 8 zeigt die entstehenden Gitter.

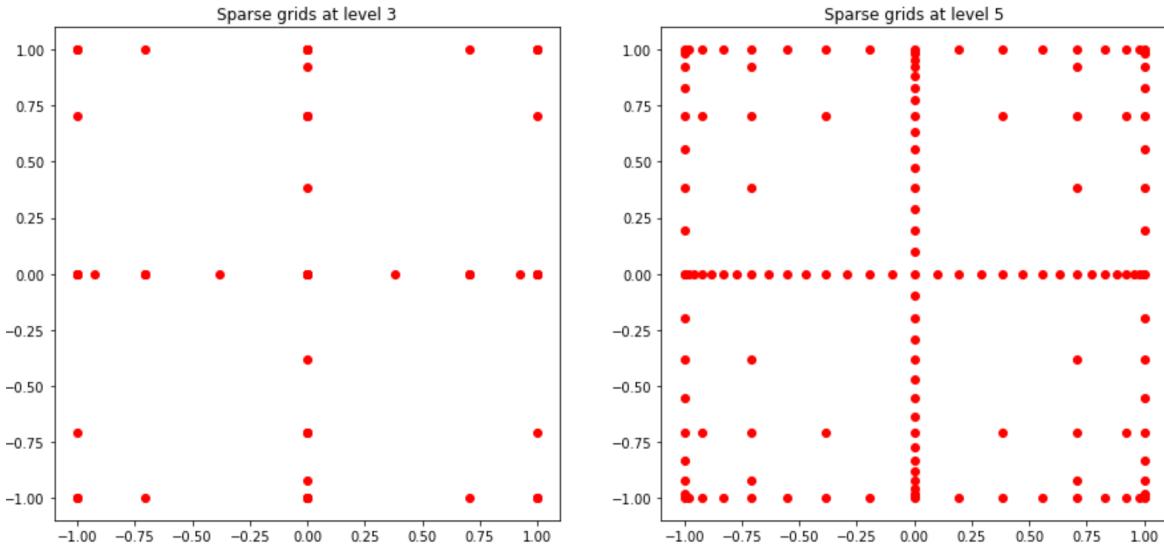


Abbildung 8: SparseGrids erzeugt mit der Clenshaw-Curtis-Regel auf $[-1, 1]^2$ für die Level 3, 5. Bild entnommen aus dem Jupyter-Notebook *sparse-grids.ipynb* in [4].

	$d = 2$		$d = 4$	
L	Sparse Grid	Full Grid	Sparse Grid	Full Grid
1	5	9	9	81
2	13	25	41	625
3	29	81	137	6 561
4	65	289	401	83 521
5	145	1 089	1 105	$1.186e + 06$
6	321	4 225	2 929	$1.785e + 07$
7	705	16 641	7 537	$2.769e + 08$
8	1 537	66 049	18 945	$4.362e + 09$
9	3 329	263 169	46 721	$6.926e + 10$
10	7 169	$1.051e + 06$	113 409	$1.104e + 12$
	$d = 6$		$d = 8$	
L	Sparse Grid	Full Grid	Sparse Grid	Full Grid
1	13	729	17	6 561
2	85	15 625	145	390 625
3	389	531 441	849	$4.305e + 07$
4	1 457	$2.414e + 07$	3 937	$6.976e + 09$
5	4 865	$1.291e + 09$	15 713	$1.406e + 12$
6	15 121	$7.542e + 10$	56 737	$3.186e + 14$
7	44 689	$4.608e + 12$	190 881	$7.669e + 16$
8	127 105	$2.881e + 14$	609 025	$1.903e + 19$
9	350 657	$1.823e + 16$	1 863 937	$4.797e + 21$
10	943 553	$1.160e + 18$	5 515 265	$1.218e + 24$
	$d = 10$		$d = 20$	
L	Sparse Grid	Full Grid	Sparse Grid	Full Grid
1	21	59 049	41	$3.487e + 09$
2	221	$9.766e + 06$	841	$9.537e + 13$
3	1 581	$3.487e + 09$	11 561	$1.216e + 19$
4	8 801	$2.016e + 12$	120 401	$4.064e + 24$
5	41 265	$1.532e + 15$	1 018 129	$2.346e + 30$
6	171 425	$1.346e + 18$	7 314 609	$1.812e + 36$
7	652 065	$1.276e + 21$	46 106 289	$1.629e + 42$
8	2 320 385	$1.257e + 24$	—	$1.580e + 48$
9	7 836 545	$1.262e + 27$	—	$1.593e + 54$
10	25 370 753	$1.280e + 30$	—	$1.639e + 60$

Tabelle 2: Anzahl an Gitterpunkten für die Clenshaw-Curtis Quadratur und verschiedene Dimensionen d in Abhängigkeit des Gitterlevel L .

5 Das Potentialströmungsproblem

Die Herleitung der Dünngitterquadratur ermöglicht es, hochdimensionale Integrale numerisch effizient und genau zu approximieren. In der Praxis treten solche Integrale oft im Kontext von Simulationen unter Unsicherheiten auf, da dort neben der räumlichen Komponente zusätzlich mit stochastischen Elementen gearbeitet wird. Im folgenden Teil der Arbeit soll ein numerisches Modellproblem entwickelt werden, welches anschließend mithilfe von Stochastic Collocation unter Unsicherheiten betrachtet wird. Die Dünngitterquadratur wird dann in der Quantifizierung von sogenannten Quantities of Interest des Modellproblems verwendet.

Auf Grundlage der Vorlesung *Einführung in das Wissenschaftliche Rechnen* [24] im Sommersemester 2024 am Karlsruher Institut für Technologie betrachten wir das Modellproblem der Regenwasserversickerung durch eine poröse Bodenschicht. Zunächst wird die Permeabilität der Bodenschicht deterministisch betrachtet und anschließend zu einer stochastischen Modellierung übergegangen.

5.1 Physikalische Grundlagen

Um einen Versickerungsprozess mathematisch modellieren zu können, bedienen wir uns physikalischer Grundlagen, namentlich dem Gesetz von Darcy. Eine Herleitung durch Homogenisierung der Navier-Stokes-Gleichung findet sich in [25]. Wir betrachten ein beschränktes Gebiet $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, $d \in \mathbb{N}$, welches unsere poröse Bodenschicht darstellt, sowie die folgenden Größen:

$$\begin{aligned} p: \Omega &\rightarrow \mathbb{R}^d && \text{der hydrostatische Druck} \\ \kappa: \Omega &\rightarrow \mathbb{R}_{\text{sym}}^{d \times d} && \text{der Permeabilitätstensor} \\ G: \Omega &\rightarrow \mathbb{R}^d && \text{die Gravitation} \end{aligned}$$

Unter der Annahme, dass die Flüssigkeit inkompressibel ist und das System im Gleichgewicht, ergibt sich dann das Darcy-Gesetz zu

$$q = -\kappa(\nabla p - G).$$

Es besagt, dass der Fluss q durch das Medium proportional zum negativen Gradienten des hydrostatischen Drucks p und der Permeabilität κ ist, wobei die Gravitationsbelastung G berücksichtigt wird. Diese Gleichung drückt aus, dass der Fluss in Richtung des stärksten Druckgefälles fließt, wobei die Permeabilität die Geschwindigkeit des Flusses beeinflusst und die Gravitation eine zusätzliche externe Kraft darstellt.

5.2 Mathematische Modellierung

Wir entwickeln ein mathematisches Modell der Regenwasserversickerung durch eine poröse Bodenschicht mit zunächst einer deterministischen Permeabilität κ . Grundlage hierfür findet sich in [24]. Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, $d \in \mathbb{N}$, und der Fluss des Grundwassers gegeben durch

$$q: \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^d,$$

wobei $T > 0$ und $[0, T]$ ein Zeitintervall. Zur Vereinfachung nehmen wir an, dass innerhalb der Bodenschicht das Regenwasser weder erzeugt noch vernichtet wird. Das heißt wir fordern $\operatorname{div}(q) = 0$. Die Massendichte

$$\rho: \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$$

gibt an, wie viel Masse pro Volumeneinheit zu einem bestimmten Zeitpunkt in einem bestimmten Bereich vorhanden ist. Entsprechend ergibt sich zu einem beliebigen gegebenen Kontrollvolumen $Y \subset \Omega$ die Wassermenge in Y zum Zeitpunkt $t \in [0, T]$ durch das Integral

$$\int_Y \rho(x, t) \, dx.$$

Damit ergibt sich die zeitliche Änderung der Wassermenge in Y durch den Zu- und Abfluss am Rand des Kontrollvolumens Y . Physikalisch macht es Sinn, die Einhaltung der sogenannten Bilanzgleichung zu fordern. Es soll gelten

$$\frac{d}{dt} \int_Y \rho(x, t) \, dx = - \int_{\partial Y} \rho(x, t) q(x, t) \cdot n \, da.$$

Die Bilanzgleichung stellt sicher, dass die Änderung der Wassermenge im Kontrollvolumen genau dem Zu- und Abfluss von Wasser am Rand entspricht. Physikalisch gesehen bedeutet dies, dass keine Masse innerhalb des Kontrollvolumens erzeugt oder vernichtet wird, sondern dass die Änderung der Masse im Volumen durch den Ein- und Ausfluss am Rand bestimmt wird. Das entspricht dem Prinzip der Masseerhaltung.

Wir benötigen den nachfolgenden Satz von Gauß.

Satz 5.1 (Satz von Gauß): *Es sei $D \subseteq \mathbb{R}^d$ offen und beschränkt mit C^1 -Rand ∂D . Sei $f \in C^1(D, \mathbb{R}^d)$. Bezeichnet n die äußere Normale zu ∂D , so gilt*

$$\int_D \operatorname{div} f(x) \, dx = \int_{\partial D} f(x) \cdot n(x) \, da.$$

Für einen Beweis sei auf [8] verwiesen. Angewendet auf unser Modellproblem folgt damit

$$\frac{d}{dt} \int_Y \rho(x, t) \, dx = - \int_{\partial Y} \operatorname{div}(\rho q) \, da.$$

Diese Umformulierung liefert schließlich die partielle Differentialgleichung

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho q) = 0.$$

Im allgemeinen Fall nehmen wir an, die Gravitation G wirkt nur in der letzten Komponente. Das heißt für $\rho_0, g_0 \in \mathbb{R}$ gilt $G = (0, \dots, 0, \rho_0 \cdot g_0)^T \in \mathbb{R}^d$. Ferner setzen wir für $x = (x_1, \dots, x_d)^T \in \mathbb{R}^d$ im Folgenden $u(x) = -p(x) + \rho_0 g_0 x_d$. Das vorher beschriebene Gesetz von Darcy zur Beschreibung des Flusses eines Fluids durch ein poröses Medium vereinfacht sich damit zu $q = \kappa \nabla u$. Es ergibt sich die folgende partielle Differentialgleichung

$$\operatorname{div} \kappa \nabla u = 0.$$

Diese entspricht im Falle ortsunabhängiger Permeabilität, $\kappa(x) = \kappa_0 \forall x \in \Omega$, der Laplace-Gleichung

$$\operatorname{div} \nabla u = \Delta u = 0.$$

Zusätzlich definieren wir Randbedingungen und setzen dafür $\partial\Omega = \Gamma_N \cup \Gamma_D$ als disjunkte Zerlegung. Ferner seien

$$\begin{aligned} u_D &: \Gamma_D \rightarrow \mathbb{R} && \text{(Dirichlet-Werte)} \\ g_N &: \Gamma_N \rightarrow \mathbb{R} && \text{(Neumann-Werte)} \end{aligned}$$

gegebene Randwerte. Insgesamt ergibt sich damit die Randwertaufgabe:

Bestimme $u: \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ mit

$$\begin{cases} \operatorname{div} \kappa \nabla u = 0 & \text{in } \Omega \\ u = u_D & \text{auf } \Gamma_D \\ \kappa \nabla u \cdot n = g_N & \text{auf } \Gamma_N. \end{cases} \quad (5.1)$$

Die Formulierung (5.1) wird im Folgenden als deterministisches Potentialströmungsproblem bezeichnet.

Im weiteren Verlauf vereinfachen wir unser Modellproblem auf einen 2-dimensionalen Querschnitt von $\Omega = (0, 1)^3$. Wir betrachten

$$\Omega_{2D} = \{(x_1, x_3) \in \mathbb{R}^2 \mid (x_1, 0, x_3) \in \Omega\}$$

und fordern, dass die Lösung lokal symmetrisch um $x_2 = 0$ sei. Dann gilt $\partial^2 u_{3D} = 0$ und mit $u_{2D}(x_1, x_3) = u_{3D}(x_1, 0, x_3)$ folgt

$$\operatorname{div} \kappa_{2D} \nabla u_{2D} = 0$$

wobei $\kappa_{2D}(x_1, x_3) \in \mathbb{R}_{\text{sym}}^{2 \times 2}$. Wir setzen ferner $\Omega_{2D} = (0, 1)^2$, $\Gamma_D = [0, 1] \times \{0\}$, $\Gamma_N = \partial\Omega \setminus \Gamma_D$, $\kappa = I_2$ und die Dirichlet-Randbedingung auf $u_D \equiv 0$ sowie die Neumann-Werte auf

$$g_N(x) = \begin{cases} -1 & \text{falls } x_3 = 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}.$$

Auf dem Gebiet Ω_{2D} ergibt sich dann im Fall von ortsunabhängiger Permeabilität das Modellproblem der Regenwasserversickerung

$$\begin{cases} -\Delta u = 0 \\ u(x, y) = 0 & y = 0 & \text{(Grundwasserspiegel)} \\ \nabla u(x, y) \cdot n = -1 & y = 1 & \text{(Einfussströmung)} \\ \nabla u(x, y) \cdot n = 0 & x \in \{0, 1\} & \text{(Neumann-RB).} \end{cases} \quad (5.2)$$

6 Schwache Formulierung und Lösbarkeit des deterministischen Potentialströmungsproblems

Die analytische oder numerische Lösung von Differentialgleichungen in der sogenannten starken Formulierung wie Modellproblemen (5.1) ist häufig an starke Glattheits- und Differenzierbarkeitsbedingungen der Lösung geknüpft, welche das Finden einer Lösung stark erschweren. Mithilfe von Methoden der Funktionalanalysis betrachtet man in der Praxis statt der starken oft eine schwache Formulierung mithilfe von Sobolevfunktionen um die Differentialgleichung in eine Integraldarstellung umzuwandeln. Dieser Ansatz ermöglicht dann das Suchen einer sogenannten schwachen Lösung der Gleichung.

Bevor wir konkrete numerische Lösungen des Modellproblems 5.1 herleiten, werden in diesem Abschnitt zunächst die schwache Formulierung hergeleitet und anschließend die theoretische Lösbarkeit aus Sichtweise der Analysis betrachtet. Grundlagen hierfür werden [24], sowie die im Rahmen dieser Vorlesung entstandenen Praktikumsberichte im Sommersemester 2024 am Karlsruher Institut für Technologie sein.

6.1 Schwache Formulierung

Wir betrachten einen Ansatzraum von Funktionen gegeben durch

$$V = \{\phi \in C^2(\Omega) \cap C(\overline{\Omega}) \mid \phi|_{\Gamma_D} = 0\}$$

und multiplizieren die Gleichung $\operatorname{div}(\kappa \nabla u) = 0$ mit einer Testfunktion $\phi \in V$. Ferner integrieren wir über das Gebiet Ω und erhalten

$$\int_{\Omega} \phi \cdot \operatorname{div}(\kappa \nabla u) dx = 0. \quad (6.1)$$

Da ϕ eine \mathbb{R} -wertige Funktion ist, gilt die Produktregel für die Divergenz. Für ein Vektorfeld $F: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ gilt also

$$\operatorname{div}(\phi \cdot F) = \operatorname{grad}(\phi) \cdot F + \phi \cdot \operatorname{div}(F)$$

was äquivalent zur Gleichung

$$\phi \cdot \operatorname{div}(F) = \operatorname{div}(\phi \cdot F) - \operatorname{grad}(\phi) \cdot F = \nabla u \cdot F$$

ist. Angewendet auf (6.1) folgt damit für $F = \kappa \nabla u$ die Gleichung

$$0 = \int_{\Omega} \phi \cdot \operatorname{div}(\kappa \nabla u) dx = \int_{\Omega} \operatorname{div}(\phi \cdot \kappa \nabla u) dx - \int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \kappa \nabla u dx. \quad (6.2)$$

Wir verwenden Satz 5.1 (Satz von Gauss) um das Volumenintegral über die Divergenz in ein Oberflächenintegral zu überführen. Es gilt

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \operatorname{div}(\phi \cdot \kappa \nabla u) dx &= \int_{\partial\Omega} \phi \cdot \kappa \nabla u \cdot n da \\ &= \int_{\Gamma_D} \phi \cdot \kappa \nabla u \cdot n da + \int_{\Gamma_N} \phi \cdot \kappa \nabla u \cdot n da \\ &\stackrel{\phi|_{\Gamma_D}=0}{=} \int_{\Gamma_N} \phi \cdot \kappa \nabla u \cdot n da. \end{aligned}$$

Eingesetzt in Gleichung (6.2) folgt damit

$$0 = \int_{\Omega} \phi \cdot \operatorname{div}(\kappa \nabla u) dx = \int_{\Gamma_N} \phi \cdot \kappa \nabla u \cdot n da - \int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \kappa \nabla u dx$$

und damit insgesamt die Formulierung

$$\int_{\Gamma_N} \phi \cdot \kappa \nabla u \cdot n da = \int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \kappa \nabla u dx.$$

Unter Hinzunahme der Neumann-Randbedingung folgt dann die schwache Formulierung des Anfangswertproblems (5.1) zu:

Finde $u \in H^1(\Omega)$ so, dass für alle Testfunktionen $\phi \in V$ gilt:

$$\int_{\Gamma_N} \phi \cdot g_N da = \int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \kappa \nabla u dx. \quad (6.3)$$

6.2 Theoretische Lösbarkeit

Wir werden uns in diesem Abschnitt mit der Lösbarkeit des hier behandelten Modellproblems in seiner schwachen Formulierung (6.3) beschäftigen und dabei die wichtigsten Resultate zusammentragen. Die Theorie hinter der Lösbarkeit allgemeiner partieller Differentialgleichungen, deren Differentialoperatoren elliptisch sind, findet sich in vielen Standardwerken wie beispielsweise dem Werk von Hackbusch [26].

Wir betrachten das Modellproblem (6.3) und definieren zunächst aus der schwachen Formulierung die Abbildungen $l: V \rightarrow \mathbb{R}$ und $b: V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$\begin{aligned} l(v) &= \int_{\Omega} v \cdot g_N da, \quad \text{für } \phi \in V \\ b(u, v) &= \int_{\Omega} \kappa \nabla u \cdot \nabla v dx. \end{aligned}$$

Die schwache Formulierung entspricht dann der Gleichung

$$b(u, v) = l(v) \quad \forall v \in V. \quad (6.4)$$

Die eindeutige Lösbarkeit dieser Gleichung wird mithilfe des Satzes von Lax-Milgram bewiesen, zuvor benötigen wir aber den Darstellungssatz von Fréchet-Riesz

Satz 6.1 (Darstellungssatz von Fréchet-Riesz): *Es sei V ein Hilbertraum mit Skalarprodukt (\cdot, \cdot) und V' der Dualraum von V . Die Abbildung*

$$\Phi: V \rightarrow V', \quad \Phi(y) = (\cdot, y)$$

ist bijektiv, isometrisch und konjugiert linear. Das heißt zu $x' \in V'$ existiert genau ein $y \in V$ mit

$$x'(x) = (x, y) \quad \forall x \in V$$

und $\|x'\| = \|x\|$.

6 SCHWACHE FORMULIERUNG UND LÖSBARKEIT DES DETERMINISTISCHEN POTENTIALSTRÖMUNGSPROBLEMS

Für einen Beweis sei an dieser Stelle auf [9] verwiesen. Mithilfe dieses Darstellungssatzes, kann das folgende Resultat aus [9] gezeigt werden.

Satz 6.2: Sei V ein Hilbertraum mit Skalarprodukt (\cdot, \cdot) und $b: V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetige, bilineare und V -elliptische Form, das heißt, es existieren Konstanten $\alpha, \beta > 0$, sodass

$$b(u, v) \leq \beta \|u\| \|v\| \quad \forall u, v \in V,$$

$$b(u, u) \geq \alpha \|u\|^2 \quad \forall u \in V.$$

Dann existiert genau ein stetiger Operator $T: V \rightarrow V$ mit

$$b(x, y) = (Tx, y) \quad \forall x, y \in V.$$

Beweis. Nach dem Darstellungssatz von Fréchet-Riesz ist $\Phi: V \rightarrow V'$ definiert durch $\Phi(x) = (\cdot, x)$ bijektiv, isometrisch und konjugiert-linear. Sei $x \in V$. Da b stetig ist, liegt nach Voraussetzung die Abbildung $\bar{b}_x = \overline{b(x, \cdot)}$ in V' . Wir definieren die Abbildung

$$T: V \rightarrow V, \quad Tx = \Phi^{-1}(\bar{b}_x).$$

Aus der Sesquilinearität von b folgt, dass $\Psi: V \rightarrow V'$, $x \mapsto \bar{b}_x$ konjugiert linear ist. Also ist $T = \Phi^{-1} \circ \Psi$ als Komposition konjugiert-linearer Abbildungen linear. Aus den Definitionen erhalten wir für $x, y \in V$

$$(y, Tx) = (\Phi(Tx))(y) = (\Psi(x))(y) = \bar{b}_x(y) = \overline{b(x, y)}$$

und damit durch komplexe Konjugation

$$b(x, y) = (Tx, y) \quad \text{für alle } x, y \in V. \tag{6.5}$$

Zu zeigen ist noch die Stetigkeit von T . Aus den Voraussetzungen an b und (6.5) folgt

$$\|Tx\|^2 = |(Tx, Tx)| = |b(x, Tx)| \leq \beta \|x\| \|Tx\| \quad \text{für alle } x \in V.$$

Dies impliziert

$$\|Tx\| \leq \beta \|x\| \quad \text{für alle } x \in V$$

und damit die Stetigkeit von T . Es verbleibt die Eindeutigkeit von T nachzuweisen: Sei $S \in L(V)$ ein weiterer Operator, der (6.5) (mit S anstelle von T) erfüllt. Sei $x \in V$. Dann gilt

$$(Tx - Sx, y) = (Tx, y) - (Sx, y) = b(x, y) - b(x, y) = 0 \quad \text{für alle } y \in V,$$

das heißt, $Tx - Sx \in V^\perp = \{0\}$, also $Tx = Sx$. Da $x \in V$ beliebig gewählt war, folgt wie gewünscht $S = T$. \square

Darauf aufbauend folgt der Satz von Lax-Milgram. (Anmerkung: In der Literatur wird teilweise auch Satz 6.2 als Satz von Lax-Milgram bezeichnet.)

6 SCHWACHE FORMULIERUNG UND LÖSBARKEIT DES DETERMINISTISCHEN POTENTIALSTRÖMUNGSPROBLEMS

Satz 6.3 (Satz von Lax-Milgram): *Sei V ein Hilbertraum und $b: V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetige, bilineare und V -elliptische Form, das heißt, es existieren Konstanten $\alpha, \beta > 0$, sodass*

$$\begin{aligned} b(u, v) &\leq \beta \|u\| \|v\| \quad \forall u, v \in V, \\ b(u, u) &\geq \alpha \|u\|^2 \quad \forall u \in V. \end{aligned}$$

Dann existiert für jedes $l \in V'$ (den Dualraum von V) genau ein $u \in V$, sodass

$$b(u, v) = l(v) \quad \forall v \in V.$$

Wir betrachten also nun die Abbildung $b: V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ und wollen die eindeutige Lösbarkeit der schwachen Formulierung mithilfe des Satzes von Lax-Milgram zeigen. Hierzu benötigen wir zunächst die Poincaré-Ungleichung.

Satz 6.4 (Poincaré-Ungleichung): *Definiere die Seminorm*

$$|f|_{H^k(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} \sum_{|\alpha|=k} |D^\alpha f|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}.$$

In Abhängigkeit von Ω existiert dann eine Konstante $C_P < \infty$, so dass

$$\|f\|_{L^2(\Omega)} \leq C_P |f|_{H^k(\Omega)}$$

Für einen Beweis sei auf Theorem 2.10 in [27] verwiesen. Damit lässt sich dann das folgende Korollar 2.11 aus der gleichen Quelle zeigen.

Korollar 6.5: *Ist Ω beschränkt so sind $\|\cdot\|_{H^k(\Omega)}$ und $|\cdot|_{H^k(\Omega)}$ äquivalent auf $H_0^k(\Omega)$. Es existieren also Konstanten $c_1, c_2 > 0$ so, dass*

$$c_1 |f|_{H^k(\Omega)} \leq \|f\|_{H^k(\Omega)} \leq c_2 |f|_{H^k(\Omega)}, \quad \forall f \in H_0^k(\Omega).$$

Mit diesem Resultat kann der folgende Satz bewiesen werden.

Satz 6.6: *Sei $V = \{\phi \in H_0^1(\Omega) \mid \phi|_{\Gamma_D} = 0\}$ und $b: V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ definiert durch*

$$b(u, v) = \int_{\Omega} \kappa \nabla u \cdot \nabla v dx.$$

Sei ferner $0 < \kappa_{min} \leq \kappa \leq \kappa_{max} < \infty$. Dann ist b eine stetige, bilineare und V -elliptische Form.

Beweis. Wir zeigen zunächst Linearität im ersten Argument. Es gilt

$$\begin{aligned} b(u + w, v) &= \int_{\Omega} \kappa \nabla(u + w) \cdot \nabla v dx & b(\lambda u, v) &= \int_{\Omega} \kappa \nabla(\lambda u) \cdot \nabla v dx \\ &= \int_{\Omega} \kappa(\nabla u + \nabla w) \cdot \nabla v dx & &= \int_{\Omega} \kappa \lambda \nabla u \cdot \nabla v dx \\ &= \int_{\Omega} \kappa \nabla u \cdot \nabla v dx + \int_{\Omega} \kappa \nabla w \cdot \nabla v dx & &= \lambda \int_{\Omega} \kappa \nabla u \cdot \nabla v dx \\ &= b(u, v) + b(w, v) & &= \lambda b(u, v) \end{aligned}$$

6 SCHWACHE FORMULIERUNG UND LÖSBARKEIT DES DETERMINISTISCHEN POTENTIALSTRÖMUNGSPROBLEMS

Vollständig analog zeigt man die Linearität im zweiten Argument. Also ist b bilinear. Für die Stetigkeit von b müssen wir eine Konstante $\beta > 0$ finden, sodass

$$b(u, v) \leq \beta \|u\|_{H_0^1(\Omega)} \|v\|_{H_0^1(\Omega)} \quad \forall u, v \in V.$$

Zunächst verwenden wir die Cauchy-Schwarz-Ungleichung im $L^2(\Omega)$ -Raum

$$b(u, v) = \int_{\Omega} \kappa \nabla u \cdot \nabla v \, dx \leq \int_{\Omega} |\kappa \nabla u \cdot \nabla v| \, dx \leq \int_{\Omega} |\kappa| |\nabla u| |\nabla v| \, dx.$$

Nach Annahme ist κ beschränkt. Damit gilt folgt

$$b(u, v) \leq \kappa_{\max} \int_{\Omega} |\nabla u| |\nabla v| \, dx. \quad (6.6)$$

Wiederum nach der Cauchy-Schwarz-Ungleichung:

$$\int_{\Omega} |\nabla u| |\nabla v| \, dx \leq \left(\int_{\Omega} |\nabla u|^2 \, dx \right)^{1/2} \left(\int_{\Omega} |\nabla v|^2 \, dx \right)^{1/2} = \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)}. \quad (6.7)$$

Mit dem Zusammenhang

$$\|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} = \int_{\Omega} \left| \sum_{j=1}^d \partial_j u \right|^2 \, dx = \|u\|_{H^1(\Omega)}$$

folgt dann nach Korollar 6.5

$$\|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} \leq C_1 \|u\|_{H_0^1(\Omega)}, \quad \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)} \leq C_2 \|v\|_{H_0^1(\Omega)}.$$

Zusammen mit (6.7) folgt dann durch Einsetzen in (6.6)

$$b(u, v) \leq \kappa_{\max} \|u\|_{H_0^1(\Omega)} \|v\|_{H_0^1(\Omega)}.$$

Also ist b stetig.

Für die V -Elliptizität benötigen wir eine Konstante $\alpha > 0$, sodass

$$b(u, u) \geq \alpha \|u\|_{H_0^1(\Omega)}^2 \quad \forall u \in V.$$

Es gilt

$$b(u, u) = \int_{\Omega} \kappa |\nabla u|^2 \, dx.$$

Nach Annahme ist κ nach unten durch eine positive Konstante beschränkt. Damit folgt

$$b(u, u) = \int_{\Omega} \kappa |\nabla u|^2 \, dx \geq \kappa_{\min} \int_{\Omega} |\nabla u|^2 \, dx = \kappa_{\min} \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Mit Korollar 6.5 folgt dann

$$\|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq M \|u\|_{H_0^1(\Omega)}^2.$$

Also ist b V -elliptisch mit der Konstante $\alpha = \kappa_{\min} M$. □

Zusammen mit dem Satz von Lax-Milgram folgt die eindeutige Lösbarkeit der schwachen Formulierung des Modellproblems.

7 Numerische Lösung des deterministischen Potentialströmungsproblems

Nachdem wir im vorherigen Abschnitt die theoretische Lösbarkeit der schwachen Formulierung (6.3) mithilfe des Satzes von Lax-Milgram bewiesen haben, werden wir jetzt eine numerische Lösung des Modellproblems herleiten. Die theoretischen Beweise der Lösbarkeit liefern im Allgemeinen keine konkrete Lösung, sodass die Notwendigkeit von numerischen Algorithmen zur Approximation der Lösung gegeben ist.

In diesem Abschnitt wird zunächst das Ritz-Galerkin-Verfahren, benannt nach dem Sowjetischen Ingenieur und Mathematiker Boris Grigorjewitsch Galjorkin (Boris Galerkin) und dem Schweizer Physiker Walther Heinrich Wilhelm Ritz, vorgestellt. Anschließend folgt ein Abschnitt über die Finite-Elemente-Methode.

Wir werden uns im Folgenden unter anderem auf die Vorlesungen *Numerische Methoden für Differentialgleichungen* [28] und *Einführung in das Wissenschaftliche Rechnen* [24] sowie die im Rahmen dieser Vorlesung entstandenen Praktikumsberichte im Sommersemester 2024 am Karlsruher Institut für Technologie stützen.

7.1 Ritz-Galerkin-Verfahren

In der schwachen Formulierung des Modellproblems (6.3) beziehungsweise der Formulierung $b(u, v) = l(v)$ in (6.4) wird eine Lösung in $H^1(\Omega)$ gesucht. Da die numerische Suche nach einer Lösung in einem Funktionenraum unendlicher Dimension aus offensichtlichen Gründen nicht umsetzbar ist, wählt das Ritz-Galerkin-Verfahren einen endlichen Teilraum von $V = H_0^1(\Omega)$ aus um dort eine Lösung zu konstruieren. Sei also $V_h \subset V$ ein Teilraum der Dimension $N \in \mathbb{N}$ mit einer Basis

$$B_{V_h} = \{\varphi_1, \dots, \varphi_N\} \quad \text{sodass} \quad \varphi_i \in V \quad \forall i \in \{1, \dots, N\}.$$

Gesucht ist eine Lösung $u_h \in V_h$, welche als Linearkombination gemäß

$$u_h = \sum_{j=1}^N c_j \varphi_j$$

dargestellt werden kann. Die Approximation u_h der Lösung muss dann die Variationsgleichung

$$b(u_h, v) = l(v) \quad \forall v \in V_h \tag{7.1}$$

erfüllen. Satz 7.2 aus [28] besagt, dass die Variationsgleichung eine eindeutige Lösung besitzt, sofern die Bilinearform elliptisch ist.

Satz 7.1: *Sei $b(\cdot, \cdot)$ elliptisch. Dann ist $A_h = (b(\varphi_n, \varphi_k))_{n,k=1,\dots,N} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ regulär und es existiert eine eindeutige Lösung $u_h \in V_h$ der Variationsgleichung (7.1) für alle $v \in V_h$. Mit $f = (l(\varphi_n))_{n=1,\dots,N} \in \mathbb{R}^N$ gilt dann für die Lösung*

$$u_h = \sum_{n=1}^N A_h^{-1} f \varphi_n.$$

7 NUMERISCHE LÖSUNG DES DETERMINISTISCHEN POTENTIALSTRÖMUNGSPROBLEMS

Beweis. Für

$$v_h = \sum_{n=1}^N v_n \varphi_n \in V_h$$

gilt

$$c\|v_h\|_{l^2}^2 \leq b(v_h, v_h) = b\left(\sum_{n=1}^N v_n \varphi_n, \sum_{k=1}^N v_k \varphi_k\right) = \sum_{n,k=1}^N v_n v_k a(\varphi_n, \varphi_k) = v^\top A_h v.$$

Und damit folgt $v^\top A_h v > 0$ für $v \neq 0_N$. Also ist A_h positiv definit und folglich regulär. Somit ist $u = A_h^{-1}f$ wohldefiniert. Da u die Gleichung $A_h u = f$ löst, löst es auch die Variationsgleichung, denn mit

$$\sum_{n=1}^N b(\varphi_n, \varphi_k) u_n = (A_h u)_k = (f)_k = l(\varphi_k) \quad \text{für } k = 1, \dots, N$$

folgt

$$b(u_h, v_h) = \sum_{n,k=1}^N u_n v_k b(\varphi_n, \varphi_k) = \sum_{k=1}^N v_k l(\varphi_k) = l(v_h),$$

also die Variationsgleichung. □

Wir wissen also, dass nach dem Satz von Lax-Milgram die Gleichung (6.4) eine theoretische Lösung in V besitzt und Satz 7.1 liefert nun die Existenz der Ritz-Galerkin-Approximation in einem endlichdimensionalen Teilraum $V_h \subset V$. Die Güte dieser Approximation wird in Abschnitt 7.3 betrachtet.

Wir wenden nun diesen Ansatz auf unser Modellproblem in der schwachen Formulierung (6.3) an. Gesucht ist eine Lösung $u_h \in V_h$, welche sich als Linearkombination gemäß

$$u_h = \sum_{j=1}^N c_j \varphi_j$$

darstellen lässt. Eingesetzt in die schwache Formulierung ergibt sich

$$\int_{\Gamma_N} \varphi_i \cdot g_N \, da = \int_{\Omega} \nabla \varphi_i \cdot \kappa \nabla \sum_{j=1}^N c_j \varphi_j \, dx \quad \forall \varphi_i \in V_h.$$

Eine Umformung liefert dann

$$\int_{\Gamma_N} \varphi_i \cdot g_N \, da = \sum_{j=1}^N c_j \int_{\Omega} \nabla \varphi_i \cdot \kappa \nabla \varphi_j \, dx.$$

7 NUMERISCHE LÖSUNG DES DETERMINISTISCHEN POTENTIALSTRÖMUNGSPROBLEMS

Hieraus definiert sich die sogenannte Steifigkeitsmatrix $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ für $i, j \in \{1, \dots, N\}$ durch

$$A[i, j] = \int_{\Omega} \nabla \varphi_i \cdot \kappa \nabla \varphi_j \, dx$$

und der Lastvektor $b \in \mathbb{R}^N$ durch

$$b[i] = \int_{\Gamma_N} \varphi_i \cdot g_N \, da \quad \text{für } i \in \{1, \dots, N\}.$$

Zusammen mit $c = (c_1, \dots, c_N)^T \in \mathbb{R}^N$ ergibt sich dann das zu lösende Gleichungssystem

$$A \cdot c = b.$$

7.2 Finite-Elemente-Methode mit Lagrange Elementen erster Ordnung

Zur numerischen Realisierung der Galerkin-Methode müssen der endlich dimensionale Lösungsraum sowie der Testraum gewählt werden. Hierzu verwenden wir die Finite-Elemente-Methode (kurz FEM). Finite-Elemente-Methoden haben sich seit ihrer erstmaligen Entwicklung in der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts durch Namen wie Ray William Clough und Richard Courant zu einem der wichtigsten mathematischen Werkzeuge im 21. Jahrhundert entwickelt. Die Grundidee besteht darin, physikalische Systeme oder räumliche Strukturen durch eine endliche Anzahl von Teilbereichen, sogenannten Finite Elementen, zu zerlegen. Diese Elemente sind einfach genug, um sie mit mathematischen Gleichungen zu beschreiben, deren Lösung dann eine Annäherung an die Lösung des gesamten Problems liefert.

Als Standardwerk auf dem Gebiet der Finiten-Elemente-Methode kann das Werk von Brenner und Scott [29] betrachtet werden. Eine historisch genaue Einordnung findet sich in [26] ab Seite 161.

Wir betrachten in diesem Abschnitt das Modellproblem (5.1) und wollen mithilfe von Finite-Elemente-Methoden eine numerische Lösung herleiten. Wir werden uns an der Vorlesung [24], sowie den im Rahmen dieser angefertigten Praktikumsberichte im Sommersemester 2024 und den Ausarbeitungen aus [27] orientieren.

In der Literatur wird häufig mit der formalen Definition von Finiten Elementen gearbeitet. Im Standardwerk zu Finiten Elementen von Brenner und Scott [29] findet sich beispielsweise folgenden Definition:

Definition 7.2 (Finites Element): Sei

- (i) $K \subseteq \mathbb{R}^n$ eine beschränkte abgeschlossene Menge mit nichtleerem Inneren und stückweise glattem Rand (das Elementgebiet),
- (ii) \mathcal{P} ein endlich-dimensionaler Raum von Funktionen auf K (der Raum der Formfunktionen) und

7 NUMERISCHE LÖSUNG DES DETERMINISTISCHEN POTENTIALSTRÖMUNGSPROBLEMS

(iii) $\mathcal{N} = \{N_1, N_2, \dots, N_k\}$ eine Basis für \mathcal{P} (die Menge der Knotenvariablen).

Dann wird $(K, \mathcal{P}, \mathcal{N})$ ein Finites Element genannt.

Diese formale Definition ist für die theoretische Betrachtung von Finiten Elementen wichtig, kann jedoch im weiteren Verlauf dieser Arbeit in den Hintergrund gerückt werden. Im Folgenden soll die Technik der Finiten Elemente am Beispiel eines sogenannten Polygongebiets gemäß der folgenden Definition hergeleitet werden.

Definition 7.3 (Polygongebiet): Seien $n, d \in \mathbb{N}$. Ein Polygongebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ist ein beschränktes und zusammenhängendes Gebiet mit einer abzählbaren Mengen an Ecken $\mathcal{V} = \{v_1, \dots, v_n\} \subset \partial\Omega$ so, dass der Rand $\partial\Omega$ des Gebiets sich durch eine Polygonzug darstellen lässt.

Sei im Folgenden $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ein solches Polygongebiet und \mathcal{K} bezeichnet eine Menge von Dreiecken oder Vierecken aus Ω . Zerlege dadurch das Gebiet gemäß

$$\overline{\Omega} = \bigcup_{K \in \mathcal{K}} \overline{K}.$$

Jedes $K \in \mathcal{K}$ kann dabei durch die Menge an Eckpunkten beschrieben werden. In unserem konkreten Fall gilt für $\overline{K} = \text{conv}(\mathcal{V}_K)$ mit

$$\mathcal{V}_K = \begin{cases} \{z_{K,0}, z_{K,1}, z_{K,2}\} \subset \mathbb{R}^2 & \text{Dreieck} \\ \{z_{K,0}, z_{K,1}, z_{K,2}, z_{K,3}\} \subset \mathbb{R}^2 & \text{Viereck} \end{cases}.$$

Diese Definitionen geben uns die Menge aller $N \in \mathbb{N}$ Eckpunkte gemäß

$$\mathcal{V}_{\mathcal{K}} = \bigcup_{K \in \mathcal{K}} \mathcal{V}_K = \{z_1, \dots, z_N\}.$$

Wir fordern, dass die gewählte Zerlegung des Gebietes Ω in Dreiecke oder Vierecke zulässig ist.

Definition 7.4 (Zulässige Zerlegung): Eine Zerlegung \mathcal{K} heißt zulässig, wenn für alle $K, K' \in \mathcal{K}$ gilt

$$\text{conv}(\mathcal{V}_K \cap \mathcal{V}_{K'}) = \text{conv}(\mathcal{V}_K) \cap \text{conv}(\mathcal{V}_{K'}).$$

Demnach soll für eine Zerlegung gelten, dass der Durchschnitt zweier verschiedener Zellen leer, eine Ecke oder eine Kante ist. Abbildung 9 zeigt hierfür eine beispielhafte Zerlegung eines Quadrates in Dreiecke. Zur Konstruktion der Zerlegung in Dreiecke wird ein Referenzdreieck gemäß der folgenden Definition benötigt.

Definition 7.5 (Referenzdreieck): Auf dem Einheitsquadrat wird das Referenzdreieck durch

$$\hat{K} = \text{conv} \left\{ \hat{\nu}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \hat{\nu}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \hat{\nu}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

definiert. Zusätzlich definieren wir den Funktionenraum $\hat{V} = \text{span}\{\hat{\varphi}_1, \hat{\varphi}_2, \hat{\varphi}_3\}$. Hierbei gilt

$$\hat{\varphi}_1 \left(\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \right) = 1 - x_1 - x_2, \quad \hat{\varphi}_2 \left(\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \right) = x_1, \quad \hat{\varphi}_3 \left(\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \right) = x_2$$

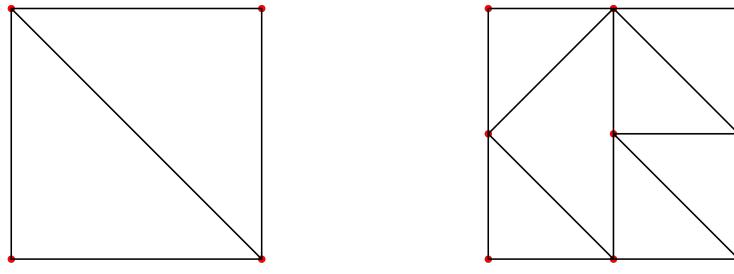


Abbildung 9: Zulässige (links) und nicht zulässige (rechts) Finite-Elemente-Zerlegung in Dreiecke eines beliebigen Gebietes.

Nach Konstruktion der Funktionen im Referenzdreieck gilt dann offensichtlich

$$\hat{\varphi}_i(\hat{\nu}_j) = \delta_{ij}, \quad \text{für } i, j = 1, 2, 3.$$

Zur Konstruktion der einzelnen Finiten Elementen aus dem Referenzdreieck benötigen wir noch eine lineare Transformation gegeben durch

$$\Phi_K: \hat{K} \rightarrow K, \quad \Phi_K(\hat{\nu}) = A\hat{\nu} + c.$$

Sei \mathcal{K} eine Zerlegung von Ω mit der maximalen Kantenlänge $h = \max_{K \in \mathcal{K}} \text{diam}(K)$. Setze

$$V_K = \text{span}\{\varphi_i \circ \Phi_K^{-1} \mid \varphi_i \in \hat{V}\}$$

und definiere

$$V_h(\Omega, \mathcal{K}) = \{\varphi_h \in C(\bar{\Omega}) \mid \varphi_h|_K \in V_K, \forall K \in \mathcal{K}\}.$$

Unter Beachtung der Randbedingungen des zu lösenden Problems definieren wir ferner

$$V_h(u_D) = \{\varphi_h \in V_h \mid \varphi_h(z) = u_D(z), \forall z \in \mathcal{V}_D \cap \Gamma_D\}.$$

Nach [24] und mithilfe der in (6.3) hergeleiteten schwachen Formulierung lässt sich die so genannten Finite-Elemente-Formulierung unseres Modellproblems herleiten. Bestimme $u_h \in V_h(u_D)$ so, dass

$$\sum_{K \in \mathcal{K}} \int_K \kappa \nabla u_h \cdot \nabla \varphi_h \, dx = \int_{\Gamma_N} g_N \varphi_h \, da \quad \forall \varphi_h \in V_h(0).$$

Betrachtet man die Knotenbasis $\{\hat{\varphi}_1, \dots, \hat{\varphi}_N\}$ von V_h , so lässt sich eine äquivalente algebraische Formulierung herleiten. Setze dazu $I = \{1, \dots, N\}$ die gesamte Indexmenge und $I_D = \{h \in I \mid z_h \in \Gamma_D\}$ die Indexmenge der Knoten, welche auf dem Dirichletrand Γ_D liegen. Bestimme dann $\underline{u} \in \mathbb{R}^N$ mit $u_h = \sum \underline{u}_n \hat{\varphi}_n \in V_h(u_D)$ und

$$\sum_{n=1}^N \underline{u}_n \sum_{K \in \mathcal{K}} \int_K \kappa \nabla \hat{\varphi}_n \cdot \nabla \hat{\varphi}_k \, dx = \int_{\Gamma_N} g_N \hat{\varphi}_k \, da, \quad \forall k \in I \setminus I_D.$$

7 NUMERISCHE LÖSUNG DES DETERMINISTISCHEN POTENTIALSTRÖMUNGSPROBLEMS

Hieraus definiert sich die Steifigkeitsmatrix $\underline{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ sowie der dazugehörige Lastvektor $\underline{b} \in \mathbb{R}^N$ durch

$$\underline{A}[k, n] = \begin{cases} \sum_{K \in \mathcal{K}} \int_K \kappa \nabla \hat{\varphi}_n \cdot \nabla \hat{\varphi}_k \, dx, & k \notin I_D \\ 1, & n = k \in I_D \\ 0, & n \neq k \in I_D \end{cases}$$

sowie

$$\underline{b}[k] = \begin{cases} \int_{\Gamma_N} g_N \hat{\varphi}_k \, da, & k \notin I_D \\ u_D(z_k), & k \in I_D. \end{cases}$$

Final ergibt sich damit das zu lösende Gleichungssystem

$$\underline{A} \underline{u} = \underline{b}.$$

7.2.1 Lagrange Elemente höherer Ordnung

Der im vorherigen Abschnitt vorgestellte Ansatz verwendet auf den einzelnen Elementen der Zerlegung lineare Basisfunktionen (Polynome vom Grad 1) zur Interpolation auf den Eckpunkten. Um die numerische Genauigkeit zu erhöhen, kann die Verwendung von Polynomen höherer Ordnung sinnvoll sein. Höhere Ordnungselemente verwenden polynomiale Ansatzfunktionen, die in der Lage sind, die Lösung innerhalb eines Elements besser zu approximieren. Dies führt zu einer höheren Genauigkeit der Lösung. Allerdings muss abgewogen werden, ob der erhöhte Rechenaufwand in der konkreten numerischen Simulation benötigt wird.

Der nachfolgende Abschnitt ist eine Wiedergabe aus [29] und stellt die Beispiele 3.2.3 und 3.2.4 aus *Chapter 3. The Construction of a Finite Element Space* kurz vor.

Lagrange Elemente 2. Ordnung: Wir betrachten den Polynomraum \mathcal{P}_2 aller Polynome vom Grad kleiner gleich 2 sowie ein beliebiges Dreieck K mit den Eckpunkten z_1, z_2, z_3 . Damit die Interpolationspolynome auf den einzelnen Elementen eindeutig bestimmt sind, benötigen $N = 6$ verschiedene Knotenpunkte in K . Sei also die Menge an Knotenpunkten $\mathcal{N} = \{N_1, N_2, \dots, N_6\}$ definiert durch

$$N_i = \begin{cases} z_i, & \text{wenn } i = 1, 2, 3; \\ m_i = \text{Mittelpunkt zwischen } z_{i-3} \text{ und } z_{i-2} & \text{für } i = 4, 5, 6. \end{cases}$$

Durch eine kurze Rechnung (vergleiche [29]) lässt sich zeigen, dass die Polynome auf jedem Element eindeutig bestimmt sind.

Lagrange Elemente n -ter Ordnung: Allgemein lässt sich diese Konstruktion für $n \in \mathbb{N}$ auch auf Polynome n -ter Ordnung übertragen. Man betrachtete den Polynomraum \mathcal{P}_n von Polynomen vom Grad kleiner gleich n und wählt Knotenpunkte $\mathcal{N}_n = \{N_i \mid i = 1, \dots, \frac{1}{2}(k+1)(k+2)\}$. Dabei sind 3 Knotenpunkte an den Ecken des Dreiecks festgelegt, $3(k-1)$ auf den Kanten und $\frac{1}{2}(k-1)(k-1)$ im Inneren der Dreiecke zu wählen. Erneut zeigt dann eine kurze Rechnung, dass Polynome vom Grad $\leq n$ durch die Knotenpunkte in \mathcal{N}_n eindeutig bestimmt sind.

7.3 Das Lemma von Céa

Durch das Galerkin-Verfahren beziehungsweise der Finite-Elemente-Methode stehen uns nun Algorithmen zur Verfügung, welche eine numerische Approximation der Lösung des Modellproblems (5.1) liefern. Um die Güte dieser Approximation abschätzen zu können, wird das Lemma von Céa verwendet. Dieses Resultat stammt ursprünglich von Jean Céa und stammt aus seiner Dissertation im Jahre 1964. Heute findet es sich in fast sämtlichen Werken zu Finiten-Elementen (vergleiche beispielsweise das Werk von Brenner & Scott in [29]) oder der numerischen Lösungstheorie partieller Differentialgleichungen, beispielsweise [26].

Als Ausgangspunkt dient wieder die schwache Formulierung (6.3) und wir suchen eine Lösung der Operatorgleichung (6.4), also der Gleichung $b(u, v) = l(v)$ für alle $v \in V$, wobei $(V, (\cdot, \cdot))$ ein Hilbertraum ist. Zur numerischen Approximation ziehen wir uns auf einen abgeschlossenen Unterraum $V_h \subset V$ zurück. Nach dem Beweis von Satz 6.6 wissen wir, dass $b: V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ für $V = \{\phi \in H_0^1(\Omega) \mid \phi|_{\Gamma_D} = 0\}$ eine stetige, bilineare und V-elliptische Form ist. Wir wissen also, dass eine Lösung u der Operatorgleichung existiert und berechnen eine numerische Approximation u_{V_h} im Unterraum $V_h \subset V$. Das Lemma von Céa liefert dann das folgende Resultat.

Lemma 7.6 (Lemma von Céa): *Sei $(V, (\cdot, \cdot))$ ein Hilbertraum, $V_h \subset V$ ein abgeschlossener Unterraum von V und $b: V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetige, bilineare und V-elliptische Form. Ist $u \in V$ die Lösung der Gleichung $b(u, v) = l(v)$ für alle $v \in V$ und $u_h \in V_h$ mit $b(u_h, v) = l(v)$ für alle $v \in V_h$ dann gilt die Abschätzung*

$$\|u - u_h\|_V \leq \frac{\beta}{\alpha} \min_{v \in V_h} \|u - v\|_V$$

wobei β und α die Konstanten aus Satz 6.3 sind.

Der Beweis folgt Brenner & Scott in [29]).

Beweis. Da nach Voraussetzung $b(u, v) = l(v)$ für alle $v \in V$ und $u_h \in V_h$ mit $b(u_h, v) = l(v) \quad \forall v \in V_h$ folgt durch Subtraktion

$$b(u - u_h, v) = 0 \quad \forall v \in V_h.$$

Damit folgt nun für alle $v \in V_h$,

$$\begin{aligned} \alpha \|u - u_h\|_V^2 &\leq b(u - u_h, u - u_h) && \text{(V-Eliptizität)} \\ &= b(u - u_h, u - v) + b(u - u_h, v - u_h) \\ &= b(u - u_h, u - v) && \text{(da } v - u_h \in V_h) \\ &\leq \beta \|u - u_h\|_V \|u - v\|_V. && \text{(Stetigkeit)} \end{aligned}$$

Also folgt insgesamt

$$\|u - u_h\|_V \leq \frac{\beta}{\alpha} \|u - v\|_V \quad \forall v \in V_h.$$

7 NUMERISCHE LÖSUNG DES DETERMINISTISCHEN POTENTIALSTRÖMUNGSPROBLEMS

Und damit

$$\|u - u_h\|_V \leq \frac{\beta}{\alpha} \inf_{v \in V_h} \|u - v\|_V = \frac{\beta}{\alpha} \min_{v \in V_h} \|u - v\|_V$$

da V_h nach Annahme abgeschlossen ist. \square

Das Lemma von Céa liefert die Optimalität der Annäherung der exakten Lösung durch die Lösung im Unterraum bis auf einen konstanten Faktor, in Abhängigkeit der Eigenschaften der Bilinearform. Die Qualität der numerischen Lösung hängt also im Wesentlichen davon ab, wie gut der gewählte Unterraum V_h den gesamten Raum V approximieren kann. Je besser der Unterraum ist, desto genauer ist die numerische Lösung.

Weiterhin ermöglicht das Lemma von Céa die Abschätzung des Fehlers zwischen der exakten Lösung u und der approximativen Lösung u_h durch einfachere Berechnungen im Raum V_h .

8 Uncertainty Quantification mit Stochastic Collocation

Eine Grundannahme der Probleme (5.1) und (5.2) war, dass die Permeabilität κ deterministisch bestimmt ist. In der Realität sind verschiedene Parameter von mathematischen Modellen nicht exakt bekannt. Vielmehr sind sie oft mit Unsicherheiten behaftet, die aus verschiedenen Quellen wie Messungenauigkeiten, Modellvereinfachungen oder Variabilität in den Materialien resultieren können. Daher ist die Annahme einer deterministischen Bestimmung dieser Parameter in praktischen Anwendungen oft nicht gerechtfertigt und eine Charakterisierung der Parameter mit Unsicherheiten notwendig.

Das Behandeln von mathematischen Problemstellungen unter Unsicherheit wird als Uncertainty Quantification (UQ) bezeichnet und ist ein noch recht junges Teilgebiet der Mathematik. Eine historische Abhandlung über dieses Gebiet findet sich beispielsweise in [30]: *Erst im frühen 19. Jahrhundert begannen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, sich von der damals deterministischen Sichtweise, wie sie in der Newton'schen Mechanik vorherrschte, zu lösen. Sie begannen, Unsicherheit nicht mehr als unerwünschten Zustand zu betrachten, den es zu vermeiden galt, sondern entwickelten die ersten Modelle, die Unsicherheiten berücksichtigen.* (Übersetzt aus [30], Seite 2 (beziehungsweise 670), Abschnitt '3. Brief history of uncertainty assessment and quantification')

Wir werden im folgenden Abschnitt ein probabilistisches Modellproblem herleiten, bei dem die Permeabilität durch ein Zufallsfeld stochastisch modelliert wird. Um diese Unsicherheiten in der Permeabilität quantifizieren zu können, werden wir Stochastic Collocation für die Uncertainty Quantification (UQ) verwenden.

Die Grundidee der Stochastic Collocation ist dabei, die Unsicherheiten im Modellproblem an einer diskreten Menge von Stützstellen mithilfe von Interpolationsfunktionen zu interpolieren. An jedem dieser sogenannten Collocation Points wird dann das deterministische Problem gelöst, und die lokalen Lösungen schließlich zu einer globalen zusammengefasst.

Im Folgenden wird, basierend auf Abschnitt *Stochastic Collocation Methods: A Survey* von Xiu D. aus [31], eine kurze Einführung in die Stochastic Collocation durch Interpolation gegeben.

Notation: Im Folgenden beschreibt $(\Xi, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ stets einen Wahrscheinlichkeitsraum.

8.1 Stochastic Collocation

In unserem vorherigen Modellbeispiel war die Permeabilität κ noch als deterministische Funktion modelliert. Stattdessen betrachten wir einen stochastischen Wertebereich Ξ und für $\Omega = (0, 1)^2$ modellieren wir κ stochastisch durch

$$\kappa: \Xi \times \Omega \sim \log(N(\mu, \sigma^2)).$$

Dies bedeutet, dass die Permeabilität einer logarithmischen Normalverteilung mit Parametern μ und σ^2 folgt. Die genauen Parameter können zunächst allgemein gehalten

werden. Eine konkrete Modellierung findet sich in einem nachfolgenden Abschnitt. Wir betrachten damit das stochastische Problem welches sich aus (5.1) wie folgt bestimmt

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\kappa(\xi, x)\nabla u(\xi, x)) = 0 & \text{für } (\xi, x) \in \Xi \times \Omega \\ u(\xi, x) = u_D & \text{auf } \Gamma_D \\ \kappa(\xi, x)\nabla u(\xi, x) \cdot n = g_N & \text{auf } \Gamma_N. \end{cases} \quad (8.1)$$

Unter Hinzunahme der Unsicherheit in der Permeabilität ist man an der Abhängigkeit der Lösung vom Parameterraum Ξ interessiert, das heißt für festes $x = (x_1, x_2)^T \in \Omega$ am Verhalten der Funktion

$$u(\xi)_x = u(\xi, x) : \Xi \rightarrow \mathbb{R}$$

oder an einem globalen Verhalten in Form von Quantities of Interest. Wir betrachten das stochastische Problem (8.1) an einer diskreten Menge von Collocation Points gegeben durch

$$\Theta = \{\xi_j \mid j = 1, \dots, M\} \subseteq \Xi$$

wobei $M \in \mathbb{N}$. Damit ergibt sich das diskrete Problem für $j \in \{1, \dots, M\}$

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\kappa(\xi_j, x)\nabla u(\xi_j, x)) = 0 & \text{für } \xi_j \in \Theta, x \in \Omega \\ u(\xi_j, x) = u_D & \text{auf } \Gamma_D \\ \kappa(\xi_j, x)\nabla u(\xi_j, x) \cdot n = g_N & \text{auf } \Gamma_N. \end{cases} \quad (8.2)$$

Die Collocation Points können auf verschiedene Wege generiert werden. Während Monte-Carlo-Methoden die Punkte zufällig gemäß der Verteilung des Zufallsfeldes wählen, werden wir im weiteren Verlauf zunächst auf einem Tensorprodukt und später auf einem Dünngitter interpolieren und so eine numerische Approximation erhalten.

8.2 Stochastic Collocation via Interpolation

Wir betrachten einen Funktionenraum V mit endlicher Kardinalität $N \in \mathbb{N}$. Typischerweise verwendet man für V den Polynomraum aller Polynome bis zum Grad $n \in \mathbb{N}$ oder je nach Problemstellung unter Hinzunahme verschiedener Glattheits- oder Randbedingungen entsprechende Ansatzfunktionen.

Sei weiterhin $B = (b_1, \dots, b_N)$ eine Basis von V und setze

$$w(z) = \sum_{i=1}^N c_i b_i(z) \in V$$

als Linearkombination von Basisfunktionen mit Koeffizienten c_i . Interpoliert man eine Lösung u von (8.2) auf den Collocation Points in Abhängigkeit des Zufallparameters ξ , so ergibt sich die Bedingung

$$w(\xi_j) = u(\xi_j) \quad \forall j = 1, \dots, M.$$

Definiert man eine Matrix A durch

$$A = (a_{ij})_{1 \leq i \leq M, 1 \leq j \leq N} \quad a_{ij} = b_j(\xi_i),$$

eine rechte Seite f gemäß

$$f = (u(\xi_1), \dots, u(\xi_M))^T,$$

so ergibt sich das lineare Gleichungssystem

$$Ac = f$$

wobei

$$c = (c_1, \dots, c_N)^T$$

die Koeffizienten der Interpolation sind.

Dieser Ansatz wird in der Praxis jedoch nur sehr selten verwendet, da diese Interpolation zu numerischer Instabilität sowie schlechter Fehlerabschätzung führt. Alternativ kann eine Konstruktion über Lagrange-Polynome auf einem vollen Gitter erfolgen. Beide Ansätze haben aber den Nachteil, dass für die Interpolation in mehreren Dimensionen die entstehenden äquidistanten Gitter zu Instabilitäten führen, siehe dazu [31] auf Seite 703/704.

Da zusätzlich bei der Erweiterung bekannter eindimensionalen Interpolationsregeln auf mehrere Dimensionen der am Anfang dieser Arbeit erwähnte Fluch der Dimensionen auftritt, wird auch hier ein Dünngitter-Ansatz gewählt.

Sei $d \in \mathbb{N}$ die Dimension des Problems und $\Theta^k = \{\xi_j^{(k)} \mid j = 1, \dots, M^{(k)}\}$ für $k \in \{1, \dots, d\}$ Interpolationspunkte für jede Dimension. Seien ferner die Lagrange-Polynome zu Θ^k definiert durch

$$L_j(z) = \prod_{i=1, i \neq j}^{M^{(k)}} \frac{Z - \xi_i^{(k)}}{\xi_j^{(k)} - \xi_i^{(k)}}, \quad j = 1, \dots, M^{(k)}$$

Sei zur Lösung u und $k \in \{1, \dots, d\}$ der Lagrange-Interpolant gegeben durch

$$Q_{M^{(k)}}[u] = \sum_{j=1}^{M^{(k)}} u(\xi_j^{(k)}) L_j(\xi_j^{(k)}).$$

Anstelle des üblichen Tensorproduktes

$$Q_M = Q_{M^{(1)}} \otimes \cdots \otimes Q_{M^{(d)}}$$

zur Verallgemeinerung der eindimensionalen Interpolation verwenden wir die Interpolation nach Smolyak, sowie den entsprechenden Ausarbeitungen auf Seite 706 aus [31]. Dieser Ansatz verwendet einen Teilraum mit Level $l \geq d$ statt des vollen Tensorproduktes gemäß

$$Q_l = \sum_{l-d+1 \leq |\mathbf{i}| \leq l} (-1)^{l-|\mathbf{i}|} \cdot \binom{d-1}{l-|\mathbf{i}|} \cdot (Q_{M^{(1)}} \otimes \cdots \otimes Q_{M^{(d)}}).$$

Die Menge an Stützstellen ist dann gegeben durch

$$\Theta = \bigcup_{l-d+1 \leq |\mathbf{i}| \leq l} (\Theta^1 \times \cdots \times \Theta^d). \quad (8.3)$$

8.3 Quantities of Interest des Modellproblems

Die im vorherigen Abschnitt vorgestellte Interpolationsmethode konstruiert mithilfe von Lagrange-Polynomen eine Annäherung an die die Lösung des stochastischen Modellproblems (8.1). Dieser Interpolant kann dann zur Berechnung von sogenannten Quantities of Interest, also stochastische Kenngrößen wie Erwartungswert und Varianz, verwendet werden, um das stochastische Verhalten der Lösung zu quantifizieren. Da beide Größen durch Integrale definiert sind, werden wir im Folgenden nicht auf Lagrange-Polynome zur Interpolation zurückgreifen, sondern die zu Beginn dieser Arbeit hergeleitete Dünngitterquadratur verwenden.

Wir betrachten die Gleichung

$$\operatorname{div}(\kappa(\xi, x) \nabla u(\xi, x)) = 0 \text{ für } x \in \Omega, \xi \in \Xi$$

sowie die entsprechenden Nebenbedingungen des Modellproblems (8.2). Untersucht werden soll nicht das Verhalten der Lösung u an festen Punkten im Raum, sondern das globale Verhalten von u . Wir betrachten entsprechend u in der $L^2(\Omega)$ Norm über $x \in \Omega$ und bilden den Erwartungswert über den Wahrscheinlichkeitsraum Ξ , also

$$\mathbb{E} \left[\|u(\xi, x)\|_{L^2(\Omega)} \right] = \int_{\Xi} \|u(\xi, x)\|_{L^2(\Omega)} d\mathbb{P}(\xi),$$

sowie die Varianz

$$\operatorname{Var} \left[\|u(\xi, x)\|_{L^2(\Omega)} \right] = \mathbb{E} \left[\left(\|u(\xi, x)\|_{L^2(\Omega)} - \mathbb{E} \left[\|u(\xi, x)\|_{L^2(\Omega)} \right] \right)^2 \right].$$

Wir bezeichnen im Folgenden mit $Q(\xi) = \|u(\xi, x)\|_{L^2(\Omega)}$ das Zielfunktional.

Zur Berechnung dieser Integrale verwenden wir die Dünngitterquadratur. Zunächst werden die Stützstellen $\Theta = \{\xi_j \mid j = 1, \dots, M \in \mathbb{N}\} \subseteq \Xi$ und die entsprechenden Gewichte W_1, \dots, W_M so gewählt, dass das gewünschte dünne Gitter entsteht. Eine denkbare Konstruktion ist dabei beispielsweise (8.3). Approximiert wird also gemäß

$$\mathbb{E} \left[\|u(\xi, x)\|_{L^2(\Omega)} \right] = \int_{\Xi} \|u(\xi, x)\|_{L^2(\Omega)} d\mathbb{P}(\xi) \approx \sum_{j=1}^M W_j \cdot \|u(\xi_j, x)\|_{L^2(\Omega)} = \hat{Q}_{\Xi}(\xi).$$

Hierbei ist $\hat{Q}_{\Xi}(\xi)$ die numerische Approximation des zu bestimmenden Erwartungswertes des Zielfunktional $Q(\xi)$. Analog definiert sich dann $\hat{Q}_{\operatorname{Var}}(\xi)$ als numerische Approximation der Varianz. Zur Messung der Genauigkeit der Approximation betrachtet man schlussendlich den *root mean square error* (kurz RMSE) definiert durch

$$\operatorname{RMSE}(\hat{Q}) = \left(\mathbb{E} \left[(\hat{Q} - \mathbb{E}[Q])^2 \right] \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (8.4)$$

9 Stochastische Modellierung der Permeabilität

Nachdem bereits die Notwendigkeit der stochastischen Modellierung der Permeabilität im vorherigen Abschnitt erläutert wurde, soll es jetzt um die mathematische Umsetzung gehen. Dafür werden wir die sogenannte Karhunen–Loève–Expansion (KL–Expansion), in der Literatur auch unter Kosambi–Karhunen–Loève–Theorem zu finden, verwenden. Diese Methode ermöglicht es, ein Zufallsfeld als unendliche Reihe von orthogonalen Funktionen darzustellen, die durch unkorrelierte Zufallsvariablen gewichtet sind. Zur numerischen Umsetzung dieser Darstellung von Zufallsfelder, werden wir eine sogenannten *truncated KL–Expansion* (gekürzte KL–Expansion) verwenden.

Im Folgenden ist $\Omega = (0, 1)^2$, $(\Xi, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ ein Wahrscheinlichkeitsraum und die Permeabilität durch ein Zufallsfeld $\kappa: \Xi \times \Omega$ gegeben.

9.1 Theoretische Grundlagen

Auf eine ausführliche Diskussion der Existenz, Eindeutigkeit und Stetigkeit der Lösung des Modellproblems (8.1) wird in dieser Arbeit verzichtet und stattdessen auf Abschnitt 3.3. *Weak formulation and existence* in [27] verwiesen. Da wir aber im folgenden Abschnitt ein konkretes Modell der Permeabilität entwickeln wollen, werden hier zunächst die wichtigsten Resultate für Existenz und Stetigkeit in Abhängigkeit des Permeabilitätsmodells aus [27] wiedergegeben.

Zuerst definieren wir formal für alle $\xi \in \Xi$

$$\kappa_{\min}(\xi) = \min_{x \in \Omega} \kappa(\xi, x), \quad \kappa_{\max}(\xi) = \max_{x \in \Omega} \kappa(\xi, x).$$

Die folgenden Annahmen (Vergleiche Assumption 3.1 in [27]) über die Eingabedaten sowie die Randbedingungen u_D , g_N aus dem stochastischen Modellproblem (8.1) seien im Folgenden erfüllt.

- i) $\kappa_{\min} \geq 0$ fast sicher und $\frac{1}{\kappa_{\min}} \in L^p(\Xi)$, für alle $p \in (0, \infty)$.
- ii) $\kappa \in L^p(\Xi; C^t(\bar{\Omega}))$, für ein $0 < t \leq 1$ und für alle $p \in (0, \infty)$.
- iii) $u_D \in L^{p_*}(\Xi; H^{t+\frac{1}{2}}(\Gamma_D))$, sowie $g_N \in L^{p_*}(\Xi; H^{t-\frac{1}{2}}(\Gamma_N))$, für ein $p_* \in (0, \infty]$.

Das Modell soll einer Log-Normalverteilung folgen, also

$$\kappa(\xi, x) = \exp(g(\xi, x)),$$

wobei $g: \Xi \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ eine Gauss-Verteilung besitzt. Eine Gauss-Verteilung ist besonders geeignet, da sie durch ihren Mittelwert und ihre Kovarianzstruktur vollständig charakterisiert ist. Ferner wird wie in [27] angenommen, dass $\mathbb{E}[g(\xi, x)] = 0$ und der Kovarianzkern gegeben ist durch

$$C(x, y) = \mathbb{E}[(g(\xi, x) - \mathbb{E}[g(\xi, x)])(g(\xi, y) - \mathbb{E}[g(\xi, y)])] = \sigma^2 \exp\left(-\frac{\|x - y\|_p^\alpha}{\lambda^\alpha}\right). \quad (9.1)$$

Hierbei ist σ^2 die Varianz, λ die Korrelationslänge und α ein Glättungsparameter. Die Korrelationslänge λ gibt an, über welche Distanz die Werte von $g(\xi, x)$ räumlich korreliert sind, während σ^2 die Intensität der Variabilität beschreibt. Sei ferner $\|\cdot\|_p$ die 1-Norm für $p = 1$, beziehungsweise die euklidische Norm für $p = 2$.

Analog wie in [27] und den darin referenzierten Werken betrachten wir noch die Regularität der Kovarianz (9.1), welche insbesondere im Nullpunkt nicht stetig ist. Somit können Realisierungen des Feldes $g(\xi, x)$ sehr unstetig sein. Der Satz von Kolmogorov (Vergleiche [12]) besagt aber, dass alle Realisierungen von $g(\xi, x)$ fast-sicher Hölder-stetig mit Hölder-Konstante $t < \frac{1}{2}$ sind. Daraus lässt sich folgendes Lemma aus [27] ableiten.

Lemma 9.1: *Sei $g(\xi, x)$ ein Gaußsches Feld mit der Kovarianz von (9.1). Die Trajektorien des lognormalen Feldes $a(\xi, x) = \exp(g(\xi, x))$ gehören für alle $t < \frac{1}{2}$ fast sicher zu $C^t(\bar{\Omega})$, und $\|a(\xi)\|_{C^t(\bar{\Omega})} \leq (1 + 2|g(\xi)|_{C^t(\bar{\Omega})})\alpha_{\max}(\xi)$.*

Für einen Beweis sei auf Lemma 3.4 in [27] verwiesen. Unter Korollar 3.5 in derselben Quelle findet sich das folgende Resultat.

Korollar 9.2: *Sei $g(\xi, x)$ ein Gaußsches Feld mit der Kovarianz von (9.1). Dann sind die Annahmen i) und ii) für lognormal-Felder $\kappa(\xi, x) = \exp(g(\xi, x))$ erfüllt für jedes $t < \frac{1}{2}$.*

Dieses Resultat liefert dann die eindeutige Lösbarkeit des Modellproblems (8.1).

9.2 Kosambi–Karhunen–Loève–Expansion

Dieser Abschnitt orientiert sich an Betz et al. in [32]. Wir widmen uns der stochastischen Modellierung der Permeabilität als Logarithmische Normalverteilung auf dem Gebiet $\Omega = (0, 1)^2$. Sei dazu $(\Xi, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ ein Wahrscheinlichkeitsraum und die Permeabilität gegeben durch ein Zufallsfeld gemäß

$$\kappa: \Xi \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}.$$

Jedem Punkt $x \in \Omega$ wird dann eine zufallsbedingte Größe, in unserem Fall die Permeabilität, zugeordnet. Ziel ist es, diese Verteilung zu approximieren, das heißt wir suchen $\hat{\kappa}$ als endliche Menge von Zufallsvariablen aus unserem Zufallsfeld. Die Güte dieser Approximation wird durch verschiedene Fehlergrößen gemessen. Der Approximationsfehler sei definiert durch

$$\varepsilon_\kappa(\xi, x) = \kappa(\xi, x) - \hat{\kappa}(\xi, x)$$

und zusätzlich definieren wir den mittleren quadratischen Fehler (Mean Square Error, MQE) durch

$$MQE_\kappa = \mathbb{E}[(\varepsilon_\kappa(\xi, x))^2].$$

Integriert man den MQE über das gesamte Gebiet Ω ergibt anschließend den globalen mittleren quadratischen Fehler (Global Mean Square Error, GMQE)

$$GMQE_\kappa = \int_{\Omega} MQE_\kappa \, dx = \int_{\Omega} \mathbb{E}[(\varepsilon_\kappa(\xi, x))^2] \, dx.$$

Das Kosambi–Karhunen–Loève-Theorem besagt, dass ein Zufallsfeld exakt durch die folgende Expansion dargestellt werden kann:

$$\kappa(\xi, x) = \mu(x) + \sum_{i=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_i} \phi_i(x) Z_i(\xi),$$

wobei $\mu(x)$ die Mittelwertfunktion des Feldes ist, $Z_i(\xi): \Xi \rightarrow \mathbb{R}$ unkorrelierte Zufallsvariablen sind und $\lambda_i \in [0, \infty)$, $\phi_i: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ die Eigenwerte und Eigenfunktionen des Autokovarianz-Kerns sind, die aus der Lösung der homogenen Fredholm'schen Integralgleichung zweiter Art gewonnen werden:

$$\int_{\Omega} \text{Cov}(x, x') \phi_i(x') dx' = \lambda_i \phi_i(x). \quad (9.2)$$

Für einen Beweis dieser Aussagen sei auf [33] verwiesen. Sortiert man die Eigenwerte λ_i absteigend und wählt $M \in \mathbb{N}$ fest, so erhält man die gekürzte KL-Expansion durch

$$\hat{\kappa}(\xi, x) = \mu(x) + \sum_{i=1}^M \sqrt{\lambda_i} \phi_i(x) Z_i(\xi). \quad (9.3)$$

Wiederum nach [34], ist diese Expansion unter den Methoden der Reihenentwicklung optimal in Bezug auf den globalen mittleren quadratischen Fehler.

Um die Permeabilität numerisch modellieren zu können, werden wir im Folgenden eine gekürzte KL-Expansion zur Approximation des Lognormal-Feldes verwendet. An dieser Stelle wird auf eine analytische Herleitung verzichtet und auf die Literatur wie beispielsweise [35] (Geiersbach, Wollner) und [36] von Babuška, I. et al. verwiesen.

Konkret wird in Abhängigkeit des Parameters M (*trunc*) der gekürzten KL-Expansion die Eigenwerte $\lambda_i \in [0, \infty)$ und Eigenfunktionen $\phi_i: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ von (9.3) als Lösung der Gleichung (9.2) mittels numerischer Algorithmen berechnet.

Notation: Im weiteren Verlauf ist unter der stochastischen Dimension des Modellproblems die Anzahl an Zufallsvariablen M in der gekürzten KL-Expansion zu verstehen.

10 Numerische Ergebnisse

10.1 Dünn- und Vollgitterquadratur - Fehleranalyse

Anmerkung: Die im theoretischen Teil der Arbeit hergeleitete Dünngitterquadratur gemäß Algorithmus 1 arbeitet für eine übergebene $L \in \mathbb{N}_0$ mit der Summationsvorschrift $|K|_1 \leq L + d - 1$. In diesem Abschnitt testen wir für Funktionen im zweidimensionalen, die Vorschrift lautet also entsprechend $|K|_1 \leq L + 1$. Um eine Vergleichbarkeit zwischen Vollgitterquadratur und der Dünngitterquadratur zu gewährleisten, wird in diesem Abschnitt die Vorschrift für die Dünngitterquadratur umgewandelt zu $|K|_1 \leq L$, damit beide Algorithmen tatsächlich auf derselben minimalen Gitterweite arbeiten und die Ergebnisse vergleichbar sind. Betrachtet werden also die folgenden Algorithmen 2 für Vollgitterquadratur und 3 für Dünngitterquadratur.

```
Input : Function  $f$ , Level  $L$ 
Output: integral_value
integral_value  $\leftarrow 0$ 
foreach  $K = (K_1, K_2) \in \mathbb{N}_0^2$  with  $|K_1|, |K_2| \leq L$  do
    foreach  $I \in J_K$  do
        Calculate hierarchical surpluses  $v_{K,I}$ 
        Calculate  $\int_{\Omega} \varphi_{K,I}(x) dx$ 
        integral_value  $\leftarrow$  integral_value +  $v_{K,I} \int_{\Omega} \varphi_{K,I}(x) dx$ ;
    end
end
return integral_value;
```

Algorithm 2: FullGrid Quadrature over $[0, 1]^2 \subset \mathbb{R}^2$

```
Input : Function  $f$ , Level  $L$ 
Output: integral_value
integral_value  $\leftarrow 0$ 
foreach  $K = (K_1, K_2) \in \mathbb{N}_0^2$  with  $|K_1| + |K_2| \leq L$  do
    foreach  $I \in J_K$  do
        Calculate hierarchical surpluses  $v_{K,I}$ 
        Calculate  $\int_{\Omega} \varphi_{K,I}(x) dx$ 
        integral_value  $\leftarrow$  integral_value +  $v_{K,I} \int_{\Omega} \varphi_{K,I}(x) dx$ ;
    end
end
return integral_value;
```

Algorithm 3: SparseGrid Quadrature over $[0, 1]^2 \subset \mathbb{R}^2$

Die Grundidee der Dünngitterquadratur wie sie im Abschnitt 4.3 eingeführt wurde war, dass Interpolationspunkte und deren zugehörige hierarchische Überschüsse vernachlässigbar sind, ohne viel Genauigkeit einzubüßen. Diese Behauptung wollen wir jetzt numerisch überprüfen.

10.1.1 Tests für Polynomfunktionen

Anmerkung: Zur Reproduktion der Ergebnisse in den Abbildungen 10 und 10 ist an dieser Stelle auf das Python-Programm *sparse_vs_full_grid_random_polynomial_test.py* im GitLab-Repository [5] verwiesen.

Wir betrachten zunächst einen Test für einfache Polynomfunktionen bis Grad $n = 10$. Dabei werden in Python 11 Polynome mit den Graden $0, 1, \dots, 10$ mit zufälligen Koeffizienten generiert und anschließend die Dünngitterquadratur mit der Vollgitterquadratur über dem Einheitswürfel $\Omega = [0, 1]^2$ für die Levels $L \in \{1, \dots, 8\}$ verglichen.

Zunächst zeigt Abbildung 10 auf der linken Seite die durchschnittliche Rechenzeit in Abhängigkeit von L . Der Wert wird hierbei pro Level als Durchschnitt aus den Rechenzeiten für jedes Polynom berechnet. Deutlich zu erkennen ist, dass die Dünngitterquadratur hier entscheidende Vorteile durch die verringerte Anzahl an Funktionsauswertungen hat.

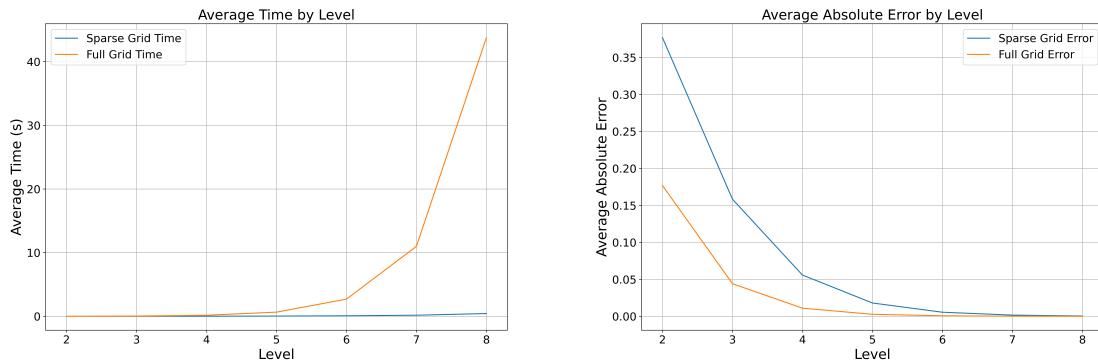


Abbildung 10: Durchschnittliche Rechenzeit und durchschnittlicher Quadraturfehler für Voll- und Dünngitterquadratur für Polynome bis zum Grad 10 in Abhängigkeit des Levels L .

Betrachtet man ferner den durchschnittlichen absoluten Fehler beider Quadratralgorithmen in Abhängigkeit von L auf der rechten Seite der Abbildung 10 über alle Polynome, so zeigt sich, dass beide Verfahren mit wachsendem Level sinkende Quadraturfehler haben. Die Dünngitterquadratur zeigt insgesamt höhere Fehler, diese sind aber ab höheren Levels nur leicht erhöht.

Abbildung 11 zeigt jetzt den Quadraturfehler für beide Verfahren in Abhängigkeit des Polynomgrades, gerechnet auf Level $L = 8$. Die Verfahren unterscheiden sich bis Grad 8 nur geringfügig, insgesamt nimmt der Fehler der Dünngitterquadratur mit steigendem Grad aber schneller zu.

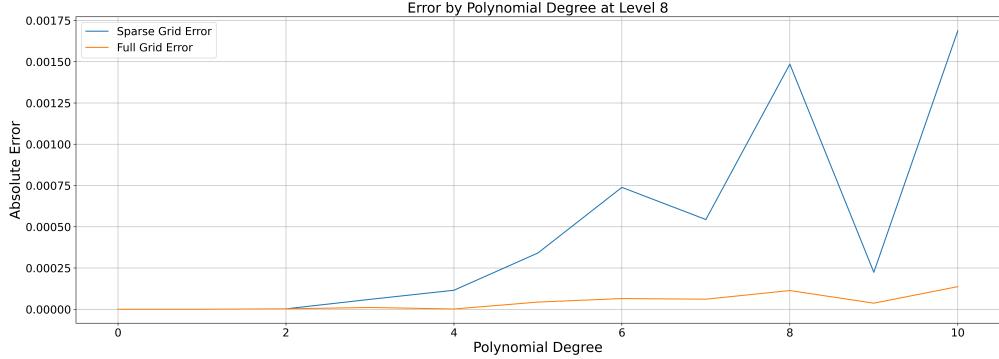


Abbildung 11: Quadraturfehler der Voll- und Dünngitterquadratur in Abhängigkeit des Polynomgrades auf $L = 8$.

Wir betrachten jetzt noch die konkrete Folge von Polynomen $f_n(x, y) = (xy)^n$ für $n \in \mathbb{N}$. Abbildung 12 zeigt den absoluten Quadraturfehler beider Methoden in Abhängigkeit des Grade n für festes Level 7. Sehr schön zu erkennen ist, dass die Approximation durch die Dünngitterquadratur mit steigendem Grad des Polynoms insgesamt einen höheren Quadraturfehler erreicht. Die Vollgitterquadratur bleibt hingegen stabiler und insgesamt auf einem niedrigeren Niveau. Die Ergebnisse sind mit dem Programm *sparse_vs_full_error_polynomial_plots.py* in [5] reproduzierbar.

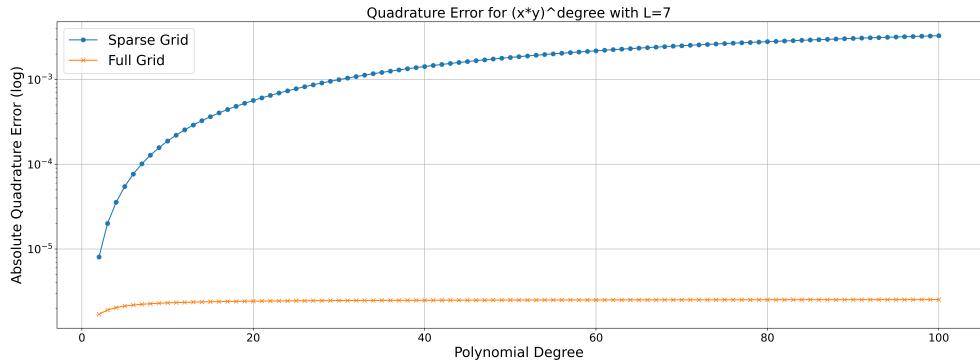


Abbildung 12: Absoluter Quadraturfehler bei Quadratur auf dem Einheitsquadrat $[0, 1]^2$ für volles und dünnes Gitter mit logarithmierter y-Achse in Abhängigkeit der Grade n von $f_n(x, y) = (xy)^n$.

Insgesamt lässt sich für Polynome festhalten, dass für $\text{Grad} \leq 10$ die Dünngitterquadratur vergleichbar gute Approximationen an den Integralwert liefert. Mit höheren Levels wird der Unterschied im absoluten Fehler beider Quadraturalgorithmen zunehmend geringer, wodurch der numerische Effizienzgewinn durch Verwendung der Dünngitterquadratur überwiegt.

10.1.2 Tests für allgemeine Funktionen

Wir betrachten weitere Funktionen die von $\Omega = [0, 1]^2$ nach \mathbb{R} abbilden und vergleichen wieder beide Algorithmen. Dazu seien die folgenden Funktionen definiert.

$$f(x, y) = (1 - x)^2 + 100(y - x^2)^2, \quad u(x, y) = \sin(x) \sin(y), \quad w(x, y) = x^{500} \cdot y^{17}$$

$$g(x, y) = \begin{cases} 1.0 & 0.5 \leq x \leq 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

L	Sparse Grid Integration			Full Grid Integration		
	Quadratur	Abs. error	Rel. error	Quadratur	Abs. error	Rel. error
2	0.2106	$7.3696e - 4$	$3.4874e - 3$	0.2108	$5.5010e - 4$	$2.6031e - 3$
3	0.2111	$2.0142e - 4$	$9.5315e - 4$	0.2112	$1.3757e - 4$	$6.5098e - 4$
4	0.2113	$5.4654e - 5$	$2.5863e - 4$	0.2113	$3.4394e - 5$	$1.6276e - 4$
5	0.2113	$1.4738e - 5$	$6.9743e - 5$	0.2113	$8.5987e - 6$	$4.0690e - 5$
6	0.2113	$3.9533e - 6$	$1.8707e - 5$	0.2113	$2.1497e - 6$	$1.0173e - 5$
7	0.2113	$1.0555e - 6$	$4.9947e - 6$	0.2113	$5.3742e - 7$	$2.5431e - 6$
8	0.2113	$2.8067e - 7$	$1.3281e - 6$	0.2113	$1.3436e - 7$	$6.3578e - 7$
9	0.2113	$7.4365e - 8$	$3.5191e - 7$	0.2113	$3.3590e - 8$	$1.5895e - 7$
10	0.2113	$1.9641e - 8$	$9.2943e - 8$	0.2113	$8.3986e - 9$	$3.9743e - 8$

Tabelle 3: Absoluter und relativer Fehler der Voll- und Dünngitterquadratur für die Funktion $u(x, y) = \sin(x) \sin(y)$ und Level L .

L	Sparse Grid Integration			Full Grid Integration		
	Quadratur	Abs. error	Rel. error	Quadratur	Abs. error	Rel. error
2	-0.0560	0.0561	506.21	0.0048	$4.6639e - 03$	42.0599
3	-0.0357	0.0358	323.0086	0.0019	$1.7955e - 03$	16.1918
4	-0.0199	0.0200	180.3593	0.0009	$7.7870e - 04$	7.0223
5	-0.0105	0.0106	95.3086	0.0004	$3.2617e - 04$	2.9414
6	-0.0053	0.0054	48.6379	0.0002	$1.1524e - 04$	1.0393
7	-0.0024	0.0025	22.9288	0.0001	$3.3328e - 05$	0.3006
8	-0.0010	0.0011	9.6257	0.0001	$8.7055e - 06$	0.0785
9	-0.0003	0.0004	3.6294	0.0001	$2.2017e - 06$	0.0199
10	-0.0000	0.0001	1.2539	0.0001	$5.5203e - 07$	0.0050

Tabelle 4: Absoluter und relativer Fehler der Voll- und Dünngitterquadratur für die Funktion $w(x, y) = x^{500} \cdot y^{17}$ und Level L .

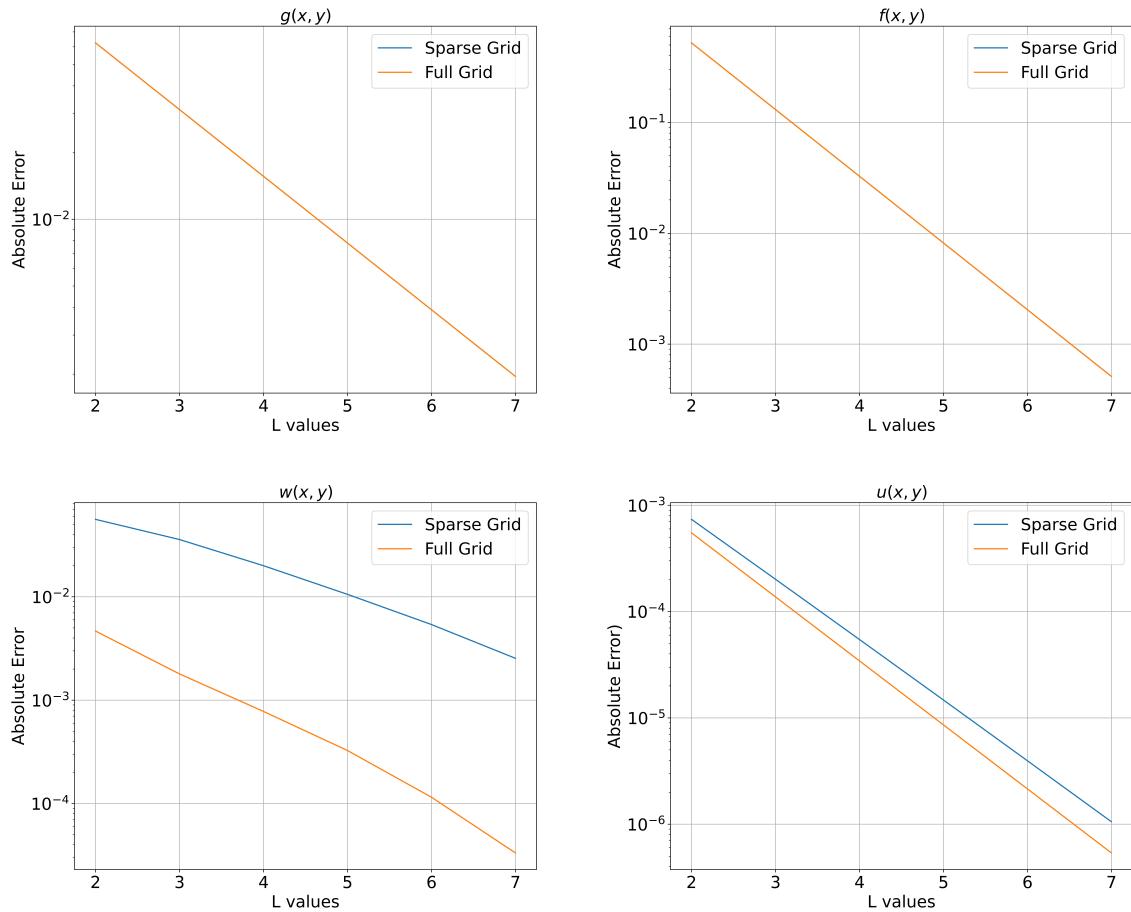


Abbildung 13: Absoluter Quadraturfehler bei Quadratur auf dem Einheitsquadrat $[0, 1]^2$ für volles und dünnes Gitter mit logarithmierter y-Achse in Abhängigkeit des Level L für die Funktionen g, f, w, u .

d = 2	L = 1	L = 2	L = 3	L = 4	L = 5	L = 6	L = 7
Full grid	9	25	81	289	1 089	4 225	16 641
Sparse grid	8	17	37	81	177	385	833

Tabelle 5: Vergleich der Anzahl an Gitterpunkten zwischen vollem und dünnem Gitter für die Dimensionen 2 und verschiedene Gitterlevel $L = 1, \dots, 7$.

Die Quadraturergebnisse für die Funktion $u(x, y)$ (siehe Tabelle 3) zeigen, dass sowohl die absoluten als auch die relativen Fehler der Dünngitterquadratur im Vergleich zur Vollgitterquadratur sehr ähnlich sind und mit steigendem Level L beide Verfahren eine hohe Genauigkeit erreichen. Ein ähnliches Bild zeigt sich auch in Abbildung 13 für die Funktionen $f(x, y)$ und $g(x, y)$.

Für die Funktion $w(x, y)$ (siehe Tabelle 4) zeigt sich ein anderes Bild. Hier sind die absoluten und relativen Fehler der Dünngitterquadratur im Vergleich zur Vollgitterquadratur deutlich größer, insbesondere bei niedrigeren Levels L . Die betrachtete Funktion hat auf dem Inneren $(0, 1)^2$ relativ niedrige Funktionswerte und erst gegen den Rand am Punkt $(1, 1)$ signifikante Werte. Die Struktur der verwendeten dünnen Gitter ordnet dem Rand des Gebiets deutlich mehr Gitterpunkte zu, wodurch es in diesem konkreten Fall zu einer schlechteren Approximation des Integrals kommt, da den Randtermen zu hohe Gewichte zugeordnet werden.

Zur Bestimmung der Konvergenzordnung p betrachten wir die Gitterweite $h = 2^{-L}$ und den absoluten Fehler $E(L) = C \cdot h^p = C \cdot 2^{-pL}$ in Abhängigkeit von L , wobei C eine Konstante ist. Logarithmieren liefert $\log(E(L)) = \log(C) - p \cdot L \cdot \log(2)$. Die Durchführung einer linearen Regression in Python liefert dann die Konvergenzrate p . Angewendet auf die Funktionen $f(x, y)$, $u(x, y)$, $w(x, y)$ und $g(x, y)$ bestimmen sich die Konvergenzraten in Tabelle 6. Die Raten unterscheiden sich nicht signifikant. Einzige Ausnahme bildet

Funktion	Full Grid	Sparse Grid
$f(x, y) = (1 - x)^2 + 100(y - x^2)^2$	1.9998	1.9998
$u(x, y) = \sin(x) \sin(y)$	1.9999	1.8934
$w(x, y) = x^{500} \cdot y^{17}$	1.4805	0.9526
$g(x, y) = \begin{cases} 1.0 & \text{für } 0.5 \leq x \leq 1, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$	1	1

Tabelle 6: Konvergenzrate bei Quadratur auf dem Einheitsquadrat $[0, 1]^2$ für volles und dünnes Gitter für die Funktionen g , f , w , u . Berechnet für $L \in \{1, \dots, 7\}$.

die Polynomfunktion mit sehr hohem Grad, wobei sich dies mit den Ergebnissen aus Abbildung 12 deckt.

Insgesamt lässt sich für die getesteten Funktionen festhalten, dass glatte Funktionen mit lokal geringer Variation für die Quadratur mit dünnen Gittern sehr gute Ergebnisse liefern. Im direkten Vergleich sind die Unterschiede zwischen Dünngitterquadratur und Vollgitterquadratur marginal. Auch Funktionen mit Sprungstellen (siehe $g(x, y)$) stellen kein Problem für die Dünngitterquadratur dar und die Fehler unterscheiden sich minimal. Der numerische Effizienzgewinn ist dabei deutlich anhand der notwendigen Funktionsauswertungen, insbesondere bei hohen Levels L , sichtbar. Tabelle 5 zeigt jeweils für $L = 1, \dots, 7$ für volles Gitter mit Gitterweite 2^{-L} und dem entsprechenden dünnen Gitter die Anzahl an Funktionsauswertungen. Funktionen mit hoher lokaler Variation oder Polynomen mit sehr hohem Grad zeigen aber auch die Grenzen der Verwendung der Dünngitterquadratur auf.

10.1.3 Schachbrett-Funktion

Wir betrachten noch eine spezielle Schachbrett-Funktion auf dem Einheitsquadrat, welche wie folgt in Python implementiert ist.

```
import numpy as np
def create_chessboard_pattern(n):
    size = 2 ** n
    chessboard = np.zeros((size, size), dtype=int)

    for i in range(size):
        for j in range(size):
            if (i + j) % 2 == 0:
                chessboard[i, j] = 1
            else:
                chessboard[i, j] = 0

    return chessboard

def f(x, y, n):
    chessboard = create_chessboard_pattern(n)
    size = 2 ** n

    i = np.floor(x * size).astype(int) - 1
    j = np.floor(y * size).astype(int) - 1

    return chessboard[i, j]
```

Die Funktion $f(x, y, n)$ generiert, in Abhängigkeit von $n \in \mathbb{N}$, ein Schachbrett-Muster mit 2^{2n-1} Quadranten mit der Seitenlänge $h_n = 2^{-n}$ und setzt die Funktion auf der Hälfte der Quadrate auf den Wert 1 und 0 sonst. Abbildung 14 zeigt das zugrundeliegende Schachbrett-Muster. Der exakte Integralwert ergibt sich direkt nach Definition zu

$$\int_{[0,1]^2} f(x, y, n) dx = \frac{1}{2}.$$

Die Dünngitterquadratur divergiert bei dieser Funktion mit wachsendem n , wie in Tabelle 7 zu sehen ist. Dies liegt daran, dass die Struktur des verwendeten dünnen Gitters und die Definition des Schachbretts dazu führt, dass viele Interpolationspunkte in Bereichen liegen, in denen die Funktion konstant 0 ist. Entsprechend befinden sich zu wenige Interpolationspunkte in Bereichen mit von Null verschiedenen Funktionswerten, sodass die Auswertung 0 ergibt. Die in Abschnitt 4.3.1 erwähnte adaptive Dünngitterquadratur ist für dieses Problem besser geeignet.

Zieht man zum Vergleich die Vollgitterquadratur hinzu, so ergeben sich die Werte aus

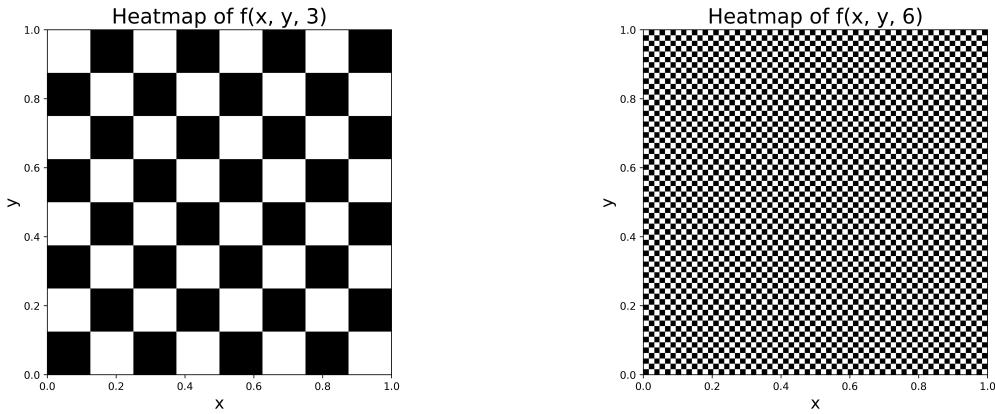


Abbildung 14: Heatmap der Schachbrett-Funktion $f(x, y, n)$ für $n = 3, 6$ auf dem Einheitsquadrat $[0, 1]^2$.

Tabelle 7. Zu erkennen ist, dass hier ein volles Gitter selbst bei kleinem Level zu einer deutlich besseren Approximation des Integrals führt.

L	n = 2		n = 4		n = 6	
	SparseGrid	FullGrid	SparseGrid	FullGrid	SparseGrid	FullGrid
2	0.0	0.5	1.0	1.0	1.0	1.0
3	0.5	0.5	0.0	0.5	1.0	1.0
4	0.5	0.5	0.0	0.5	1.0	1.0
5	0.5	0.5	0.0	0.5	0.0	0.5

Tabelle 7: Quadraturwerte der Dünn- und Vollgitterquadratur für die Schachbrett-Funktion bei $n = 2, 4, 6$ in Abhängigkeit des Level L .

10.1.4 Fazit

In diesem Abschnitt wurden die Fehleranalyse und die Konvergenz der Integrationsmethoden auf vollen und dünnen Gittern untersucht. Die Ergebnisse der Fehleranalyse zeigen, dass die Dünngitterquadratur in vielen Fällen eine vergleichbare Genauigkeit wie die Quadratur auf vollen Gittern erzielt, jedoch mit deutlich geringerem Rechenaufwand. Insbesondere bei hochdimensionalen Integralen bietet die Dünngitterquadratur erhebliche Vorteile hinsichtlich der benötigten Funktionsauswertungen. Tabelle 1 zeigt nochmals deutlich die verringerte Anzahl an Funktionsauswertungen. Mit entsprechender Implementierung können erhebliche Effizienzgewinne erreicht werden.

Die numerischen Experimente mit den Testfunktionen bestätigen, dass die Dünngitterquadratur eine hohe Genauigkeit bei reduzierten Rechenressourcen erreicht. Die Konvergenzraten zeigen, dass die Dünngitterquadratur in vielen Fällen eine ähnliche Konvergenz wie die Vollgitterquadratur aufweist, jedoch mit einem geringeren Aufwand an Funktionsauswertungen.

10.2 Modellproblem in M++

Wir kommen zur Uncertainty Quantification unter Verwendung von Stochastic Collocation mit der Dünngitterquadratur und verwenden dafür M++ [4]. Konkret betrachten wir das folgende elliptische Modellproblem auf $\Omega = (0, 1)$ mit $\partial\Omega = \Gamma_N \cup \Gamma_D$ und $x = (x_1, x_2)$:

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\kappa(\xi, x)\nabla u(\xi, x)) = 0 & \text{für } (\xi, x) \in \Xi \times \Omega \\ u(\xi, x) = u_D & \text{auf } \Gamma_D \\ \kappa(\xi, x)\nabla u(\xi, x) \cdot n = g_N & \text{auf } \Gamma_N. \end{cases} \quad (10.1)$$

Ferner seien die folgenden Randbedingungen definiert

- $\Gamma_D = \{(x, y) \in \bar{\Omega} \mid y = 0\}$
- $u_D \equiv 0$
- $\Gamma_N = \partial\Omega \setminus \Gamma_D$
- $g_N = \begin{cases} 0 & \text{falls } (x, y) \in \{(x, y) \in \Gamma_N : x \in \{0, 1\}\} \\ -1 & \text{sonst.} \end{cases}$

Die numerische Lösung wird mithilfe der in M++ implementierten Finite-Elemente-Methode für Ansatzelemente vom Grad 1 auf einer Zerlegung des Gebiets in Vierecke berechnet.

Zur Generierung von κ als Lognormal-Feld wird eine gekürzte KL-Expansion verwendet. Der Kovarianzkern ist durch

$$C(x, y) = \sigma^2 \exp\left(\frac{-\|x - y\|_p^\alpha}{\lambda^\alpha}\right)$$

gegeben und die Parameter werden zunächst auf $\sigma = \lambda = \alpha = 1$ und $p = 2$ festgelegt.

Das Zielfunktional ist gegeben durch $Q(\xi) = \|u(\xi, x)\|_{L^2(\Omega)}$.

Notation: Im Folgenden bezeichnet `trunc` die stochastische Dimension und `StochLevel` den Verfeinerungsgrad der Dünngitterquadratur beziehungsweise die Anzahl an Samples für Monte-Carlo. Ferner steht SC für Stochastic Collocation und damit für die Verwendung der Dünngitterquadratur und MC für die Monte-Carlo-Methode.

Anmerkung: In dieser Arbeit wird auf eine direkte Messung des numerischen Aufwandes aus Implementierungsgründen verzichtet. Stochastic Collocation ist zum Zeitpunkt der Beendigung dieser Arbeit nicht parallel implementiert und nicht optimiert. Entsprechend ist die Laufzeitmessung nur auf einem Kern praktisch unbrauchbar und liefert keine zuverlässigen Ergebnisse. Ein direkter Vergleich mit Monte-Carlo (parallel implementiert) ist somit nicht zuverlässig möglich. In den nachfolgenden Abschnitten versteht sich daher unter dem numerischen Aufwand grundsätzlich die Anzahl an Funktionsauswertungen (auch Collocation Points).

10.2.1 Stochastische Permeabilität und Lösung des Modellproblems

Um die numerische Lösung und die durch die KL-Expansion generierten Permeabilitätsfelder zu visualisieren, betrachten wir Abbildung 15. Sie zeigt die Lösung u sowie die zugehörige Permeabilität κ . Ferner zeigt Abbildung 16 die von ParaView errechneten Strömungslinien.

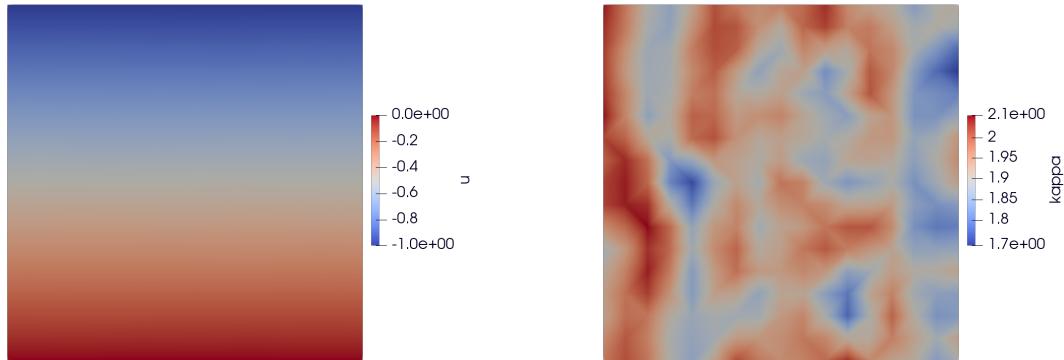


Abbildung 15: Realisierung eines Permeabilitätsfelds und u für `trunc=4`, `StochLevel=4`, `degree=1` und PDE-Solver level `SpaceLevel = 4` des elliptischen Modellproblems (10.1).

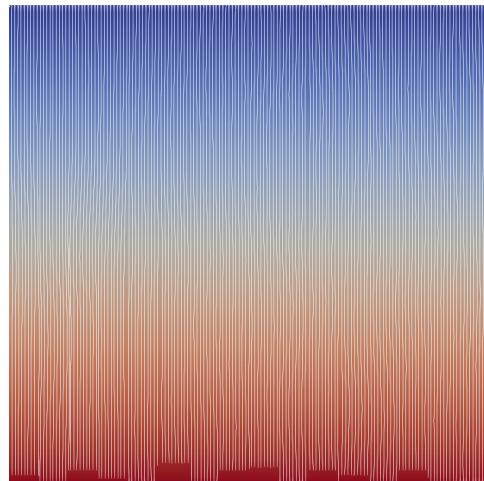


Abbildung 16: Mit ParaView berechnete Strömungslinien auf dem Strömungsfeld u für `trunc=4`, `StochLevel=4`, `degree=1` und PDE-Solver `level=4` des elliptischen Modellproblems (10.1).

10.3 Stochastische Fehlergröße

10.3.1 UQ - RMSE und räumliche Diskretisierung

Anmerkung: Um die nachfolgenden Ergebnisse zu reproduzieren, sei an dieser Stelle erneut auf das GitLab-Repository [5] und insbesondere auf das dort hinterlegte Jupyter-Notebook verwiesen.

Bevor wir konkret die stochastischen Kenngrößen betrachten, werden wir zunächst auf den Zusammenhang zwischen der räumlichen Diskretisierung und dem daraus resultierenden Fehler in der Approximation der Lösung der partiellen Differentialgleichung und dem stochastischen Fehler der Dünngitterquadratur eingehen. Der Fehler bei Verwendung der Finite-Elemente-Approximation des Modellproblems (10.1) lässt sich über das `SpaceLevel`, also die Feinheit der Zerlegung des Gebiets in Dreiecke oder Vierecke, kontrollieren. Wird das Modellproblem nur auf einer groben Zerlegung des Gebiets Ω berechnet, ist der numerische Approximationsfehler an die Lösung u entsprechend hoch. In diesen Fällen lohnt es sich nicht, zur Berechnung der Quantities of Interest die Dünngitterquadratur durch Stochastic Collocation mit sehr hoher Dimension und sehr hohem Level zu verwenden, da der Anfangsfehler des Lösers deutlich über dem stochastischen Fehler liegt.

Um diesen Zusammenhang zu verstehen, verwenden wir den Root Mean Square Error (RMSE), definiert in (8.4). Für die stochastischen Dimensionen 4 und 6 zeigen die Abbildungen 17 und 18 den RMSE gegen das stochastische Level.

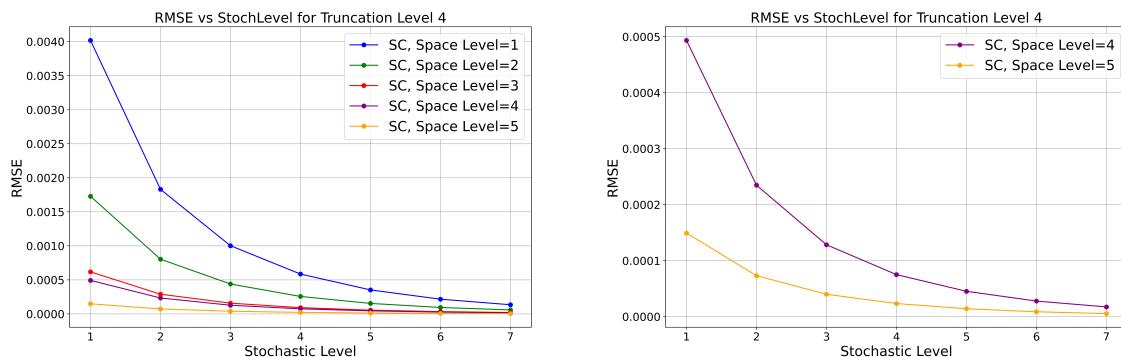


Abbildung 17: RMSE vs. StochLevel für `trunc=4` und verschiedene `SpaceLevel`. Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).

Zunächst ist deutlich erkennbar, dass der RMSE mit steigendem stochastischem Level (Level der Dünngitterquadratur) wie erwartet sinkt. Der Algorithmus approximiert die stochastischen Kenngrößen somit mit steigendem Level besser.

Die Abbildungen verdeutlichen aber auch, dass die Feinheit der räumlichen Diskretisierung (`SpaceLevel`) einen signifikanten Einfluss auf den RMSE hat. Ein höherer `SpaceLevel` reduziert den numerischen Approximationsfehler unabhängig vom gewähl-

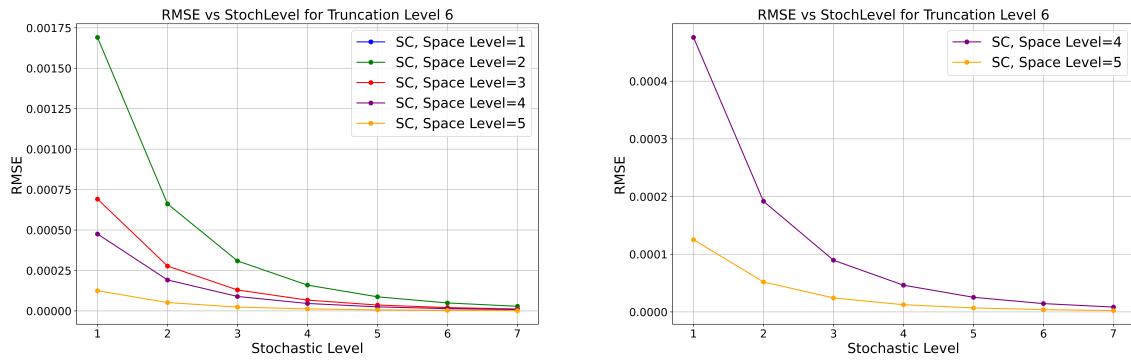


Abbildung 18: RMSE vs. StochLevel für trunc=6 und verschiedene SpaceLevel. Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).

ten stochastischen Level und von der gewählten stochastischen Dimension. Dieser Zusammenhang ist wichtig, um den Einfluss des stochastischen Fehlers korrekt zu bewerten. Betrachtet man zusätzlich den Vergleich des letzten und vorletzten Diskretisierungsevels, so fällt auf, dass der RMSE zwar durch die Erhöhung des Levels weiter sinkt, aber die Verbesserung insbesondere auf höheren stochastischen Levels sehr klein ist.

Bei niedrigen stochastischen Level ist der stochastische Fehler signifikant. Der räumliche Diskretisierungsfehler durch die Wahl des SpaceLevel wird also vom stochastischen Fehler bis zu einem stochastischen Level von ungefähr 6 dominiert. Bei höherem stochastischen Level stabilisiert sich der Fehler und der verbleibende Fehler wird vom räumlichen Diskretisierungsfehler dominiert.

Ferner ist aus den Abbildungen ersichtlich, dass die Erhöhung des stochastischen Levels im Bezug auf den RMSE einen abnehmenden Grenznutzen hat. Je höher der SpaceLevel, desto flacher fällt der RMSE mit wachsendem stochastischen Level ab. Ist der Anfangsfehler durch das Lösen der Differentialgleichung also niedrig (für hohes SpaceLevel), lohnt sich ein übermäßig hohes stochastisches Level (und damit viele Collocation Points) im Hinblick auf die Minimierung des RMSE nicht. Das bedeutet, dass eine weitere Erhöhung des stochastischen Level wenig zur Verbesserung der Approximation der Quantities of Interest beiträgt, wenn der Diskretisierungsfehler bereits niedrig ist.

Aus den Ergebnissen lässt sich ableiten, dass für eine effiziente und sinnvolle Fehlerkontrolle sowohl die räumliche Diskretisierung als auch das stochastische Level der Dünngitterquadratur optimiert werden müssen. Eine zu grobe räumliche Diskretisierung führt zu einem hohen Anfangsfehler, der nur durch sehr hohen Rechenaufwand in hoher stochastischer Dimension ausgeglichen werden kann.

10.3.2 UQ - RMSE und stochastische Dimension

Wir betrachten zusätzlich die Abhängigkeit des RMSE von der stochastischen Dimension bei festem `SpaceLevel` = 5.

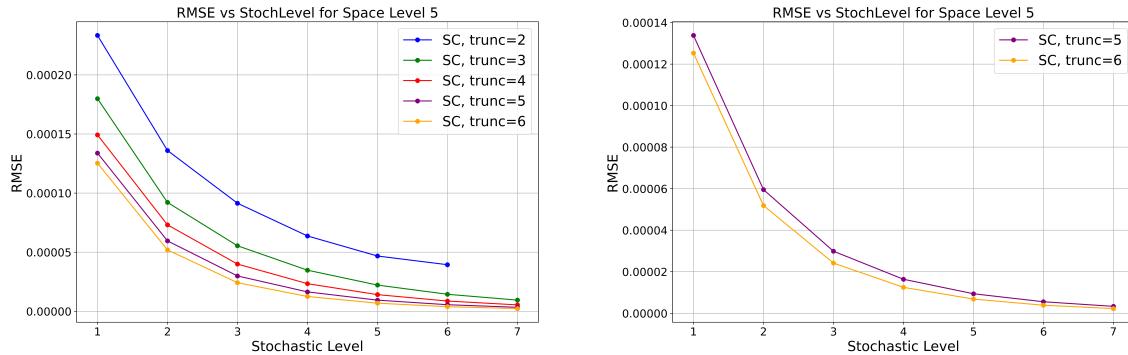


Abbildung 19: RMSE vs. `StochLevel` für verschiedene stochastische Dimensionen und `SpaceLevel` = 5. Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).

Ähnlich wie schon in Abbildung 17 erkennen wir in Abbildung 19, dass der RMSE mit steigender stochastischer Dimension, also einer besseren Approximation des Lognormal-Feldes durch die KL-Expansion, sinkt. Der Zugewinn an Genauigkeit ist allerdings bei einem höheren stochastischen Level marginal, weswegen aus der Sichtweise der Effizienz niedrigere Dimensionen mit leicht höheren stochastischen Levels zu bevorzugen sind. Angemerkt sei hier für die Abbildungen 19 und 20, dass für `trunc`= 2 das stochastische Level 7 einen negativen Mean Square Error erzeugt, wodurch entsprechend der Root Mean Square Error nicht berechnet werden kann.

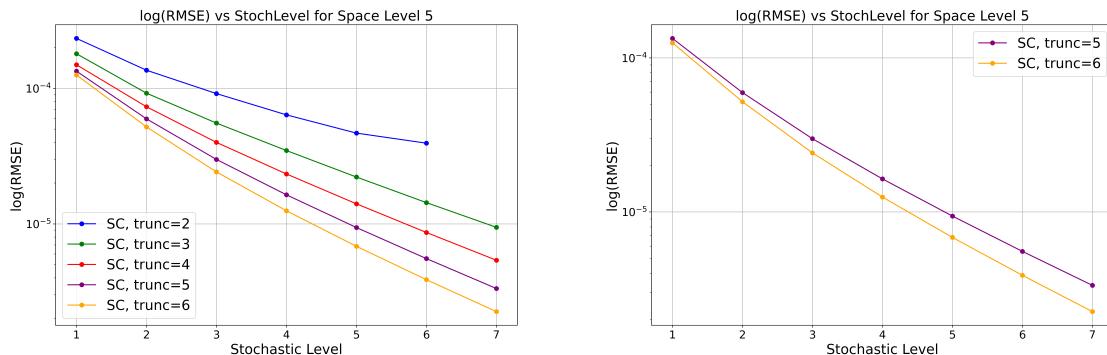


Abbildung 20: $\log(\text{RMSE})$ vs. `StochLevel` für verschiedene stochastische Dimensionen und `SpaceLevel` = 5. Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).

Wir betrachten jetzt dieselben Werte nur auf einer logarithmischen Skala in Abbildung 20. Auf der logarithmischen Skala ist eine fast lineare Abnahme des RMSE mit steigendem stochastischen Level zu erkennen. Es ist erkennbar, dass die Steigungen für verschiedene stochastische Dimensionen sehr ähnlich sind. Die Rate der Fehlerreduktion durch das Erhöhen des stochastischen Levels ist also für alle stochastischen Dimensionen nahezu gleich.

Unter Hinzunahme von Tabelle 2 ist ebenfalls ersichtlich, dass mit zunehmender stochastischer Dimension auch die Anzahl an Funktionsauswertungen trotz der Verwendung eines dünnen Gitters stark zunimmt. Entsprechend muss auch hier eine Abwägung getroffen werden. Abbildung 21 zeigt noch zusätzlich die logarithmierte Anzahl an Funktionsauswertungen bei Verwendung eines dünnen Gitters. Zusätzliche Auswertungen ergeben entsprechend einen höheren numerischen Aufwand.

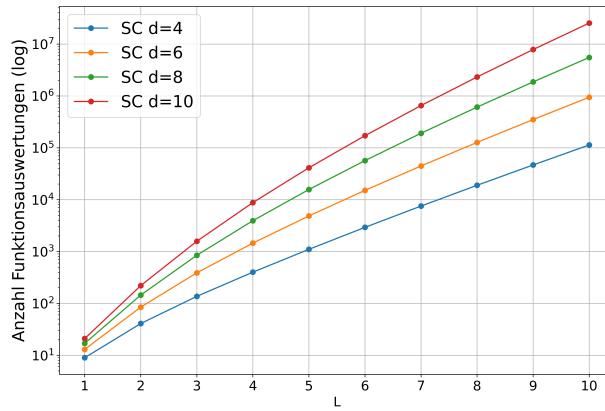


Abbildung 21: Numerischer Aufwand der Stochastic Collocation, gemessen an der Anzahl an Funktionsauswertungen für verschiedene stochastische Dimensionen (d) bei Verwendung eines dünnen Gitters mit der Clenshaw-Curtis-Rule. Werte aus Tabelle 2.

Zusammengefasst lassen sich zur Kontrolle des RMSE die folgenden Aussagen treffen: Eine Erhöhung des räumlichen Diskretisierungslevels führt zu einer Verringerung im RMSE bei einer gleichzeitig geringen Steigerung des Aufwands. Das stochastische Level hat bei angemessener Wahl der räumlichen Diskretisierung dann einen moderaten Einfluss auf den RMSE, steigert jedoch, durch Erhöhung der Anzahl der Quadraturpunkte, den numerischen Aufwand. Die Erhöhung der stochastischen Dimension zeigt einen vergleichsweise geringeren Effekt auf den RMSE, der numerische Aufwand erhöht sich jedoch durch Steigerung der Dimension. Besonders wächst der Aufwand zur numerischen Berechnung der Eigenwerte aus der KL-Expansion.

10.4 Quantities of Interest

Wir kommen zu den Quantities of Interest für das Modellproblem und deren numerischer Approximation. Interessant sind für uns der Erwartungswert und die Varianz des Zielfunktionalen $Q(\xi) = \|u(\xi, x)\|_{L^2(\Omega)}$, wobei u entsprechend eine (numerische) Lösung des elliptischen Modellproblems 10.1 ist.

Zunächst stellen wir jedoch Referenzgrößen zur Einordnung der berechneten Werte auf.

10.4.1 Referenzgrößen

Vermutung für Erwartungswert: Wir betrachten das Modellproblem (5.2) auf dem Gebiet $\Omega = (0, 1)^2$ im Falle ortsunabhängiger Permeabilität. Dann ist die Lösung gegeben durch $u(x, y) = -y$. Entsprechend gilt für die L^2 -Norm

$$\|u(x, y)\|_2 = \left(\int_0^1 \int_0^1 |u(x, y)|^2 dy dx \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

Nimmt man jetzt eine stochastisch lognormalverteilte Permeabilität in (10.1) mit Erwartungswert 1 hinzu, so lässt sich erwarten, dass sich der Erwartungswert der L^2 -Norm der stochastischen Lösung mit steigender Approximationsgüte dem errechneten Wert von $\frac{1}{\sqrt{3}} \approx 0,57735$ annähert.

Als weitere Vergleichsgröße betrachten wir Testdurchläufe der Monte-Carlo-Methode mit 100 000 Samples in Tabelle 8. Zu erwarten ist, dass Stochastic Collocation ähnliche Ergebnisse für eine geringere Anzahl an Collocation Points erzielt.

Trunc	Mean (\mathbb{E}_{MC})	Varianz (\mathbb{V}_{MC})	MSE	RMSE
2	0.577406	$1.90039e - 07$	$1.9003941e - 12$	$1.3785478e - 06$
3	0.577507	$2.06408e - 07$	$2.0640794e - 12$	$1.4366904e - 06$
4	0.577536	$2.1697e - 07$	$2.1696972e - 12$	$1.4729892e - 06$
5	0.577538	$2.14394e - 07$	$2.1439404e - 12$	$1.4642201e - 06$
6	0.577552	$2.27247e - 07$	$2.2724658e - 12$	$1.50747e - 06$
7	0.577567	$2.59024e - 07$	$2.5902369e - 12$	$1.6094213e - 06$
8	0.577583	$2.82419e - 07$	$2.8241874e - 12$	$1.6805319e - 06$
9	0.577592	$3.20001e - 07$	$3.2000107e - 12$	$1.7888574e - 06$
10	0.577596	$3.55404e - 07$	$3.5540376e - 12$	$1.8852155e - 06$
15	0.577606	$4.14174e - 07$	$4.1417445e - 12$	$2.0351276e - 06$
20	0.577612	$5.00946e - 07$	$5.0094566e - 12$	$2.2381815e - 06$

Tabelle 8: Mittelwert, Varianz, MSE und RMSE berechnet mit Monte-Carlo-Methode, Samples = 100 000, SpaceLevel = 5 für das elliptische Modellproblem (10.1).

10.4.2 UQ - Einfluss des SpaceLevels auf Erwartungswert und Varianz

Bevor wir zum Einfluss der stochastischen Größen wie `StochLevel` und `trunc` auf den Erwartungswert und die Varianz kommen, betrachten wir kurz die Abhängigkeit der beiden Größen vom räumlichen Diskretisierungslevel in den Abbildungen 22 und 23.

Der Mittelwert in Abbildung 22 zeigt wenig Abhängigkeit vom gewählten `SpaceLevel`, mit einem einzigen Ausreißer für `SpaceLevel= 2`. Betrachtet man den rechten Plot so zeigen sich Schwankungen auf sehr geringem Niveau.

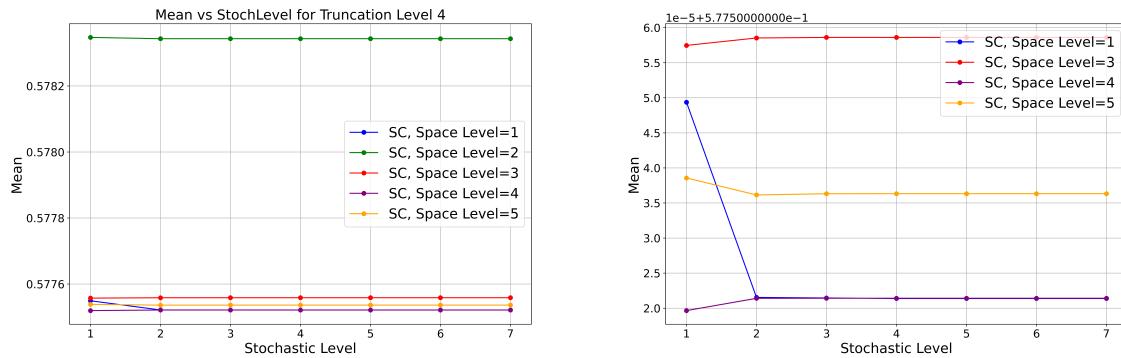


Abbildung 22: Mean vs. `StochLevel` für festes `trunc= 4` für verschiedene `SpaceLevel`. Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).

Die Varianz zeigt in Abbildung 23 eine abnehmende Tendenz in Abhängigkeit des `SpaceLevel`. Je höher feiner also die Zerlegung in Finite-Elemente, desto geringere Varianzen zeigt das Zielfunktional.

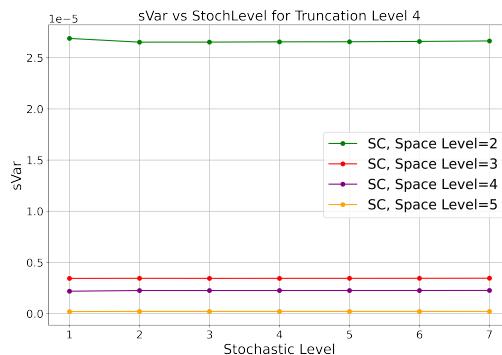


Abbildung 23: `sVar` vs. `StochLevel` für festes `trunc= 4` für verschiedene `SpaceLevel`. Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).

10.4.3 UQ - Erwartungswert

Wir halten zunächst ein räumliches Diskretisierungslevel von 5 fest und betrachten das Verhalten des Erwartungswerts für verschiedene stochastische Dimensionen.

Trunc	StochLevel	Samples	Mean (\mathbb{E}_{sc})	MSE	RMSE
3	1	7	0.577510	$3.235343e - 08$	0.000180
3	2	25	0.577507	$8.482995e - 09$	0.000092
3	3	69	0.577508	$8.482995e - 09$	0.000055
3	4	177	0.577508	$1.208636e - 09$	0.000035
3	5	441	0.577508	$4.914288e - 10$	0.000022
3	6	1 073	0.577508	$2.060767e - 10$	0.000014
3	7	2 561	0.577508	$8.907806e - 11$	0.000009
4	1	9	0.577539	$2.226498e - 08$	0.000149
4	2	41	0.577536	$5.344981e - 09$	0.000073
4	3	137	0.577536	$1.594284e - 09$	0.000040
4	4	401	0.577536	$5.451465e - 10$	0.000023
4	5	1 105	0.577536	$1.979085e - 10$	0.000014
4	6	2 929	0.577536	$7.474311e - 11$	0.000009
4	7	7 537	0.577536	$2.910039e - 11$	0.000005
5	1	11	0.577541	$1.790652e - 08$	0.000134
5	2	61	0.577537	$3.546235e - 09$	0.000060
5	3	241	0.577538	$8.932642e - 10$	0.000030
5	4	801	0.577538	$2.686566e - 10$	0.000016
5	5	2 433	0.577538	$8.844576e - 11$	0.000009
5	6	6 993	0.577538	$3.077504e - 11$	0.000006
5	7	19 313	0.577538	$1.114502e - 11$	0.000003

Tabelle 9: Erwartungswert und MSE, RMSE berechnet mit Stochastic Collocation auf `SpaceLevel = 5` für das elliptische Modellproblem (10.1).

Betrachtet man die Werte in Tabelle 9, so fällt auf, dass die Dünngitterquadratur eine sehr geringe Anzahl an Collocation Points (Samples) benötigt, um vergleichbare Ergebnisse für den Erwartungswert des Zielfunktional zu erhalten. Über alle stochastischen Dimensionen und stochastischen Levels hinweg verhält sich der Erwartungswert ferner sehr stabil und zeigt kaum bis gar keine Schwankungen. Dieses Verhalten zeigt sich ebenfalls in Abbildung 24.

Zur genauen Analyse des Einflusses des räumlichen Diskretisierungslevels auf den Erwartungswert betrachten wir zusätzlich noch den Mittelwert der Erwartungswerte über alle stochastische Dimensionen und stochastische Levels links in Abbildung 25. Die gewonnenen Daten aus M++ werden hierfür nach `SpaceLevel` gruppiert, anschließend der Mittelwert der Erwartungswerte gebildet und gegen `SpaceLevel` geplottet.

Zu erkennen ist, dass sich die Erwartungswerte insgesamt mit höherem `SpaceLevel` stabilisieren und im Mittel angleichen. Dieser Trend zeigt sich auch bei Betrachtung der

Variabilität der Erwartungswerte über alle stochastische Dimensionen in Abhängigkeit des stochastischen Level. Eine Erhöhung des SpaceLevel verringert für jedes betrachtete stochastische Level die Variabilität der berechneten Erwartungswerte über alle betrachteten stochastischen Dimensionen hinweg.

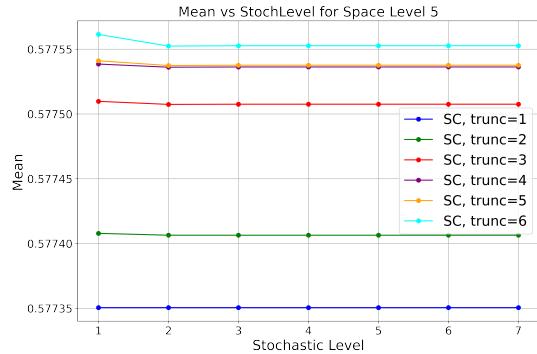


Abbildung 24: Mean vs. StochLevel für verschiedene stochastische Dimensionen und SpaceLevel = 5. Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).

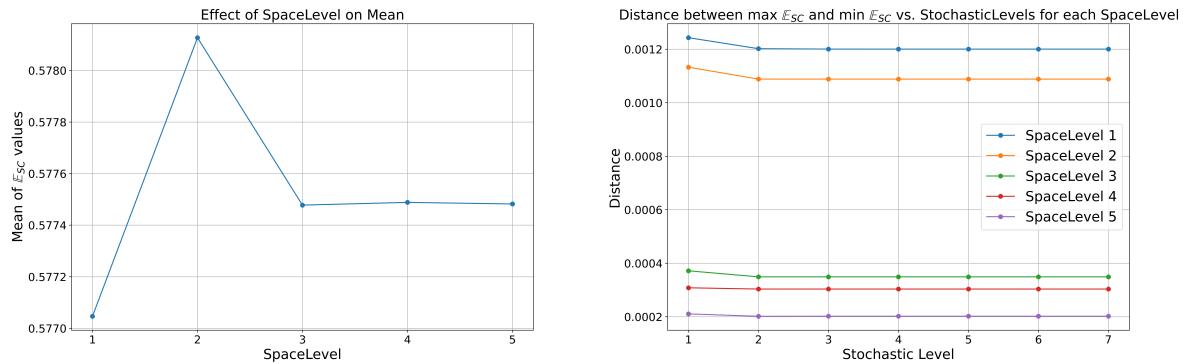


Abbildung 25: Links: Mittelwerte der durch Stochastic Collocation berechneten Erwartungswerte in Abhängigkeit des SpaceLevel. Rechts: Maximaler Abstand zwischen minimalem und maximalem Erwartungswert über alle stochastischen Dimensionen hinweg für jedes StochLevel. Elliptische Modellproblem (10.1).

Der Vergleich der mit Stochastic Collocation errechneten Erwartungswerte aus Tabelle 9 und den entsprechenden Referenzwerte aus Abschnitt 10.4.1 liefert zum Schluss noch die Werte in Tabelle 10. Wie vermutet, nähern sich die Werte der Stochastic Collocation den Referenzwerten an. Wieder sei angemerkt, dass die Monte-Carlo Werte für eine deutlich höhere Anzahl an Samples (100 000) und damit verbunden einem deutlich erhöhten numerischen Aufwand errechnet wurden. Der Effizienzgewinn durch Verwendung der Dünngitterquadratur ist erheblich.

Trunc	StochLevel	Samples	$ \mathbb{E}_{MC} - \mathbb{E}_{SC} $	$ \frac{1}{\sqrt{3}} - \mathbb{E}_{SC} $
3	1	7	$3.0e - 06$	$1.5973e - 04$
3	2	25	0.0	$1.5673e - 04$
3	3	69	$1.0e - 6$	$1.5773e - 04$
3	4	177	$1.0e - 6$	$1.5773e - 04$
3	5	441	$1.0e - 6$	$1.5773e - 04$
3	6	1 073	$1.0e - 6$	$1.5773e - 04$
3	7	2 561	$1.0e - 6$	$1.5773e - 04$
4	1	9	$3.0e - 06$	$1.8873e - 04$
4	2	41	0	$1.8573e - 04$
4	3	137	0	$1.8573e - 04$
4	4	401	0	$1.8573e - 04$
4	5	1 105	0	$1.8573e - 04$
4	6	2 929	0	$1.8573e - 04$
4	7	7 537	0	$1.8573e - 04$
5	1	11	$3.0e - 06$	$1.9073e - 04$
5	2	61	$1.0e - 06$	$1.8673e - 04$
5	3	241	0	$1.8773e - 04$
5	4	801	0	$1.8773e - 04$
5	5	2 433	0	$1.8773e - 04$
5	6	6 993	0	$1.8773e - 04$
5	7	19 313	0	$1.8773e - 04$

Tabelle 10: Vergleich berechneter Erwartungswert durch Stochastic Collocation (\mathbb{E}_{SC}) auf SpaceLevel = 5 und Referenzwert (\mathbb{E}_{MC}) aus Tabelle 8 sowie theoretisch vermuteter Erwartungswert.

10.4.4 UQ - Varianz

Wir betrachten die durch Stochastic Collocation errechnete Varianz des Zielfunktional für verschiedene stochastische Dimensionen.

Trunc	StochLevel	Samples	Varianz (V_{SC})
3	1	7	2.264740e - 07
3	2	25	2.120750e - 07
3	3	69	2.118480e - 07
3	4	177	2.139290e - 07
3	5	441	2.167200e - 07
3	6	1 073	2.211200e - 07
3	7	2 561	2.281290e - 07
4	1	9	2.003850e - 07
4	2	41	2.191440e - 07
4	3	137	2.184170e - 07
4	4	401	2.186040e - 07
4	5	1 105	2.186890e - 07
4	6	2 929	2.189230e - 07
4	7	7 537	2.193300e - 07
5	1	11	1.969720e - 07
5	2	61	2.163200e - 07
5	3	241	2.152770e - 07
5	4	801	2.151940e - 07
5	5	2 433	2.151890e - 07
5	6	6 993	2.152100e - 07
5	7	19 313	2.152440e - 07

Tabelle 11: Varianz berechnet von Stochastic Collocation auf SpaceLevel = 5 für das elliptische Modellproblem (10.1).

Tabelle 11 zeigt zunächst die Varianz für SpaceLevel= 5 in Abhängigkeit vom stochastischen Level und den verschiedenen stochastischen Dimensionen. Erkennbar ist, dass sich die Varianz bereits bei einer sehr niedrigen stochastischen Dimension auf einem stabilen Level und in einer sehr kleinen Größenordnung bewegt. Die Hinzunahme von mehr Collocation Points bei gleichbleibender stochastischer Dimension führt zu einer vernachlässigbar kleinen Änderung in der Varianz. Entsprechend ist eine sinnvolle Kontrolle der Varianz nur bedingt über das stochastische Level und mehr über die Wahl der stochastischen Dimension sowie des räumlichen Diskretisierungslevels möglich. Vergleicht man die errechneten Werte durch Stochastic Collocation in Tabelle 11 mit den Referenzwerten in Tabelle 8, so ist deutlich, dass SC ein beinahe identisch niedriges Niveau der Varianz wie MC mit 100 000 Samples erreicht. Der Zugewinn an Effizienz ist dabei offensichtlich durch die Verwendung von weniger als 20 000 Funktionsauswertungen im Vergleich zu vollen 100 000 enorm.

Wir betrachten noch die Varianz in Abhängigkeit des `SpaceLevel` und der stochastischen Dimension. Abbildung 26 zeigt die Varianz für `SpaceLevel` = 2,3 und 27 für `SpaceLevel` = 4,5. Es wurde jeweils auf die stochastische Dimension 1 und 2 verzichtet, da einzelne Ausreißer für diese Dimensionen den Plot unbrauchbar machen.

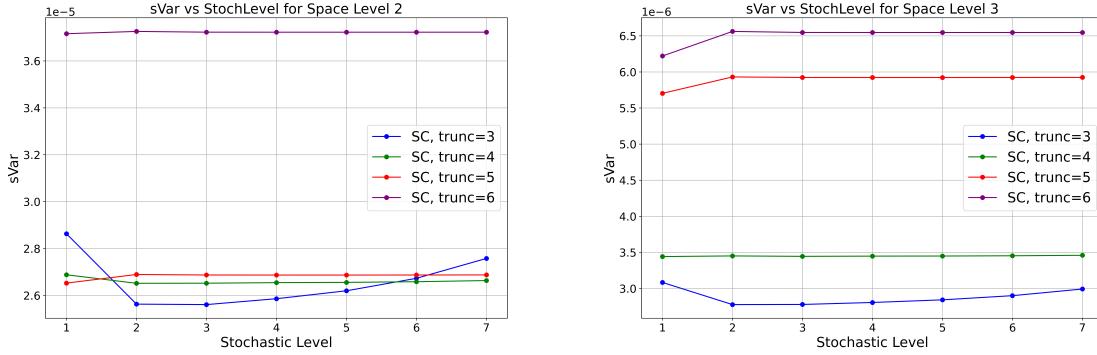


Abbildung 26: sVar vs. StochLevel für verschiedene stochastische Dimensionen und `SpaceLevel` = 2,3. Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).

Betrachtet man `SpaceLevel` = 3,4, so ist erkennbar, dass die Varianz in der stochastischen Dimension wachsend ist. Für `SpaceLevel` = 2,5 ergibt sich die selbe Beobachtung, mit den Ausnahmen `trunc=4,5`. Folglich minimiert sich die Varianz tendenziell für niedrige stochastische Dimensionen.

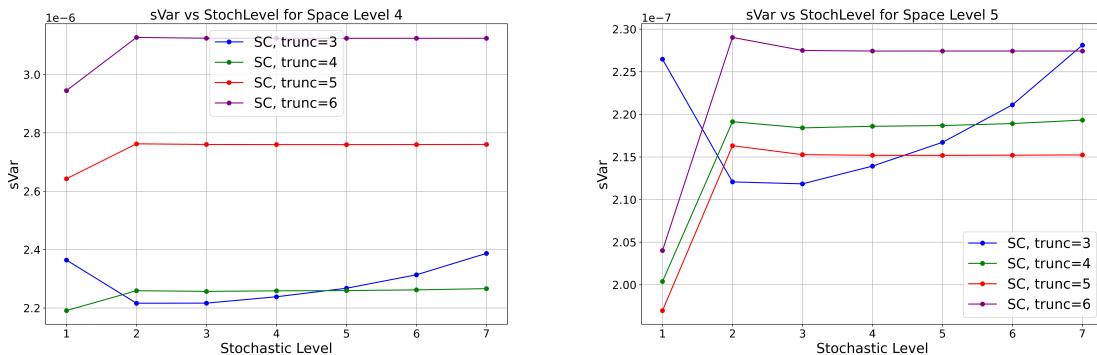


Abbildung 27: sVar vs. StochLevel für verschiedene stochastische Dimensionen und `SpaceLevel` = 4,5. Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).

10.4.5 Zusammenfassung Stochastic Collocation

Insgesamt lassen sich bei Verwendung von Stochastic Collocation zur Uncertainty Quantification die Effekte in Tabelle 12 resultieren.

	RMSE	Erwartungswert	Varianz	Aufwand
SpaceLevel ↑	↓↓↓	↑	↓↓	↑
Stochastisches Level ↑	↓↓	↑↑	↑ →	↑↑
Truncation ↑	↓	↑	↑↓	↑↑↑

Tabelle 12: Einfluss von SpaceLevel, StochLevel und trunc bei Verwendung von Stochastic Collocation auf den RMSE, die Approximation des Erwartungswert und auf die Varianz für das Stochastische Modellproblem (10.1).

Das räumliche Diskretisierungslevel SpaceLevel zeigt auf den RMSE die in Abbildung 17 dargestellten Effekte. Allgemein ist eine Abnahme des RMSE mit steigendem SpaceLevel zu beobachten. Der Erwartungswert stabilisiert sich bei Verwendung eines höheren SpaceLevel, gut zu erkennen in Abbildung 25. Für die Varianz ergeben sich die Effekte in den Abbildungen 26 und 27. Ein steigendes SpaceLevel sorgt für eine insgesamt geringere Varianz. Der numerische Aufwand wächst mit dem SpaceLevel, wobei hauptsächlich die Berechnung der eigentlichen Lösung des Modellproblems steigt im Aufwand.

Das stochastische Level StochLevel der Dünngitterquadratur zur Uncertainty Quantification sorgt wie erwartet für eine Reduktion des RMSE und gleichzeitig für eine bessere Approximation des Erwartungswerts. Insbesondere sei auf die Ergebnisse in Tabelle 10 hingewiesen. Die Abbildungen 26 und 27 zeigen insgesamt entweder ein stabiles oder leicht steigendes Niveau der Varianz für die verschiedenen StochLevel. Der numerische Aufwand wächst mit steigendem StochLevel durch die Verwendung von mehr Collocation Points zur Approximation des Integrals.

Die stochastische Dimension trunc hat insgesamt einen geringeren Einfluss auf den RMSE. Mit zunehmender stochastischer Dimension sinkt der RMSE. Abbildungen 26 und 27 zeigen steigende Varianzen für steigende Dimensionen, Tabelle 11 teilweise sinkende Varianzen. Insgesamt ist der Effekt auf die Varianz nicht eindeutig und abhängig von der Wahl der anderen Parameter. Der Aufwand steigt hingegen sehr deutlich, dabei fällt hauptsächlich die Berechnung der Eigenwerte in der KL-Expansion zur Approximation der Permeabilität ins Gewicht.

10.5 Vergleich zwischen Stochastic Collocation und Monte-Carlo

Um Stochastic Collocation mit einer bereits implementierten Methode zu vergleichen, werden wir die durch Monte-Carlo berechneten Werte hinzunehmen. Um die Vergleichbarkeit zu gewährleisten, verwenden wir statt dem stochastischen Level die Anzahl an Collocation Points, beziehungsweise Samples. Hierbei wird die Anzahl der Samples für Monte-Carlo gleich der Anzahl an Quadraturpunkten bei Verwendung von Stochastic Collocation mit der Dünngitterquadratur gesetzt. Um Vergleichbarkeit zwischen den einzelnen Abschnitten zu gewährleisten, werden wir im Folgenden mit einem festen räumlichen Diskretisierungslevel von `SpaceLevel= 5` rechnen.

10.5.1 UQ - Vergleich RMSE

Wir vergleichen zunächst das Verhalten des RMSE für die stochastischen Dimensionen 4 und 6 zwischen Stochastic Collocation und der Monte-Carlo-Methode.

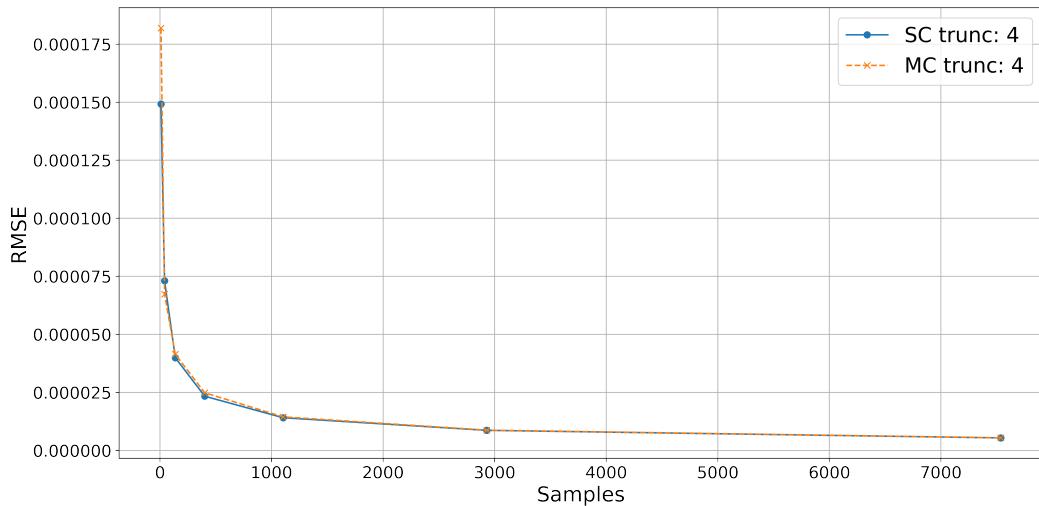


Abbildung 28: RMSE durch Monte-Carlo und Stochastic Collocation in Abhängigkeit der Anzahl der Collocation Points beziehungsweise der MC Sample Anzahl für die stochastische Dimension 4 und `SpaceLevel= 5`.

Abbildung 28 zeigt das Verhalten des RMSE für die stochastische Dimension `trunc= 4` und der Anzahl an Collocation Points. Beide Verfahren zeigen ein sehr ähnliches Verhalten, wobei die Dünngitterquadratur ein marginal besseres Fehlerverhalten für eine geringe Anzahl an Samples ($\leq 1\,000$) aufweist.

Das Erhöhen der stochastischen Dimension auf 6 in Abbildung 29 zeigt wie erwartet zwar insgesamt eine Reduktion des RMSE für beide Verfahren, die Verläufe unterscheiden sich aber weiterhin nicht signifikant. Tabelle 13 zeigt die tatsächlich errechneten Werte für beide Methoden. Wieder ist ersichtlich, dass sich das Verhalten des RMSE nicht signifikant unterscheidet.

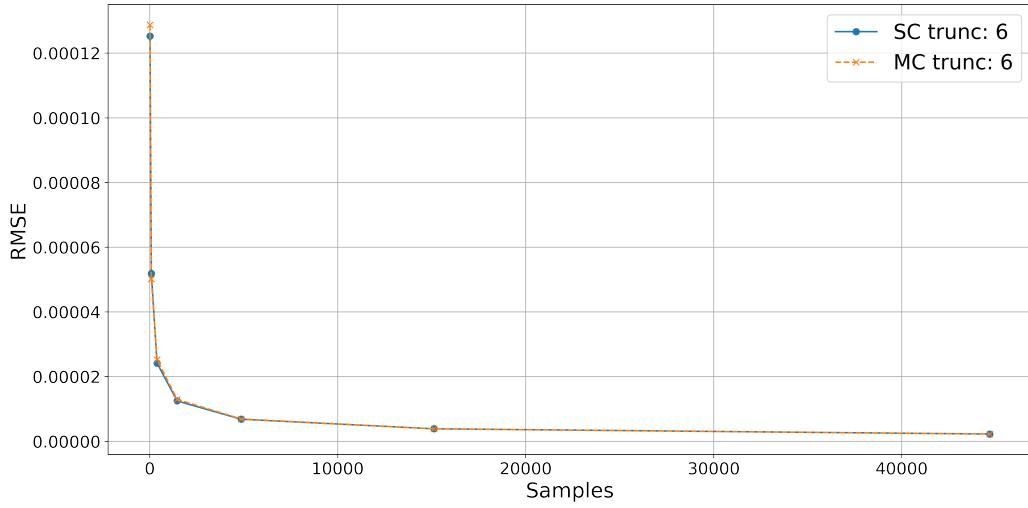


Abbildung 29: RMSE durch Monte-Carlo und Stochastic Collocation in Abhängigkeit der Anzahl der Collocation Points beziehungsweise der MC Sample Anzahl für die stochastische Dimension 6 und SpaceLevel= 5, elliptisches Modellproblem (10.1).

Trunc	Samples	RMSE _{SC}	RMSE _{MC}	RMSE _{MC} – RMSE _{SC}
4	9	1.490000e – 04	1.819121e – 04	3.291210e – 05
4	41	7.300000e – 05	6.731495e – 05	5.685050e – 06
4	137	4.000000e – 05	4.141920e – 05	1.419200e – 06
4	401	2.300000e – 05	2.482060e – 05	1.820600e – 06
4	1105	1.400000e – 05	1.444382e – 05	4.438200e – 07
4	2929	9.000000e – 06	8.732197e – 06	2.678030e – 07
4	7537	5.000000e – 06	5.432230e – 06	4.322300e – 07
6	13	1.250000e – 04	1.287072e – 04	3.707200e – 06
6	85	5.200000e – 05	5.020307e – 05	1.796930e – 06
6	389	2.400000e – 05	2.524818e – 05	1.248180e – 06
6	1457	1.200000e – 05	1.294627e – 05	9.462700e – 07
6	4865	7.000000e – 06	6.908056e – 06	9.194400e – 08
6	15121	4.000000e – 06	3.873041e – 06	1.269590e – 07
6	44689	2.000000e – 06	2.254632e – 06	2.546320e – 07

Tabelle 13: Vergleich des RMSE für Stochastic Collocation (RMSE_{SC}) und Monte-Carlo (RMSE_{MC}) auf SpaceLevel= 5 für das elliptische Modellproblem (10.1).

10.5.2 UQ - Vergleich Erwartungswert

Wir widmen uns dem Erwartungswert und vergleichen erneut Stochastic Collocation mit der Monte-Carlo-Methode für festes `SpaceLevel`= 5.

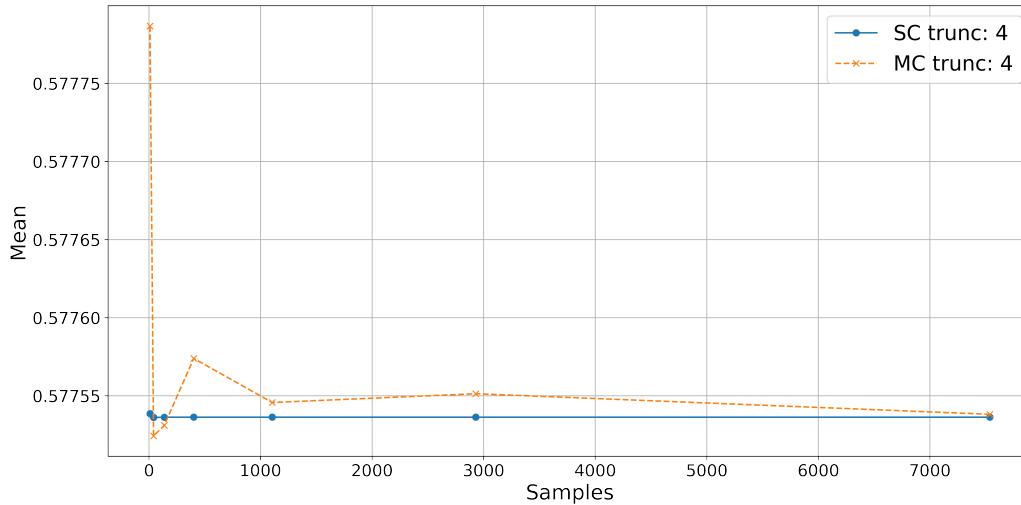


Abbildung 30: Berechneter Erwartungswert durch Monte-Carlo und Stochastic Collocation in Abhängigkeit der Anzahl der Collocation Points beziehungsweise der MC Sample Anzahl für die stochastische Dimension 4 und `SpaceLevel`= 5, elliptisches Modellproblem (10.1).

Abbildung 30 zeigt zunächst den Erwartungswert für die stochastische Dimension 4. Zu erkennen ist, dass die Verwendung von Stochastic Collocation insgesamt zu einem deutlich stabileren Verhalten führt. Der Erwartungswert weist für eine geringe Anzahl an Samples noch sehr kleine Schwankungen auf, stabilisiert sich dann aber sofort und bleibt mit steigender Anzahl an Samples sehr stabil. Im direkten Vergleich mit Monte-Carlo ist ersichtlich, dass sich die MC-Methode erst ab einer Sample Anzahl $\geq 7\,000$ dem Wert der Stochastic Collocation annähert. Deutlich zu erkennen ist hier also der Vorteil der SC-Methode, dass eine geringere Anzahl an Samples bereits zu einer deutlich stabileren Approximation des Erwartungswerts führt.

Dieses Verhalten spiegelt sich auch bei einer höheren stochastischen Dimension `trunc`= 6 in Abbildung 31 wider. Für weniger als 15 000 Samples zeigt die MC-Methode starke Variation im Erwartungswert und stabilisiert sich erst danach.

Betrachtet man zusätzlich Tabelle 14, so zeigt sich das stabile Verhalten des Erwartungswerts bei Verwendung von Stochastic Collocation erneut. Die Abweichungen des Mittelwerts vom Referenzwert aus Tabelle 8 ist bei SC im Vergleich zu MC bereits ab einer sehr geringen Anzahl an Samples besser.

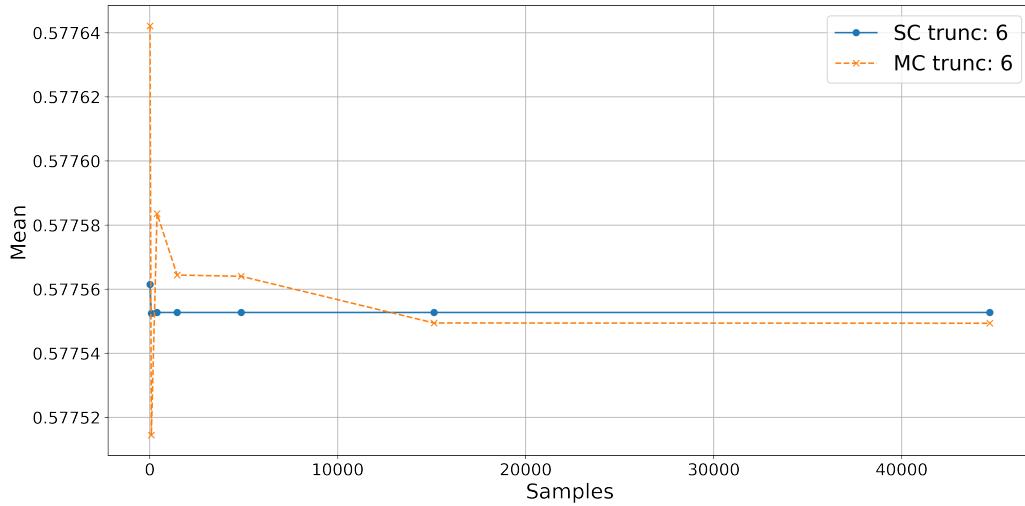


Abbildung 31: Berechneter Erwartungswerts durch Monte-Carlo und Stochastic Collocation in Abhängigkeit von der Anzahl der Collocation Points beziehungsweise der MC Sample Anzahl für die stochastische Dimension 6 und SpaceLevel= 5, elliptisches Modellproblem (10.1).

Trunc	Samples	\mathbb{E}_{SC}	\mathbb{E}_{MC}	$ \mathbb{E}_{SC} - \mathbb{E}_{ref} $	$ \mathbb{E}_{MC} - \mathbb{E}_{ref} $
4	9	0.577539	0.577787	$2.570000e - 06$	$2.510000e - 04$
4	41	0.577536	0.577524	$1.500000e - 07$	$1.200000e - 05$
4	137	0.577536	0.577531	$3.200000e - 07$	$5.000000e - 06$
4	401	0.577536	0.577574	$3.300000e - 07$	$3.800000e - 05$
4	1 105	0.577536	0.577546	$3.300000e - 07$	$1.000000e - 05$
4	2 929	0.577536	0.577551	$3.300000e - 07$	$1.500000e - 05$
4	7 537	0.577536	0.577538	$3.300000e - 07$	$2.000000e - 06$
6	13	0.577561	0.577642	$9.460000e - 06$	$9.000000e - 05$
6	85	0.577552	0.577514	$4.600000e - 07$	$3.800000e - 05$
6	389	0.577553	0.577584	$7.300000e - 07$	$3.200000e - 05$
6	1 457	0.577553	0.577564	$7.300000e - 07$	$1.200000e - 05$
6	4 865	0.577553	0.577564	$7.300000e - 07$	$1.200000e - 05$
6	15 121	0.577553	0.577549	$7.300000e - 07$	$3.000000e - 06$
6	44 689	0.577553	0.577549	$7.300000e - 07$	$3.000000e - 06$

Tabelle 14: Vergleich des Erwartungswert für Stochastic Collocation (\mathbb{E}_{SC}) und Monte-Carlo (\mathbb{E}_{MC}) und Abstand zum Referenzwert \mathbb{E}_{ref} aus Tabelle 8 ($\text{trunc}= 4$: $\mathbb{E}_{ref} = 0.577536$, $\text{trunc}= 6$: $\mathbb{E}_{ref} = 0.577552$) auf SpaceLevel= 5, elliptisches Modellproblem (10.1).

10.5.3 UQ - Vergleich Varianz

Als letztes betrachten wir noch die Varianz im direkten Vergleich zwischen Monte-Carlo und Stochastic Collocation erneut auf `SpaceLevel = 5`.

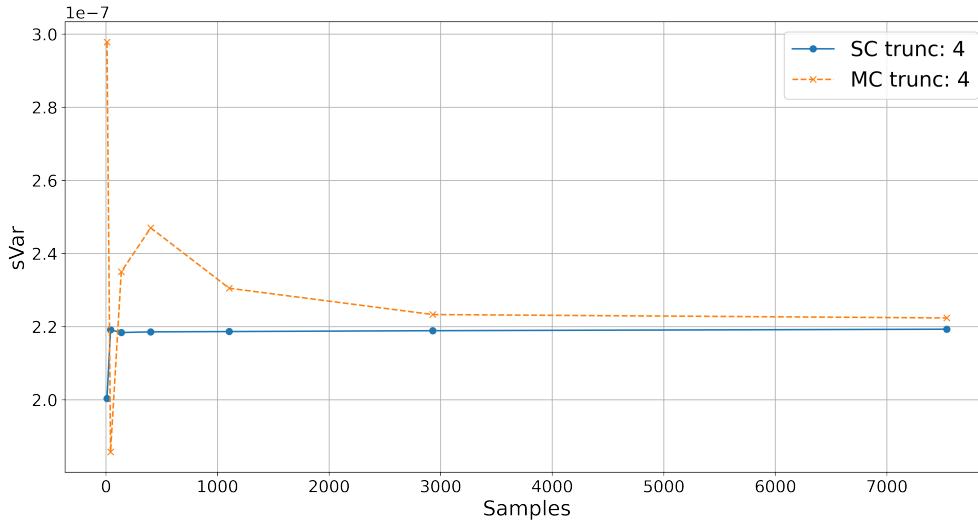


Abbildung 32: Berechneter Erwartungswert durch Monte-Carlo und Stochastic Collocation in Abhängigkeit von der Anzahl der Collocation Points beziehungsweise der MC Sample Anzahl für die stochastische Dimension 4 und `SpaceLevel = 5`, elliptisches Modellproblem (10.1).

Für die stochastische Dimension 4 ergibt sich das Verhalten in Abbildung 32. Deutlich zu erkennen ist, dass sich die Varianz bei Verwendung von Stochastic Collocation sehr viel stabiler verhält. Die Monte-Carlo-Methode ist bis zu einer Sample Anzahl von 3 000 auf einem höheren Niveau und stabilisiert sich erst danach auf einem etwas höheren Level als Stochastic Collocation.

Analog zeigt sich dieses Verhalten für die stochastische Dimension 6 in Abbildung 33. Erst ab einer Sample Anzahl $\geq 15\,000$ ist die Varianz auf dem gleichen Niveau wie Stochastic Collocation beziehungsweise sogar leicht darunter.

Betrachtet man Tabelle 15, so zeigt sich, dass die Varianz bei Verwendung von Stochastic Collocation grundsätzlich niedriger ist als bei gleicher Sample Anzahl und Monte-Carlo. Erst ab der bereits in Abbildung 32 beobachteten hohen Anzahl an Samples fällt die Varianz der MC-Methode unter die von Stochastic Collocation. Der Vergleich mit den Referenzwerten aus Tabelle 8 zeigt, dass Stochastic Collocation wie erwartet die auf 100 000 Samples gerechnete Varianz besser erreicht als die Monte-Carlo-Methode. Lediglich ab 15 121 Samples für die stochastische Dimension 6 liegt MC näher am Referenzwert.

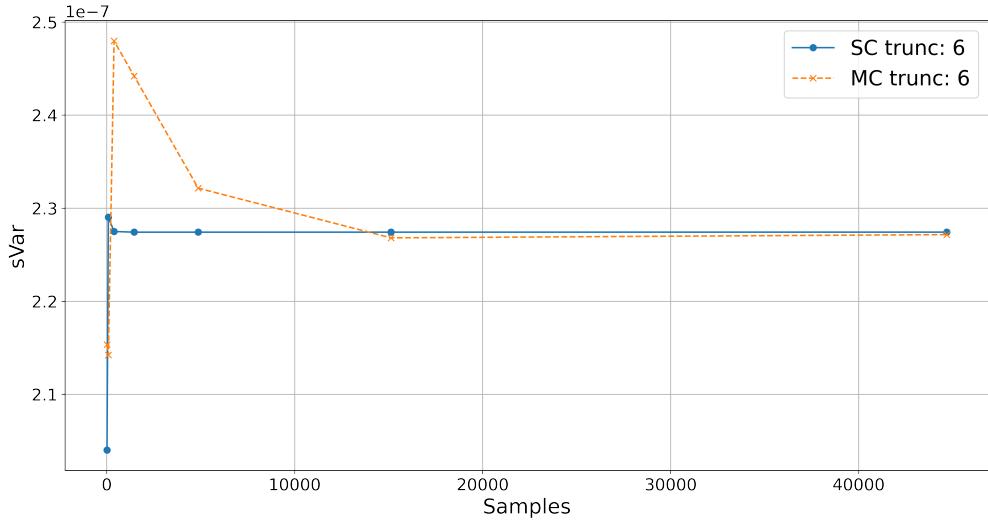


Abbildung 33: Berechnete Varianz durch Monte-Carlo und Stochastic Collocation in Abhängigkeit von der Anzahl der Collocation Points beziehungsweise der MC Sample Anzahl für die stochastische Dimension 6 und SpaceLevel=5, elliptisches Modellproblem (10.1).

Trunc	Samples	\mathbb{V}_{SC}	\mathbb{V}_{MC}	$ \mathbb{V}_{SC} - \mathbb{V}_{ref} $	$ \mathbb{V}_{MC} - \mathbb{V}_{ref} $
4	9	2.003850e - 07	2.978280e - 07	1.6585e - 08	8.0858e - 08
4	41	2.191440e - 07	1.857830e - 07	2.1740e - 09	3.1187e - 08
4	137	2.184170e - 07	2.350300e - 07	1.4470e - 09	1.8060e - 08
4	401	2.186040e - 07	2.470410e - 07	1.6340e - 09	3.0071e - 08
4	1105	2.186890e - 07	2.305290e - 07	1.7190e - 09	1.3559e - 08
4	2929	2.189230e - 07	2.233400e - 07	1.9530e - 09	6.3700e - 09
4	7537	2.193300e - 07	2.224100e - 07	2.3600e - 09	5.4400e - 09
6	13	2.040220e - 07	2.153520e - 07	2.3225e - 08	1.1895e - 08
6	85	2.290330e - 07	2.142300e - 07	1.7860e - 09	1.3017e - 08
6	389	2.275070e - 07	2.479760e - 07	2.6000e - 10	2.0729e - 08
6	1457	2.274320e - 07	2.442020e - 07	1.8500e - 10	1.6955e - 08
6	4865	2.274330e - 07	2.321640e - 07	1.8600e - 10	4.9170e - 09
6	15121	2.274350e - 07	2.268220e - 07	1.8800e - 10	4.2500e - 10
6	44689	2.274370e - 07	2.271710e - 07	1.9000e - 10	7.6000e - 11

Tabelle 15: Vergleich der Varianz für Stochastic Collocation (\mathbb{V}_{SC}) und Monte-Carlo (\mathbb{V}_{MC}) und Abstand zum Referenzwert \mathbb{V}_{ref} aus Tabelle 8 (trunc= 4: $\mathbb{V}_{ref} = 2.1697e - 07$, trunc= 6: $\mathbb{V}_{ref} = 2.27247e - 07$) auf SpaceLevel= 5, elliptisches Modellproblem (10.1).

10.5.4 Zusammenfassung Vergleich Stochastic Collocation und Monte-Carlo

Insgesamt lässt sich sagen, dass Stochastic Collocation im direkten Vergleich mit Monte-Carlo insbesondere im Hinblick auf die benötigte Anzahl an Samples Vorteile bietet. Das beobachtete Verhalten des RMSE für beide Verfahren hat gezeigt, dass insgesamt der Fehler in der Approximation der stochastischen Kenngrößen eine gute Vergleichbarkeit zwischen beiden Verfahren liefert. Gemessen am RMSE approximieren sowohl MC als SC die stochastischen Größen ähnlich gut, zu sehen in Tabelle 13.

Im direkten Vergleich erhalten wir für den Erwartungswert bei Verwendung von Stochastic Collocation aber ein stabileres Verhalten, besonders bei Verwendung einer sehr geringen Anzahl an Samples. Die Monte-Carlo-Methode variiert für weniger als 1 000 Samples deutlich und insgesamt benötigt die Monte-Carlo-Methode eine höhere Anzahl an Samples zur Stabilisierung der Ergebnisse und damit einen erhöhten Rechenaufwand. Die Approximation der erwarteten Zielwerte funktioniert unter Verwendung von Stochastic Collocation ebenfalls besser, zu sehen in Tabelle 14.

Die errechnete Varianz im Ergebnis zeigt für Stochastic Collocation ein deutlich stabileres Verhalten auf einem teilweise geringeren Niveau als Monte-Carlo. Abbildungen 32 und 33 zeigen dies. Auch die Approximation der Referenzwerte in Tabelle 15 liefert, bei einer niedrigen Anzahl an Samples und damit verbunden einem niedrigeren Rechenaufwand, bei Verwendung von Stochastic Collocation genauere Werte im Vergleich zur Monte-Carlo-Methode.

10.6 Verhalten für verschiedene Kovarianzkerne

Wir betrachten jetzt noch kurz das Verhalten der Varianz und des RMSE für verschiedene Parameter im Kovarianzkern

$$C(x, y) = \sigma^2 \exp\left(\frac{-\|x - y\|_p^\alpha}{\lambda^\alpha}\right).$$

Dabei bleibt $p = 2$ fest und untersucht wird für die feste stochastische Dimension 4 und festes SpaceLevel= 5 das Verhalten der Varianz und des RMSE für verschiedene Korrelationslängen λ , Glättungsparameter α und Varianzen σ^2 .

Die einzelnen Parameter haben dabei unterschiedliche Auswirkungen auf den Kovarianzkern, siehe dazu unter anderem [27].

Korrelationslänge λ : λ bestimmt, wie schnell die Korrelation zwischen den Punkten x und y abnimmt, wenn der Abstand zwischen ihnen zunimmt.

Für kleine λ (≤ 1) fällt die Exponentialfunktion schneller ab. Punkte, die relativ nah beieinander liegen, sind daher weniger stark korreliert. Insgesamt ergibt sich eine steilere Abnahme der Kovarianz und wir erwarten, dass die berechnete Varianz größer ist. Große λ (≥ 1) sorgen entsprechend für mehr Korrelation zwischen weiter entfernten Punkten, also einer flacheren Abnahme der Kovarianz. Insgesamt wird eine geringere berechnete Varianz erwartet.

Glättungsparameter α : Dieser Parameter beeinflusst die Glätte des Kovarianzkerns um den Punkt 0, indem er den Exponenten der Distanz $\|x - y\|_2$ bestimmt.

Kleine α sorgen für eine weniger glatte Funktion und es wird erwartet, dass die berechnete Varianz sowie der RMSE höher sind. Dahingegen führt die Wahl eines großen α zu schwächerer Korrelation zwischen entfernten Punkten und einer insgesamt glatteren Funktion. Erwartet wird dann eine geringere berechnete Varianz und ein geringerer RMSE.

Varianz σ^2 : Die Varianz skaliert den Kovarianzkern. Ist σ klein, wird eine geringere berechnete Varianz aufgrund von geringeren Amplituden im stochastischen Prozess erwartet, sowie ein insgesamt niedrigerer RMSE. Große Werte für σ sollten entsprechend zu einer höheren Varianz und einem höheren RMSE führen.

Anmerkung: Auf eine Analyse des Verhaltens des Mittelwerts wird an dieser Stelle verzichtet. Die Werte unterscheiden sich höchstens ab der 4. Nachkommastelle und dort auch nicht signifikant. Für genaue Werte sei an dieser Stelle auf die entsprechenden DataFrames im Jupyter-Notebook in [5] verwiesen.

10.6.1 Korrelationslänge

Wir betrachten zunächst den Effekt der Korrelationslänge λ in Abbildung 34.

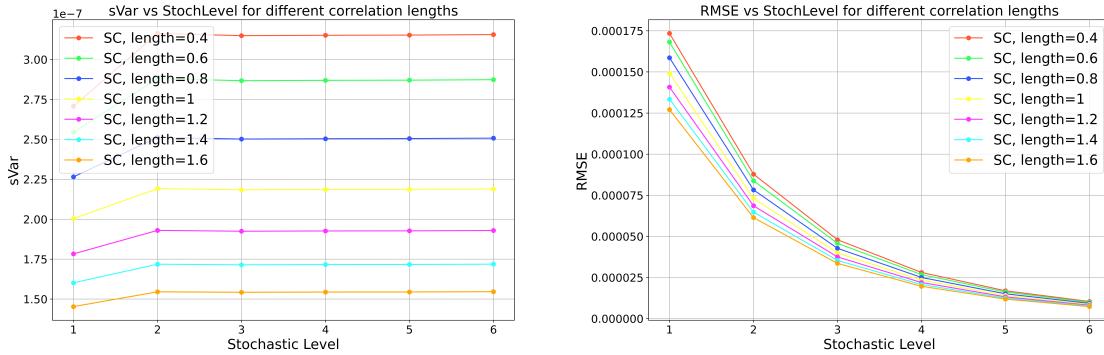


Abbildung 34: Auswirkungen der Korrelationslänge λ des Kovarianzkerns auf die mit Stochastic Collocation berechnete Varianz und den RMSE für $\text{trunc} = 4$, $\text{SpaceLevel} = 5$, $\alpha = 1$ und $\sigma = 1$, elliptisches Modellproblem (10.1).

Deutlich zu erkennen ist die erwartete Abnahme der Varianz mit steigender Korrelationslänge λ . Ferner zeigt sich eine Abnahme des RMSE auf geringem Niveau mit steigendem λ . Insgesamt zeigen sich also die erwarteten Effekte für unterschiedliche Korrelationslängen.

10.6.2 Glättungsparameter

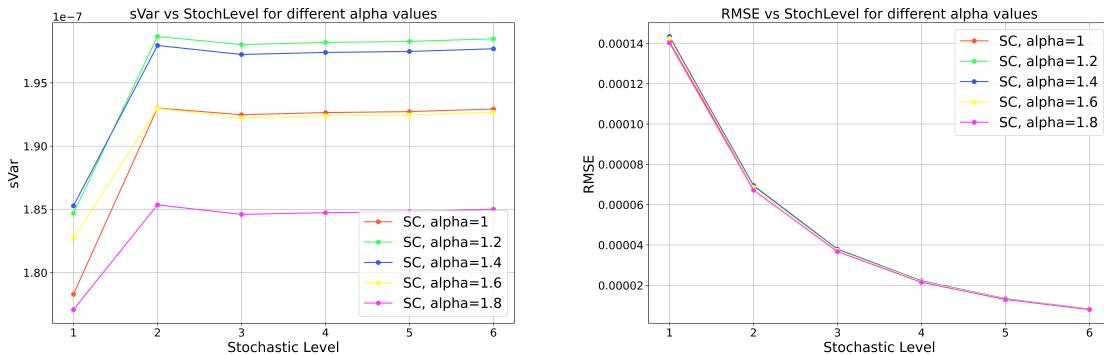


Abbildung 35: Auswirkungen des Glättungsparameters α des Kovarianzkerns auf die mit Stochastic Collocation berechnete Varianz und den RMSE für $\text{trunc} = 4$, $\text{SpaceLevel} = 5$, $\sigma = 1$ und $\lambda = 1.2$, elliptisches Modellproblem (10.1).

Anmerkung: Damit der Glättungsparameter α auch eine Auswirkung auf λ^α hat, wird (nur in diesem Unterabschnitt zur Betrachtung von α) $\lambda = 1.2$ fest gewählt.

Die Auswirkungen von α auf die berechnete Varianz und RMSE des Modellproblems

sind in Abbildung 35 dargestellt. Zu erkennen ist, dass sich die erwartete Abnahme der Varianz mit steigendem α einstellt. Einzige Ausnahme sind $\alpha = 1.2$ und $\alpha = 1.4$. Diese Abweichung könnte durch die Wahl von $\lambda = 1.2$ beeinflusst sein. Der RMSE in Abbildung 35 zeigt keine signifikante Abhängigkeit vom Parameter α . Die Auswirkungen sind in Tabelle 16 dargestellt. Die erwartete Abnahme des RMSE zeigt sich auf sehr niedrigem Niveau nur für die stochastischen Level 1 und 2.

StochLevel	α				
	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8
1	0.000141	0.000143	0.000143	0.000142	0.000140
2	0.000069	0.000070	0.000069	0.000069	0.000067
3	0.000037	0.000038	0.000038	0.000037	0.000037
4	0.000022	0.000022	0.000022	0.000022	0.000021
5	0.000013	0.000013	0.000013	0.000013	0.000013
6	0.000008	0.000008	0.000008	0.000008	0.000008

Tabelle 16: RMSE, berechnet mit Stochastic Collocation, in Abhängigkeit des stochastischen Levels und Glättungsparameter α im Kovarianzkern für $\text{trunc} = 4$, $\text{SpaceLevel} = 5$, $\sigma = 1$ und $\lambda = 1.2$, elliptisches Modellproblem (10.1).

10.6.3 Varianzparameter

Zum Schluss betrachten wir den Varianzparameter σ in Abbildung 36.

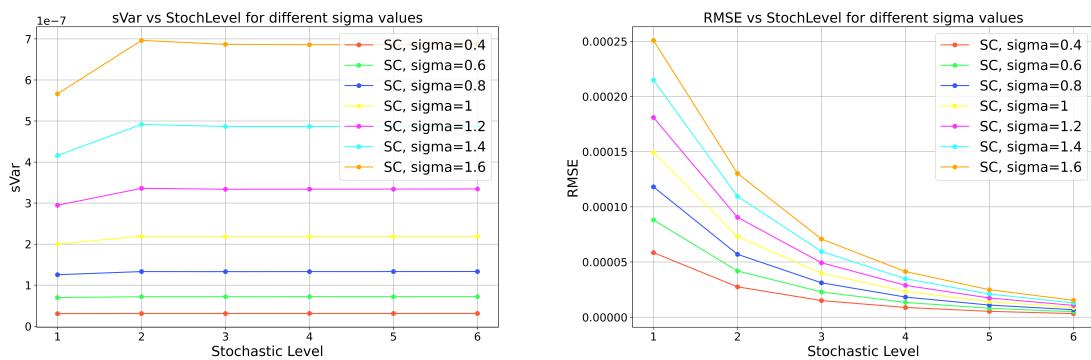


Abbildung 36: Auswirkungen des Varianzparameters σ des Kovarianzkerns auf die mit Stochastic Collocation berechnete Varianz und den RMSE für $\text{trunc} = 4$, $\text{SpaceLevel} = 5$, $\alpha = 1$ und $\lambda = 1$, elliptisches Modellproblem (10.1).

Auch hier erkennen wir das erwartete Verhalten. Für kleine Werte von σ ist die berechnete Varianz und der RMSE kleiner, während eine Erhöhung von σ zum Gegenteil führt. Entsprechend wird auch dieses Verhalten des Modells in den Berechnungen mit Stochastic Collocation widergespiegelt.

10.7 Konvergenzanalyse

Zum Abschluss betrachten wir jetzt noch die Konvergenz im Erwartungswert, also konkret die Abschätzung

$$|\mathbb{E}[Q_{h_l} - Q]| \leq c \cdot h_l^{\alpha_{\text{conv}}},$$

wobei $Q_{h_l} = \|u_{h_l}\|_{L^2(\Omega)}$ die Quantity of Interest ist und Q der theoretische exakte Wert. Es bezeichnet hierbei l das Level und $h_l = 2^{-l}$ die Gitterweite der Finite-Elemente Approximation. Da Q im Allgemeinen nicht bekannt ist, schätzen wir den Konvergenzparameter α_{conv} durch

$$|\mathbb{E}[Q_{h_l} - Q_{h_{l-1}}]| \leq c \cdot h_l^{\alpha_{\text{conv}}}$$

und wenden eine lineare Regression an.

10.7.1 Standard Kovarianzkern

Für die Standardparameter $\lambda = 1$, $\alpha = 1.0$ und $\sigma = 1$ ergeben sich Abbildung 37 sowie die Konvergenzraten in Tabelle 17. Es ist erkennbar, dass sich die Erwartungswerte bei festem stochastischem Level stabil verhalten und keine große Variation im räumlichen Level aufweisen. Die Differenzen $|\mathbb{E}[Q_{h_l} - Q_{h_{l-1}}]|$ sind fallend.

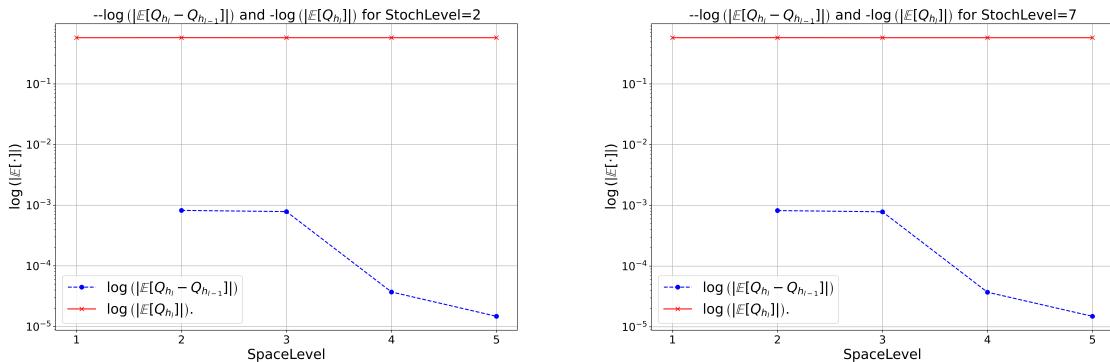


Abbildung 37: $\log(|\mathbb{E}[Q_{h_l} - Q_{h_{l-1}}]|)$ und $\log(|\mathbb{E}[Q_{h_l}]|)$ für $\text{StochLevel}=2, 7$, $\lambda = 1$, $\alpha = 1.0$, $\sigma = 1$.

Die Konvergenzraten aus Tabelle 17 zeigen keine großen Variationen für verschiedene stochastische Level.

StochLevel	1	2	3	4	5	6	7
α_{conv}	2.0579	2.1803	2.1754	2.1752	2.1752	2.1752	2.1752

Tabelle 17: Konvergenzrate α_{conv} für $\text{StochLevel}=1, \dots, 7$, $\lambda = 1$, $\alpha = 1.0$, $\sigma = 1$.

10.7.2 Verschiedene Kovarianzkerne

Variieren wir zunächst die Korrelationslänge λ , so ergeben sich Abbildung 38 und Tabelle 18. Erneut erkennbar ist, dass der Erwartungswert konstant und die Differenzen $|\mathbb{E}[Q_{h_l} - Q_{h_{l-1}}]|$ fallend sind.

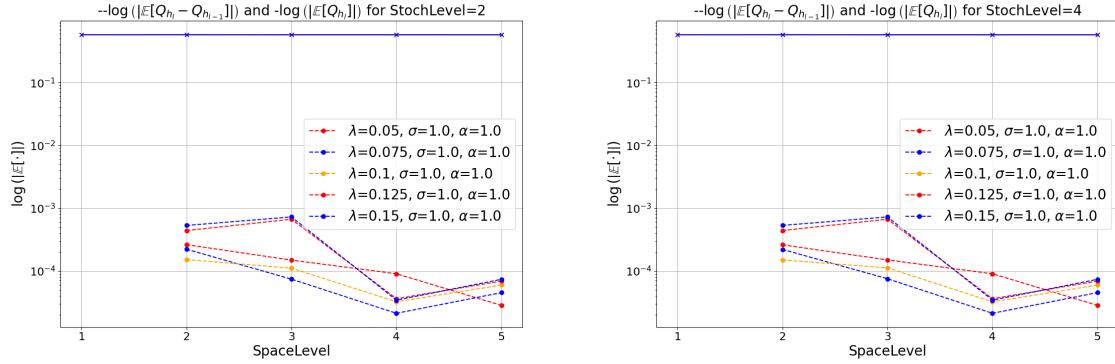


Abbildung 38: $\log(|\mathbb{E}[Q_{h_l} - Q_{h_{l-1}}]|)$ und $\log(|\mathbb{E}[Q_{h_l}]|)$ für $\text{StochLevel} = 2, 4$, $\sigma = 1.0$, $\alpha = 1.0$.

Durch die veränderte Wahl der Parameter, ergeben sich dann auch verschiedene Konvergenzraten in Tabelle 18.

StochLevel= 2					
λ	0.05	0.075	0.1	0.125	0.15
α_{conv}	1.0356	0.8695	0.5829	1.2218	1.2948
StochLevel= 4					
λ	0.05	0.075	0.1	0.125	0.15
α_{conv}	1.0341	0.8685	0.5790	1.2227	1.2958

Tabelle 18: Konvergenzrate α_{conv} für $\text{StochLevel} = 2, 4$ und verschiedene λ mit $\sigma = 1.0$, $\alpha = 1.0$.

Der Parameter λ beeinflusst die Korrelation im stochastischen Prozess. Ein höherer Wert von λ führt zu einer stärkeren Korrelation über größere Entfernungen. Die Werte in Tabelle 18 zeigen, dass die Konvergenzrate mit wachsendem λ (für $\lambda \leq 0.1$) sinkt.

Variieren wir den Glättungsparameter α , so ergeben sich Abbildung 39 und die Konvergenzraten aus Tabelle 19. Es zeigen sich erneut konstante Erwartungswerte und fallende Differenzen $|\mathbb{E}[Q_{h_l} - Q_{h_{l-1}}]|$.

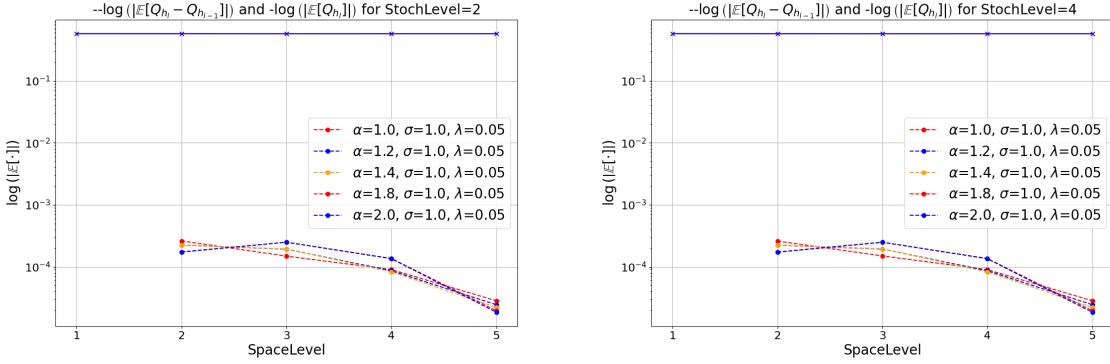


Abbildung 39: $\log(|\mathbb{E}[Q_{h_l} - Q_{h_{l-1}}]|)$ und $\log(|\mathbb{E}[Q_{h_l}]|)$ für $\text{StochLevel} = 2, 4$, $\lambda = 0.05$, $\sigma = 1.0$.

Die Konvergenzraten in Tabelle 18 sind dabei insgesamt höher als die in Tabelle 18, aber weiterhin niedriger als im Standardfall.

StochLevel= 2					
α	1.0	1.2	1.4	1.8	2.0
α_{conv}	1.0356	1.0750	1.1253	1.0309	1.0581
StochLevel= 4					
α	1.0	1.2	1.4	1.8	2.0
α_{conv}	1.0341	1.0729	1.1232	1.0289	1.0562

Tabelle 19: Konvergenzrate α_{conv} für $\text{StochLevel} = 2, 4$ und verschiedene α mit $\lambda = 0.05$, $\sigma = 1.0$.

Der Parameter α steuert die Glattheit des stochastischen Prozesses. Ein höherer Wert von α führt zu einem glatteren Prozess, was typischerweise eine schnellere Konvergenz zur Folge hat. In der Analyse zeigte sich, dass mit zunehmendem α die Konvergenzraten α_{conv} tendenziell höher sind, was bedeutet, dass die Differenz $|\mathbb{E}[Q_{h_l} - Q_{h_{l-1}}]|$ schneller abnimmt.

Bei Veränderungen in der Varianz σ ergeben sich Abbildung 40 und die Konvergenzraten aus Tabelle 20. Auch hier bleiben die Erwartungswerte konstant und die Differenzen $|\mathbb{E}[Q_{h_l} - Q_{h_{l-1}}]|$ sind fallend.

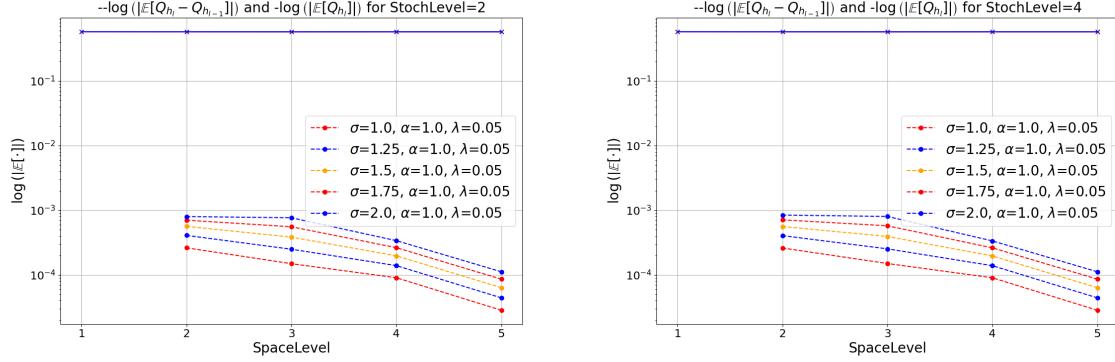


Abbildung 40: $\log(|\mathbb{E}[Q_{h_l} - Q_{h_{l-1}}]|)$ und $\log(|\mathbb{E}[Q_{h_l}]|)$ für $\text{StochLevel}=2, 4$, $\lambda = 0.05$, $\alpha = 1.0$.

Die Konvergenzraten in Tabelle 20 sind wieder niedriger als im Standardfall, bleiben aber bei Variation von σ stabiler als bei Variation von α .

StochLevel= 2					
σ	1.0	1.25	1.5	1.75	2.0
α_{conv}	1.0356	1.0472	1.0420	1.0170	0.9693
StochLevel= 4					
σ	1.0	1.25	1.5	1.75	2.0
α_{conv}	1.0341	1.0459	1.0438	1.0282	1.0004

Tabelle 20: Konvergenzrate α_{conv} für $\text{StochLevel}=2, 4$ und verschiedene σ mit $\lambda = 0.05$, $\alpha = 1.0$.

10.7.3 Zusammenfassung Konvergenzanalyse

Die Konvergenzanalyse hat gezeigt, dass für die Standardparameter $\lambda = \sigma = \alpha = 1$ die Erwartungswerte bei konstanten stochastischen Levels nur wenig signifikante Variationen bei Veränderung der räumlichen Diskretisierungsweite h_l aufweisen. Die Differenzen der Erwartungswerte $|\mathbb{E}[Q_{h_l} - Q_{h_{l-1}}]|$ fallen mit steigenden Levels und liefern somit stabile Konvergenzraten.

Bei Variation der Korrelationslänge λ wird deutlich, dass steigende λ für $\lambda \leq 0.1$ die Konvergenzrate negativ beeinflussen. Für größere λ ist wieder eine Zunahme der Konvergenzrate zu beobachten.

Veränderungen im Glättungsparameter α zeigen ebenfalls einen signifikanten Einfluss auf die Konvergenzgeschwindigkeit. Die Wahl von α um den Wert $\alpha = 1.4$ zeigt dabei die höchste Konvergenzrate.

Auch die Varianz σ^2 des Kovarianzkerns spielt eine Rolle für den Konvergenzparameter. Höhere Varianzen führen tendenziell zu niedrigeren Konvergenzraten. Dies ist darauf zurückzuführen, dass eine größere Varianz im stochastischen Prozess zu höheren Unsicherheiten in der Modellierung führt, was die Konvergenz verlangsamt.

Für die Ergebnisse im vorherigen Abschnitt ist zu beachten, dass Berechnungen auf höheren räumlichen Diskretisierungslevels der Finite-Elemente-Methode sinnvoll wären, um die Werte von α_{conv} mit mehr Regressionspunkten genauer bestimmen zu können. Aufgrund fehlender paralleler Implementierung ist zum Zeitpunkt der Beendigung dieser Arbeit das Rechnen über Level 5 hinaus nicht in vertretbarer Zeit umsetzbar. Eine Validierung der Ergebnisse mit mehr Levels wäre hier angebracht.

11 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde die Dünngitterquadratur auf Grundlage von Interpolation mit hierarchischen Basisfunktionen für Funktionen mit mehrdimensionalem Definitionsbereich als Quadraturalgorithmus hergeleitet. Dabei wurden die bekannten linearen Hutfunktionen zur Interpolation verwendet und die anschließend auftretenden Tensorprodukte durch Ausnutzen der Eigenschaften der hierarchischen Interpolationskoeffizienten optimiert. Das Resultat ist der Algorithmus 1 der Dünngitterquadratur. Diese Quadraturformel umgeht den zu Beginn erwähnten Fluch der Dimensionen durch systematische Reduzierung des verwendeten Interpolationsgitters, ohne dabei erhebliche Verluste an Approximationsgüte zu erleiden. Als mögliche Erweiterung der Dünngitterquadratur wurde bereits in Abschnitt 4.3.1 auf die Verwendung eines adaptiven Verfahrens hingewiesen. Weiteres zur adaptiven Dünngitterquadratur findet sich beispielsweise in [20]. Ferner sind die Wahl der Basisfunktionen und die Regel zur Auswahl der Interpolationspunkte des dünnen Gitters entscheidend für den tatsächlich entstehenden Quadraturalgorithmus. Um einen Überblick über weitere Arten von dünnen Gittern zu erhalten, sei hier auf Abschnitt 4.4 sowie [22] verwiesen. Ferner bietet [2] einen guten Überblick über das Thema.

Abschnitt 5 leitet das in dieser Arbeit betrachtete Potentialströmungsproblem her. Die errechnete Lösung kann Grundlage für die lineare Transportgleichung sein. Mit ihr kann beispielsweise der Transport von Öl oder anderen Stoffen durch die simulierte Bodenschicht mathematisch modelliert werden. Behält man das stochastisch modellierte Permeabilitätsfeld bei, so kann man auch für diese Gleichung Uncertainty Quantification für Größen wie Masse oder Konzentration von einfließenden Schadstoffen durchführen. Eine Behandlung genau dieser Thematik mit Multilevel-Monte-Carlo-Methoden findet sich beispielsweise in [13] oder in [27]. Interessant wäre auch hier ein Vergleich mit Stochastic Collocation und damit verbunden der Dünngitterquadratur.

Zur numerischen Lösung des Potentialströmungsproblems wurde in Abschnitt 7 der Ansatz über Finite-Elemente-Methoden gewählt. Diese Methode bietet noch viele weitere mögliche Diskretisierungen und Ansatzelemente, sodass eine vollständige Erfassung im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich ist. Für einen Überblick, sei an dieser Stelle ein weiteres Mal auf [29] verwiesen.

Um stochastische Unsicherheit in unser Modell zu implementieren, wurde in Abschnitt 8 Stochastic Collocation als Methode und direkte Implementierung der Dünngitterquadratur zur Approximation hochdimensionaler stochastischer Integrale gewählt. Eine sehr umfassende Einführung in das noch junge Gebiet der Uncertainty Quantification findet sich in [31]. Zur stochastischen Modellierung der Permeabilität wurde das Kosambi–Karhunen–Loève-Theorem als Ansatz gewählt. Bei Verwendung von Monte-Carlo-Methoden bietet sich aber auch die Implementierung über Circulant Embedding zur Erzeugung des stochastischen Zufallsfeldes an. Ausführungen zu diesem Thema finden sich beispielsweise in [27].

Die abschließende Betrachtung der numerischen Ergebnisse ab Abschnitt 10.1 hat gezeigt, dass für ausgewählte Testfunktionen die Dünngitterquadratur im zweidimensionalen Fall eine gute Alternative zur Vollgitterquadratur darstellt. Der numerische Aufwand wurde reduziert, die Vergrößerung des Fehlers aber gleichzeitig auf einem niedrigen Niveau gehalten. Damit ist es gelungen, dem Fluch der Dimensionen zumindest teilweise zu entkommen.

Die Dünngitterquadratur zur Uncertainty Quantification am elliptischen Modellproblem der Regenwasserversickerung wurde ab Abschnitt 10.2 betrachtet. Es hat sich gezeigt, dass diese Methode insbesondere im Vergleich zur Monte-Carlo-Methode entscheidende Vorteile im Hinblick auf die benötigte Anzahl an Collocation Points bietet und gleichzeitig bereits bei geringem Rechenaufwand gute Approximationen an die gewünschten Zielgrößen liefert. Interessant wäre hier noch der Vergleich mit Multilevel-Monte-Carlo Methoden, zu finden beispielsweise in [37], auch um die Weiterentwicklung von Monte-Carlo mit Stochastic Collocation zu vergleichen.

12 Anhang

Abbildungsverzeichnis

1	Plot der nodalen Basisfunktionen $\varphi_{l,k}$ für $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$ aus der Hutfunktion im Raum V_3	18
2	Hierarchische Basisfunktionen $\varphi_{j,k}$ im Raum V_3 der stückweise linearen Funktionen bezüglich des Gitters G_l	19
3	Plot der zweidimensionalen Hutfunktion $\varphi_{(2,1),(2,2)}$ als Tensorprodukt der eindimensionalen gestauchten Hutfunktionen $\varphi_{(2,1)}$ und $\varphi_{(2,2)}$	21
4	Hierarchische Interpolation und verwendete Interpolationspunkte auf vollem Gitter mit Level $L = (4, 4)$ der Funktion $f(x, y) = x^2 + y^2$	26
5	Hierarchische Interpolation und verwendete Interpolationspunkte auf dünnem Gitter mit Level $L = 4$ der Funktion $f(x, y) = x^2 + y^2$	27
6	Beispielhafte erzeugte dünne Gitter für die Level $L = 4$ und $L = 6$ auf $[0, 1]^2$ beziehungsweise $[0, 1]^3$	28
7	Interpolationspunkte eines dünnen Gitters auf dem Einheitsquadrat $[0, 1]^2$ in Abhängigkeit des Multiindex.	29
8	SparseGrids erzeugt mit der Clenshaw-Curtis-Regel auf $[-1, 1]^2$ für die Level 3, 5. Bild entnommen aus dem Jupyter-Notebook <i>sparse-grids.ipynb</i> in [4].	36
9	Zulässige (links) und nicht zulässige (rechts) Finite-Elemente-Zerlegung in Dreiecke eines beliebigen Gebietes.	50
10	Durchschnittliche Rechenzeit und durchschnittlicher Quadraturfehler für Voll- und Dünngitterquadratur für Polynome bis zum Grad 10 in Abhängigkeit des Levels L	62
11	Quadraturfehler der Voll- und Dünngitterquadratur in Abhängigkeit des Polynomgrades auf $L = 8$	63
12	Absoluter Quadraturfehler bei Quadratur auf dem Einheitsquadrat $[0, 1]^2$ für volles und dünnes Gitter mit logarithmierter y-Achse in Abhängigkeit der Grade n von $f_n(x, y) = (xy)^n$	63
13	Absoluter Quadraturfehler bei Quadratur auf dem Einheitsquadrat $[0, 1]^2$ für volles und dünnes Gitter mit logarithmierter y-Achse in Abhängigkeit des Level L für die Funktionen g, f, w, u	65
14	Heatmap der Schachbrett-Funktion $f(x, y, n)$ für $n = 3, 6$ auf dem Einheitsquadrat $[0, 1]^2$	68
15	Realisierung eines Permeabilitätsfelds und u für <code>trunc=4, StochLevel=4, degree=1</code> und PDE-Solver level <code>SpaceLevel = 4</code> des elliptischen Modellproblems (10.1).	70
16	Mit ParaView berechnete Strömungslinien auf dem Strömungsfeld u für <code>trunc=4, StochLevel=4, degree=1</code> und PDE-Solver <code>level=4</code> des elliptischen Modellproblems (10.1).	70

17	RMSE vs. StochLevel für trunc=4 und verschiedene SpaceLevel . Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).	71
18	RMSE vs. StochLevel für trunc=6 und verschiedene SpaceLevel . Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).	72
19	RMSE vs. StochLevel für verschiedene stochastische Dimensionen und SpaceLevel = 5 . Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).	73
20	$\log(\text{RMSE})$ vs. StochLevel für verschiedene stochastische Dimensionen und SpaceLevel = 5 . Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).	73
21	Numerischer Aufwand der Stochastic Collocation, gemessen an der Anzahl an Funktionsauswertungen für verschiedene stochastische Dimensionen (d) bei Verwendung eines dünnen Gitters mit der Clenshaw-Curtis-Rule. Werte aus Tabelle 2.	74
22	Mean vs. StochLevel für festes trunc= 4 für verschiedene SpaceLevel . Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).	76
23	sVar vs. StochLevel für festes trunc= 4 für verschiedene SpaceLevel . Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).	76
24	Mean vs. StochLevel für verschiedene stochastische Dimensionen und SpaceLevel = 5 . Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).	78
25	Links: Mittelwerte der durch Stochastic Collocation berechneten Erwartungswerte in Abhängigkeit des SpaceLevel . Rechts: Maximaler Abstand zwischen minimalem und maximalem Erwartungswert über alle stochastischen Dimensionen hinweg für jedes StochLevel . Elliptische Modellproblem (10.1).	78
26	sVar vs. StochLevel für verschiedene stochastische Dimensionen und SpaceLevel = 2,3 . Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).	81
27	sVar vs. StochLevel für verschiedene stochastische Dimensionen und SpaceLevel = 4,5 . Berechnungen durch Stochastic Collocation für das elliptische Modellproblem (10.1).	81
28	RMSE durch Monte-Carlo und Stochastic Collocation in Abhängigkeit der Anzahl der Collocation Points beziehungsweise der MC Sample Anzahl für die stochastische Dimension 4 und SpaceLevel= 5	83
29	RMSE durch Monte-Carlo und Stochastic Collocation in Abhängigkeit der Anzahl der Collocation Points beziehungsweise der MC Sample Anzahl für die stochastische Dimension 6 und SpaceLevel= 5 , elliptisches Modellproblem (10.1).	84

30	Berechneter Erwartungswert durch Monte-Carlo und Stochastic Collocation in Abhangigkeit der Anzahl der Collocation Points beziehungsweise der MC Sample Anzahl fur die stochastische Dimension 4 und SpaceLevel = 5, elliptisches Modellproblem (10.1)	85
31	Berechneter Erwartungswerts durch Monte-Carlo und Stochastic Collocation in Abhangigkeit von der Anzahl der Collocation Points beziehungsweise der MC Sample Anzahl fur die stochastische Dimension 6 und SpaceLevel = 5, elliptisches Modellproblem (10.1).	86
32	Berechneter Erwartungswert durch Monte-Carlo und Stochastic Collocation in Abhangigkeit von der Anzahl der Collocation Points beziehungsweise der MC Sample Anzahl fur die stochastische Dimension 4 und SpaceLevel = 5, elliptisches Modellproblem (10.1).	87
33	Berechnete Varianz durch Monte-Carlo und Stochastic Collocation in Abhangigkeit von der Anzahl der Collocation Points beziehungsweise der MC Sample Anzahl fur die stochastische Dimension 6 und SpaceLevel = 5, elliptisches Modellproblem (10.1).	88
34	Auswirkungen der Korrelationslange λ des Kovarianzkerns auf die mit Stochastic Collocation berechnete Varianz und den RMSE fur trunc = 4, SpaceLevel = 5, $\alpha = 1$ und $\sigma = 1$, elliptisches Modellproblem (10.1)	91
35	Auswirkungen des Glattungsparameters α des Kovarianzkerns auf die mit Stochastic Collocation berechnete Varianz und den RMSE fur trunc = 4, SpaceLevel = 5, $\sigma = 1$ und $\lambda = 1.2$, elliptisches Modellproblem (10.1)	91
36	Auswirkungen des Varianzparameters σ des Kovarianzkerns auf die mit Stochastic Collocation berechnete Varianz und den RMSE fur trunc = 4, SpaceLevel = 5, $\alpha = 1$ und $\lambda = 1$, elliptisches Modellproblem (10.1)	92
37	$\log(\mathbb{E}[Q_{h_l} - Q_{h_{l-1}}])$ und $\log(\mathbb{E}[Q_{h_l}])$ fur StochLevel = 2, 7, $\lambda = 1$, $\alpha = 1.0$, $\sigma = 1$	93
38	$\log(\mathbb{E}[Q_{h_l} - Q_{h_{l-1}}])$ und $\log(\mathbb{E}[Q_{h_l}])$ fur StochLevel = 2, 4, $\sigma = 1.0$, $\alpha = 1.0$	94
39	$\log(\mathbb{E}[Q_{h_l} - Q_{h_{l-1}}])$ und $\log(\mathbb{E}[Q_{h_l}])$ fur StochLevel = 2, 4, $\lambda = 0.05$, $\sigma = 1.0$	95
40	$\log(\mathbb{E}[Q_{h_l} - Q_{h_{l-1}}])$ und $\log(\mathbb{E}[Q_{h_l}])$ fur StochLevel = 2, 4, $\lambda = 0.05$, $\alpha = 1.0$	96

Tabellenverzeichnis

1	Vergleich der Anzahl an Gitterpunkten zwischen vollem und dünnem Gitter für die Dimensionen 2 und 3 und verschiedene Gitterlevel L	28
2	Anzahl an Gitterpunkten für die Clenshaw-Curtis Quadratur und verschiedene Dimensionen d in Abhängigkeit des Gitterlevel L	37
3	Absoluter und relativer Fehler der Voll- und Dünngitterquadratur für die Funktion $u(x, y) = \sin(x) \sin(y)$ und Level L	64
4	Absoluter und relativer Fehler der Voll- und Dünngitterquadratur für die Funktion $w(x, y) = x^{500} \cdot y^{17}$ und Level L	64
5	Vergleich der Anzahl an Gitterpunkten zwischen vollem und dünnem Gitter für die Dimensionen 2 und verschiedene Gitterlevel $L = 1, \dots, 7$	65
6	Konvergenzrate bei Quadratur auf dem Einheitsquadrat $[0, 1]^2$ für volles und dünnes Gitter für die Funktionen g, f, w, u . Berechnet für $L \in \{1, \dots, 7\}$	66
7	Quadraturwerte der Dünngitter- und Vollgitterquadratur für die Schachbrett-Funktion bei $n = 2, 4, 6$ in Abhängigkeit des Level L	68
8	Mittelwert, Varianz, MSE und RMSE berechnet mit Monte-Carlo-Methode, <code>Samples = 100 000</code> , <code>SpaceLevel = 5</code> für das elliptische Modellproblem (10.1)	75
9	Erwartungswert und MSE, RMSE berechnet mit Stochastic Collocation auf <code>SpaceLevel = 5</code> für das elliptische Modellproblem (10.1)	77
10	Vergleich berechneter Erwartungswert durch Stochastic Collocation (\mathbb{E}_{SC}) auf <code>SpaceLevel = 5</code> und Referenzwert (\mathbb{E}_{MC}) aus Tabelle 8 sowie theoretisch vermuteter Erwartungswert	79
11	Varianz berechnet von Stochastic Collocation auf <code>SpaceLevel = 5</code> für das elliptische Modellproblem (10.1)	80
12	Einfluss von <code>SpaceLevel</code> , <code>StochLevel</code> und <code>trunc</code> bei Verwendung von Stochastic Collocation auf den RMSE, die Approximation des Erwartungswert und auf die Varianz für das Stochastische Modellproblem (10.1) .	82
13	Vergleich des RMSE für Stochastic Collocation (RMSE_{SC}) und Monte-Carlo (RMSE_{MC}) auf <code>SpaceLevel= 5</code> für das elliptische Modellproblem (10.1)	84
14	Vergleich des Erwartungswert für Stochastic Collocation (\mathbb{E}_{SC}) und Monte-Carlo (\mathbb{E}_{MC}) und Abstand zum Referenzwert \mathbb{E}_{ref} aus Tabelle 8 (<code>trunc= 4: $\mathbb{E}_{ref} = 0.577536$, <code>trunc= 6: $\mathbb{E}_{ref} = 0.577552$</code>) auf <code>SpaceLevel= 5</code>, elliptisches Modellproblem (10.1)</code>	86
15	Vergleich der Varianz für Stochastic Collocation (\mathbb{V}_{SC}) und Monte-Carlo (\mathbb{V}_{MC}) und Abstand zum Referenzwert \mathbb{V}_{ref} aus Tabelle 8 (<code>trunc= 4: $\mathbb{V}_{ref} = 2.1697e-07$, <code>trunc= 6: $\mathbb{V}_{ref} = 2.27247e-07$</code>) auf <code>SpaceLevel= 5</code>, elliptisches Modellproblem (10.1)</code>	88
16	RMSE, berechnet mit Stochastic Collocation, in Abhängigkeit des stochastischen Levels und Glättungsparameter α im Kovarianzkern für <code>trunc= 4</code> , <code>SpaceLevel= 5</code> , $\sigma = 1$ und $\lambda = 1.2$, elliptisches Modellproblem (10.1) .	92

17	Konvergenzrate α_{conv} für <code>StochLevel</code> = 1, ..., 7, $\lambda = 1$, $\alpha = 1.0$, $\sigma = 1$. . .	93
18	Konvergenzrate α_{conv} für <code>StochLevel</code> = 2, 4 und verschiedene λ mit $\sigma = 1.0$, $\alpha = 1.0$	94
19	Konvergenzrate α_{conv} für <code>StochLevel</code> = 2, 4 und verschiedene α mit $\lambda = 0.05$, $\sigma = 1.0$	95
20	Konvergenzrate α_{conv} für <code>StochLevel</code> = 2, 4 und verschiedene σ mit $\lambda = 0.05$, $\alpha = 1.0$	96

Literatur

- [1] C. Zenger. „Sparse grids“. In: *Parallel Algorithms for Partial Differential Equations*. Hrsg. von W. Hackbusch. Bd. 31. Notes on Numerical Fluid Mechanics. Braunschweig/Wiesbaden: Vieweg, 1991.
- [2] Jochen Garcke. „Sparse Grids in a Nutshell“. In: *Sparse Grids and Applications*. Hrsg. von Jochen Garcke und Michael Griebel. Berlin, Heidelberg: Springer, 2012, S. 57–80. DOI: [10.1007/978-3-642-31703-3_2](https://doi.org/10.1007/978-3-642-31703-3_2).
- [3] Hans-Joachim Bungartz und Michael Griebel. „Sparse grids“. In: *Acta Numerica* 13 (2004), S. 147–269.
- [4] *M++, meshes, multigrid and more*. <http://www.math.kit.edu/ianm3/seite/mplusplus/de>. Karlsruher Institut für Technologie, Fakultät für Mathematik, 24.04.2024. 2024.
- [5] *GitLab*. https://github.com/PFelsen/Bachelor_Thesis_Karlsruhe_2024.
- [6] Herbert Amann und Joachim Escher. *Analysis I*. Basel: Birkhäuser, 2006. ISBN: 978-3-7643-7755-7.
- [7] Herbert Amann und Joachim Escher. *Analysis II*. 2., korrigierte Auflage. Basel: Birkhäuser, 2006. ISBN: 978-3-7643-7105-0.
- [8] Herbert Amann und Joachim Escher. *Analysis III*. 2., korrigierte Auflage. Basel: Birkhäuser, 2009. ISBN: 978-3-7643-8883-6.
- [9] Dirk Werner. *Funktionalanalysis*. 8., vollständig überarbeitete Auflage. Berlin, Heidelberg: Springer Spektrum, 2018. ISBN: 978-3-662-55406-7. DOI: [10.1007/978-3-662-55407-4](https://doi.org/10.1007/978-3-662-55407-4).
- [10] Nicole Bäuerle. *Einführung in die Stochastik - WS 22/23*. Vorlesungsskript, Wintersemester 2022/2023. Okt. 2022.
- [11] Mathias Trabs. *Wahrscheinlichkeitstheorie*. Vorlesungsskript, Sommersemester 2021, Version vom 26. Juni 2023.
- [12] Achim Klenke. *Wahrscheinlichkeitstheorie*. 3., überarbeitete und ergänzte Auflage. Springer-Lehrbuch Masterclass. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013. ISBN: 978-3-642-36017-6. DOI: [10.1007/978-3-642-36018-3](https://doi.org/10.1007/978-3-642-36018-3).
- [13] Tim Buchholz. „Die Multilevel Monte Carlo Methode und deren Anwendung am Beispiel der linearen Transportgleichung“. Bachelorarbeit. Karlsruher Institut für Technologie, Apr. 2020.
- [14] Helmut Harbrecht und Michael Multerer. *Algorithmische Mathematik: Graphen, Numerik und Probabilistik*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag GmbH Deutschland, 2022. ISBN: 978-3-642-41951-5. DOI: [10.1007/978-3-642-41952-2](https://doi.org/10.1007/978-3-642-41952-2).
- [15] Stefan Achatz. „Adaptive finite Dünngitter-Elemente höherer Ordnung für elliptische partielle Differentialgleichungen mit variablen Koeffizienten“. Diss. München: Technische Universität München, März 2003.

- [16] Astrid Fischer. „Interpolation von vektorwertigen Funktionen mit adaptiven dünnen Gittern“. Diplomarbeit am Institut für Numerische Simulation. Magisterarb. Bonn: Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Nov. 2007.
- [17] Fanzi Meng. „Sparse Grid Interpolation“. Magisterarb. Canberra, Australia: The Australian National University, März 2016.
- [18] Tim Rheinfels. „Numerische Integration lokaler Steifigkeitsmatrizen auf dünnen Gittern im d-dimensionalen Raum“. Lehrstuhl für Informatik 10 (Systemsimulation). Bachelorarbeit. Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Aug. 2016.
- [19] Dirk Pflüger. „Spatially Adaptive Sparse Grids for High-Dimensional Problems“. Diss. München: Technische Universität München, Juni 2010.
- [20] Johannes Brumm und Simon Scheidegger. „Using Adaptive Sparse Grids to Solve High-Dimensional Dynamic Models“. In: (Mai 2017). URL: <https://ssrn.com/abstract=2349281>.
- [21] Miroslav Stoyanov. *User Manual: TASMANIAN Sparse Grids*. Techn. Ber. Oak Ridge National Laboratory, 2015.
- [22] Miroslav Stoyanov. *User Manual: Toolkit for Adaptive Stochastic Modeling and Non-Intrusive Approximation (TASMANIAN)*. Oak Ridge National Laboratory. Oak Ridge, TN, Sep. 2017.
- [23] C. W. Clenshaw und A. R. Curtis. „A method for numerical integration on an automatic computer“. In: *Numerische Mathematik* 2 (1960), S. 197–205. DOI: 10.1007/BF01386234.
- [24] Christian Wieners. *Einführung in das Wissenschaftliche Rechnen*. Vorlesungsskript, Sommersemester 2019, Version vom 17. Juni 2024.
- [25] Stephen Whitaker. „Flow in Porous Media I: A Theoretical Derivation of Darcy's Law“. In: *Transport in Porous Media* 1 (1986), S. 3–25. DOI: 10.1007/BF01036523. URL: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF01036523>.
- [26] Wolfgang Hackbusch. *Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen*. 4., überarbeitete Auflage. Wiesbaden: Springer Spektrum, 2016. ISBN: 978-3-658-15357-1. DOI: 10.1007/978-3-658-15358-8.
- [27] Niklas Baumgarten. „Multilevel Monte Carlo methods for elliptic boundary value problems with stochastically modeled coefficients“. Magisterarb. Karlsruhe: Karlsruhe Institute of Technology, Mai 2018.
- [28] Christian Wieners. *Numerische Methoden für Differentialgleichungen: Skript zur Vorlesung im Wintersemester 2023/2024*. Vorlesungsskript, Version vom 11. Februar 2024.
- [29] Susanne C. Brenner und L. Ridgway Scott. *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*. 3rd. New York: Springer, 2008. ISBN: 978-0-387-75933-3. DOI: 10.1007/978-0-387-75934-0.

- [30] J.M. Booker und T.J. Ross. „An Evolution of Uncertainty Assessment and Quantification“. In: *Scientia Iranica* 18.3 (2011), S. 669–676. DOI: 10.1016/j.scient.2011.04.017.
- [31] Roger Ghanem, David Higdon und Houman Owhadi, Hrsg. *Handbook of Uncertainty Quantification*. Cham, Switzerland: Springer, 2017. ISBN: 978-3-319-12385-1. DOI: 10.1007/978-3-319-12385-1.
- [32] Wolfgang Betz, Iason Papaioannou und Daniel Straub. „Numerical methods for the discretization of random fields by means of the Karhunen–Loève expansion“. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 271 (2014), S. 109–129. ISSN: 0045-7825. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cma.2013.12.010>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782513003502>.
- [33] Giordano Giambartolomei. „The Karhunen-Loève Theorem“. Bachelorarbeit. Bologna: Alma Mater Studiorum, Università di Bologna, Nov. 2015. URL: https://core.ac.uk/display/31159449?utm_source=pdf&utm_medium=banner&utm_campaign=pdf-decoration-v1.
- [34] Roger G. Ghanem und Pol D. Spanos. *Stochastic Finite Elements - A Spectral Approach*. Springer New York, NY, 1991. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-1-4612-3094-6>.
- [35] Caroline Geiersbach und Winnifried Wollner. „A Stochastic Gradient Method with Mesh Refinement for PDE Constrained Optimization under Uncertainty“. In: (Juni 2020). URL: <https://arxiv.org/abs/1905.08650>.
- [36] Ivo Babuška, Fabio Nobile und Raul Tempone. „A Stochastic Collocation Method for Elliptic Partial Differential Equations with Random Input Data“. In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 45.3 (2007), S. 1005–1034. DOI: 10.1137/050645142.
- [37] Niklas Baumgarten. „A Fully Parallelized and Budgeted Multi-level Monte Carlo Framework for Partial Differential Equations: From Mathematical Theory to Automated Large-Scale Computations“. Englisch. Diss. Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2023. 174 S. DOI: 10.5445/IR/1000158415.