

Bachelorarbeit

Die Multilevel Monte Carlo Methode und deren Anwendung am Beispiel der linearen Transportgleichung

Tim Buchholz

??..??..??

Betreuung: Prof.Dr. Christian Wieners und M.Sc. Niklas Baumgarten

Fakultät für Mathematik

Karlsruher Institut für Technologie

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Grundlagen	5
2.1	analytische/numerische Grundlagen	5
2.2	stochastische Grundlagen	7
2.3	Monte Carlo Methoden	7
3	Multilevel Monte Carlo Methode (MLMC)	8
4	MLMC angewandt auf das Transportproblem	9
4.1	Problemstellung	9
4.1.1	deterministisches Problem	9
4.1.2	probabilistisches Problem	10
4.2	Numerische Lösung des Potentialströmungsproblem	11
4.2.1	Schwache Formulierung	13
4.2.2	Diskretisierung	14
4.3	Formulierung als LGS	16
4.4	Numerische Lösung des Transportproblem	17
4.5	Anwendung der MLMC Methode auf das Transportproblem für unsichere Permeabilität κ	17
5	Beispiel/Experiment	18
5.1	Konkretes Problem	18
5.2	Ergebnisse	18
6	Ausblick und Fazit	19

1 Einleitung

TODO(Einleitung wird zu einem späterem Zeitpunkt noch ausgebaut und nachgebessert mehr cites mehr forschung mehr inhalt) Monte Carlo Methoden sind weit verbreitet und finden in verschiedenen Bereichen der Mathematik ihre Anwendung. Sie dienen dabei als statistische Schätzer für Erwartungswerte. Eine der bekanntesten Anwendungen ist wohl die Monte Carlo Quadratur, welche zur numerischen Integration genutzt werden kann.

Nachdem Giles (cite ...) ... gewöhnliche DGL ... kam ... für SPDE's zu nutzen ...cite .

So entstehende Problemstellungen fallen in das Gebiet der Uncertainty Quantification, einem 'Zusammentreffen der Wahrscheinlichkeitstheorie, Numerik, Statistik und der echten Welt' [9]. Allerdings besitzt die Monte Carlo Methode einen entscheidenden Nachteil, will man sie im Zusammenhang unsicherer Ausgangsdaten für die Lösung von partiellen Differentialgleichungen nutzen, sie konvergiert im Normalfall relativ langsam und das (numerische) Lösen von PDE's ist oft sehr aufwendig. Es werden also unter Umständen sehr viele, sehr teure (Zufalls-)Samples benötigt, um ein vernünftiges Ergebnis zu erhalten.

Diese Thesis soll sich daher mit der Multilevel Monte Carlo Methode (im Folgenden MLMC Methode genannt) beschäftigen, welche an die Monte Carlo Methode angelehnt ist, aber durch die geschickte Auswertung der (Zufalls-Samples) deutliche Effizienzvorteile gegenüber der Standard Monte Carlo Methode besitzt. Die MLMC Methode soll nach einer ausführlichen theoretischen Analyse auch praktisch auf das (lineare) Transportproblem angewandt werden. Genauer soll für

- ein beschränktes Gebiet $\mathbb{D} \subseteq \mathbb{R}^d$
- ein Zeitintervall $\mathbb{T} = [0, T]$
- ein Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$
- ein zufälliges Flussvektorfeld $q : \Omega \times \overline{\mathbb{D}} \rightarrow \mathbb{R}^d$
- eine Anfangskonzentration eines (zu transportierenden) Stoffes $\rho_0 : \overline{\mathbb{D}} \rightarrow \mathbb{R}^d$
- einen Einfluss $\rho_{\text{in}} : \Gamma_{\text{in}} \times \mathbb{T} \rightarrow \mathbb{R}$ über den Einflussrand $\Gamma_{\text{in}} := \{z \in \partial\mathbb{D} : q(z) \cdot n(z) \leq 0\} \subset \partial\mathbb{D}$ mit $n(z)$ als äußeren Normalenvektor im (Rand-)Punkt z

der Erwartungswert eines Funktionals der Konzentration des Stoffes $\rho : \overline{\mathbb{D}} \times \mathbb{T} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ bestimmt werden. Dabei erhält man ρ als Lösung der folgenden partiellen Differentialgleichung:

$$\begin{aligned} &\text{Bestimme } \rho : \overline{\mathbb{D}} \times \mathbb{T} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}, \text{ sodass} \\ (\text{TP}) \quad &\begin{cases} \partial_t \rho + \text{div}(\rho q) = 0 & \text{in } \mathbb{D} \times (0, T) \\ \rho(x, t) = \rho_{\text{in}}(x, t) & \text{auf } \Gamma_{\text{in}} \times (0, T) \\ \rho(x, 0) = \rho_0(x) & \text{auf } \mathbb{D}. \end{cases} \end{aligned}$$

1 Einleitung

Außerdem muss zunächst ein zwar zufälliges aber dennoch sinnvolles Vektorfeld q erzeugt werden. Wir nutzen hierbei das Darcy-Gesetz $q = -\kappa(\nabla p + G)$, welches als Modellierung von Fluiden in porösen Bodenschichten bereits oft genutzt wurde (vgl. z.B. [6]). Dabei ist

- $p : \mathbb{D} \rightarrow \mathbb{R}$ der hydrostatische Druck
- $\kappa : \Omega \times \mathbb{D} \rightarrow (\mathbb{R}_{\text{sym}})^{d \times d}$ der Permeabilitätstensor
- $G = (0, 0, p_0 g_0)^\top$ der Gravitationsvektor

und es soll später, bevor wir das eigentliche Transportproblem lösen, stets zunächst für ein zufälliges κ ein entsprechendes Flussvektorfeld q über das sogenannte Potentialströmungsproblem, welches sich aus dem Darcy-Gesetz ableitet, berechnet werden. Die genauere Modellierung des so entstehenden Gesamtproblems soll aber an späterer Stelle erfolgen.

Die Thesis ist dazu folgendermaßen unterteilt:

Abschnitt 2 sammelt verschiedene Grundlagen aus den Bereichen der Stochastik, der Analysis und Numerik partieller Differentialgleichungen, sowie einige Aspekte der (standard) Monte Carlo Methoden, welche auch der MLMC Methode als theoretischer Unterbau dienen sollen.

In Abschnitt 3 wird anschließend die MLMC Methode an sich erklärt, ohne die Theorie hierbei allzu sehr auf die Anwendung auf das Transportproblem zu beschränken.

In Abschnitt 4 werden dann das (lineare) Transportproblem und das Potentialströmungsproblem beschrieben, welches wir lösen müssen, um an die entsprechenden Ausgangsdaten zu kommen. Anschließend wird die numerische Lösung der beiden Probleme mit Finite Elementen Methoden behandelt, bevor schließlich auf die Anwendung der MLMC Methode auf das Transportproblem mit unsicheren Ausgangsdaten am Beispiel der Permeabilität κ eingegangen wird.

Der fünfte und letzte Abschnitt befasst sich mit konkreten Durchführung und Implementierung des zuvor theoretisch beleuchteten Problem innerhalb der parallelen Finite Elemente Softwarebibliothek "M++"[1], welche am Institut für Angewandte und Numerische Mathematik 3 (KIT) von Herrn Prof. Dr. C. Wieners entwickelt wurde.

Am Schluss der Thesis steht eine kleine Zusammenfassung der bis dahin erarbeiteten Resultate und der Ausblick auf Möglichkeiten vielfältiger Art an, diese in weiteren Arbeiten anzuknüpfen.

2 Grundlagen

2.1 analytische/numerische Grundlagen

Sei $\mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^d$ für $d \in \mathbb{N}$ und $\|\cdot\|$ eine Norm auf \mathbb{R}^d . Die folgenden Definitionen und Sätze sollen als Grundlagen für die weiteren Betrachtungen dieser Thesis dienen. Insbesondere wollen wir hierbei meist auf konkrete Beweise verzichten und verweisen dahingehend auf die Literatur. Die analytischen Grundlagen bauen zum Teil auf der Vorlesung Rand- und Eigenwertprobleme aus dem Sommersemester 2019 von Herrn Prof. Dr. Reichel auf sind aber auch in der angegebenen Literatur zu finden (TODO find Literatur).

Definition 2.1. (Einige Operatoren)

- (a) Für $F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ ist die Divergenz von F definiert durch

$$\operatorname{div} F = \nabla \cdot F := \sum_{i=1}^d \frac{\partial F_i}{\partial x_i}$$

- (b) Für $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ und $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{N}^d$ ist die partielle Ableitung von f nach dem sogenannten Multiindex α definiert durch

$$\partial^\alpha f := \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial x_1^{\alpha_1} \cdots \partial x_d^{\alpha_d}} = \frac{\partial^{\alpha_1 + \cdots + \alpha_d} f}{\partial x_1^{\alpha_1} \cdots \partial x_d^{\alpha_d}}$$

Definition 2.2. (Einige Funktionenräume) todo C, C1, Ccinf, Lp, L1loc

Satz 2.3. Sei $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d$ offen und beschränkt und $1 \leq p < \infty$, dann gilt:
 $C_c^\infty(\mathcal{D})$ liegt dicht in $L^p(\mathcal{D})$, d.h. $C_c^\infty(\mathcal{D}) \subseteq L^p(\mathcal{D})$ und $\overline{C_c^\infty(\mathcal{D})}^{\|\cdot\|_p} = L^p(\mathcal{D})$

Definition 2.4. (Lipschitz-Gebiet TODO cite rwp)

- (a) Eine offene zusammenhängenden Menge $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d$ heißt Lipschitz-Gebiet, falls für jedes $x_0 \in \partial\mathcal{D}$ ein Radius $r > 0$ und eine Lipschitz-stetige Funktion $\phi : \mathbb{R}^{d-1} \rightarrow \mathbb{R}$ existiert, so dass (nach einer geeigneten Bewegung des Koordinatensystems) gilt:
 Für $x' = (x_1, \dots, x_{d-1})$ und $B_r(x_0) := \{x \in \mathbb{R}^d : \|x - x_0\| < r\}$ ist

$$\mathcal{D} \cap B_r(x_0) = \{x = (x', x_d) \in B_r(x_0) : x_d > \phi(x')\}$$

Es gilt dann notwendigerweise:

$$\partial\mathcal{D} \cap B_r(x_0) = \{x = (x', x_d) \in B_r(x_0) : x_d = \phi(x')\}$$

- (b) Ist \mathcal{D} ein Lipschitz-Gebiet so existiert $x = (x', \phi(x')) \in \partial\mathcal{D} \cap B_r(x_0)$ der Vektor

$$n(x) = \frac{1}{\sqrt{1 + |\nabla \phi(x')|^2}} \begin{pmatrix} \nabla \phi(x') \\ -1 \end{pmatrix}$$

2 Grundlagen

fast überall bezüglich des Oberflächenmaßes auf $\partial\mathcal{D}$ und heißt der äußere Einheitsnormalenvektor an $\partial\mathcal{D}$ im Punkt x .

Satz 2.5. (Gaußscher Integralsatz für Lipschitz-Gebiete)

Sei $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d$ ein beschränktes Lipschitz-Gebiet und sei n der äußere Einheitsnormalenvektor an $\partial\mathcal{D}$. Dann gilt:

$$\int_{\mathcal{D}} \frac{\partial f}{\partial x_i} dx = \int_{\partial\mathcal{D}} f n_i da$$

für jede Funktion $f \in C^1(\overline{\mathcal{D}})$.

Oft erscheint der Gaußsche Integralsatz in auch folgender Form:

$$\int_{\mathcal{D}} \operatorname{div} F dx = \int_{\partial\mathcal{D}} F \cdot n da$$

wobei $F : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}^d$ ein Vektorfeld ist. Die Komponentenfunktionen von $F = (F_1, \dots, F_d)$ sollen dann $F_i \in C^1(\overline{\mathcal{D}})$ für $i = 1, \dots, d$ erfüllen.

Definition 2.6. (schwache Ableitung)

Sei $u \in L^1_{\text{loc}}$. Wir sagen u besitzt eine schwache Ableitung zum Multiindex α , falls eine Funktion $v \in L^1_{\text{loc}}$ existiert, mit

$$\int_{\mathcal{D}} u \partial^\alpha \Phi dx = (-1)^{|\alpha|} \int_{\mathcal{D}} v \Phi dx \quad \forall \Phi \in C_0^\infty(\mathcal{D})$$

In diesem Zusammenhang nennen wir Φ auch Testfunktion und wir definieren $D^\alpha u := v$ als die schwache Ableitung von u zum Multiindex α .

Bemerkung. Per Konvention ist für $\alpha = (0, \dots, 0)$ $\partial^\alpha u = u$

Definition 2.7. (Sobolevräume)

Sei $\mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^d$ offen, $k \in \mathbb{N}$ und $1 \leq p \leq \infty$

(a) $W^{k,p}(\mathcal{D}) := \{u \in L^p(\mathcal{D}) \text{ und die schwachen Ableitungen } \partial^\alpha u \text{ existieren, mit } \partial^\alpha u \in L^p(\mathcal{D}) \text{ für alle } \alpha \in \mathbb{N}_0^d, |\alpha| \leq k\}$

(b) $\|u\|_{k,p} = \|u\|_{W^{k,p}(\mathcal{D})} := \begin{cases} \left(\sum_{|\alpha| \leq k} \int_{\mathcal{D}} |\partial^\alpha u|^p dx \right)^{\frac{1}{p}}, & 1 \leq p < \infty \\ \sum_{|\alpha| \leq k} \|\partial^\alpha u\|_\infty, & p = \infty \end{cases}$

(c) $W_0^{k,p}(\mathcal{D}) := \overline{C_c^\infty(\mathcal{D})}^{\|\cdot\|_{k,p}}$

Satz 2.8. (Multiplikation mit Testfunktionen und Integration)

Sei $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d$ offen und $u \in L^1_{\text{loc}}(\mathcal{D})$ und $\int_{\mathcal{D}} u \psi dx = 0 \quad \forall \psi \in C_c^\infty(\mathcal{D})$
Dann gilt $u \equiv 0$.

Satz 2.9. (Rechnen mit Differentialoperatoren) todo FEM

2.2 stochastische Grundlagen

2.3 Monte Carlo Methoden

3 Multilevel Monte Carlo Methode (MLMC)

4 MLMC angewandt auf das Transportproblem

4.1 Problemstellung

4.1.1 deterministisches Problem

Sei $\mathbb{T} = [0, T]$ ein Zeitintervall für $T > 0$ und $\mathbb{D} \subset \mathbb{R}^d, d \in \mathbb{N}$ ein beschränktes, offenes und konvexes Lipschitz-Gebiet mit Rand $\partial\mathbb{D} = \Gamma_D \dot{\cup} \Gamma_N$. Wie bereits in der Einleitung beschrieben, wollen wir den Transport eines Stoffes in einer porösen Bodenschicht auf Grundlage eines vorhandenen Flusses beschreiben. Als modellhaftes Problem soll uns hierfür die Regenwasserversickerung dienen: In einer porösen Bodenschicht befindet sich zum Zeitpunkt $t = 0$ ein Stoff (beispielsweise Öl) in einer gegebenen Anfangskonzentration und -verteilung. Nun sickert Regenwasser in diese poröse Bodenschicht ein. Zusätzlich wollen wir weitere Zuflüsse des Fremdstoffes über den Einflussrand $\Gamma_{\text{in}} \subset \partial\mathbb{D}$ zulassen. Wir sind letztendlich an der Konzentration dieser Substanz an einer Stelle $x \in \overline{\mathbb{D}}$ zu einem Zeitpunkt $t \in \mathbb{T}$ interessiert.

Bevor allerdings die Konzentration als Lösung des Transportproblems bestimmt werden kann, muss zunächst das Flussvektorfeld $q : \overline{\mathbb{D}} \rightarrow \mathbb{R}^d$ berechnet werden.

Sei hierfür $p : D \rightarrow \mathbb{R}$ der hydrostatische Druck, $\kappa : D \rightarrow (\mathbb{R}_{\text{sym}})^{d \times d}$ der Permeabilitätstensor und $G = (0, 0, p_0 g_0)^\top$. Wie bereits in der Einleitung angedeutet, kann der Fluss des Regenwassers durch das Darcy-Gesetz $q = -\kappa(\nabla p + G)$ modelliert werden. Durch $u(x) := p(x) + p_0 g_0 x_3$ vereinfacht sich das Darcy-Gesetz zu $q = -\kappa \nabla u$.

Nehmen wir die physikalische Annahme hinzu, dass der Fluss q 'quellfrei' sein soll, also an keiner Stelle Masse verschwinden oder erscheinen kann, erhalten wir das Potentialströmungsproblem:

Bestimme $u : \overline{\mathbb{D}} \rightarrow \mathbb{R}$ und $q : \overline{\mathbb{D}} \rightarrow \mathbb{R}^2$ mit

$$(PS) \begin{cases} \operatorname{div} q = 0 & , \text{in } \mathbb{D} \\ q = -\kappa \nabla u & , \text{in } \mathbb{D} \\ u = u_D & , \text{auf } \Gamma_D \\ -q \cdot n = g_N & , \text{auf } \Gamma_N \end{cases}$$

Bemerkung. Wir wollen aus verschiedenen Gründen direkt die sogenannte gemischte Formulierung des Potentialströmungsproblem nutzen. Näheres dazu findet sich im nächsten Abschnitt.

Anschließend suchen wir die Dichteverteilung $\rho : \mathbb{D} \times \mathbb{T} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ einer transportierten Substanz (in unserem Modell das Öl).

Gegeben sei dazu die Anfangsverteilung $\rho_0 : \mathbb{D} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ und der Einfluss der Substanz über die Zeit $\rho_{\text{in}} : \Gamma_{\text{in}} \times \mathbb{T} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ mit $\Gamma_{\text{in}} := \{z \in \partial\mathbb{D} : q(z) \cdot n(z) \leq 0\} \subset \partial\mathbb{D}$. Dabei ist $n(z)$ der äußere Normalenvektor im (Rand-)Punkt z . Wir bedienen uns wieder der Physik und fordern die Erfüllung der Bilanzgleichung

$$\forall K \subseteq \mathbb{D}, t \in \mathbb{T} : \frac{d}{dt} \int_K \rho(x, t) \, dx + \int_{\partial K} \rho(x, t) q(x) \cdot n(x) \, da = 0.$$

Wenden wir für ein zulässiges $K \subseteq \mathbb{D}$ und $\rho, q \in C^1(\mathbb{D})$ den Satz von Gauß an erhalten wir

$$\int_K \partial_t \rho(x, t) + \operatorname{div}(\rho q)(x, t) \, dx = 0$$

und können so die (lineare) Transportgleichung ableiten:

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho q) = 0 \text{ in } \mathbb{D} \times (0, T]$$

Mit den entsprechenden Rand- und Anfangswerten erhalten wir so:

$$\begin{aligned} & \text{Bestimme } \rho : \overline{\mathbb{D}} \times \mathbb{T} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}, \text{ sodass} \\ (\text{TP}) \quad & \begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho q) = 0 & , \text{ in } \mathbb{D} \times (0, T) \\ \rho(x, t) = \rho_{\text{in}}(x, t) & , \text{ auf } \Gamma_{\text{in}} \times (0, T) \\ \rho(x, 0) = \rho_0(x) & , \text{ auf } \mathbb{D} \end{cases} \end{aligned}$$

4.1.2 probabilistisches Problem

In dem letzten Unterabschnitt sind wir bereits bei der Lösung des Potentialströmungsproblems davon ausgegangen, sämtliche benötigten Randwerte sowie den Permeabilitätstensor κ exakt für das gesamte Gebiet \mathbb{D} zu kennen. Wir wollen uns von dieser durchaus starken Annahme lösen und deshalb zusätzlich die Permeabilität κ mit Mitteln der Stochastik modellieren. Sei dazu $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ ein Wahrscheinlichkeitsraum und ab nun $d = 2$, also $\mathbb{D} \subseteq \mathbb{R}^2$.

Bemerkung. Grundsätzlich funktionieren die vorgestellten Verfahren auch für $d = 3$, wir wollen uns aber der Anschaulichkeit halber auf zwei Dimensionen beschränken. Das so betrachtete Gebiet \mathbb{D} lässt sich so z.B. als Querschnitt einer Bodenschicht interpretieren.

Weiter sei nun $\kappa(\cdot, x) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ die (vom Zufall abhängige) Permeabilität. Wie schon an anderer Stelle (z.B. in [7] oder cite) wollen wir die Permeabilität als lognormal-Feld (TODO) modellieren. Unser so entstehendes Problem fällt somit in den Bereich der Uncertainty Quantification und lautet:

Für $\omega \in \Omega$, bestimme $u(\omega, \cdot) : \bar{\mathbb{D}} \rightarrow \mathbb{R}$ und $q(\omega, \cdot) : \bar{\mathbb{D}} \rightarrow \mathbb{R}^2$ mit

$$(PS) \begin{cases} \operatorname{div}(q(\omega, x)) = 0 & , \text{ für } x \in \mathbb{D} \\ q(\omega, x) = -\kappa(\omega) \nabla u(\omega, x) & , \text{ für } x \in \mathbb{D} \\ -q(\omega, x) \cdot n = g_N(x) & , \text{ für } x \in \Gamma_N \\ u(\omega, x) = u_D(x) & , \text{ für } x \in \Gamma_D \end{cases}$$

Für $\omega \in \Omega$ und $q(\omega, \cdot) : \bar{\mathbb{D}} \rightarrow \mathbb{R}$, bestimme $\rho(\omega, \cdot) : \bar{\mathbb{D}} \times \mathbb{T} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ mit

$$(TP) \begin{cases} \partial_t \rho(\omega, x, t) + \operatorname{div}(\rho(\omega, x, t) q(\omega, x)) = 0 & , \text{ für } (x, t) \in \mathbb{D} \times (0, T] \\ \rho(\omega, x, t) = \rho_{\text{in}}(x, t) & , \text{ für } (x, t) \in \Gamma_{\text{in}} \times \mathbb{T} \\ \rho(\omega, x, 0) = \rho_0(x) & , \text{ für } x \in \mathbb{D} \end{cases}$$

für die Anfangs- und Randwerte:

$$\begin{aligned} g_N & : \Gamma_N \rightarrow \mathbb{R} \\ u_D & : \Gamma_D \rightarrow \mathbb{R} \\ \rho_{\text{in}} & : \Gamma_{\text{in}} \times \mathbb{T} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0} \\ \rho_0 & : \mathbb{D} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0} \end{aligned}$$

wobei $\partial \mathbb{D} = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ und $\Gamma_{\text{in}} := \{z \in \partial \mathbb{D} : q(z) \cdot n(z) \leq 0\} \subset \partial \mathbb{D}$

Dabei stellen wir uns die Aufgabe, den Erwartungswert eines gegebenen Zielfunktional $Q(\rho)$ zu berechnen, etwa dem Ausfluss der transportierten Substanz über den Rand. An dieser Stelle können wir dann, nachdem wir uns in den nächsten zwei Unterabschnitten damit beschäftigt haben, wie wir obige Probleme numerisch lösen, die MLMC Methode nutzen, um diesen Erwartungswert zu berechnen.

4.2 Numerische Lösung des Potentialströmungsproblem

Bemerkung. Die beiden folgenden Abschnitte bauen im Wesentlichen auf den beiden Vorlesungen 'Einführung in das Wissenschaftliche Rechnen' (SS 2019) und 'Finite Elemente Methoden' (WS 2019/2020) von Herrn Prof. Dr. Wieners auf. Dem entsprechend sind als Quellen neben [4] und [3] vor allem die Mitschriften zu den oben genannten Vorlesungen, sowie die Berichte zum Rechnerpraktikum mit M++ [1] zu nennen.

Wie bereits in obigem Abschnitt erwähnt, sollen sich die nächsten beiden Abschnitte damit beschäftigen, wie wir die oben beschriebenen Probleme für ein festes $\omega \in \Omega$ numerisch lösen können. Ein Überblick über alle möglichen Verfahren, welche zur Lösung der beiden Probleme geeignet sind, würde den Rahmen dieser Thesis sprengen. Wir wollen deshalb im Folgenden auf eine Möglichkeit eingehen diese Berechnung numerisch durchzuführen. Insbesondere werden dabei jene Verfahren beschrieben, welche wir auch später innerhalb der MLMC Methode in M++ nutzen wollen. Da wir in diesen beiden Abschnitten $\omega \in \Omega$ ohnehin fest halten, genügt es zudem das deterministische Problem zu betrachten.

Sowohl das hybride Finite Elemente Verfahren, welches wir zur Lösung des Potentialströmungsproblem nutzen wollen, als auch das Discontinuous Galerkin Verfahren, mit dessen Hilfe wir das Transportproblem lösen wollen, bauen auf der Finite Elemente Theorie auf. Diese ist im Wesentlichen in der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts entstanden, ist aber bis heute in praktischer wie auch in theoretischer Sicht aktuell. Die Grundidee ist hierbei die vorliegenden Rand-Anfangswertaufgaben in einem passenden endlichen Unterraum zu lösen. Dabei löst man sich auf analytischer Seite zunächst oft von einzelnen Regularitäts- und Differenzierbarkeitsbedingungen und führt einen sogenannten schwachen Lösungsbegriff ein (vergleiche Abschnitt 2.1). Statt nun aber solch eine schwache Lösung in einem unendlich dimensional Funktionenraum, wie beispielsweise in den Sobolevräumen $W^{1,2}(\mathbb{D})$ oder $W_0^{1,2}(\mathbb{D})$ zu bestimmen, zieht man sich auf endliche Unterräume zurück.

Die folgende Definition entstammt [4] und geht ursprünglich (1978) auf Ciarlet zurück.

Definition 4.1. Sei

- $K \subseteq \mathbb{R}^d$ eine beschränkte abgeschlossene Menge mit einem nichtleeren Inneren und stückweise stetig differenzierbarem Rand
- \mathcal{P} ein endlich dimensionaler Funktionenraum auf K
- $\mathcal{N} = \{N_1, N_2, \dots, N_k\}$ eine Basis für \mathcal{P}'

Dann heißt $(K, \mathcal{P}, \mathcal{N})$ ein finites Element.

Wir wollen im Folgenden diese theoretische Definition zwar im Hinterkopf behalten, aber wie in [3] meist nur mit den sogenannten Finite-Elemente-Räumen arbeiten. Dabei wird eine geeignete Zerlegung $\mathfrak{K} = \{K_1, K_2, \dots, K_M\}$ von \mathbb{D} in endlich viele Teilgebiete gewählt. Anschließend betrachten wir einen endlichen Raum von Funktionen, die eingeschränkt auf diese Teilgebiete von einfacher Gestalt sind, beispielsweise bieten sich oft polynomielle Darstellungen niedrigen Grades an. Ein solches Teilgebiet $K \in \mathfrak{K}$ nennen wir Finites Element oder auch Zelle und fordern implizit verbunden mit dem betrachteten Funktionenraum die Erfüllung der obigen Definition.

Im Falle $\mathbb{D} \subseteq \mathbb{R}^2$ kommen so z.B. Dreiecke oder Vierecke in Frage, in $\mathbb{D} \subseteq \mathbb{R}^3$ können Tetraeder, Würfel, Quader und andere genutzt werden.

Sei nun $\mathbb{D} \subseteq \mathbb{R}^2$ zudem ein polygonales Gebiet, um eine einfache Zerlegung in Dreiecke oder Vierecke zu gewährleisten.

Definition 4.2. 1. Eine Zerlegung $\mathfrak{K} = \{K_1, K_2, \dots, K_M\}$ von \mathbb{D} in Dreiecks- oder Viereckselemente heißt zulässig, wenn folgende Eigenschaften erfüllt sind:

- $\overline{\mathbb{D}} = \bigcup_{i=1}^M K_i$
- Für $i \neq j$ ist $K_i \cap K_j$
 - a) ein gemeinsamer Eckpunkt von K_i und K_j
 - b) eine gemeinsame Kante von K_i als auch von K_j
 - c) oder $K_i \cap K_j = \emptyset$

2. Wir schreiben oft \mathfrak{K}_h anstatt \mathfrak{K} , wenn jedes Element einen Durchmesser von höchstens $2h$ besitzt [Vorlesung $h = \max \text{diam } K$ was passt besser]

Abbildung 1: Zulässige Zerlegung und unzulässige Zerlegung mit hängendem Knoten

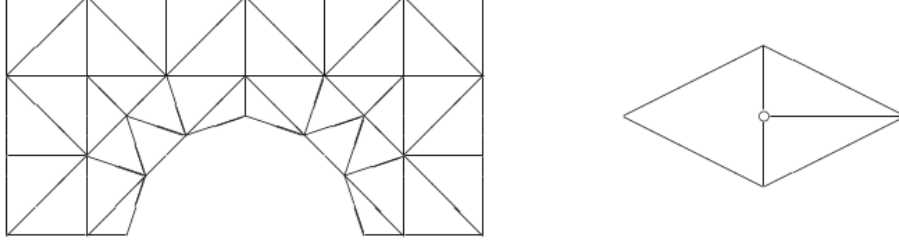


Abbildung aus [3] Seite 58

Wir führen außerdem folgende Bezeichnungen ein:

- ein $K \in \mathfrak{K}$ nennen wir Zelle
- $\mathbb{D}_h := \bigcup_{K \in \mathfrak{K}} K$ sei die Menge der Zellen
- ein $z \in \mathcal{V}_K := \{z_{K,0}, z_{K,1}, z_{K,2}\} \subset \mathbb{R}^2$ nennen wir Knoten und \mathcal{V}_K die Menge der Knoten von K
- $\mathcal{V}_{\mathfrak{K}} := \bigcup_{K \in \mathfrak{K}} \mathcal{V}_K$ sei die Menge aller Knoten
- $\mathcal{F} := (\{\partial K_1 \cap \partial K_2 : K_1, K_2 \in \mathfrak{K}\} \cup \{\partial K_1 \cap \partial \mathbb{D} : K_1 \in \mathfrak{K}\}) \setminus \{\emptyset\}$ sei die Menge aller Seiten
- $\mathcal{F}_K := (\{\partial K \cap \partial K' : K' \in \mathfrak{K}\} \cup \{\partial K \cap \partial \mathbb{D}\}) \setminus \{\emptyset\}$ sei die Menge aller Seiten von K
- $\partial \mathbb{D}_h := \bigcup_{F \in \mathcal{F}} F$ sei der Rand von \mathbb{D}_h

4.2.1 Schwache Formulierung

Betrachten wir also die deterministische Version des Potentialströmungsproblem:

Bestimme $u : \overline{\mathbb{D}} \rightarrow \mathbb{R}$ und $q : \overline{\mathbb{D}} \rightarrow \mathbb{R}^2$ mit

$$(\text{PS}) \begin{cases} \text{div } q = 0 & , \text{in } \mathbb{D} \quad (1) \\ q = -\kappa \nabla u & , \text{in } \mathbb{D} \quad (2) \\ u = u_D & , \text{auf } \Gamma_D \\ -q \cdot n = g_N & , \text{auf } \Gamma_N \end{cases}$$

Satz 2.8 sagt uns, dass wir in obiger Formulierung Gleichung (1) mit Testfunktionen $\phi \in W_0^{1,2}(\mathbb{D})$ und Gleichung (2) mit Testfunktionen $\psi \in ???$ multiplizieren und anschließend

über \mathbb{D} integrieren können und so eine äquivalente schwache Formulierung herleiten:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{D}} \operatorname{div}(q) \phi \, dx &= 0 \text{ für alle Testfunktionen } \phi : \mathbb{D} \rightarrow \mathbb{R} \\ \int_{\mathbb{D}} (q + \kappa \nabla u) \cdot \psi \, dx &= 0 \text{ für alle Testfunktionen } \psi : \mathbb{D} \rightarrow \mathbb{R}^2 \end{aligned}$$

Da κ weiter symmetrisch positiv definit ist, lässt sich letztere Gleichung zu

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{D}} \kappa^{-1} (q + \kappa \nabla u) \cdot \psi \, dx &= 0 \\ \Leftrightarrow \int_{\mathbb{D}} \nabla u \cdot \psi \, dx &= - \int_{\mathbb{D}} (\kappa^{-1} q) \cdot \psi \, dx \quad (\star) \end{aligned}$$

umformen. Außerdem wollen wir nun noch die Dirichlet-Randbedingungen $u = u_D$ auf Γ_D einfließen lassen. Dazu verwenden wir den Satz von Gauß:

$$\int_{\partial\Omega} (u\psi) \cdot n \, da \stackrel{\text{Gauß}}{=} \int_{\Omega} \operatorname{div}(u\psi) \, dx = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \psi \, dx + \int_{\Omega} u \operatorname{div}(\psi) \, dx \quad (\psi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^2)$$

Wählen wir nun unseren Ansatzraum so, dass für die Funktion ψ gilt $\psi \cdot n = 0$ auf Γ_N . Damit folgt

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_D} (u_D \psi) \cdot n \, da &\stackrel{\substack{\psi \cdot n|_{\Gamma_N}=0 \\ u|_{\Gamma_D}=u_D}}{=} \int_{\partial\Omega} (u\psi) \cdot n \, da = \underbrace{\int_{\Omega} \nabla u \cdot \psi \, dx}_{\stackrel{(\star)}{=} - \int_{\Omega} (\kappa^{-1} q) \cdot \psi \, dx} + \int_{\Omega} u \operatorname{div}(\psi) \, dx. \end{aligned}$$

Die Neumann-Randbedingung $(\kappa \nabla u) \cdot n = g_N$ auf Γ_N wird durch die Wahl des Lösungsraumes erfüllt.

Wir erhalten so folgende schwache Formulierung:

$$\begin{aligned} &\text{Bestimme } (q, u) \text{ mit } q \cdot n = -g_N \text{ auf } \Gamma_N \text{ und} \\ (\text{sPS}) \quad &\left\{ \begin{array}{l} \int_{\mathbb{D}} \kappa^{-1} q \cdot \psi \, dx - \int_{\mathbb{D}} u \operatorname{div}(\psi) \, dx = - \int_{\Gamma_D} (u_D \psi) \cdot n \, da \\ \int_{\mathbb{D}} \operatorname{div}(q) \phi \, dx = 0 \end{array} \right. \\ &\text{für alle } (\psi, \phi) \text{ in einem geeigneten Testraum mit } \psi \cdot n = 0 \text{ auf } \Gamma_N \end{aligned}$$

4.2.2 Diskretisierung

Sei \mathfrak{K} eine zulässige Zerlegung von \mathbb{D} und alle Bezeichnungen wie oben. Wir nummerieren zunächst die Zellen und die Seiten durch:

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= \{F_1, \dots, F_{|\mathcal{F}|}\} && \text{globale Seitennummerierung} \\ \mathfrak{K} &= \{K_1, \dots, K_{|\mathfrak{K}|}\} && \text{globale Zellennummerierung} \end{aligned}$$

Außerdem definieren wir:

Definition 4.3. (Seiten- und Zellenbasis)

(a) $\{\psi_i\}_{i=1}^{|\mathcal{F}|}$ heißt Seitenbasis und ist definiert durch

$$\forall i, j \in \{1, \dots, |\mathcal{F}|\} : \int_{F_j} \psi_i \cdot n^K \, da = \pm \delta_{i,j} \text{ und } \psi_i|_K \in \mathbb{P}_1(K, \mathbb{R}^2) \cap C(\overline{\mathbb{D}}) \text{ } (K \in \mathcal{K})$$

(b) $\{\mu_i\}_{i=1}^{|\mathcal{K}|}$ heißt Zellenbasis und ist gegeben durch

$$\forall m \in \{1, \dots, |\mathcal{K}|\} : \mu_m := \chi_{K_m}.$$

Anschließend wählen wir als Testräume bzw. Finite Elemente Räume:

Definition 4.4. (Ansatzräume)

(a) $W_h := \text{span}\{\psi_1, \dots, \psi_{|\mathcal{F}|}\}$ (Seitenansatzraum/ Raum für ψ und q_h)

(b) $W_h(g) := \{\psi_h \in W_h : \int_F \psi_h \cdot n \, da = \int_F g \, da \text{ für alle } F \subseteq \Gamma_N\}$

(c) $Q_h := \text{span}\{\mu_1, \dots, \mu_{|\mathcal{K}|}\}$ (Zellenansatzraum/ Raum für ϕ und u_h)

Bemerkung.

$$\forall K \in \mathcal{K} : \psi_i|_K \in \mathbb{P}_1(K, \mathbb{R}^2) \text{ und } \mu_m|_K \in \mathbb{P}_0(K, \mathbb{R})$$

Also

$$W_h \subseteq \prod_{K \in \mathcal{K}} \mathbb{P}_1(K, \mathbb{R}^2) \quad (\text{Menge der zellenweisen linearen Funktionen}) \text{ und}$$

$$Q_h \subseteq \prod_{K \in \mathcal{K}} \mathbb{P}_0(K, \mathbb{R}) \quad (\text{Menge der zellenweisen konstanten Funktionen}).$$

Zusammen mit der schwachen Formulierung (4.2.1) erhalten wir so

Bestimme $(q_h, u_h) \in W_h(-g_N) \times Q_h$ mit

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \kappa^{-1} q_h \cdot \psi_h \, dx - \int_{\Omega} u_h \operatorname{div}(\psi_h) \, dx &= - \int_{\Gamma_D} (u_D \psi_h) \cdot n \, da \\ \int_{\Omega} \operatorname{div}(q_h) \phi_h \, dx &= 0 \end{cases}$$

für alle $(\psi_h, \phi_h) \in W_h(0) \times Q_h$

4.3 Formulierung als LGS

Es seien wie bisher Seiten, Seitenbasis, Zellen und Zellenbasis global nummeriert

$$\begin{aligned} N &:= |\mathcal{F}| & \mathcal{F} &= \{F_1, \dots, F_N\} \\ M &:= |\mathcal{K}| & W_h &= \{\psi_1, \dots, \psi_N\} \\ & & \mathcal{K} &= \{K_1, \dots, K_M\} \\ & & Q_h &= \{\mu_1, \dots, \mu_M\}. \end{aligned}$$

Wir können nun damit beginnen das so entstandene endlich dimensionale Problem in eine Lineares Gleichungs System umformulieren. Dazu definieren wir:

$$\begin{aligned} \underline{A} &\in \mathbb{R}^{N \times N} \text{ mit } \underline{A}[n, k] := \int_{\Omega} \kappa^{-1} \psi_n \cdot \psi_k \, dx \\ \underline{B} &\in \mathbb{R}^{M \times N} \text{ mit } \underline{B}[m, k] := - \int_{\Omega} \mu_m \operatorname{div}(\psi_k) \, dx \\ \underline{b} &\in \mathbb{R}^N \text{ mit } \underline{b}[k] := - \int_{\Gamma_D} u_D \psi_k \cdot n \, da \end{aligned}$$

und (für die Randbedingungen)

$$\underline{W}(g) := \left\{ \underline{q} \in \mathbb{R}^N : \underline{q}[k] = \int_{F_k} g \, da \text{ (für } k \text{ mit } F_k \subseteq \Gamma_N) \right\}$$

Unser zu lösendes Problem lässt sich so mit $q_h = \sum_{n=1}^N \underline{q}[n] \psi_n$ und $u_h = \sum_{m=1}^M \underline{u}[m] \mu_m$ umformen zu

$$\begin{aligned} \text{Bestimme } (\underline{q}, \underline{u}) &\in \underline{W}(-g_N) \times \mathbb{R}^M \text{ mit} \\ (\text{L gFE}) \quad &\begin{cases} \underline{A} \underline{q} + \underline{B}^T \underline{u} &= \underline{b} \\ \underline{B} \underline{q} &= 0 \end{cases} \end{aligned}$$

oder anders geschrieben

$$\begin{aligned} \text{Bestimme } (\underline{q}, \underline{u}) &\in \underline{W}(-g_N) \times \mathbb{R}^M \text{ mit} \\ (\text{dgPS}) \quad &\left\{ \begin{pmatrix} \underline{A} & \underline{B}^T \\ \underline{B} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{q} \\ \underline{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{b} \\ 0 \end{pmatrix} \right. \end{aligned}$$

Wir haben so eine diskrete gemischte Formulierung des Potentialströmungsproblem hergeleitet und können mit dieser aus gegebenen Rand- und Anfangswerten ein Flussvektorfeld q erzeugen, welches der obigen Differentialgleichung genügt. Es handelt sich hierbei um das gemischte Finite Elemente Verfahren. In M++ selbst lösen wir das Potentialströmungsproblem durch eine Abwandlung dieses Verfahrens. Wir diskretisieren dazu eine äquivalente Formulierung von (sPS) und erhalten so mit dem hybriden Finite

Elemente Verfahren die gleichen Ergebnisse, die auch der vorgestellte gemischte Ansatz liefern würde, bei besserer Effizienz und guter Parallelisierbarkeit. Da das Potentialströmungsproblem in dieser Thesis primär dazu genutzt werden soll das Vektorfeld q zu bestimmen, soll uns aus theoretischer Sicht aber obige Formulierung genügen und wir verweisen hinsichtlich der Lösung mit hybriden gemischten Finiten Elementen auf die Literatur, wie etwa [5] oder [8].

4.4 Numerische Lösung des Transportproblem

4.5 Anwendung der MLMC Methode auf das Transportproblem für unsichere Permeabilität κ

5 Beispiel/Experiment

5.1 Konkretes Problem

5.2 Ergebnisse

6 Ausblick und Fazit

Literatur

- [1] M++ (meshes, multigrid and more). <http://www.math.kit.edu/ianm3/page/mplusplus/de>. Accessed: 2019-10-17.
- [2] D. N. Arnold and R. Winther. Mixed finite elements for elasticity. *Numerische Mathematik*, 92(3):401–419, 2002.
- [3] D. Braess. *Finite Elemente: Theorie, schnelle Löser und Anwendungen in der Elastizitätstheorie*. Springer-Verlag, 2013.
- [4] S. Brenner and R. Scott. *The mathematical theory of finite element methods*, volume 15. Springer Science & Business Media, 2007.
- [5] F. Brezzi and M. Fortin. *Mixed and hybrid finite element methods*, volume 15. Springer Science & Business Media, 2012.
- [6] G. De Marsily. Quantitative hydrogeology. Technical report, Paris School of Mines, Fontainebleau, 1986.
- [7] P. Kumar, P. Luo, F. J. Gaspar, and C. W. Oosterlee. A multigrid multilevel monte carlo method for transport in the darcy–stokes system. *Journal of Computational Physics*, 371:382–408, 2018.
- [8] J. E. Roberts and J.-M. Thomas. Mixed and hybrid methods. 1991.
- [9] T. J. Sullivan. *Introduction to uncertainty quantification*, volume 63. Springer, 2015.

Erklärung

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.

Ort, den Datum