

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	5
2.3	Monte Carlo Methoden	5
3	Multilevel Monte Carlo Methode (MLMC)	6
4	MLMC angewandt auf das Transportproblem	7
4.1	Problemstellung	7
4.1.1	deterministisches Problem	7
4.1.2	probabilistisches Problem	8
4.2	Numerische Lösung des Potentialströmungsproblem	9
4.3	Numerische Lösung des Transportproblem	10
4.4	Anwendung der MLMC Methode auf das Transportproblem für unsichere Permeabilität κ	10
5	Beispiel/Experiment	11
5.1	Konkretes Problem	11
5.2	Ergebnisse	11
6	Ausblick und Fazit	12

1 Einleitung

Monte Carlo Methoden sind weit verbreitet und finden in verschiedenen Bereichen der Mathematik ihre Anwendung. Neben der numerischen Integration können sie unter anderem auch bei der Lösung von partiellen Differentialgleichungen in Situationen genutzt werden, in denen Teile der benötigten Daten, wie zum Beispiel Anfangs- und oder Randwerte, unsicher sind bzw. nicht zu Verfügung stehen. So entstehende Problemstellungen fallen in das Gebiet der Uncertainty Quantification, einem 'Zusammentreffen der Wahrscheinlichkeitstheorie, Numerik, Statistik und der echten Welt' [6]. 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 (unsicheres) Flussvektorfeld $q : \overline{\mathbb{D}} \rightarrow \mathbb{R}^d$
- 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

die Konzentration des Stoffes $\rho : \overline{\mathbb{D}} \times \mathbb{T} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ als Lösung der folgenden (partiellen) Differentialgleichung bestimmt werden.

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

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. [4]). Dabei ist

- $p : \mathbb{D} \rightarrow \mathbb{R}$ der hydrostatische Druck

1 Einleitung

- $\kappa : \mathbb{D} \rightarrow (\mathbb{R}_{\text{sym}})^{d \times d}$ 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 soll.

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

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 L-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 wir uns allerdings dem eigentlichen Transportproblem widmen können, müssen wir zunächst das Flussvektorfeld $q : \overline{\mathbb{D}} \rightarrow \mathbb{R}^d$ berechnen.

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

Nun ist es allerdings so, dass wir bereits bei der Lösung des Potentialströmungsproblems davon ausgehen, sämtliche benötigten Randwerte sowie (vor allem) 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 [5] 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 (TODO SPACING):

Für $\omega \in \Omega$, bestimme $u(\omega, \cdot) : \overline{\mathbb{D}} \rightarrow \mathbb{R}$ und $q(\omega, \cdot) : \overline{\mathbb{D}} \rightarrow \mathbb{R}^2$ 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 $q(\omega, \cdot) : \overline{\mathbb{D}} \rightarrow \mathbb{R}$, bestimme $\rho(\omega, \cdot) : \overline{\mathbb{D}} \times \mathbb{T} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ 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:

$$g_N : \Gamma_N \rightarrow \mathbb{R}$$

$$u_D : \Gamma_D \rightarrow \mathbb{R}$$

$$\rho_{\text{in}} : \Gamma_{\text{in}} \times \mathbb{T} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$$

$$\rho_0 : \mathbb{D} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$$

wobei $\partial \mathbb{D} = \Gamma_D \dot{\cup} \Gamma_N$ 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 [3] und [2] vor allem die Mitschriften zu den oben genannten Vorlesungen, sowie die Berichte zum Rechnerpraktikum mit M++ [1]

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, genauer sogenannte Finite-Elemente-Räume, zurück.

4.3 Numerische Lösung des Transportproblem

4.4 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. Braess. *Finite Elemente: Theorie, schnelle Löser und Anwendungen in der Elastizitätstheorie*. Springer-Verlag, 2013.
- [3] S. Brenner and R. Scott. *The mathematical theory of finite element methods*, volume 15. Springer Science & Business Media, 2007.
- [4] G. De Marsily. Quantitative hydrogeology. Technical report, Paris School of Mines, Fontainebleau, 1986.
- [5] 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.
- [6] 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