Heterogene Mehrskalen Finite Elemente Methoden für elliptische PDE's [HM-FEM]

Felix Albrecht

felix.albrecht@uni-muenster.de

23.01.2008

Literatur

- W. E, B. Engquist, *Heterogeneous Multiscale Methods: A Review*, Commun. Comput. Phys. 2(2007): 367-450
- W. E, P. Ming, P. Zhang, *Analysis of the Heterogeneous Multiscale Method for elliptic Homogenization Problems*, J. Amer. Math. Soc. 18(2005): 121-156

Anwendungsbeispiele [Strömung in porösen Medien]

Zu den Anwendungsgebieten der Mehrskalenprobleme gehören

- Grundwasserprobleme:
    - Ausbeutung von Ölreservoirs,

Anwendungsbeispiele [Strömung in porösen Medien]

Zu den Anwendungsgebieten der Mehrskalenprobleme gehören

- Grundwasserprobleme:
    - Ausbeutung von Ölreservoirs,
    - Eindringen von Salzwasser in Küstenregionen,

Anwendungsbeispiele [Strömung in porösen Medien]

Zu den Anwendungsgebieten der Mehrskalenprobleme gehören

- Grundwasserprobleme:
    - Ausbeutung von Ölreservoirs,
    - Eindringen von Salzwasser in Küstenregionen,
    - Ausbreitung und Abbau von Schadstoffen im Erdreich;

Anwendungsbeispiele [Strömung in porösen Medien]

Zu den Anwendungsgebieten der Mehrskalenprobleme gehören

- Grundwasserprobleme:
  - Ausbeutung von Ölreservoirs,
  - Eindringen von Salzwasser in Küstenregionen,
  - Ausbreitung und Abbau von Schadstoffen im Erdreich;
- Industrielle Anwendungen:
  - Katalysatoren,

Anwendungsbeispiele [Strömung in porösen Medien]

Zu den Anwendungsgebieten der Mehrskalenprobleme gehören

- Grundwasserprobleme:
  - Ausbeutung von Ölreservoirs,
  - Eindringen von Salzwasser in Küstenregionen,
  - Ausbreitung und Abbau von Schadstoffen im Erdreich;
- Industrielle Anwendungen:
  - Katalysatoren,
  - Filter,

Anwendungsbeispiele [Strömung in porösen Medien]

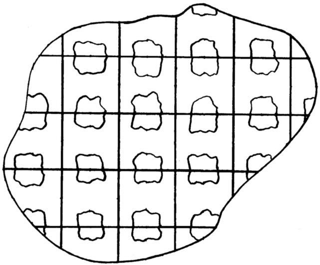
Zu den Anwendungsgebieten der Mehrskalenprobleme gehören

- Grundwasserprobleme:
    - Ausbeutung von Ölreservoirs,
    - Eindringen von Salzwasser in Küstenregionen,
    - Ausbreitung und Abbau von Schadstoffen im Erdreich;
- Industrielle Anwendungen:
    - Katalysatoren,
    - Filter,
    - Brennstoffzellen.

Beispiel [Zwei Skalen]

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$ ein Gebiet mit glattem Rand, $I = \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)^2$ die Einheitszelle.

Makroskala



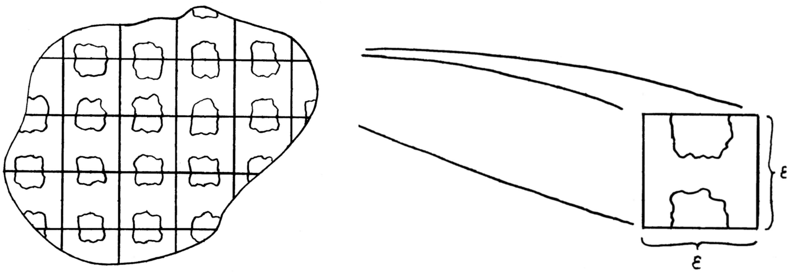
Mikroskala

Beispiel [Zwei Skalen]

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$ ein Gebiet mit glattem Rand, $I = \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)^2$ die Einheitszelle.

Makroskala

Mikroskala



$\Omega \subset \mathbb{R}^2$

εI

Problemstellung

Gegeben sei folgendes elliptische Problem:

$$
\begin{aligned}
-\nabla \cdot \Big(a^{\varepsilon}(x) \nabla u^{\varepsilon}(x) \Big) &= f(x) && \text{in } \Omega \subset \mathbb{R}^d, d = 2, 3 \\
u^{\varepsilon}(x) &= 0 && \text{auf } \partial\Omega,
\end{aligned}
\tag{1.1}
$$

wobei $f \in L^2(\Omega)$, $a^{\varepsilon} \in L^{\infty}(\Omega)$.

Problemstellung

Gegeben sei folgendes elliptische Problem:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \Big(a^\varepsilon(x) \nabla u^\varepsilon(x) \Big) &= f(x) && \text{in } \Omega \subset \mathbb{R}^d, d = 2, 3 \\ u^\varepsilon(x) &= 0 && \text{auf } \partial\Omega, \end{aligned} \tag{1.1}$$

wobei $f \in L^2(\Omega)$, $a^\varepsilon \in L^\infty(\Omega)$.

Der Koeffizient a^ε hat dabei die folgende Form:

$$a^\varepsilon(x) = a(x, \tfrac{x}{\varepsilon})$$

$a(x, y)$ periodisch in y

mit Periode I.

Problemstellung

Gesucht ist eine Funktion $U(x)$ auf der Makroskala als Lösung des homogenisierten Problems

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \Big(A(x) \nabla U(x) \Big) &= f(x) && \text{in } \Omega \subset \mathbb{R}^d, d = 2, 3 \\ U(x) &= 0 && \text{auf } \partial\Omega, \end{aligned} \tag{1.2}$$

wobei $A(x)$ der homogenisierte Koeffizient sei.

Problemstellung

Gesucht ist eine Funktion $U(x)$ auf der Makroskala als Lösung des homogenisierten Problems

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \Big(A(x) \nabla U(x) \Big) &= f(x) && \text{in } \Omega \subset \mathbb{R}^d, d = 2, 3 \\ U(x) &= 0 && \text{auf } \partial\Omega, \end{aligned} \tag{1.2}$$

wobei $A(x)$ der homogenisierte Koeffizient sei.

Formal ist dies das Grenzproblem zu (1.1) für $\varepsilon \longrightarrow 0$.

Überblick

- Um die Mikroskala korrekt aufzulösen muss für die Gitterweite $h = \mathcal{O}(\varepsilon)$ gelten,

Überblick

- Um die Mikroskala korrekt aufzulösen muss für die Gitterweite $h = \mathcal{O}(\varepsilon)$ gelten,
- das Problem hätte also eine Komplexität von $N = \mathcal{O}(\frac{1}{\varepsilon})$.

Überblick

- Um die Mikroskala korrekt aufzulösen muss für die Gitterweite $h = \mathcal{O}(\varepsilon)$ gelten,
- das Problem hätte also eine Komplexität von $N = \mathcal{O}(\frac{1}{\varepsilon})$.
- Die PDE (1.2) muss auf ganz Ω gültig, bzw. bekannt sein.

Überblick

- Um die Mikroskala korrekt aufzulösen muss für die Gitterweite $h = \mathcal{O}(\varepsilon)$ gelten,
- das Problem hätte also eine Komplexität von $N = \mathcal{O}(\frac{1}{\varepsilon})$.
- Die PDE (1.2) muss auf ganz Ω gültig, bzw. bekannt sein.
- Der Koeffizient des Grenzproblems $A(x)$ ist nur in sehr einfachen Fällen und nur für $d = 1$ bekannt!

Philosophie von HM-FEM

- Unter der Annahme, dass (1.2) auf ganz Ω gültig und bekannt ist, wählt man sich einen beliebigen makroskopischen Löser,

Philosophie von HM-FEM

- Unter der Annahme, dass (1.2) auf ganz Ω gültig und bekannt ist, wählt man sich einen beliebigen makroskopischen Löser, z.B. standard FEM auf einer Triangularisierung $\mathcal{T}_H$, wobei H die Eigenschaften von a^ε auf der Makroskala auflösen soll.

Philosophie von HM-FEM

- Unter der Annahme, dass (1.2) auf ganz Ω gültig und bekannt ist, wählt man sich einen beliebigen makroskopischen Löser, z.B. standard FEM auf einer Triangularisierung $\mathcal{T}_H$, wobei H die Eigenschaften von a^ε auf der Makroskala auflösen soll.
- Unter der Annahme, dass der effektive homogenisierte Koeffizient $A_H(x)$ bekannt ist, definiere die Bilinearform

$$
\begin{aligned}
(\ ,\ )_{A_H}: &\quad \mathbb{V} \times \mathbb{V} \longrightarrow \mathbb{R} \\
(V, W)_{A_H} := &\int_\Omega \nabla V(x) \cdot A(x) \nabla W(x) dx.
\end{aligned}
$$

diskrete schwache Formulierung

Damit lautet die schwache Formulierung des makroskalen Problems (1.2):
Gesucht ist eine Funktion $U \in \mathbb{V}$, sodass

$$(U, V)_{A_H} = \langle f, V \rangle_{L^2(\Omega)} \qquad \forall V \in \mathbb{V} \tag{2.3}$$

diskrete schwache Formulierung

Damit lautet die schwache Formulierung des makroskalen Problems (1.2): Gesucht ist eine Funktion $U \in \mathbb{V}$, sodass

$$(U, V)_{A_H} = \langle f, V \rangle_{L^2(\Omega)} \qquad \forall V \in \mathbb{V} \tag{2.3}$$

und ihre diskrete Variante: Gesucht ist ein Koeffizientenvektor $U_H \in \mathbb{R}^N$, sodass

$$K_H U_H = F_H.$$

Berechnung von K_H

Die konkrete Berechnung von

$$(K_H)_{ij} = (\varphi_i, \varphi_j)_{A_H}$$

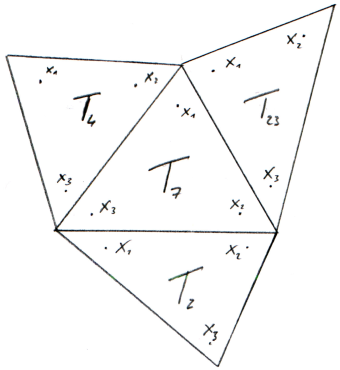
erfordert eine Auswertung des Integrals

$$(V, W)_{A_H} = \int_\Omega \nabla V(x) \cdot A_H(x) \nabla W(x) dx.$$

Quadratur

Diese erfolgt durch Quadratur:

$$(V, W)_{A_H} \simeq \sum_{T \in \mathcal{T}_H} |T| \sum_{x_l \in T} n_l \Big(\nabla V \cdot A_H \nabla W \Big)(x_l). \tag{2.4}$$



Quadratur auf $\Omega \subset \mathbb{R}^2$

Philosophie von HFM

Idee:

Philosophie von HFM

Idee:

- Verabschieden von der Annahme, dass die Makroskopische Gleichung überall Gültigkeit haben muss, bzw.

Philosophie von HFM

Idee:

- Verabschieden von der Annahme, dass die Makroskopische Gleichung überall Gültigkeit haben muss, bzw.
- dass A_H gegeben ist.

Philosophie von HFM

Idee:

- Verabschieden von der Annahme, dass die Makroskopische Gleichung überall Gültigkeit haben muss, bzw.
- dass A_H gegeben ist.

$\Rightarrow$ Zur Berechnung von $\Big(\nabla V \cdot A_H \nabla W\Big)(x_l)$ in (2.4) greift man auf das **Mikroskalen-Modell** (1.1) zurück.

Approximation an den Quadraturpunkten

Zur Approximation von $\Big(\nabla V \cdot A_H \nabla W\Big)(x_l)$ geht man folgendermassen vor:

Approximation an den Quadraturpunkten

Zur Approximation von $\Big(\nabla V \cdot A_H \nabla W\Big)(x_l)$ geht man folgendermassen vor:

- Um jeden Quadraturpunkt x_l wählt man einen Kubus $I_\delta(x_l) = x_l + \delta\left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]^d$ aus, wobei $\delta = \mathcal{O}(\varepsilon)$, $\delta << H$.

Approximation an den Quadraturpunkten

Zur Approximation von $\Big(\nabla V \cdot A_H \nabla W\Big)(x_l)$ geht man folgendermassen vor:

- Um jeden Quadraturpunkt x_l wählt man einen Kubus $I_\delta(x_l) = x_l + \delta\left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]^d$ aus, wobei $\delta = \mathcal{O}(\varepsilon)$, $\delta << H$.
- Auf $I_\delta(x_l)$ betrachtet man das Mikroskalenproblem

$$-\nabla \cdot (a^\varepsilon \nabla v_l^\varepsilon) = 0 \qquad \text{in } I_\delta(x_l) \tag{2.5}$$

mit geeigneten Randbedingungen.

Approximation an den Quadraturpunkten

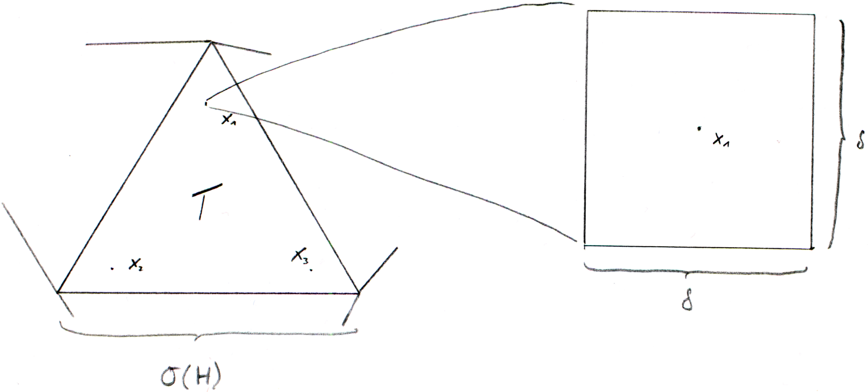
Zur Approximation von $\Big(\nabla V \cdot A_H \nabla W\Big)(x_l)$ geht man folgendermassen vor:

- Um jeden Quadraturpunkt x_l wählt man einen Kubus $I_\delta(x_l) = x_l + \delta\left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]^d$ aus, wobei $\delta = \mathcal{O}(\varepsilon)$, $\delta << H$.
- Auf $I_\delta(x_l)$ betrachtet man das Mikroskalenproblem

$$-\nabla \cdot (a^\varepsilon \nabla v_l^\varepsilon) = 0 \qquad \text{in } I_\delta(x_l) \tag{2.5}$$

  mit geeigneten Randbedingungen.
- Man wählt einen geeigneten Mikrolöser (z.B. FEM, FV, FD), und löst (2.5), um v_l^ε und w_l^ε zu erhalten.

Approximation an den Quadraturpunkten



Approximation an den Quadraturpunkten

Mit den Lösungen des Mikroproblems (2.5) setzt man

$$\Big(\nabla V \cdot A_H \nabla W\Big)(x_l) := \frac{1}{\delta^d} \int\limits_{I_\delta(x_l)} \nabla v_l^\varepsilon \cdot a^\varepsilon(x) \nabla w_l^\varepsilon \, dx.$$

Approximation an den Quadraturpunkten

Mit den Lösungen des Mikroproblems (2.5) setzt man

$$\Big(\nabla V \cdot A_H \nabla W\Big)(x_l) := \frac{1}{\delta^d} \int\limits_{I_\delta(x_l)} \nabla v_l^\varepsilon \cdot a^\varepsilon(x) \nabla w_l^\varepsilon \, dx.$$

Um den Einfluss der Randbedingungen in (2.5) zu verringern, kann man auch

$$\Big(\nabla V \cdot A_H \nabla W\Big)(x_l) := \frac{1}{\delta'^d} \int\limits_{I_{\delta'}(x_l)} \nabla v_l^\varepsilon \cdot a^\varepsilon(x) \nabla w_l^\varepsilon \, dx$$

setzen, für ein $\delta' < \delta$.

Randbedingungen

Als geeignete Randbedingungen für (2.5) bietet sich i.A. folgende Dirichlet-Bedingung an:

$$v_I^\varepsilon = V_I(x) \qquad \text{auf } \partial I_\delta(x_I),$$

wobei V_I eine lineare Approximation von V bei x_I ist.

Randbedingungen

Als geeignete Randbedingungen für (2.5) bietet sich i.A. folgende Dirichlet-Bedingung an:

$$v_I^\varepsilon = V_I(x) \qquad \text{auf } \partial I_\delta(x_I),$$

wobei V_I eine lineare Approximation von V bei x_I ist. Falls $a^\varepsilon(x) = a(x, \frac{x}{\varepsilon})$ und $a(x,y)$ periodisch in y, kann man z.B. $\delta = \varepsilon$ setzen und

$$v_I^\varepsilon - V_I(x) \qquad \text{periodisch auf } \partial I_\delta(x_I) = x_I + \varepsilon \left[\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\right]^d$$

fordern.

Zusamenfassung

- Mit Heterogenen Mehrskalen Methoden [HMM] lassen sich numerische Methoden für Mehrskalenprobleme aufstellen,

Zusamenfassung

- Mit Heterogenen Mehrskalen Methoden [HMM] lassen sich numerische Methoden für Mehrskalenprobleme aufstellen, auch wenn
  - die makroskopische Gleichung nicht auf ganz Ω gültig ist oder nur ihre Art bekannt ist,

Zusamenfassung

- Mit Heterogenen Mehrskalen Methoden [HMM] lassen sich numerische Methoden für Mehrskalenprobleme aufstellen, auch wenn
  - die makroskopische Gleichung nicht auf ganz Ω gültig ist oder nur ihre Art bekannt ist,
  - kein Homogenisierungsproblem vorliegt, bzw. keinerlei Zusammenhang zwischen der Mikro- und der Makro-Gleichung besteht.

Zusamenfassung

- Mit Heterogenen Mehrskalen Methoden [HMM] lassen sich numerische Methoden für Mehrskalenprobleme aufstellen, auch wenn
  - die makroskopische Gleichung nicht auf ganz Ω gültig ist oder nur ihre Art bekannt ist,
  - kein Homogenisierungsproblem vorliegt, bzw. keinerlei Zusammenhang zwischen der Mikro- und der Makro-Gleichung besteht.
- Die Wahl der Löser auf den einzelnen Skalen ist völlig frei.

Zusamenfassung

- Mit Heterogenen Mehrskalen Methoden [HMM] lassen sich numerische Methoden für Mehrskalenprobleme aufstellen, auch wenn
  - die makroskopische Gleichung nicht auf ganz Ω gültig ist oder nur ihre Art bekannt ist,
  - kein Homogenisierungsproblem vorliegt, bzw. keinerlei Zusammenhang zwischen der Mikro- und der Makro-Gleichung besteht.
- Die Wahl der Löser auf den einzelnen Skalen ist völlig frei.
- Es werden so vielen Informationen wie möglich auf allen Skalen benutzt.

Zusamenfassung

- Mit Heterogenen Mehrskalen Methoden [HMM] lassen sich numerische Methoden für Mehrskalenprobleme aufstellen, auch wenn
  - die makroskopische Gleichung nicht auf ganz Ω gültig ist oder nur ihre Art bekannt ist,
  - kein Homogenisierungsproblem vorliegt, bzw. keinerlei Zusammenhang zwischen der Mikro- und der Makro-Gleichung besteht.
- Die Wahl der Löser auf den einzelnen Skalen ist völlig frei.
- Es werden so vielen Informationen wie möglich auf allen Skalen benutzt.
- Ein mit HMM designter Algorithmus ist erheblich weniger rechenintensiv, als das Lösen des kompletten Mikroskalen-Modells (da $\delta << H$).

Fehlerabschätzung

Theorem

Sei U_0 die eindeutige Lösung des schwachen homogenisierten Problems (2.3), U_H die Lösung mit HFM und es gelte exakte Quadratur für Polynome vom Grad k.

Fehlerabschätzung

Theorem

Sei U_0 die eindeutige Lösung des schwachen homogenisierten Problems (2.3), U_H die Lösung mit HFM und es gelte exakte Quadratur für Polynome vom Grad k.

Dann gilt im Fall des periodischen Homogenisierungsproblems

$$||U_0 - U_H||_{H^1(\Omega)} \leq C\Big(H^k + \varepsilon\Big),$$

für ein $C \in \mathbb{R}_{>0}$.