

Modellreduktion für Grundwasserströmungen

Eine Anwendung der Reduzierte-Basis-Methode für Finite Volumen Verfahren

Martin Drohmann¹

¹Institut für Numerische und Angewandte Mathematik
Universität Münster

17. Februar 2009

Gliederung

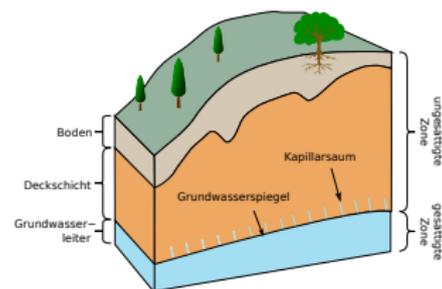
- 1 Grundwasserströmungen
 - Richards-Gleichung
 - Anwendungen

- 2 Modellreduktion durch RB-Methoden
 - Szenario für RB-Methoden
 - RB-Methoden für Evolutionsgleichungen
 - RB-Methodik für Richards-Gleichung

Grundwasserströmungen

Modellierung von Wasserfluss

- in oberirdischen (gesättigten Schichten) meistens mit *Flachwassergleichungen*.
- in ungesättigten Bodenschichten und Grundwasserschichten mit *Richards-Gleichung*.



Die Richards-Gleichung kann aus dem Darcy-Gesetz und der Kontinuitätsgleichung der Hydrodynamik hergeleitet werden.

Darcy-Gesetz

- Henry Darcy untersuchte 1856 den Wasserfluss durch eine mit Sand gefüllte Röhre. Die Röhre war dabei vollständig mit Wasser gesättigt.
- Dabei fand er heraus, dass

$$Q = -K \frac{\Delta H \cdot A}{L}, \quad (1)$$

wobei Q der Wasserfluss, der den Filter in einer Zeiteinheit durchströmt, A der Durchmesser, L die Länge der Röhre und K eine Materialkonstante ist.

Herleitung Richards-Gleichung

Der kontinuierliche Darcy-Fluss (auf ungesättigte Medien erweitert)

$$\mathbf{q} = -K(\theta)\nabla(\psi + z) \quad (2)$$

kann in die Kontinuitätsgleichung der Hydrodynamik

$$\frac{\partial}{\partial t}\theta + \nabla \cdot \mathbf{q} = 0 \quad (3)$$

eingesetzt werden und man erhält die Richards-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\theta(\psi) - \nabla \cdot (K(\theta)\nabla(\psi + z)) = 0. \quad (4)$$

Herleitung Richards-Gleichung

Der kontinuierliche Darcy-Fluss (auf ungesättigte Medien erweitert)

$$\mathbf{q} = -K(\theta)\nabla(\psi + z) \quad (2)$$

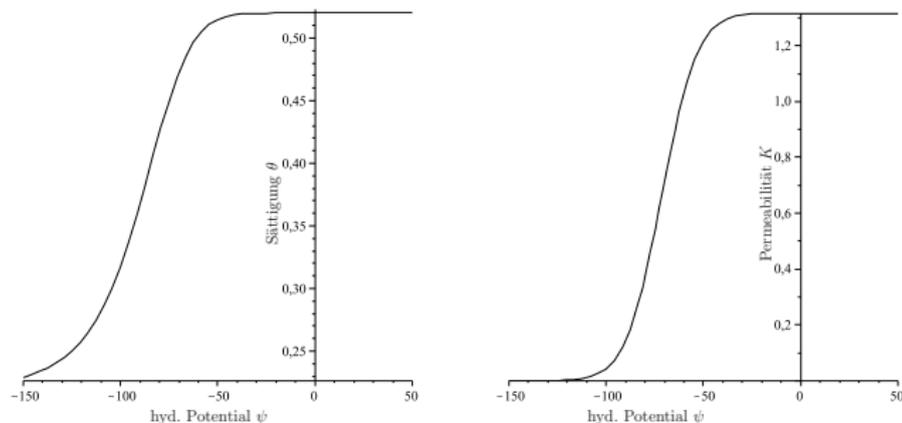
kann in die Kontinuitätsgleichung der Hydrodynamik

$$\frac{\partial}{\partial t}\theta + \nabla \cdot \mathbf{q} = 0 \quad (3)$$

eingesetzt werden und man erhält die Richards-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}\theta(\psi) - \nabla \cdot (K(\theta)\nabla(\psi + z)) = 0. \quad (4)$$

Beispiele für Parameter

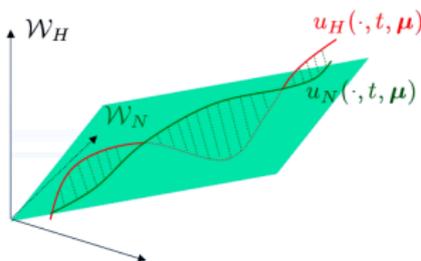


(a) Van-Genuchten-Mualem Modell für $\theta_{\text{sat}} = 0.52$, $\theta_{\text{res}} = 0.218$, $K_{\text{sat}} = 1.3167$, $\alpha = 0.0115$ und $m = 7.0$.

Anwendungen in der Wasserwirtschaft

- Ausbreitungen von Kontaminationen im Grundwasser
- Auswirkungen von baulichen Veränderungen (Kanalbauten, Versiegelungen, ...)
- Hochwasserschutz
- ...

- Parameterstudien für Partielle Differentialgleichungen, z.B. für Geometrie, Kontroll- oder Materialparameter
- Viele schnelle Simulationen oder Echtzeitsimulationen werden benötigt
- Beispiele: Designoptimierung, Parameterschätzung, statistische Analysen,...



Allgemeines Evolutionsproblem als PPDE

Wir betrachten parametrisierte partielle Differentialgleichungen (PPDE) mit einem zusätzlichen Parameter $\mu \in \mathcal{S} \subset \mathbb{R}^p$.

Gesucht ist zu jedem Parameter $\mu \in \mathcal{S}$ und zu jedem Zeitpunkt $t \in [0, T]$ eine Lösung $u(\cdot, t; \mu) \in \mathcal{W}$, so dass die Gleichung

$$\partial_t u(\cdot; \mu) - \mathcal{L}(\mu)[u(\cdot; \mu)] = 0 \quad \Omega(\mu) \times [0, T] \quad (5)$$

mit zusätzliche Anfangs- und Randwertbedingungen - die ebenfalls vom Parameter abhängen können - erfüllt ist.

Beispiel: Richards-Gleichung für unterschiedliche Materialien $\mathcal{L}(\mu)[u]$.

Allgemeines Evolutionsproblem als PPDE

Wir betrachten parametrisierte partielle Differentialgleichungen (PPDE) mit einem zusätzlichen Parameter $\mu \in \mathcal{S} \subset \mathbb{R}^p$.
Gesucht ist zu jedem Parameter $\mu \in \mathcal{S}$ und zu jedem Zeitpunkt $t \in [0, T]$ eine Lösung $u(\cdot, t; \mu) \in \mathcal{W}$, so dass die Gleichung

$$\partial_t u(\cdot; \mu) - \mathcal{L}(\mu) [u(\cdot; \mu)] = 0 \quad \Omega(\mu) \times [0, T] \quad (5)$$

mit zusätzliche Anfangs- und Randwertbedingungen - die ebenfalls vom Parameter abhängen können - erfüllt ist.

Beispiel: Richards-Gleichung für unterschiedliche Materialien $\mathcal{L}(\mu)[u]$.

Allgemeines Evolutionsproblem als PPDE

Wir betrachten parametrisierte partielle Differentialgleichungen (PPDE) mit einem zusätzlichen Parameter $\mu \in \mathcal{S} \subset \mathbb{R}^p$.
Gesucht ist zu jedem Parameter $\mu \in \mathcal{S}$ und zu jedem Zeitpunkt $t \in [0, T]$ eine Lösung $u(\cdot, t; \mu) \in \mathcal{W}$, so dass die Gleichung

$$\partial_t u(\cdot; \mu) - \mathcal{L}(\mu) [u(\cdot; \mu)] = 0 \quad \Omega(\mu) \times [0, T] \quad (5)$$

mit zusätzliche Anfangs- und Randwertbedingungen - die ebenfalls vom Parameter abhängen können - erfüllt ist.

Beispiel: Richards-Gleichung für unterschiedliche Materialien $\mathcal{L}(\mu)[u]$.

numerische Lösung

Um das Evolutionsproblem zu lösen, wird es auf einen diskreten Raum \mathcal{W}_H projiziert, z.B. Finite Elemente, Finite Volumen, Discontinuous Galerkin, ...

Gesucht ist zu jedem Parameter $\mu \in \mathcal{S}$ und zu jedem Zeitpunkt $0 = t^0 < \dots < t^K = T$ eine diskrete Funktionen $U^k(\cdot; \mu) \in \mathcal{W}_H$, die die Gleichungen

$$\frac{1}{\Delta t}(U^k - U^{k-1}) + \mathcal{L}_I(\mu)[U^k] + \mathcal{L}_E(\mu)[U^k - 1] = 0 \quad (6)$$

für $k = 1, \dots, K$ und eine entsprechende Anfangsbedingung erfüllen.

Somit ist $u(x, t; \mu) \approx U_H(x, t; \mu) := \sum_{k=0}^{K-1} U^k(x; \mu) \chi_{\{tk \leq t < tk+1\}}$

numerische Lösung

Um das Evolutionsproblem zu lösen, wird es auf einen diskreten Raum \mathcal{W}_H projiziert, z.B. Finite Elemente, Finite Volumen, Discontinuous Galerkin, ...

Gesucht ist zu jedem Parameter $\mu \in \mathcal{S}$ und zu jedem Zeitpunkt $0 = t^0 < \dots < t^K = T$ eine diskrete Funktionen $U^k(\cdot; \mu) \in \mathcal{W}_H$, die die Gleichungen

$$\frac{1}{\Delta t}(U^k - U^{k-1}) + \mathcal{L}_I(\mu)[U^k] + \mathcal{L}_E(\mu)[U^k - 1] = 0 \quad (6)$$

für $k = 1, \dots, K$ und eine entsprechende Anfangsbedingung erfüllen.

Somit ist $u(x, t; \mu) \approx U_H(x, t; \mu) := \sum_{k=0}^{K-1} U^k(x; \mu) \chi_{\{tk \leq t < tk+1\}}$

numerische Lösung

Um das Evolutionsproblem zu lösen, wird es auf einen diskreten Raum \mathcal{W}_H projiziert, z.B. Finite Elemente, Finite Volumen, Discontinuous Galerkin, ...

Gesucht ist zu jedem Parameter $\mu \in \mathcal{S}$ und zu jedem Zeitpunkt $0 = t^0 < \dots < t^K = T$ eine diskrete Funktionen $U^k(\cdot; \mu) \in \mathcal{W}_H$, die die Gleichungen

$$\frac{1}{\Delta t}(U^k - U^{k-1}) + \mathcal{L}_I(\mu)[U^k] + \mathcal{L}_E(\mu)[U^k - 1] = 0 \quad (6)$$

für $k = 1, \dots, K$ und eine entsprechende Anfangsbedingung erfüllen.

Somit ist $u(x, t; \mu) \approx U_H(x, t; \mu) := \sum_{k=0}^{K-1} U^k(x; \mu) \chi_{\{t^k \leq t < t^{k+1}\}}$

Idee der RB-Methode

Der diskrete Raum \mathcal{W}_H ist meist "hochdimensional", so dass Gleichungssysteme von letzter Folie für viele Unbekannte gelöst werden. => **langsam**

Idee: Projiziere die Diskretisierung in einen niedrig-dimensionalen Raum $\mathcal{W}_N \subset \mathcal{W}_H$, der von Lösungs-Snapshots " $U^k(\mu)$ " aufgespannt wird. Dies ist der Reduzierte-Basis Raum.

RB Schema I

Voraussetzung: RB-Raum \mathcal{W}_N bekannt, und die Operatoren $L_I^k(\mu)$ und $L_E^k(\mu)$ sind affin bezüglich des Parameters zerlegbar, d.h. sie lassen sich schreiben als

$$\mathcal{L}_I(\mu)[U] = \sum_{q=1}^{Q_I} L_I^q[U] \sigma_I^q(\mu), \quad (7)$$

$$\mathcal{L}_E(\mu)[U] = \sum_{q=1}^{Q_E} L_E^q[U] \sigma_E^q(\mu), \quad (8)$$

wobei die Operatoren $L_{I/E}^q$ linear sind und strikt unabhängig vom Parameter μ sind und die Koeffizientenfunktionen $\sigma_{I/E}^q(\mu)$ mit einer Komplexität von $\mathcal{O}(N)$ für ein $N \ll H$ berechnet werden können.

RB-Schema II

Die Funktionen $U_N^k(x; \mu) := \sum_{n=1}^N a_n^k(\mu) \varphi_n$ bilden für jedes $\mu \in \mathcal{S}$ eine *Reduzierte-Basis Lösung*, falls die Koeffizientenvektoren $\mathbf{a}^k := (a_n^k)_{n=1}^N$ für alle $k = 1, \dots, K$ und $\mu \in \mathcal{S}$ die Gleichungen

$$\frac{1}{\Delta t} (\mathbf{a}^k - \mathbf{a}^{k-1}) + \sum_{q=1}^{Q_I} \sigma_I^q(\mu) \mathbf{L}_I[\mathbf{a}^k] + \sum_{q=1}^{Q_E} \sigma_E^q \mathbf{L}_E[\mathbf{a}^{k-1}] = 0 \quad (9)$$

für $k = 1, \dots, K$ und eine entsprechende Anfangsbedingung erfüllen, wobei die Matrizen durch

$$(\mathbf{L}_I^q)_{m,n} := \int_{\Omega} L_I^q(\varphi_n) \varphi_m, \quad (\mathbf{L}_E^q)_{m,n} := \int_{\Omega} L_E^q(\varphi_n) \varphi_m \quad (10)$$

gegeben sind.

Somit ist $U_H(x, t; \mu) \approx U_N(x, t; \mu) := \sum_{k=0}^{K-1} U_N^k(x; \mu) \chi_{\{t_k \leq t < t^{k+1}\}}$

Generierung der Reduzierten Basis [Offline-Phase]

- Beginne mit initialer Reduzierter Basis $\mathcal{W}_{\tilde{N}}$, die z.B. aus den Anfangswerten konstruiert werden kann.
- Erweitere die Basis induktiv um eine weitere Basisfunktion
 - Berechne $U_{\tilde{N}}(t^k; \mu)$ für alle $k = 0, \dots, K$ und $\mu \in \mathcal{M} \subset \mathcal{S}$
 - Finde das $\mu_{\max} \in \mathcal{M}$, für das $\|U_H - U_{\tilde{N}}\|$ maximal ist. Am Besten mit Hilfe eines **a-posteriori Fehlerschätzers**
 - Konstruiere aus RB-Funktionen $U_H(x, t; \mu_{\max})$ die nächste Basisfunktion $\varphi_{\tilde{N}+1}$.

bis: maximaler Fehler unter vorgegebener Schranke ε_{tol} .

Probleme

- Der Operator $\mathcal{L}(\mu)$ in einer Evolutionsgleichung ist oft nicht-linear, z.B. für die Richards-Gleichung (nicht-lineare Diffusion)
- Die Zerlegbarkeit von $\mathcal{L}_{\mathcal{I}/\mathcal{E}}(\mu)$ bezüglich des Parameters μ ist a priori nicht immer gegeben.
- Transformationen des unterliegenden Gebietes $\Omega(\mu)$ sind im RB-Schema nicht möglich, weil RB-Funktionen aus gleichem Raum kommen müssen.
⇒ Geometrietransformation $\Phi : \tilde{\Omega} \rightarrow \Omega(\mu)$.

Lösung zu Problemen 1 und 2

Mittels *empirischer Interpolation* kann ein Operator $\mathcal{L}_{I/E}(\mu)$ in affin zerlegbare Form gebracht werden:

$$\mathcal{I}_M[\mathcal{L}_{I/E}(\mu)][V] = \sum_{m=1}^M y_m(V; \mu) \xi_m \quad (11)$$

Hierbei sind die Koeffizienten durch

$$y_m(V; \mu) := \mathcal{L}/\mathcal{I}_E(\mu)[V](x_m) \quad (12)$$

gegeben und die Funktionen $\{\xi_m\}_{m=1}^M$ bilden die Basis eines sog. *kollateralen Basisraums*. Für **explizite** Verfahren, d.h. $\mathcal{L}_I \equiv 0$ kann die empirische Interpolierte in das RB Schema übernommen werden.

Lösung zu Problemen 1 und 2

Mittels *empirischer Interpolation* kann ein Operator $\mathcal{L}_{I/E}(\mu)$ in affin zerlegbare Form gebracht werden:

$$\mathcal{I}_M[\mathcal{L}_{I/E}(\mu)][V] = \sum_{m=1}^M y_m(V; \mu) \xi_m \quad (11)$$

Hierbei sind die Koeffizienten durch

$$y_m(V; \mu) := \mathcal{L}/\mathcal{I}_E(\mu)[V](x_m) \quad (12)$$

gegeben und die Funktionen $\{\xi_m\}_{m=1}^M$ bilden die Basis eines sog. *kollateralen Basisraums*. Für **explizite** Verfahren, d.h. $\mathcal{L}_I \equiv 0$ kann die empirische Interpolierte in das RB Schema übernommen werden.

Lösung zu Problem 3

- Das Problem wird mittels einer diffeomorphen Geometrietransformation $\Phi : \tilde{\Omega} \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ auf ein Referenzgebiet $\tilde{\Omega}$ übertragen.
- Für Finite Elemente Verfahren gibt es einen Ansatz diese Transformation in *affine* Transformationen auf Teilgebieten aufzuteilen. **Aber:** Übertragung auf Finite Volumen Verfahren nicht möglich.
- Daher betrachten wir allgemeine – auch nicht-affine – Geometrietransformationen Φ , wodurch sich die die Form der Evolutionsgleichung verändert. (Kettenregel)

Beispiel einer Geometrietransformation

Um eine allgemeine Geometrietransformation mit der Richards-Gleichung verwenden zu können, betrachten wir die äquivalente Kirchhoff'sche Darstellung

$$\partial_t c(u) - \Delta u - \nabla \cdot (K_c(c(u)) \nabla x_d) = 0. \quad (13)$$

mit der Kirchhoff-Transformation \mathcal{K} , so dass die Funktion c qualitativ der Sättigung θ entspricht.

Hier ist die Nicht-Linearität im Konvektionsterm, und eine Geometrietransformation lässt sich verwenden.

Beispiel für Richards-Gleichung(Fortsetzung)

Der Diffusionsterm kann dann durch

$$\nabla_x \cdot (\nabla_x u) = \nabla_{\hat{x}} \cdot (G^t G \nabla_{\hat{x}} \hat{u}) + \nabla_{\hat{x}} \cdot (v \hat{u}) - (\nabla_{\hat{x}} \cdot v) \hat{u}. \quad (14)$$

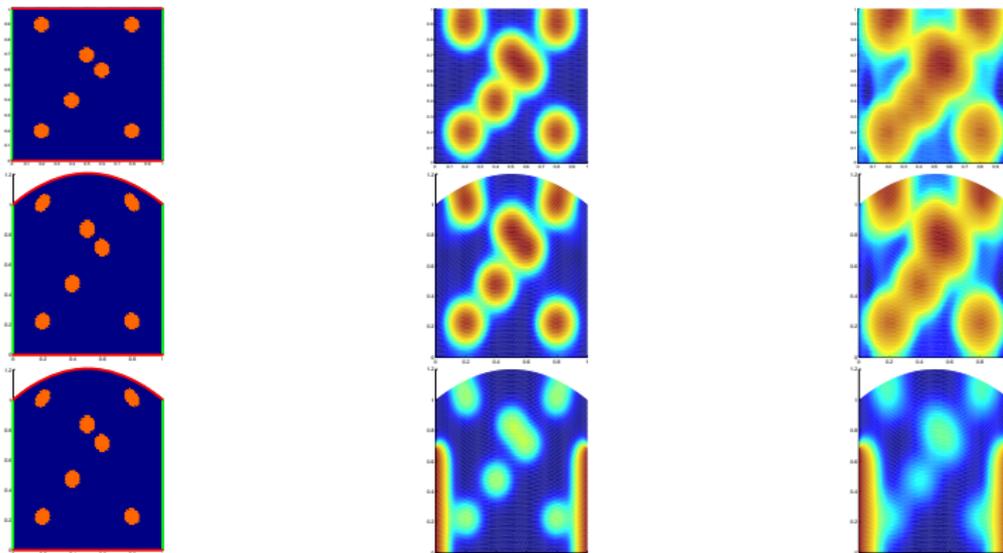
und der Konvektionsterm durch

$$\partial_{x_d} \nu(u) = \nabla_{\hat{x}} \cdot ((G_d \cdot)^t \nu(\hat{u})) - (\nabla_{\hat{x}} \cdot (G_d \cdot)^t) \nu(\hat{u}) \quad (15)$$

ersetzt werden, wobei

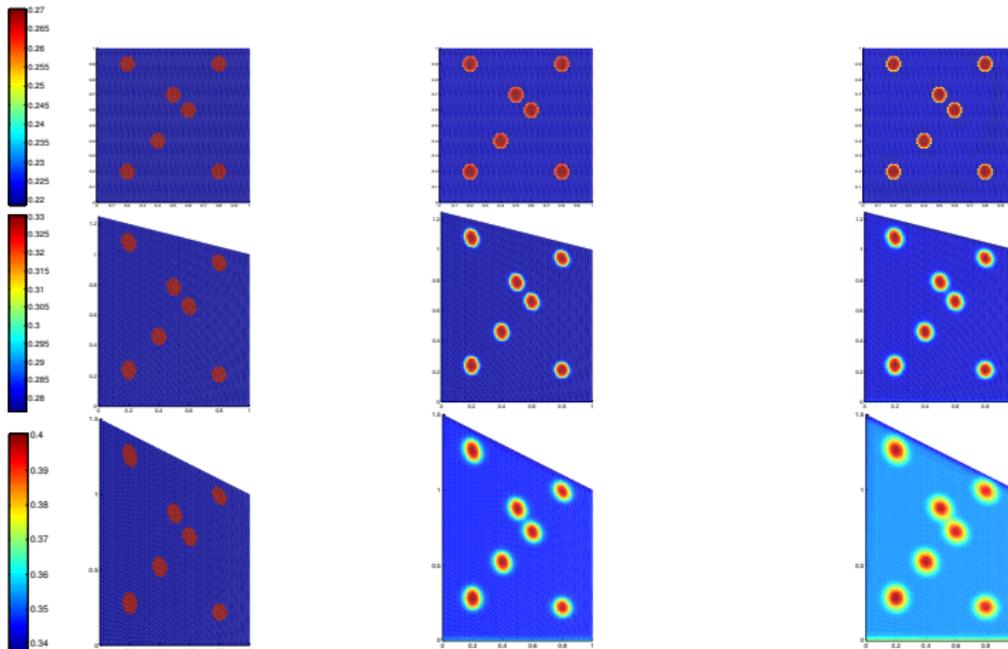
$$\begin{aligned} \hat{x} &= \Phi^{-1}(x) \in \hat{\Omega}, \\ \hat{u} &= u \circ \Phi \in H^2(\hat{\Omega}), \\ G(\hat{x}) &= D\Phi^{-1}|_{\Phi(\hat{x})} \in \mathbb{R}^{d \times d} \text{ und} \\ v &= G(\nabla \cdot G). \end{aligned}$$

Numerische Ergebnisse 1



Numerische Lösungen eines linearen Problems für verschiedene Parameter jeweils zu den Zeitpunkten $t = 0.0$, $t = 0.45$ und $t = 0.9$.

Numerische Ergebnisse 2



Numerische Lösungen eines nicht-linearen Problems für verschiedene Parameter jeweils zu den Zeitpunkten $t = 0.0$, $t = 0.005$ und $t = 0.01$.

Effizienz-Messungen I

Dimensionen	Laufzeit[s]	Max Fehler
$H = 8000$	23.0626	0
$N = 1, M = 1$	3.7714	0.612030
$N = 17, M = 17$	4.0709	0.019138
$N = 17, M = 34$	4.3081	0.002640
$N = 17, M = 50$	4.5474	0.001784
$N = 25, M = 17$	4.0746	0.019816
$N = 25, M = 34$	4.3142	0.004379
$N = 25, M = 50$	4.5497	0.001340

Tabelle: Laufzeitvergleich der Reduzierte-Basis Lösungen zu verschiedenen Dimensionen der reduzierten Räume.

Gesamtdauer Offline-Phase für $N = 25, M = 50$: 2920 sec.

Durchschnittlicher Zeitgewinn pro Online-Simulation: 18.5 sec.

Absoluter Zeitgewinn ab: ≈ 158 Simulat.

Literatur I



A. Patera und G. Rozza.

Reduced Basis Approximation and A Posteriori Error Estimation for Parametrized Partial Differential Equations.

Version 1.0, Copyright MIT 2006, to appear in (tentative rubric)
MIT Pappalardo Graduate Monographs in Mechanical Engineering



B. Haasdonk, M. Ohlberger und G. Rozza.

A Reduced Basis Method for Evolution Schemes with
Parameter-Dependent Explicit Operators

Techreport: University of Münster 2007



B. Haasdonk und M. Ohlberger

nReduced Basis Method for Finite Volume Approximations of
Parametrized Linear Evolution Equations

M2AN, Math. Model. Numer. Anal. 42, 277–302, 2008