Effiziente Algorithmen für Stochastische Galerkin-Verfahren

O. Ernst, E. Ullmann (Institut für Numerische Mathematik und Optimierung)

Quantifizierung von Unsicherheit / Numerische Simulation / Finite Elemente / Zufallsfeld / Iterationsverfahren

Bei der numerischen Simulation vieler Prozesse in Naturwissenschaft und Technik, zum Beispiel der Schadstoffausbreitung im Grundwasser oder Belastungstests von Balken, die mathematisch häufig als Randwertaufgabe formuliert werden, sind die Eingangsdaten (Bodeneigenschaften, Niederschlagsmengen, Elastizitätsmodul etc.) oftmals mit erheblichen Unsicherheiten behaftet. Quantitative Aussagen zu den Auswirkungen solcher Datenunsicherheiten sind daher bei der Beurteilung des Simulationsergebnisses wünschenswert.

Stochastische Galerkin-Verfahren sind eine inzwischen weit verbreitete Diskretisierungsmethode für Randwertprobleme mit zufälligen Daten. Dabei werden physikalische Freiheitsgrade, die bei einer Simulation mit Finiten Elementen entstehen, zusätzlich mit stochastischen Freiheitsgraden gekoppelt. Ausgehend von Eingangsdaten, welche als Zufallsfelder beschrieben werden, erhält man somit eine kompakte Darstellung des zufälligen Simulationsergebnisses. Die zusätzliche Berechnung von stochastischen Freiheitsgraden der Lösung führt allerdings dazu, dass die stochastischen Galerkin-Gleichungen schnell bis zu 10000 mal mehr Unbekannte besitzen als rein deterministische Galerkin-Gleichungen. Die Entwicklung effizienter und robuster Iterationsverfahren zur Lösung dieser sehr grossen linearen Gleichungssysteme ist deshalb ein entscheidender Baustein bei der numerischen Simulation mit unsicheren Daten.

In den vergangenen fünf Jahren wurden vor allem zwei Arten von stochastischen Formfunktionen studiert: multivariate orthogonale Polynome (stochastische Finite-Element-Methode) und Interpolationspolynome, welche mit bestimmten Quadraturknoten assoziiert sind (stochastische Kollokationsmethode). Strukturelle Untersuchungen in der Arbeit [2] haben gezeigt, dass die Verwendung von orthogonalen Polynomen im Allgemeinen keine Entkopplung der Galerkin-Gleichungen erlaubt. Daher wurde in [3] ein neuer Präkonditionierer für die gekoppelten Galerkin-Gleichungen entwickelt und getestet. Diese Methode erlaubt eine schnellere und effizientere iterative Lösung des Galerkin-Gleichungssystems als eine etablierte Methode, welche auf dem Mittelwert der zufälligen Eingangsdaten basiert. Aufbauend auf den Untersuchungen in [1] wurde diese Idee in Zusammenarbeit mit Dr. Powell von der University of Manchester, UK, auch auf sogenannte stochastische gemischte Finite-Elemente-Diskretisierungen bei der Simulation von stationären Grundwasserströmungen mit zufälliger, lognormaler hydraulischer Durchlässigkeit übertragen [4].

Allerdings haben diese Arbeiten gezeigt, dass keiner der getesten Präkonditionierer robust bezüglich wichtiger Parameter der stochastischen Diskretisierung bzw. statistischer Grössen der Eingangsdaten ist. Deshalb arbeiten die Forscher am Institut für Numerische Mathematik und Optimierung im Moment an Mehrgitter-Verfahren für die Galerkin-Gleichungen. Diese Klasse von Iterationsverfahren ist aufgrund ihrer Effizienz und Robustheit seit Jahren weit verbreitet bei der rein deterministischen numerischen Simulation. Eine Ausdehnung dieser Technologie auf stochastisch-deterministische Galerkin-Gleichungen ist ein aktuelles Forschungsgebiet. Gefördert vom Leisler-Kiep-Reisestipendium (2008) absolvierte E. Ullmann dazu im Jahr 2009 einen sechsmonatigen Forschungsaufenthalt an der University of Maryland, College Park, USA, bei Prof. H. Elman.

Stochastische Kollokationsmethoden erlauben im Gegensatz zur Verwendung von orthogonalen Polynomen bei der Darstellung der Zufallsfelder sofort eine Entkopplung der Galerkin-Gleichungen. Dies geschieht über eine Simulation mit geschickt gewählten Realisierungen der Eingangsdaten ähnlich einer Monte-Carlo-Methode. Die dabei entstehende Folge von unabhängigen deterministischen Galerkin-Gleichungen erlaubt prinzipiell eine Verwendung etablierter Gleichungslöser. Die Herausforderung besteht allerdings darin, bereits berechnete Daten bei der Lösung vorangehender Systeme wiederzuverwenden bzw. eine sinnvolle Anordnung der Gleichungssysteme zu entwickeln, so dass der Aufwand zur Lösung der gesamten Folge von Gleichungssystemen drastisch reduziert wird. Aufbauend auf bereits gewonnenen Ergebnissen zu sogenannten Krylov-Unterraum-Recycling-Verfahren in [5] wird die Erforschung dieser Fragestellungen nun auf stochastische Kollokationsmethoden ausgedehnt.

Diese Arbeit wird im DFG-Schwerpunktprogramm 1324 *Extraktion quantifizierbarer Informationen aus komplexen Systemen* im Projekt *Stochastic Galerkin Methods: Fundamentals and Algorithms* gefördert.

O. E. Ernst, C. E. Powell, D. J. Silvester, E. Ullmann: Efficient Solvers for a Linear Stochastic Galerkin Mixed Formulation of Diffusion Problems with Random Data, SIAM J. Sci. Comput. 31 (2009), S. 1424-1447.

O. G. Ernst, E. Ullmann: Stochastic Galerkin Matrices, Preprint 32, DFG-SPP 1324, November 2009. Erscheint in SIAM J. Matrix Anal. Appl. (2010).

E. Ullmann: A Kronecker Product Preconditioner for Stochastic Galerkin Finite Element Discretizations, Preprint 2008-04, Fakultät für Mathematik und Informatik, TU Bergakademie Freiberg, ISSN 1433-9307. Erscheint in SIAM J. Sci. Comput. (2010).

C. E. Powell, E. Ullmann: Preconditioning Stochastic Galerkin Saddle Point Systems, MIMS EPrint 2009.88, School of Mathematics, University of Manchester, ISSN 1749-9097. Eingereicht November 2009.

E. Ullmann: Solution Strategies for Stochastic Finite Element Discretizations, Dissertationsschrift, TU Bergakademie Freiberg (2008).