

IN A U G U R A L - D I S S E R T A T I O N

zur  
Erlangung der Doktorwürde  
der  
Naturwissenschaftlich-Mathematischen Gesamtfakultät  
der  
Ruprecht-Karls-Universität  
Heidelberg

vorgelegt von

Diplom-Physiker Jens Eberhard  
aus Heidelberg

Tag der mündlichen Prüfung: 18. Dezember 2003



Upscaling und Mehrgitterverfahren für  
Strömungen in heterogenen porösen Medien

Gutachter: Prof. Dr. Gabriel Wittum  
Prof. Dr. Willi Jäger



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>7</b>
2.1	Mathematische Grundlagen . . . . .	7
2.2	Fourier-Analyse und Distributionen . . . . .	11
2.3	Fluidtransport in einem porösen Medium . . . . .	15
2.4	Mehrskalenproblem und stochastische Modellierung . . . . .	18
2.4.1	Skalen, Modellierung und Zufallsfeld . . . . .	18
2.4.2	Gaußsches Zufallsfeld und Korrelation . . . . .	20
2.4.3	Generierung eines Gaußschen Zufallsfeldes . . . . .	21
2.4.4	Periodische und andere Felder . . . . .	22
2.5	Homogenisierungstheorie . . . . .	23
2.6	Einfache Mittelungsroutinen . . . . .	24
2.7	Finite Elemente . . . . .	26
2.7.1	Galerkin-Verfahren . . . . .	26
2.7.2	Gebietszerlegungen . . . . .	26
2.7.3	Bilineare Finite Elemente . . . . .	27
2.7.4	Assemblierung . . . . .	29
2.7.5	Approximationssätze . . . . .	30
<b>3</b>	<b>Mehrgitterverfahren</b>	<b>31</b>
3.1	Iterative Lösungsverfahren . . . . .	31
3.2	Einfache lineare Iterationsverfahren . . . . .	32
3.2.1	Konvergenz der einfachen Iterationsverfahren . . . . .	33
3.3	Klassische Mehrgitterverfahren . . . . .	34
3.3.1	Glätter . . . . .	34
3.3.2	Die Mehrgitter-Idee . . . . .	34
3.3.3	Transferoperatoren . . . . .	36
3.3.4	Grobgitteroperator und Gitterhierarchie . . . . .	38
3.3.5	Mehrgitter-Konvergenz . . . . .	39
3.3.6	Aufwand eines Mehrgitterzyklus . . . . .	40

3.4	Algebraische Mehrgitterverfahren . . . . .	41
3.4.1	Einführung . . . . .	41
3.4.2	Operatorabhängige Prolongation im eindimensionalen Fall . . . . .	41
3.4.3	Basisfunktionen im eindimensionalen Fall . . . . .	43
3.4.4	Bemerkungen zum zweidimensionalen Fall . . . . .	44
3.4.5	Matrixabhängige Transferoperatoren . . . . .	44
3.4.6	Explizite Prolongationen im zweidimensionalen Fall . . . . .	47
3.4.7	Algebraische Verfahren . . . . .	51
3.4.8	Das Ruge-Stüben-Verfahren . . . . .	51
3.4.9	Das Schurkomplement-Mehrgitterverfahren . . . . .	56
<b>4</b>	<b>Die Coarse Graining Methode</b>	<b>59</b>
4.1	Coarse Graining der Strömungsgleichung . . . . .	60
4.2	Störungstheoretische Berechnung . . . . .	66
4.2.1	Berechnung mit einer weichen Abschneidefunktion . . . . .	68
4.3	Statistische Eigenschaften . . . . .	70
4.3.1	Varianz des hochskalierten Permeabilitätsfeldes $K(x) _\lambda$ . . . . .	70
4.3.2	Fluktuationen der hochskalierten Permeabilität von Realisierung zu Realisierung . . . . .	71
4.4	Fehlerberechnung für die hochskalierte Lösung . . . . .	73
4.5	Renormierungsgruppen-Analyse . . . . .	75
<b>5</b>	<b>Numerisches Coarse Graining und Mehrgitter</b>	<b>81</b>
5.1	Numerisches Coarse Graining . . . . .	81
5.1.1	Analogie zur Theorie der Homogenisierung . . . . .	87
5.2	Vergleich mit der Mehrskalen-Theorie . . . . .	87
5.3	Berechnung des hochskalierten Feldes . . . . .	89
5.4	Vergleich von Theorie und Simulation . . . . .	92
5.4.1	Effektiver Permeabilitätstensor . . . . .	94
5.4.2	Berechnung der statistischen Eigenschaften . . . . .	95
5.4.3	Varianz des hochskalierten Permeabilitätsfeldes . . . . .	96
5.4.4	Abweichung der hochskalierten Permeabilität . . . . .	96
5.5	Numerische Fluß- und Fehlerberechnung . . . . .	98
5.5.1	Berechnung und Vergleich der Flüsse . . . . .	98
5.5.2	Berechnung und Vergleich der Lösung aus der numerisch hochskalierten Strömungsgleichung . . . . .	99
5.6	Das Coarsening-Mehrgitterverfahren . . . . .	101
5.6.1	Transferoperatoren für das Coarsening-Mehrgitterverfahren . . . . .	104
<b>6</b>	<b>Numerische Experimente und Ergebnisse</b>	<b>105</b>
6.1	MG-effektiver Koeffizient . . . . .	105
6.2	Das Modellproblem . . . . .	106

6.3	Varianten des Coarsening-Mehrgitterverfahrens . . . . .	107
6.3.1	$h$ -Abhängigkeit des CN-MG . . . . .	110
6.4	Vergleich der Mehrgitterverfahren . . . . .	111
6.4.1	Vergleich für ein Ensemble von skalaren Feldern . . . . .	112
6.4.2	Vergleich für richtungsanisotrope Felder . . . . .	114
6.4.3	Vergleich für eine isotrope Einzelrealisierung . . . . .	114
6.5	Vergleich für periodische Medien . . . . .	115
6.5.1	Periodisch geschichtetes Medium . . . . .	115
6.5.2	Medien mit periodischen Einlagerungen . . . . .	117
6.5.3	Schachbrett-Medien . . . . .	121
6.5.4	Medium mit Querschichtung . . . . .	123
6.6	Weitere Beispielfelder . . . . .	125
6.7	Zusammenfassung der Resultate . . . . .	127
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>131</b>
<b>A</b>	<b>Anhang</b>	<b>135</b>
A.1	Greensche Funktion für ein homogenes Medium . . . . .	135
A.2	Modifizierter Mehrgitter-Algorithmus . . . . .	135
A.3	Explizite Berechnungen zur Coarse Graining Methode . . . . .	135
A.3.1	Berechnungen für den anisotropen Fall . . . . .	136
A.3.2	Berechnungen für die weiche Abschneidefunktion . . . . .	136
A.3.3	Berechnungen für die Abweichung des Permeabilitätskoeffizienten . . . . .	137
A.3.4	Berechnungen für die Fehlerberechnung . . . . .	141
A.4	Numerisches Coarse Graining mit Nullrandbedingungen . . . . .	142
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>143</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>151</b>





# Kapitel 1

## Einleitung

Viele Vorgänge in der Natur sind wegen der Größe der Systeme und der komplexen Wechselwirkungen nur sehr schwer zu verstehen, und eine adäquate Modellierung natürlicher Phänomene führt oft zu komplexen Modellen. Eine große Anzahl davon liefert in der mathematischen Beschreibung partielle Differentialgleichungen. Darin auftretende Parameter beinhalten die Komplexität und Größe der relevanten Eigenschaften für den Prozeß in der Natur. Eine Folge dessen ist, daß in die Modelle sehr viele Daten eingehen. Die Modelle sind aber auch dadurch gekennzeichnet, daß sich die physikalischen Prozesse oft auf sehr unterschiedlichen Größenskalen abspielen. Die Größenunterschiede der in der Natur auftretenden Erscheinungen sind eine der wichtigsten Eigenschaften und in vielen Fällen lassen sich die skalenabhängigen Vorgänge nicht unabhängig voneinander behandeln. In solchen Fällen spricht man von einem Mehrskalenproblem.

Sehr oft treten in den Materialwissenschaften Mehrskalenprobleme auf, da eine makroskopische Beschreibung des Mediums ohne die Effekte, die von der atomistischen Skala stammen, nicht sinnvoll ist. Schon in sehr einfachen Systemen wie z.B. in der Dynamik eines an einen Atomkern gebundenen Elektrons liegt ein Mehrskalenproblem vor. Es resultiert aus der unterschiedlichen Masse des Elektrons und des Atomkerns von drei Größenordnungen. Dies setzt sich bei komplexeren Systemen wie einfache Moleküle oder Makromoleküle fort. Entsprechend schwer und aufwendig sind Berechnungen, um die Dynamik solcher Systeme ohne Vereinfachungen bezüglich der Skalenabhängigkeit zu erhalten.

Ein interessantes Beispiel für ein Mehrskalensystem sind sehr lange Polymerketten. Diese besitzen Eigenschaften und ein Verhalten sehr ähnlich zu denen von biomolekularen Systemen. Eine Beschreibung muß hier sukzessive die Effekte von der Mikroskala (Atome) über die Mesoskala (Molekülgruppen) zur Makroskala (ganze Kette) hin involvieren. Ein weiteres Mehrskalenproblem ist das bekannte Phänomen der Supraleitung bestimmter Materialien. Hier bestimmen die Elektronen, die auf der Nanometer-Skala ( $10^{-9}m$ ) durch die direkte Wechselwirkung mit den Atomkernen lokalisiert sind, gebunden in sogenannten Cooper-Paaren das Verhalten des Systems auf Größenordnungen von  $10^2$ - $10^3nm$ . Dieser Effekt trägt zur supraleitenden Eigenschaft der Materialien bei. Auch in der Strömungsmechanik liegen häufig Mehrskalenprobleme vor. Zum Beispiel in nahezu inkompressiblen Strömungen, die aber bereits von kleinen Kompressibilitätseffekten beeinflusst werden. Solche Strömungen sind von schnellen Druckwellen gekennzeichnet, die sich mit Schallgeschwindigkeit ausbreiten. Durch die Größenunterschiede von Strömungs- und Schallgeschwindigkeit ergibt sich hier ein Mehrskalenproblem.

Für alle Mehrskalenprobleme ist charakteristisch, daß es nicht ausreicht, sich zur genauen Beschreibung des Problems auf eine einzige Größenskala zu beschränken. In der Regel muß man zum Verständnis des Phänomens alle Skalen im Modell berücksichtigen. Ein weiterer, wichtiger Aspekt ist, daß auch experimentelle Meßergebnisse von der gewählten Auflösung des Experiments abhängen. Dies erschwert das Verwenden von Daten in einem Modell, wenn die Skala des Modells der experimentellen Skala nicht entspricht.

Weitere Mehrskalprobleme sind das Verhalten von Flüssigkeiten in der Nähe des kritischen Temperaturpunktes oder die Strömung von Flüssigkeiten durch poröse Materialien. Darunter fällt auch die Strömung von Grundwasser im Erdboden, der als poröses Medium modelliert wird. Auf dieses Mehrskalproblem konzentrieren wir uns in dieser Arbeit. Die skalenabhängigen Effekte auf die Strömung im Aquifer werden durch die Durchlässigkeit (Permeabilität) wiedergegeben. Dies resultiert im Strömungsmodell in einer stark variierenden Permeabilität.

### Poröse Medien und Skalen im Aquifer

Allgemein versteht man unter einem porösen Medium ein heterogenes Material, bestehend aus Feststoffskelett oder -matrix und dem durch darin befindliche Hohlräume gebildeten Porenraum. Der Porenraum des porösen Mediums wird als zusammenhängend betrachtet, da andernfalls der Transport von Fluiden im Porenraum nicht möglich wäre. Poröse Medien treten in einem weiten Bereich von Problemstellungen der Natur- und Ingenieurwissenschaften auf. Böden oder Grundwasserleiter (Aquifer) sind nur ein Beispiel aus der Geologie, poröse Katalysatoren, Chromatographiesäulen oder keramische Schäume spielen in wichtigen Prozessen der chemischen Verfahrenstechnik eine Rolle. Auch die menschliche Haut kann als poröses Medium angesehen werden.

Die Strömung des Grundwassers in einem Grundwasserleiter wird vor allem durch die räumlich stark variierende Durchlässigkeit des Bodens bestimmt. Man unterscheidet dafür drei relevante Längenskalen: Auf der Porenskala ( $10^{-3}m$ ) ist die molekulare Diffusion entscheidend. Auf der Mesoskala ( $1m$ ) kommt durch die Heterogenität des Porenraums und dem damit nicht mehr aufgelösten Geschwindigkeitsfeldes der Effekt der Dispersion zum Tragen, der die lokale Diffusion dominiert. Er hat seine Ursache in der zusätzlichen Vermischung der Moleküle aufgrund der Porenstruktur. Auf der Makroskala ( $10^2m$ ) spielen makroskopische Veränderungen des Aquifers eine Rolle, die sich durch großräumige Variabilitäten der Permeabilität auswirken.

Aufgrund dieses Mehrskalproblems modelliert man einen Grundwasserleiter als poröses Medium mit sehr heterogener Permeabilität, die man im Rahmen einer stochastischen Modellierung als Realisierung eines Ensembles von Feldern ansieht. Experimentell gewonnene Daten können in die Realisierungen miteinfließen. Weiter sind Grundwasserleiter dadurch gekennzeichnet, daß ihr gesamter Porenraum vom Wasser eingenommen wird. Man betrachtet daher eine Strömung in einem gesättigten porösen Medium.

### Lösungs- und Upscalingsmöglichkeit

Analytische Lösungen von Mehrskalproblemen sind in vielen Fällen nicht bekannt. Um sehr präzise numerische Lösungen zu erhalten, ist es erforderlich, daß alle im Problem auftretenden Längenskalen durch die in der Simulation verwendeten diskreten Größen aufgelöst werden. Dies ist aber selbst bei der hohen Leistung von heutigen Computern nicht immer möglich. Die Größe des Speicherbereichs setzt hier die Grenzen.

Für eine Grundwasser-Simulation mit einer Million Gitterelementen ist es beispielsweise üblich, daß jedes Element eine Ausdehnung in der Größenordnung von zehn Metern hat. Die Durchlässigkeit, die man an Proben mißt, ist jedoch auf einer Skala von einigen Zentimetern gegeben. Das bedeutet, daß man mehr als  $10^5$  Freiheitsgrade pro Raumdimension hat. Der Speicher- und Rechenaufwand dafür übersteigt die Leistungsfähigkeit moderner Computer. Die Situation kann erleichtert werden, indem man auf Parallelrechner ausweicht. Aber die Größe des diskreten Problems wird dadurch nicht reduziert.

Ein möglicher Ausweg ist, das Charakteristikum eines Mehrskalproblems zu umgehen. Für ein Mehrskalproblem reicht es nicht aus, sich bei der Beschreibung des Problems auf eine einzige Größenskala zu beschränken. Dies wird aber möglich, wenn man den Einfluß anderer Skalen durch geeignete Methoden auf eine gegebene Skala transferiert und diese in die Beschreibung einfließen läßt.

Dieses Vorgehen wird durch folgenden Sachverhalt unterstützt: Wenn es möglich ist, alle Skalen eines Systems in einer numerischen Simulation aufzulösen, dann liefert die entsprechende Berechnung quantitativ bestmögliche Informationen über das Systemverhalten. Für die meisten praktischen Anwendungen sind die feinen Details einer Lösung des Problems jedoch nicht von Interesse.

Oftmals reicht es aus, makroskopische Eigenschaften des Mehrskalensystems zu bestimmen, wie z.B. Elastizitätsmodule oder effektive Leitfähigkeiten. Dies motiviert ebenfalls die Entwicklung von Verfahren, die die feinskaligen Effekte auf größere Skalen übertragen, um damit das Systemverhalten auf einer größeren Skala exakter ermitteln zu können.

Solche Verfahren werden in vielen Bereichen benutzt. Bei deren Entwicklung können völlig unterschiedliche Kriterien für das Hochskalieren (Upscaling) die Grundlage sein, z.B. die Erhaltung physikalischer Größen wie etwa Fluß oder dissipative Energie [Dur91, SVGC95, RdM97, KYL02]. Einige Verfahren leiten durch eine Mittelung aus den fundamentalen Differentialgleichungen neue skalenabhängige Gleichungen her [Dur91, DK92a, DK92b, NT98]. Diese beschreiben direkt die skalenabhängige Lösung. Einen Überblick über eine Vielzahl von Upscalingsverfahren liefern die Arbeiten [SVGC95, RdM97, WGH00]. Ein erster Schritt in Richtung einer numerischen Behandlung eines Mehrskalensystems ist also das Ableiten von Modellgleichungen, die durch ein Upscaling das grobskalige Systemverhalten zusammen mit dem Einfluß der feinen Skalen beschreiben.

### Berechnung der Grundwasserströmung und Upscaling

Eine direkte numerische Simulation der Strömung in einem Grundwasserleiter ist aufgrund der feinskaligen Heterogenitäten im Medium oft sehr schwer. Für die Entwicklung eines Upscalingsverfahrens muß man die Permeabilität des heterogenen Mediums hochskalieren. Die Permeabilität beschreibt für eine Einphasenströmung das Medium allein.

Im Bereich der Upscalingsverfahren gibt es nun unterschiedliche Arten der Vorgehensweise:

Einfache Upscalingsmethoden sind heuristische Verfahren, die aus physikalisch motivierten Volumennittelungsverfahren bestehen [Kit90, Dur92]. Sie versuchen, den Einfluß der Heterogenitäten zu erfassen, indem die Heterogenitäten lokal für kleine Volumina geeignet gemittelt werden und daraus entstehende glatte Größen für die größeren Skalen berechnet werden. Oft werden diese noch erweitert, um die Erhaltung von physikalischen Größen, die das makroskopische System beschreiben, zu gewährleisten.

Eine zweite Art von Upscalingmethoden versucht, den Übergang von der Mikroskala zur Makroskala zu bewerkstelligen, indem die Lösung auf der Makroskala durch lokale Lösungen des Systems auf den feinen Skalen aufgebaut wird. Dies geschieht numerisch, indem lokale Lösungen auf der Feinskala ermittelt werden. Diese beinhalten den Einfluß der feinskaligen Heterogenitäten und aus ihnen wird die grobskalige Lösung zusammengesetzt. Damit erhält man implizit ein Upscalingsverfahren.

Die Mathematik stellt außerdem die rigorose, aber nur eingeschränkt einsetzbare Vorgehensweise der Homogenisierung zur Verfügung [Koz77, ZKON79, Koz79, JKO94]. Effektive Werte aus dem Hochskalieren sind hier nur in Spezialfällen explizit anzugeben, nämlich im Fall von Medien mit periodischen Heterogenitäten. Für den Fall, daß die Heterogenitäten stochastisch verteilt sind, kann man effektive Werte im allgemeinen nur formal angeben [Yur81, Yur86, PY90]. In einer aktuellen Arbeit von Piatnitski und Bourgeat [BP02] wird aber gezeigt, wie man effektive Werte in solchen Fällen numerisch approximieren kann.

Alle einfachen Mittelungsroutinen gehören bis auf Renormierungsverfahren zu den genannten volumenbasierten Verfahren. Darunter fallen die Verfahren von Kitanidis, Durlofsky und weiteren [Kit90, RGH90, Dur92, DK92a, NO93, PNT96, RSMB99]. Die Renormierungsverfahren leiten aus analogen elektrischen Widerstandsschaltungen lokale effektive Werte her [Kin89, HM01]. Die einfachen Mittelungsroutinen haben den Vorteil, daß sie sehr leicht zu berechnen sind.

Unter die zweite Art des Upscalings fallen sogenannte Multiskalen-Finite-Elemente Methoden, die in den letzten Jahren insbesondere von Hou et al. und Schwab et al. erarbeitet wurden [HW97, HWC99, MS99, MS01]. Sie basieren auf theoretischen Arbeiten und liefern auch Abschätzungen für den Fehler durch das Upscaling, die die volumenbasierten Methoden nicht liefern. Die theoretischen Vorhersagen sind nur im Fall periodischer Medien gültig. Die Verfahren lassen sich aber auch im nicht-periodischen Fall anwenden.

Der Vorteil der volumenbasierten Verfahren gegenüber den letztgenannten ist, daß sie sich in allen Fällen mit geringerem Aufwand einsetzen lassen. Die Verfahren, die das feinskalige Verhalten durch einen Mehrskalensystemansatz direkt in die grobskalige Lösung integrieren, sind aufwendig zu implementieren und auch in ihrer Ausführung aufwendiger.

Wir schlagen in dieser Arbeit ein neues Verfahren zum Hochskalieren vor, die sogenannte Coarse Graining Methode. Sie wurde in den Grundzügen in den Arbeiten [Att02, AEN02] für die Strömungsgleichung und für den Fall stochastischer Medien entwickelt. Die Coarse Graining Methode gehört zu den beiden genannten Arten des Upscalings, da sie auf einer Volumenmittelung basiert, die sich aber ähnlich wie in den Multiskalen-Finite-Elemente Methoden durch das Lösen von kleineren, lokalen Problemen darstellen läßt. Mit ihr erhält man im allgemeinen einen Tensor für die effektive Permeabilität. In speziellen Fällen liefert sie zudem effektive Werte, die denen aus der Homogenisierungstheorie entsprechen. In einem eingeschränkten Sinn erweitert die Coarse Graining Methode die Methode der Homogenisierung auf stochastische Medien.

## Mehrgitterverfahren

Verfahren, die ausgehend von Modellgleichungen auf der feinsten Skala eines Problems das Verhalten abhängig von der Skala oder Modellgleichungen auf größeren Skalen bestimmen, werden auch in speziellen Lösungsverfahren in der numerischen Mathematik benötigt. Diese bezeichnet man als Mehrgitterverfahren. In ihrer einfachsten Form gehen sie von einer Diskretisierung einer partiellen Differentialgleichung aus und lösen das dazugehörige lineare Gleichungssystem (geometrisches Mehrgitterverfahren). Um dies effizient zu tun, nutzen die Mehrgitterverfahren eine Hierarchie von immer größeren Gittern aus, auf denen eine diskrete Version des zugrundeliegenden feinskaligen Problems vorliegt (Grob-gitteroperator). Auf diesen Gittern werden Korrekturen zur Lösung berechnet. Damit die Verfahren effektiv arbeiten, ist es nötig, die diskrete Darstellung des Problems auf den größeren Gittern möglichst dem skalenabhängigen Verhalten des ausgehenden Problems anzupassen. Dies kann durch die Verwendung von Upscalingsmethoden gewährleistet werden, um effiziente, angepaßte Mehrgitterverfahren zu erhalten.

Am Anfang der Entwicklung solcher Mehrgitterverfahren stand die Verwendung matrixabhängiger Prolongationen [ABDP81, Den82a]. Die Weiterführung dieser Idee unter Berücksichtigung der Verfahrensweise von Mehrgitterverfahren führte auf die sogenannten algebraischen Mehrgitterverfahren [RS85, BCF<sup>+</sup>00]. Wir gehen darauf im Detail in Kapitel 3 ein.

Bei diesen Mehrgitterverfahren arbeitet man gezielt auf ein effizientes Zwischenspiel der Bestandteile des Verfahrens hin, nämlich zwischen Glätter und Grobgitteroperator. Damit erreicht man eine Beschleunigung der Konvergenz und in vielen Fällen eine Verbesserung des Verfahrens hinsichtlich seiner Robustheit. Dazu wird der Grobgitteroperator durch geschickte Wahl der Grobgitter passend gewählt. Diese Informationen können allein aus der Matrixdarstellung des Problems extrahiert werden, so daß man einen „Black-Box“-Löser vorliegen hat. Das bekannteste und erste Verfahren dieser Art ist das von Ruge und Stüben [RS87].

Wir benutzen die Coarse Graining Methode als Upscalingsmethode für Mehrgitterverfahren im oben beschriebenen Sinn. Wir entwickeln damit ein algebraisch definiertes Mehrgitterverfahren, das sowohl Eigenschaften der geometrischen als auch der algebraischen Mehrgitterverfahren beinhaltet. In der Arbeit [Neu95] wird ähnlich vorgegangen und die Homogenisierungsmethode benutzt, um ein effizientes Mehrgitterverfahren für die Strömung in periodischen Medien zu entwickeln.

In der vorliegenden Arbeit konzentrieren wir uns auf die Strömung in heterogenen Medien in zwei Raumdimensionen. Wir betrachten den stationären Fall, bei dem das System im Gleichgewichtszustand ist und sich die Lösung zeitlich nicht ändert. Die Modellgleichung ist in diesem Fall eine elliptische partielle Differentialgleichung analog zu einer zeitunabhängigen Diffusionsgleichung. Das Permeabilitätsfeld modellieren wir zunächst durch Realisierungen eines Gaußschen Zufallsfeldes mit einer logarithmischen Normalverteilung. Auch periodische Permeabilitätsfelder kommen zum Einsatz, da sich diese eignen, das neu entwickelte Mehrgitterverfahren mit gängigen Verfahren zu vergleichen. Reale Daten für das Permeabilitätsfeld betrachten wir nicht.

Diese Arbeit ist wie folgt gegliedert.

Im nächsten Kapitel stellen wir die mathematischen Grundlagen für die Herleitung der Coarse

Graining Methode und die numerische Berechnung der Strömung in einem porösen Medium zusammen. Insbesondere gehen wir auf die stochastische Modellierung des Mehrskalenproblems ein und stellen kurz die Theorie der Homogenisierung und einfache Mittelungsmethoden zum Upscaling dar. In Kapitel 3 führen wir das geometrische Mehrgitterverfahren, unterschiedliche Transferabbildungen und die Erweiterung zu zwei algebraischen Verfahren ein. Die Entwicklung der Coarse Graining Methode und ihre Resultate befinden sich im Kapitel 4. Daran schließt sich die numerische Behandlung des Coarse Grainings und die Entwicklung eines Mehrgitterverfahrens an, das den Grobgitteroperator mithilfe des numerischen Coarse Grainings bestimmt. Im letzten Kapitel untersuchen wir anhand eines Modellproblems für die Strömung in heterogenen Medien verschiedene Mehrgitterverfahren. Wir untersuchen dazu auch Verfahren, die einfache Upscalingsmethoden verwenden. Das Kapitel enthält die numerischen Konvergenzraten für die Mehrgitterverfahren und geht auf einen Zusammenhang zwischen dem Konvergenzverhalten und der Modellgüte ein.



# Kapitel 2

## Grundlagen

In diesem Kapitel gehen wir auf die Grundlagen ein, die man benötigt, um ein Mehrskalenproblem zunächst kontinuierlich und dann diskret zu behandeln. Neben einigen mathematischen Grundlagen leiten wir die Strömungsgleichung her, die die Grundlage für die theoretischen als auch für die numerischen Berechnungen in dieser Arbeit ist. Wir gehen auf die stochastische Modellierung ein und stellen kurz die Theorie und Generierung eines Gaußschen Zufallsfeldes für das Permeabilitätsfeld vor. Weiter beschreiben wir die Theorie der Homogenisierung und einige Mittelungsroutinen und führen dann die Finite-Element-Methode ein. Diese liefert eine mögliche Diskretisierung der Strömungsgleichung für die numerischen Simulationen und bildet die Grundlage zur numerischen Behandlung des Mehrskalenproblems mit dem numerischen Coarse Graining.

### 2.1 Mathematische Grundlagen

Dieser Abschnitt wiederholt kurz Grundlagen aus der linearen Algebra und führt die Sobolev-Räume ein. Die Beweise der Aussagen findet man zum Beispiel in [Hac86].

Seien  $V, W$  endlich-dimensionale Vektorräume über  $\mathbb{R}$ . Mit  $\text{Lin}(V, W)$  bezeichnen wir die linearen Abbildungen von  $V$  nach  $W$ .

**Definition 2.1.** Sei  $V$  ein endlich-dimensionaler Vektorraum über  $\mathbb{R}$  und  $A \in \text{Lin}(V, V)$ . Ein Vektor  $v \in V$  heißt Eigenvektor zu  $A$ , wenn  $Av = \lambda v$  für ein  $\lambda \in \mathbb{R}$  ist. Ein solches  $\lambda$  heißt Eigenwert von  $A$ . Die Menge aller Eigenwerte bezeichnet man als Spektrum  $\sigma(A)$  und ihr Betragsmaximum als Spektralradius  $\rho(A)$ .

Wenn auf  $V$  und  $W$  Vektornormen  $\|\cdot\|_V$  und  $\|\cdot\|_W$  gegeben sind, wird durch

$$\|A\|_{W \leftarrow V} := \sup_{v \in V, v \neq 0} \frac{\|Av\|_W}{\|v\|_V} \quad (2.1)$$

eine Operatornorm für  $A \in \text{Lin}(V, W)$  induziert.

**Definition 2.2.** Als Dualraum  $V'$  von  $V$  bezeichnet man die Menge aller stetigen, linearen Funktionale  $f : V \rightarrow \mathbb{R}$  mit der kanonischen Vektorraum-Struktur.

**Definition 2.3.** Ein Skalarprodukt auf  $V$  ist eine Abbildung  $(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$  mit folgenden Eigenschaften:

1.  $(\cdot, \cdot)$  ist eine Bilinearform, das heißt

$$(u, \alpha v_1 + \beta v_2) = \alpha(u, v_1) + \beta(u, v_2) \quad \text{für alle } u, v_1, v_2 \in V, \alpha, \beta \in \mathbb{R}, \quad (2.2)$$

und die analoge Aussage für das erste Argument gilt,

2.  $(\cdot, \cdot)$  ist symmetrisch, das heißt  $(u, v) = (v, u)$  für alle  $u, v \in V$ ,
3.  $(\cdot, \cdot)$  ist positiv, das heißt  $(u, u) \geq 0$  für alle  $u \in V$ ,
4.  $(\cdot, \cdot)$  ist definit, das heißt  $(u, u) = 0 \Leftrightarrow u = 0$ .

Ein Skalarprodukt definiert eine Vektornorm auf  $V$  durch

$$\|v\| := \sqrt{(v, v)}. \quad (2.3)$$

Insbesondere wird die  $l^2$ -Norm bzw. euklidische Norm  $\|\cdot\|_2$  im  $\mathbb{R}^n$  durch das euklidische Skalarprodukt

$$(x, y) \mapsto x \cdot y := \sum_{\nu=1}^n x_\nu y_\nu \quad \text{für alle } x, y \in \mathbb{R}^n \quad (2.4)$$

erzeugt.

Durch die Abbildung  $v \mapsto (v, \cdot)$  induziert jedes Skalarprodukt auch einen Isomorphismus zwischen  $V$  und seinem Dualraum  $V'$ .

**Definition 2.4.** Seien  $V, W$  versehen mit den Skalarprodukten  $(\cdot, \cdot)_V$  und  $(\cdot, \cdot)_W$  und sei  $A \in \text{Lin}(V, W)$ . Durch die Skalarprodukte

$$(v, A^*w)_V = (Av, w)_W \quad \text{für alle } v \in V, w \in W \quad (2.5)$$

wird der Operator  $A^* \in \text{Lin}(W, V)$  definiert, den wir zu  $A$  bezüglich  $(\cdot, \cdot)$  adjungiert nennen. Für  $V = W$  und  $(\cdot, \cdot)_V = (\cdot, \cdot)_W$  heißt  $A \in \text{Lin}(V, V)$  symmetrisch, falls  $A^* = A$ .

**Definition 2.5.** Der Operator  $A \in \text{Lin}(V, V)$  heißt positiv definit, wenn er eine Basis aus Eigenvektoren zu positiven Eigenwerten besitzt.

**Satz 2.1.** Sei  $(\cdot, \cdot)$  ein Skalarprodukt auf  $V$ . Jede (bezüglich  $(\cdot, \cdot)$  symmetrische, positiv definite) Bilinearform  $a(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$  kann durch einen linearen (bezüglich  $(\cdot, \cdot)$  symmetrischen, positiv definiten) Operator  $A \in \text{Lin}(V, V)$  durch

$$a(u, v) = (Au, v) \quad (2.6)$$

dargestellt werden.

Die Wahl einer Basis in  $V$  führt zu einer Identifizierung mit dem Vektorraum  $\mathbb{R}^n$ , auf dem das euklidische Skalarprodukt ausgezeichnet ist. Lineare Abbildungen können dann durch Matrizen  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  dargestellt werden, und dem Adjungieren bezüglich  $(\cdot, \cdot)$  entspricht das Transponieren der Matrix. Symmetrischen Operatoren bezüglich  $(\cdot, \cdot)$  entsprechen symmetrische Matrizen.

## Sobolev-Räume

Sei  $\Omega$  eine offene Teilmenge des  $\mathbb{R}^n$ . Die Sobolev-Räume, die wir benötigen, werden auf dem Funktionenraum  $L^2(\Omega)$  bzw.  $L^\infty(\Omega)$  aufgebaut.  $L^2(\Omega)$  besteht aus allen Funktionen, deren Quadrat über  $\Omega$  Lebesgue-integrierbar ist. Dabei werden zwei Funktionen  $u$  und  $v$  miteinander identifiziert, wenn  $u(x) = v(x)$  für  $x \in \Omega$  abgesehen von einer Nullmenge gilt. Durch das Skalarprodukt

$$(u, v)_{L^2(\Omega)} := \int_{\Omega} u(x)v(x) d^n x \quad (2.7)$$

wird  $L^2(\Omega)$  zu einem Hilbert-Raum.

**Definition 2.6.**  $u \in L^2(\Omega)$  besitzt eine (schwache) Ableitung  $v := D^\alpha u \in L^2(\Omega)$ , falls für  $v$  gilt:

$$(w, v)_{L^2(\Omega)} = (-1)^{|\alpha|} (D^\alpha w, u)_{L^2(\Omega)} \quad \text{für alle } w \in C_c^\infty(\Omega). \quad (2.8)$$

Dabei gilt für den Multiindex  $\alpha \in \mathbb{N}^n$ ,  $D^\alpha := D_1^{\alpha_1} \cdot \dots \cdot D_n^{\alpha_n}$  und  $D_i := \frac{\partial}{\partial x_i}$ .



Der Begriff der schwachen Ableitung wird auf andere Differentialoperatoren entsprechend übertragen. Sei zum Beispiel  $u \in L^2(\Omega)^n$  ein Vektorfeld. Dann ist  $v \in L^2(\Omega)$  die Divergenz im schwachen Sinne, kurz  $v = \operatorname{div} u$ , wenn  $(w, v)_{L^2(\Omega)} = -(\operatorname{grad} w, u)_{L^2(\Omega)}$  für alle  $w \in C_c^\infty(\Omega)$  gilt.

$L^\infty(\Omega)$  bezeichnet die Menge der auf  $\Omega$  beschränkten und lokal integrierbaren Funktionen. Dabei wird nicht zwischen Funktionen unterschieden, die fast überall übereinstimmen. Die Norm lautet:

$$\|u\|_{L^\infty(\Omega)} := \inf \left\{ \sup_{x \in \Omega \setminus A} |u(x)|, A \text{ ist eine Nullmenge} \right\}.$$

**Definition 2.7 (Sobolev-Raum).** Für ganzzahliges  $m \geq 0$  bezeichne  $H^m(\Omega)$  die Menge aller Funktionen  $u$  in  $L^2(\Omega)$ , die schwache Ableitungen  $D^\alpha u \in L^2(\Omega)$  für alle  $|\alpha| \leq m$  besitzen:

$$H^m(\Omega) := \{u \in L^2(\Omega) \mid D^\alpha u \in L^2(\Omega) \text{ für } |\alpha| \leq m\}. \quad (2.9)$$

$H^m(\Omega)$  bildet einen Hilbert-Raum mit dem Skalarprodukt

$$(u, v)_{H^m(\Omega)} := \sum_{|\alpha| \leq m} (D^\alpha u, D^\alpha v)_{L^2(\Omega)} \quad (2.10)$$

und der Norm

$$\|u\|_{H^m(\Omega)} := \sqrt{\sum_{|\alpha| \leq m} \|D^\alpha u\|_{L^2(\Omega)}^2}. \quad (2.11)$$

Mit  $|u|_{H^m(\Omega)}$  bezeichnet man die Seminorm  $|u|_{H^m(\Omega)} := \sqrt{\sum_{|\alpha|=m} \|D^\alpha u\|_{L^2(\Omega)}^2}$ . Weiter definieren wir den Raum

$$W^{1,\infty}(\Omega) := \{u \in L^\infty(\Omega) \mid D^\alpha u \in L^\infty(\Omega) \text{ für } |\alpha| \leq 1\}.$$

**Definition 2.8.** Die Vervollständigung von  $C_c^\infty(\Omega)$  in  $L^2(\Omega)$  bezüglich der Norm (2.11) wird mit  $H_0^m(\Omega)$  bezeichnet.

**Satz 2.2.** 1. Die Räume  $C^\infty(\Omega) \cap L^2(\Omega)$  und  $C_c^\infty(\Omega)$  liegen dicht in  $L^2(\Omega)$ .

2.  $C^\infty(\Omega) \cap H^m(\Omega)$  liegt dicht in  $H^m(\Omega)$ .

3. Der Hilbert-Raum  $H_0^m(\Omega)$  ist ein Unterraum von  $H^m(\Omega)$  mit dem gleichen Skalarprodukt und gleicher Norm.  $C_c^\infty(\Omega)$  liegt dicht in  $H_0^m(\Omega)$ .

Den Dualraum von  $H_0^m(\Omega)$  bezeichnet man mit  $H^{-m}(\Omega)$ :

$$H^{-m}(\Omega) := (H_0^m(\Omega))' \quad (m \geq 0) \quad (2.12)$$

mit der Norm:

$$\|u\|_{H^{-m}(\Omega)} := \sup_{0 \neq v \in H_0^m(\Omega)} \frac{|u(v)|}{\|v\|_{H^m(\Omega)}}. \quad (2.13)$$

Wir betrachten die Fortsetzung von Funktionen  $u \in H^m(\Omega)$  auf den Rand  $\partial\Omega$ .

**Lemma 2.1.** Es besitze  $\Omega$  einen Lipschitz-stetigen Rand  $\partial\Omega$ . Dann gibt es eine Konstante  $C > 0$  derart, daß

$$\|u\|_{L^2(\partial\Omega)} \leq C \|u\|_{H^1(\Omega)} \quad \text{für alle } u \in C^1(\overline{\Omega})$$

gilt.

Auf dieser Grundlage erhält man durch Abschließung in dem Raum  $L^2(\partial\Omega)$  bzw.  $H^1(\Omega)$  die Existenz einer linearen, stetigen Spurabbildung

$$\gamma : H^1(\Omega) \rightarrow L^2(\partial\Omega).$$

Diese Spurabbildung  $\gamma$  generiert mit Hilfe der zugrundegelegten Funktionenräume über  $\Omega$  neue Räume über dem Rand  $\partial\Omega$ . Von Bedeutung ist vor allem

$$H^{1/2}(\partial\Omega) := \{u \in L^2(\partial\Omega) \mid \text{es existiert ein } v \in H^1(\Omega) \text{ mit } u = \gamma(v)\}. \quad (2.14)$$

Die Norm zu  $H^{1/2}(\partial\Omega)$  lautet

$$\|u\|_{H^{1/2}(\partial\Omega)} := \inf\{\|v\|_{H^1(\Omega)} \mid v \in H^1(\Omega), u = \gamma(v)\}, \quad (2.15)$$

und den Dualraum bezeichnet man mit  $H^{-1/2}(\partial\Omega)$ .

Im folgenden sei  $V$  ein Hilbert-Raum.

**Definition 2.9.** 1. Eine Bilinearform  $a(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$  heißt stetig, wenn mit einem  $C_s > 0$

$$|a(u, v)| \leq C_s \|u\| \|v\| \quad \text{für alle } u, v \in V \quad (2.16)$$

gilt.

2. Eine Bilinearform heißt  $V$ -elliptisch, falls sie auf  $V \times V$  stetig ist und

$$a(v, v) \geq C_e \|v\|^2 \quad \text{für alle } v \in V \text{ mit einem } C_e > 0 \quad (2.17)$$

erfüllt.

Mithilfe der Bilinearform  $a(\cdot, \cdot)$  und eines Funktionals  $f \in V'$  läßt sich folgendes Problem formulieren:

$$\text{Suche } u \in V \quad \text{mit } a(u, v) = f(v) \quad \text{für alle } v \in V. \quad (2.18)$$

**Lemma 2.2 (Lax-Milgram).** *Es sei  $a(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$  eine stetige,  $V$ -elliptische (mit Konstante  $C_e$ ) Bilinearform. Dann besitzt für jedes  $f \in V'$  die Variationsgleichung*

$$a(u, v) = f(v) \quad \text{für alle } v \in V \quad (2.19)$$

eine eindeutige Lösung  $u \in V$ . Ferner gilt die Abschätzung

$$\|u\|_V \leq \frac{1}{C_e} \|f\|_{V'}. \quad (2.20)$$

Mithilfe der Fortsetzungssätze aus der Sobolev-Theorie erhält man für die Aufgabe:

$$\text{Suche } u \in H^1(\Omega) \quad \text{mit } a(u, v) = f(v) \quad \text{für alle } v \in H_0^1(\Omega)$$

und  $u|_{\partial\Omega} = u_D \in L^2(\partial\Omega)$  die folgenden Sätze.

**Satz 2.3.** *Falls die Variationsaufgabe im Fall homogener Randwerte für alle  $f \in H^{-1}(\Omega)$  eindeutig lösbar ist, dann ist die Bedingung*

$$\text{es existiert ein } u_0 \in H^1(\Omega) \text{ mit } u_0|_{\partial\Omega} = u_D \quad (2.21)$$

hinreichend und notwendig für die eindeutige Lösbarkeit der Variationsaufgabe mit inhomogenen Randwerten. Ist  $\Omega$  ein beschränktes Lipschitz-Gebiet, dann ist die Bedingung äquivalent zu  $u_D \in H^{1/2}(\partial\Omega)$ .

*Beweis.* Siehe [Hac86]. □

**Satz 2.4.** *Sei  $\Omega$  ein beschränktes Lipschitz-Gebiet und im Fall homogener Randwerte sei für die Bilinearform Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung gemäß Lemma 2.2 garantiert. Die Bilinearform sei auf  $H^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega)$  beschränkt, dann existiert zu jedem  $f \in H^{-1}(\Omega)$  und  $u_D \in H^{1/2}(\partial\Omega)$  genau eine Lösung  $u \in H^1(\Omega)$  der Variationsformulierung mit inhomogenen Randdaten mit*

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} \leq C \left( \|f\|_{H^{-1}(\Omega)} + \|u_D\|_{H^{1/2}(\partial\Omega)} \right). \quad (2.22)$$

*Beweis.* Siehe [Hac86]. □

## 2.2 Fourier-Analysis und Distributionen

### 2.2.1 Fourier-Analysis

In diesem Abschnitt fassen wir die wichtigsten Ergebnisse aus der Theorie der Fourier-Integrale zusammen. Im Kapitel zur Coarse Graining Methode werden sie im Zusammenhang mit der Strömungsgleichung benutzt. Wir führen die Fourier-Transformation allgemein für integrierbare Funktionen ein und konzentrieren uns auf die Aussagen für Funktionen aus  $L^2(\mathbb{R}^n)$ . Für die Beweise der Sätze und die verwendeten Sätze aus der Integrationstheorie verweisen wir auf Forster, Hackbusch und für Verallgemeinerungen auf Brigola, Werner [For84, Hac86, Bri97, Wer02].

Im allgemeinen haben wir es hier mit komplex-wertigen Funktionen zu tun. Wir schreiben aber anstelle von  $C^k(\mathbb{R}^n, \mathbb{C})$  und  $L^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{C})$  nur  $C^k(\mathbb{R}^n)$  und  $L^2(\mathbb{R}^n)$ .

#### Definition der Fourier-Transformation

Für jede integrierbare Funktion  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$  und jedes  $k \in \mathbb{R}^n$  ist die Funktion

$$x \mapsto f(x) e^{-ix \cdot k}, \quad x \cdot k := \sum_{\nu=1}^n x_\nu k_\nu, \quad (2.23)$$

wieder integrierbar. Also existiert das Integral

$$\hat{f}(k) := (F f)(k) := \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-ix \cdot k} d^n x. \quad (2.24)$$

Die dadurch definierte Funktion

$$\hat{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C} \quad (2.25)$$

heißt Fourier-Transformierte von  $f$ . Aus der Integrationstheorie folgt, daß  $\hat{f}$  stetig ist. Außerdem ist  $\hat{f}$  beschränkt mit

$$|\hat{f}(k)| \leq \int_{\mathbb{R}^n} |f(x)| d^n x \quad \text{für alle } k \in \mathbb{R}^n.$$

Beispiele für Fourier-Transformierte, die im folgenden benötigt werden.

**Beispiel 2.1.** Die Fourier-Transformierte der Funktion  $f(x) := (2\pi)^{-n/2} e^{-|x|^2/2}$ . Es ist

$$\hat{f}(k) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-|x|^2/2} e^{-ix \cdot k} d^n x = \prod_{\nu=1}^n \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-x_\nu^2/2} e^{-ix_\nu k_\nu} dx_\nu \right) \quad (2.26)$$

$$= \prod_{\nu=1}^n e^{-k_\nu^2/2} = e^{-|k|^2/2}. \quad (2.27)$$

**Beispiel 2.2.** Für die Fourier-Transformierte der charakteristischen Funktion  $\chi_{B_n(1)}$  der  $n$ -dimensionalen Einheitskugel findet man unter Ausnutzen der Rotationsinvarianz des Integrals

$$\hat{f}(k) = \frac{(2\pi)^{n/2}}{|k|^{n/2}} J_{n/2}(|k|). \quad (2.28)$$

Die Funktion  $J_m(x)$  bezeichnet die Besselfunktion der Ordnung  $m$  [Abr72]. Für  $n = 1$  erhält man damit für die Fourier-Transformierte der charakteristischen Funktion des Intervalls  $[-1, 1]$

$$\hat{f}(k) = 2 \frac{\sin k}{k}. \quad (2.29)$$

**Lemma 2.3.** 1. Für alle  $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$  ist  $\hat{f} \in L^2(\mathbb{R}^n)$ .

2. Die inverse Fourier-Transformation  $F^{-1}\hat{f} = f$  ist für  $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$  definiert durch:

$$(F^{-1}\hat{f})(x) := \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}(k) e^{ix \cdot k} d^n k. \quad (2.30)$$

Die wichtige Eigenschaft, daß für  $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$  insbesondere auch  $\hat{f} \in L^2(\mathbb{R}^n)$  gilt, folgt daraus, daß  $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$  dicht in  $L^2(\mathbb{R}^n)$  liegt.

**Satz 2.5.** Es gibt einen eindeutig bestimmten Isomorphismus  $F$  mit:

1.  $F, F^{-1} : L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$
2.  $\|Ff\|_{L^2} = \|f\|_{L^2}$  für alle  $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$
3. Für  $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$  gilt nach eventueller Abänderung auf einer Nullmenge  $f \in C_0(\mathbb{R}^n)$  und

$$f(x) = (F^{-1}\hat{f})(x) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}(k) e^{ix \cdot k} d^n k \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R}^n.$$

Dabei bezeichnet  $C_0(\mathbb{R}^n)$  den Vektorraum aller stetigen Funktionen  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$  mit  $\lim_{|x| \rightarrow \infty} f(x) = 0$ .

Die Fourier-Transformation ist also bijektiv, normerhaltend und stetig umkehrbar auf dem Vektorraum  $L^2(\mathbb{R}^n)$ . Zu den weiteren Eigenschaften gehören:

**Satz 2.6.** Seien  $f, g \in L^2(\mathbb{R}^n)$  und  $\hat{f}, \hat{g}$  ihre Fourier-Transformierten.

1. Sei  $a \in \mathbb{R}^n$  und  $(\tau_a f)(x) := f(x - a)$  die um  $a$  translatierte Funktion. Dann gilt

$$(F \tau_a f)(k) = \hat{f}(k) e^{-ia \cdot k}. \quad (2.31)$$

2. Es gilt  $(F(f * g)) = \hat{f} \hat{g}$  und  $(Ffg) = (\hat{f} * \hat{g})$ .

3. Ist  $f \in C_c^1(\mathbb{R}^n)$ , so gilt

$$(F D_\nu f)(k) = ik_\nu \hat{f}(k).$$

Insbesondere gibt es das Analogon für schwache Ableitungen. Sei  $f \in H^m(\mathbb{R}^n)$ , dann gilt für  $|\alpha| \leq m$

$$(F D^\alpha f) = i^{|\alpha|} k^\alpha \hat{f}. \quad (2.32)$$

4. Ist die Funktion  $x \mapsto x_\nu f$  integrierbar, so ist  $\hat{f}$  nach  $k_\nu$  stetig partiell differenzierbar und es gilt

$$(F x_\nu f) = i D_\nu \hat{f}. \quad (2.33)$$

Die Faltung zweier integrierbarer Funktionen  $f, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$  ist dazu durch

$$(f * g)(y) := \int_{\mathbb{R}^n} f(x) g(y - x) d^n x$$

definiert.

*Bemerkung 2.1.* Für  $f \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$  kann die Fourier-Transformierte  $(Ff)$  im allgemeinen nicht mehr als Funktion dargestellt werden, sondern nur noch als Distribution (siehe nächster Abschnitt).

Der Vollständigkeit halber sei noch das wichtige Lemma,

**Lemma 2.4.** Für jede integrierbare Funktion  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$  gilt

$$\lim_{|k| \rightarrow \infty} \hat{f}(k) = 0,$$

erwähnt.

### 2.2.2 Distributionen

Distributionen spielen eine wichtige Rolle in der Theorie der partiellen Differentialgleichungen. Wir führen hier kurz den Begriff der Distribution ein [For84] und konzentrieren uns auf die nötigen Aussagen, die in der Theorie des Coarse Grainings verwendet werden. Dort benötigen wir die Diracsche Delta-Distribution. Mit ihr definieren wir den Begriff der Fundamental-Lösung, die auch als Greensche Funktion bezeichnet wird. Die Beweise sind alle in [For84, Wer02] enthalten.

Wir führen folgende Bezeichnung ein:  $\mathcal{D}$  sei der Vektorraum aller beliebig oft differenzierbaren Funktionen  $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$  mit kompaktem Träger:

$$\mathcal{D}(\mathbb{R}^n) := C_c^\infty(\mathbb{R}^n). \quad (2.34)$$

Wir führen in  $\mathcal{D}$  folgenden Konvergenzbegriff ein: Eine Folge  $(f_\nu)_{\nu \in \mathbb{N}}$  von Funktionen aus  $\mathcal{D}$  konvergiere gegen eine Funktion  $f \in \mathcal{D}$ ,

$$f_\nu \xrightarrow{\mathcal{D}} f,$$

falls gilt:

1. Es gibt ein Kompaktum  $K \subset \mathbb{R}^n$ , so daß  $\text{supp}(f_\nu) \subset K$  für alle  $\nu \in \mathbb{N}$  und  $\text{supp}(f) \subset K$ .
2. Für jeden Multiindex  $\alpha \in \mathbb{N}^n$  konvergiert die Folge der Ableitungen  $D^\alpha f_\nu$  für  $\nu \rightarrow \infty$  gleichmäßig auf  $K$  gegen  $D^\alpha f$ .

Der Träger einer Funktion wird mit  $\text{supp}(\cdot)$  bezeichnet.

**Definition 2.10.** Eine Distribution im  $\mathbb{R}^n$  ist eine stetige lineare Abbildung

$$T : \mathcal{D}(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{R}, \quad f \mapsto T(f). \quad (2.35)$$

Dabei bedeutet die Stetigkeit von  $T$ , daß aus  $f_\nu \xrightarrow{\mathcal{D}} f$  stets  $T(f_\nu) \rightarrow T(f)$  folgt.

Die Menge aller Distributionen im  $\mathbb{R}^n$  bildet einen Vektorraum, der mit  $\mathcal{D}'(\mathbb{R}^n)$  bezeichnet wird.

**Beispiel 2.3.** Sei  $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  eine lokal-integrierbare Funktion. Dann wird durch

$$T_g(f) := \int_{\mathbb{R}^n} g(x) f(x) d^n x \quad \text{für } f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n) \quad (2.36)$$

eine Distribution definiert.

**Beispiel 2.4 (Diracsche Delta-Distribution).** Sei  $a \in \mathbb{R}^n$ . Für  $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$  setzt man

$$T_{\delta_a}(f) \equiv \int_{\mathbb{R}^n} \delta(x - a) f(x) d^n x := f(a). \quad (2.37)$$

Dadurch wird eine Distribution  $T_{\delta_a} \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^n)$  definiert, die Diracsche Delta-Distribution zum Punkt  $a$ .

*Bemerkung 2.2.* Die Delta-Distribution kann nicht durch eine Funktion dargestellt werden. Man kann sie jedoch mithilfe eines geeigneten Konvergenzbegriffs für Distributionen als Limes von Funktionen darstellen.

Dafür gibt es den folgenden

**Satz 2.7.** Sei  $g$  eine Lebesgue-integrierbare Funktion auf  $\mathbb{R}^n$  mit  $\int_{\mathbb{R}^n} g(x) d^n x = 1$ . Für  $\epsilon > 0$  sei

$$g_\epsilon(x) := \frac{1}{\epsilon^n} g\left(\frac{x}{\epsilon}\right), \quad (2.38)$$

dann gilt für jede Funktion  $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}^n} g_\epsilon(x) f(x) d^n x = f(0), \quad (2.39)$$

d.h. die Distribution  $T_{g_\epsilon}$  von  $g_\epsilon$  konvergiert im Distributionssinn gegen die Diracsche Delta-Distribution.

**Definition 2.11 (Fundamental-Lösung).** Sei  $L$  ein linearer Differentialoperator im  $\mathbb{R}^n$ . Unter einer Fundamental-Lösung (oder Greenschen Funktion) von  $L$  bezüglich eines Punktes  $a$  versteht man eine Distribution  $G_a \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^n)$ , so daß

$$L G_a = T_{\delta_a}. \quad (2.40)$$

*Bemerkung 2.3.* Wir schreiben in den folgenden Kapiteln die Gleichung für die Greensche Funktion von  $L$  bezüglich  $a$  als

$$L g(a, x) = \delta(x - a). \quad (2.41)$$

Diese Gleichung ist als  $L T_{g_a} = T_{\delta_a}$  zu interpretieren, wobei die Distribution  $T_{g_a}$  bezüglich der Funktion  $g(a, x)$  durch

$$T_{g_a}(f) := \int_{\mathbb{R}^n} g(a, x) f(x) d^n x \quad \text{für } f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n) \quad (2.42)$$

wie in Beispiel 2.3 definiert ist.

*Bemerkung 2.4.* Für die Strömungsgleichung mit einem räumlich konstanten Permeabilitätstensor  $K$  (siehe Gl. (2.62)), d.h.  $L = -\operatorname{div} K \nabla$ , existiert die Greensche Funktion und kann explizit angegeben werden [LLJ01] (siehe Anhang A.1). Falls der Tensor  $K$  ortsabhängig ist, kann man deren Existenz für ein beschränktes Gebiet  $\Omega \in \mathbb{R}^n$  nachweisen, falls  $K_{ij}(x)$  beschränkt und  $\sum_{i,j=1}^n K_{ij}(x) \xi_i \xi_j \geq \lambda |\xi|^2$  für alle  $\xi \in \mathbb{R}^n$  und  $x \in \Omega$ ,  $\lambda > 0$ , ist ([GT83] Kapitel 8.2, Theorem 8.6).

**Definition 2.12 (Faltung von Distributionen und Funktionen).** Sei  $T \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^n)$  und  $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$ . Dann wird die Faltung

$$T * f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \quad (2.43)$$

definiert durch

$$(T * f)(x) := T(\tilde{\tau}_x f) \quad \text{für } x \in \mathbb{R}^n, \quad (2.44)$$

wobei  $(\tilde{\tau}_x f)(y) := f(x - y)$ .

**Beispiel 2.5.** Für die Delta-Distribution bezüglich des Nullpunkts gilt:

$$T_{\delta_0} * f = f \quad \text{für jedes } f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n), \quad (2.45)$$

da

$$(T_{\delta_0} * f)(x) = T_{\delta_0}(\tilde{\tau}_x f) = (\tilde{\tau}_x f)(0) = f(x). \quad (2.46)$$

Die Delta-Distribution wirkt also bezüglich der Faltung als Identität.

**Satz 2.8.** Für  $T \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^n)$  und  $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$  ist die Funktion  $T * f$  beliebig oft stetig differenzierbar, d.h.  $T * f \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ . Für den Differentialoperator  $D_i = \partial/\partial x_i$  gilt

$$D_i(T * f) = (D_i T) * f = T * (D_i f). \quad (2.47)$$

**Korollar 2.1.** Im  $\mathbb{R}^n$  sei  $L = \sum_{|\alpha| \leq k} c_\alpha D^\alpha$  ein linearer Differentialoperator mit konstanten Koeffizienten  $c_\alpha \in \mathbb{R}$ . Es sei  $G_0 \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^n)$  eine Fundamental-Lösung von  $L$ , d.h.

$$L G_0 = T_{\delta_0}. \quad (2.48)$$

Ist dann  $\rho \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$  beliebig, so ist die Funktion

$$u := G_0 * \rho \in C^\infty(\mathbb{R}^n) \quad (2.49)$$

eine Lösung der inhomogenen Differentialgleichung  $Lu = \rho$ .

**Definition 2.13 (Fourier-Transformation für Distributionen).** Die Fourier-Transformierte  $\hat{T}$  einer Distribution  $T \in \mathcal{D}'$  ist für  $f \in \mathcal{D}$  definiert durch

$$(FT)(f) \equiv \hat{T}(f) := T(\hat{f}). \quad (2.50)$$

**Satz 2.9.** Ist  $T \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^n)$ , so gilt für  $\alpha \in \mathbb{N}^n$

$$(F(D^\alpha T)) = i^{|\alpha|} x^\alpha F(T).$$

**Beispiel 2.6 (Diracsche Delta-Distribution).** Aus der Gleichung

$$T_{\delta_0}(\hat{f}) = \hat{f}(0) = \int_{\mathbb{R}^n} f(x) d^n x = \hat{T}_{\delta_0}(f) \quad (2.51)$$

ergibt sich als Fourier-Transformierte der Delta-Distribution

$$\hat{T}_{\delta_0} = T_1 := \int_{\mathbb{R}^n} \cdot d^n x \quad (\text{vgl. (2.36)}), \quad (2.52)$$

die zur  $L^\infty$ -Funktion  $x \mapsto 1$  gehörige Distribution. Damit ergibt sich für  $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$  durch Vertauschung der Integrationsreihenfolge

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\delta_0}(f) &= T_1(f) = \int_{\mathbb{R}^n} \left( \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}(k) e^{ix \cdot k} d^n k \right) d^n x \\ &= \left( F \frac{1}{(2\pi)^n} \right) \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}(k) d^n k = T_{\left(F \frac{1}{(2\pi)^n}\right)}(\hat{f}) = \hat{T}_{\left(F \frac{1}{(2\pi)^n}\right)}(f), \end{aligned}$$

woraus  $(2\pi)^n \delta_0 = (F 1)$  als Fourier-Transformierte der konstanten Funktion 1 resultiert. Dies wird häufig in der Form

$$\delta(k) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ix \cdot k} d^n x \quad (2.53)$$

notiert. Die rechte Seite von (2.53) ist aber im herkömmlichen Sinn nicht definiert und kann nur als Distribution verstanden werden.

**Beispiel 2.7.** Für eine integrierbare Funktion  $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  ergibt sich für die Distribution  $T_g$  mit  $f \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$  leicht:

$$\hat{T}_g(f) = T_g(\hat{f}) = T_{\hat{g}}(f)$$

und für  $g \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ :  $\hat{T}_g(f) = T_g(\hat{f})$ .

**Definition 2.14 (Umkehrung der Fourier-Transformation auf  $\mathcal{D}'$ ).** Man erhält, daß die Fourier-Transformation  $F$  auf  $\mathcal{D}'$  stetig, linear und umkehrbar ist. Die Umkehrtransformation  $F^{-1}$  ist für  $T \in \mathcal{D}'$  und  $f \in \mathcal{D}$  gegeben durch

$$(F^{-1} T)(f) = T(F^{-1} f). \quad (2.54)$$

*Bemerkung 2.5.* Die Umkehrformeln  $F^{-1}(FT) = T$  und  $F(F^{-1}T) = T$  sind Gleichungen in  $\mathcal{D}'$  und in der Regel nicht punktweise Beziehungen wie die Umkehrformeln für Funktionen, weil Distributionen im allgemeinen an einzelnen Stellen keine Werte besitzen.

*Bemerkung 2.6.* Analog wie in Bemerkung 2.3 schreiben wir die Gleichung für die Fourier-Transformierte der Greenschen Funktion bezüglich des Nullpunkts als

$$\hat{L} \hat{g}(0, k) = \frac{1}{(2\pi)^n} \quad (2.55)$$

mit  $\hat{L} := F L F^{-1}$ . Diese Gleichung ist als  $\hat{L} T_{\hat{g}_0} = T_{\frac{1}{(2\pi)^n}}$  zu interpretieren.

## 2.3 Fluidtransport in einem porösen Medium

Wir betrachten den Transport einer fluiden Phase auf der Mikroskala. Es bezeichne  $\tilde{\rho}$  [ $kg/m^3$ ] die mikroskopische Dichte,  $\tilde{q} := \tilde{\rho} \tilde{v}$  [ $m/s$ ] die Massengeschwindigkeit auf der Basis der Partikelgeschwindigkeit  $\tilde{v}$  der fluiden Phase. Das Reynoldsche Transport-Theorem (siehe zum Beispiel [CM93]) liefert die Massenerhaltungsgleichung

$$\partial_t \tilde{\rho} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{q}) = \tilde{f} \quad (2.56)$$

mit der mikroskopischen Massenquellldichte  $\tilde{f}$ . Daraus entsteht durch Volumenmittelung die Massenerhaltungsgleichung

$$\partial_t(\phi S \rho) + \nabla \cdot (\rho q) = f \quad (2.57)$$

mit der Dichte  $\rho$  der Phase und der volumetrischen Fluidgeschwindigkeit oder Darcy-Geschwindigkeit  $q$  der Phase.  $f$  ist die gemittelte Massenquellldichte,  $\phi$  die zeitunabhängige Porosität und  $S$  die Sättigung der Phase<sup>1</sup>. Die Volumenmittelung ist als lokale Mittelung über ein repräsentatives Elementarvolumen zu verstehen. Für die gesättigte Strömung im Grundwasserleiter ist die Sättigung  $S = 1$ , wovon wir im folgenden ausgehen.

Wird die Dichte von Wasser als konstant angenommen, weil die Masse eventuell gelöster Komponenten und die Kompressibilität von Wasser vernachlässigbar sind, vereinfacht sich (2.57) weiter zur stationären Gleichung

$$\nabla \cdot q = f, \quad (2.58)$$

wobei  $f$  durch die Volumenquellldichte  $f/\rho$  ersetzt worden ist. Diese Gleichung wird durch eine Beziehung geschlossen, die als das makroskopische Analogon der Impulserhaltung aufgefaßt werden kann und im Jahre 1850 von Darcy als experimentelles Gesetz gefunden worden ist<sup>2</sup>. Das Gesetz von Darcy hat die Form

$$q = -K(\nabla p + \rho g e_3) \quad (2.59)$$

und kann im Bereich des laminaren Fließens verwendet werden<sup>3</sup>. Dabei ist  $p$  [ $N/m^2$ ] das Mittel des Wasserdrucks,  $g$  [ $m/s^2$ ] die Gravitationskonstante,  $e_3$  der Einheitsvektor der  $x_3$ -Koordinate (entgegen der Gravitation) und

$$K = k/\mu \quad (2.60)$$

eine Größe, die sich aus der durch die feste Phase bestimmten Permeabilität  $k$  und der durch das Fluid bestimmten Viskosität  $\mu$  ergibt. Für ein sich anisotrop verhaltendes Feststoffskelett ist  $k = k(x)$  eine symmetrische, positiv definite Matrix.

Einsetzen von (2.59) in (2.57) ergibt eine lineare Gleichung für

$$h(x, t) := \frac{1}{\rho g} p(x, t) + x_3, \quad (2.61)$$

die Piezometerhöhe  $h$ , bei Ersatz von  $K$  durch  $K\rho g$  – in der Literatur als hydraulische Leitfähigkeit bekannt – und bei gleicher Bezeichnung:

$$-\nabla \cdot (K \nabla h) = f. \quad (2.62)$$

Die entstehende Gleichung ist stationär und linear.

Verhält sich das Feststoffskelett isotrop, ist  $K = KI$  mit der Einheitsmatrix  $I$  und einer skalarwertigen Funktion  $K(x)$  [ $m/s$ ]. Für ein homogenes, isotropes Feststoffskelett, d.h.  $K = const.$ , erhält man aus (2.62) schließlich die Poisson-Gleichung.

Wir bezeichnen im folgenden die hydraulische Leitfähigkeit auch als Durchlässigkeit oder als Permeabilität.

*Bemerkung 2.7.* Gleichung (2.62) ist ein typisches Beispiel für eine Diffusionsgleichung, wie sie auch bei der Beschreibung des Wärmetransports oder in der Elektrodynamik und im Magnetismus auftreten. Der Diffusionstensor  $K$  entspricht demzufolge der Wärmeleitfähigkeit, der dielektrischen Konstante oder der magnetischen Permeabilität.

Im allgemeinen ist der Diffusionskoeffizient  $K$  unstetig, anisotrop, aber symmetrisch und positiv definit und variiert über viele Größenordnungen.

<sup>1</sup>Für den Ort  $x$  mit repräsentativen Elementarvolumen  $V$  um  $x$  gilt:  $\phi(x) := |V \setminus V_{fest}|/|V|$  und  $S(x) := |V_{fluid}|/|V \setminus V_{fest}|$ .

<sup>2</sup>Das Gesetz von Darcy kann auch mathematisch rigoros durch den Übergang von der Mikroskala zur Makroskala (Homogenisierung) aus den fundamentalen Gleichungen der Strömungsmechanik, den Navier-Stokes Gleichungen, hergeleitet werden (siehe [SP80, Tar80]).

<sup>3</sup>Für die Grundwasserströmung ist die Geschwindigkeit in der Größenordnung Meter/Tag.



### Beispiel eines Grundwasserleiters

Die Abbildung 2.1 zeigt beispielhaft einen Teil eines Grundwasserleiters mit stark ausgeprägter horizontaler Schichtung (Linsen). Er stammt aus einem Aquifer in einer Kiesgrube in Hüntwangen, Schweiz [JSD94a, JSD94b, SR98]. In Abb. 2.2 ist er im Längsschnitt schematisch dargestellt. Die gemessenen mittleren Permeabilitätswerte für den Aquifer in Hüntwangen liegen zwischen  $0.005$  und  $100\text{mm/s}$ . Die Varianz der Werte innerhalb eines Sedimenttyps beträgt maximal  $0.8$ , und die mittlere Linsenlänge der Sedimente variiert zwischen  $2.6 - 50\text{m}$ .

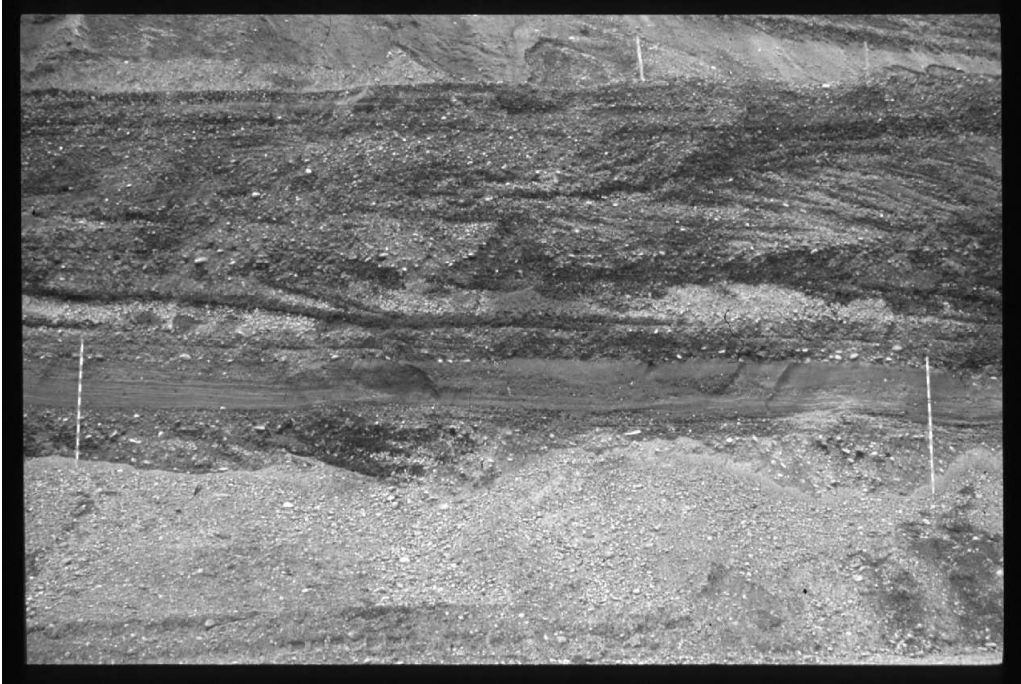


Abbildung 2.1: Bild des Längsschnitts eines Grundwasserleiters in der Kiesgrube von Hüntwangen, Schweiz. Das Bild zeigt die dritte Sektion der schematischen Skizze des Aquifers in Abbildung 2.2. Mit freundlicher Genehmigung von Stauffer [JSD94a].

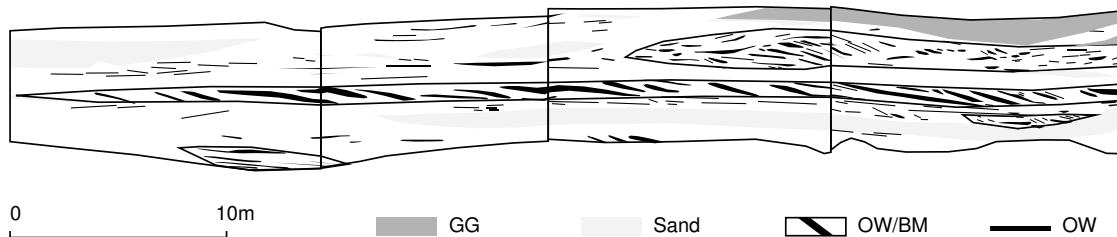


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung des Längsschnitts eines Grundwasserleiters in der Kiesgrube von Hüntwangen, Schweiz. Eine verschieden starke horizontale Schichtung wird darin sehr deutlich. Dies zeigt eine anisotrope Korrelation der Permeabilität. Die dritte Sektion ist in Abb. 2.1 als Lichtbild gezeigt. Die gemessenen Permeabilitätswerte der häufigsten Bestandteile sind (in  $\text{mm/s}$ ): Grauer Kies (GG)  $0.15$ , brauner Kies  $0.02$ , Sand  $0.26$ , Mischung aus grauem, braunen und bimodalem Kies (OW/BM, weiß)  $0.08$ , Schlick  $< 0.005$ , grobporig geschichteter, loser Kies (OW)  $> 100$ . Mit freundlicher Genehmigung von Stauffer [SR98].

## 2.4 Mehrskalenproblem und stochastische Modellierung

### 2.4.1 Skalen, Modellierung und Zufallsfeld

Wie in der Einleitung erwähnt, unterscheidet man in Grundwasserleitern drei relevante räumliche Skalen:

Auf der Porenskala mit einer typischen Längenskala von weniger als  $10^{-3}m$  sind die Eigenschaften des Mediums durch die variierende Porengrößen und -orientierungen gegeben. Auf der größeren Mesoskala mit einer Größenordnung von  $1m$  erscheint das poröse Medium homogen. Auf der makroskopischen Skala ( $10 - 10^3m$ ) treten großskalige Inhomogenitäten auf, die ebenfalls zu einer räumlichen Variation der Permeabilität des Mediums führen (siehe Abb. 2.1 und 2.2).

Auf der praktisch relevanten Makroskala dominieren die großskaligen räumlichen Fluktuationen des Mediums die Fluidströmung. Allerdings induzieren räumliche Variationen der Permeabilität des Mediums aller Skalen Fluktuationen im lokalen Strömungsfeld.

Da es im allgemeinen unmöglich ist, die komplizierte Struktur des Mediums auf allen Skalen detailliert zu kennen, liefert die stochastische Modellierung einen wertvollen Zugang, bei der man annimmt, daß die Heterogenitäten des Mediums statistisch verteilt sind.

Wir identifizieren im folgenden das räumlich inhomogene Permeabilitätsfeld eines gegebenen Aquifers mit einer einzigen Realisierung eines räumlich stochastischen Prozesses oder Zufallsfeldes. Der stochastische Prozeß ist durch das Ensemble aller möglichen Realisierungen definiert. Das betrachtete Medium stellt damit eine Realisierung des Ensembles dar, dessen statistische Eigenschaften vorgegeben sind.

Die Theorie der Zufallsfelder ist z.B. im Buch von Vanmarcke [Van84] enthalten. Wir konzentrieren uns ohne mathematische Details auf die nötigen Eigenschaften, die wir im Kapitel 4 und für die Felderzeugung brauchen.

Wir betrachten ein homogenes, ergodisches Zufallsfeld  $f(x)$ ,  $x \in \mathbb{R}^d$ , das skalar und zeitunabhängig sei. Die Ergodizität impliziert, daß Momente des Zufallsfeldes nicht davon abhängen, ob man Ensemble- oder Volumenmittelwerte bildet, d.h. es gilt:

$$\overline{f(x)} = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{\int_{B_d(R)} d^d x} \int_{B_d(R)} f(x) d^d x \quad (2.63)$$

mit der  $d$ -dimensionalen Kugel  $B_d(R)$  mit Radius  $R$ . Dabei bezeichnet  $\overline{(\cdot)}$  das Mittel über alle Realisierungen des Ensembles. Die Homogenität des Zufallsfeldes impliziert die Translationsinvarianz der  $n$ -Punktfunktionen im Raum.<sup>4</sup>

Aus der Translationsinvarianz des Zufallsfeldes folgt somit:

1. Der Mittelwert ist ortsunabhängig,  $\overline{f(x)} =: \bar{f} = const.$ , so daß  $f(x)$  in seinen Mittelwert und die zufälligen Fluktuationen um diesen aufgespalten werden kann:

$$f(x) = \bar{f} + \tilde{f}(x) \quad \text{mit} \quad \overline{\tilde{f}(x)} \equiv 0. \quad (2.64)$$

2. Die Kovarianz bzw. Korrelationsfunktion

$$cov(f(x), f(x')) := \overline{(f(x) - \bar{f})(f(x') - \bar{f})} \quad (2.65)$$

hängt nur vom Abstandsvektor der beiden Argumente ab:

$$\overline{\tilde{f}(x) \tilde{f}(x')} =: w(x - x') \quad \text{für } x, x' \in \mathbb{R}^d. \quad (2.66)$$

Sie gibt die Korrelation der Fluktuationen  $\tilde{f}(x)$  an.

<sup>4</sup>Die  $n$ -Punktfunktion ist definiert durch:

$$F_n(f(x), f(x'), \dots, f(x^{(n)})) := \overline{(f(x) - \bar{f})(f(x') - \bar{f}) \cdots (f(x^{(n)}) - \bar{f})}.$$

3. Das zweite zentrierte Moment, die Varianz  $\sigma_f^2$ , ist ortsunabhängig:

$$\sigma_f^2 := \overline{(f(x) - \bar{f})^2} = \overline{f(x)^2} - \bar{f}^2 \quad (2.67)$$

$$= \overline{\tilde{f}(x) \tilde{f}(x)} = w(0). \quad (2.68)$$

Sie ist ein Maß für die Unordnungsstärke des Feldes.

Um den stochastischen Zugang wohldefiniert zu machen, muß die Korrelationsfunktion aus (2.66) positiv und differenzierbar sein [Gel93]:  $w : \mathbb{R}^d \rightarrow C^1$ .

**Definition 2.15.** Falls die Fourier-Transformierte von  $w$  existiert, definiert man die Korrelationsfunktion der Fourier-Transformierten von  $f$  durch

$$\overline{F\tilde{f}(k) F\tilde{f}(k')} := (Fw)(k, k') = (2\pi)^d \delta(k + k') \omega(k). \quad (2.69)$$

Die Delta-Distribution ist eine Folge der Translationsinvarianz im Raum. Die Struktur der Korrelationsfunktion  $w(x)$  bzw.  $\omega(k)$  spezifiziert das Medium.

### Experimentelle statistische Untersuchungen

Experimentell findet man, daß die Verteilung der Permeabilität sehr asymmetrisch ist: Es gibt keine negativen Permeabilitätswerte, und es treten sehr viele kleine Werte  $K \lesssim 1$  und wenig sehr große Werte auf, vgl. Abb. 2.3. Modellieren kann man diesen Sachverhalt durch eine logarithmische Normalverteilung für  $K$  [Sta03]. Auch aufwendige geostatistische Untersuchungen legen nahe [Fre75, Sud86], daß das räumlich heterogene Permeabilitätsfeld in einem Aquifer in sehr guter Näherung logarithmisch normalverteilt ist. Damit wird der Logarithmus der Permeabilität,  $\ln K(x)$ , stochastisch als Gaußsches Zufallsfeld angesehen.

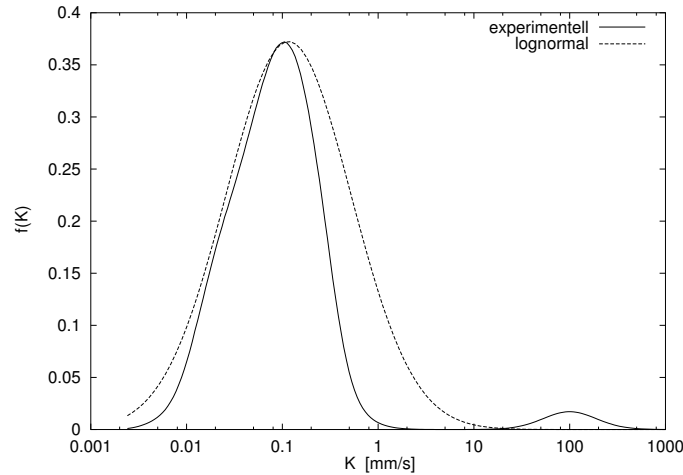


Abbildung 2.3: Experimentell ermittelte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Permeabilität  $K$  im Vergleich mit einer unnormierten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion einer logarithmischen Normalverteilung aus (2.70) mit Parametern  $m = 1.1$  und  $\sigma = 3/2$ . Die experimentellen Daten wurden durch Messungen im Aquifer in Hüntwangen, Schweiz, gefunden (siehe Abb. 2.1 und 2.2).  $f(K)$  ist bezüglich dem Volumenanteil der Sedimenttypen gewichtet. Mit freundlicher Genehmigung von Stauffer [JSD94a].

Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Lognormalverteilung in Abb. 2.3 lautet:

$$f(K) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}\sigma K} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln K - \ln m}{\sigma}\right)^2\right) \quad (2.70)$$

mit den Parametern  $m = 1.1$  und  $\sigma = 3/2$ .

Die Abhängigkeit der Varianz von  $\ln K$  von der Beobachtungsskala ist in Abbildung 2.4 für 25 verschiedene Feldversuche dargestellt [Gel93]. Varianzen  $\sigma_f^2 > 5$  kommen demnach in der Natur sehr selten vor.

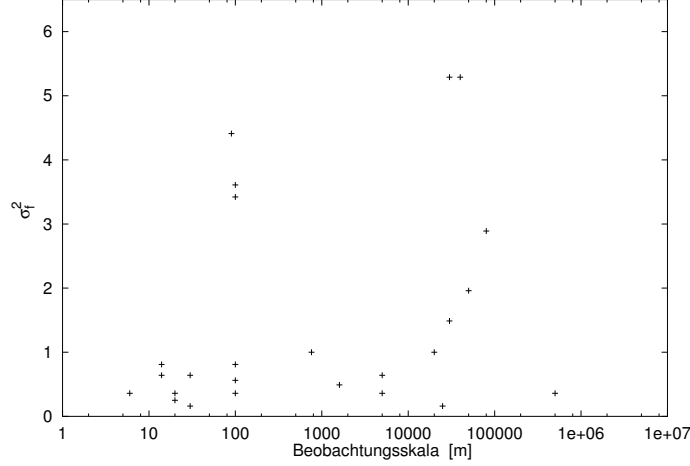


Abbildung 2.4: Experimentell ermittelte Varianzen vom Logarithmus der Permeabilität in Abhängigkeit von der Beobachtungsskala, aus [Gel93]. Die Meßdaten stammen aus 25 unterschiedlichen Feldversuchen aus den Jahren 1976–1990.

## 2.4.2 Gaußsches Zufallsfeld und Korrelation

Für die  $n$ -Punktfunktion eines Gaußschen Zufallsfeldes gilt für  $n > 2$ : Ist  $n$  ungerade, so ist die Funktion identisch null. Ist  $n$  gerade, so zerfällt die Funktion in Produkte der Zweipunktfunktion.

Wir nehmen an, daß das Permeabilitätsfeld  $K(x)$  durch ein logarithmisch normalverteiltes Zufallsfeld, gemäß

$$\ln \frac{K(x)}{K_D} := f(x) \quad (2.71)$$

mit einem Gaußschen Zufallsfeld  $f(x)$ , erzeugt wird.  $f(x)$  hat die im vorherigen Abschnitt erläuterten Eigenschaften.  $K_D$  sei eins mit der gleichen Einheit [Länge/Zeit] wie  $K(x)$ .

$\ln K(x)/K_D$  spaltet man wie in (2.64) in seinen Mittelwert und die Abweichungen um diesen Wert auf:

$$f(x) = \bar{f} + \tilde{f}(x). \quad (2.72)$$

Um die Situation in einem heterogenen Medium wiederzugeben, müssen die Korrelationen von  $\tilde{f}(x)$  sehr schnell auf Längenskalen verschwinden, die größer als die intrinsischen Korrelationslängen sind. Aus Feldexperimenten findet man, daß die Korrelationslängen typischerweise im Meterbereich liegen [Gel93]. Unter den im letzten Abschnitt genannten Voraussetzungen bleibt damit eine gewisse Freiheit bei der Wahl der genauen Form der Korrelationsfunktion. In der Literatur findet man dafür exponentiell abfallende Funktionen als auch gaußförmige Funktionen vor. Wir wählen eine Gaußförmige, da diese analytisch besser handhabbar ist:

$$\overline{\tilde{f}(x) \tilde{f}(x')} = w(x - x') := \sigma_f^2 \exp \left( - \sum_{i=1}^d \frac{(x_i - x'_i)^2}{2l_i^2} \right), \quad (2.73)$$

mit der Korrelationslänge  $l_i, i = 1, \dots, d$ , in die Richtung  $x_i$  und der Varianz  $\sigma_f^2$  von  $f(x)$ ;  $l_i, \sigma_f^2 > 0$ .

Die fouriertransformierte Korrelationsfunktion ergibt sich nach (2.69) durch (vgl. Beispiel 2.1)

$$\omega(k) = \sigma_f^2 (2\pi)^{d/2} \prod_{i=1}^d l_i \exp\left(-\frac{(k_i l_i)^2}{2}\right). \quad (2.74)$$

Man nennt das Feld anisotrop korreliert, wenn zwei oder mehr Korrelationslängen  $l_i$  ungleich sind. Im Fall eines isotrop korrelierten Feldes, für das die Korrelationslängen alle gleich sind, bezeichnen wir für alle  $i$  die Korrelationslänge mit  $l_0$ . Die Korrelationsfunktion hängt dann nur vom Abstand  $|x - x'|$  ab.

Analog zu (2.64) zerlegt man das Permeabilitätsfeld  $K(x)$  in seinen Mittelwert und die zufälligen Fluktuationen um diesen Wert:

$$K(x) = \overline{K} + k(x) \quad \text{mit} \quad \overline{k(x)} \equiv 0. \quad (2.75)$$

Benutzt man die statistischen Eigenschaften von  $\ln K(x)/K_D$  erhält man für den Mittelwert und die Varianz  $\sigma_K^2$  von  $K(x)$ :

$$\overline{K(x)} = \overline{K} = K_g \exp(\sigma_f^2/2) \quad (2.76)$$

und

$$\sigma_K^2 := \overline{k(x)k(x)} = K_g^2 (\exp(2\sigma_f^2) - \exp(\sigma_f^2)), \quad (2.77)$$

mit dem geometrischen Mittel  $K_g := K_D \exp(\overline{\ln(K(x)/K_D)}) = K_D \exp(\overline{f})$ . Für die Korrelationsfunktion ergibt sich (siehe auch [NO93]):

$$\overline{k(x)k(x')} = \overline{K}^2 \left( \exp(\overline{f(x)f(x')}) - 1 \right) \quad (2.78)$$

$$= K_g^2 \overline{f(x)f(x')} + O(\sigma_f^4). \quad (2.79)$$

*Bemerkung 2.8.* Betrachtet man entsprechend ein Tensorfeld  $K_{ij}(x)$ ,  $i, j = 1, \dots, d$ , mit unabhängigen Komponenten, gilt für die Korrelationsfunktion:

$$\overline{k_{ij}(x)k_{lm}(x')} = \delta_{il}\delta_{jm} \overline{k(x)k(x')} \quad (2.80)$$

mit dem Kronecker-Symbol  $\delta_{ij} = 1$  falls  $i = j$  und  $\delta_{ij} = 0$  sonst.

### 2.4.3 Generierung eines Gaußschen Zufallfeldes

Das Gaußsche Zufallfeld  $f(x)$  kann durch eine Superposition von einer großen Anzahl zufällig gewählter Kosinus-Moden näherungsweise erzeugt werden. Der Algorithmus folgt der Methode, die von Kraichnan in [Kra70, Kra76] eingeführt wurde.

Gemäß [Kra70, Kra76] wird  $f(x)$  numerisch durch

$$f_N(x) := \overline{f} + \sqrt{\frac{2\sigma_f^2}{N}} \sum_{j=1}^N \cos(q^{(j)} \cdot x + \alpha^{(j)}) \quad (2.81)$$

erzeugt. Die Vektoren  $q^{(j)}$  und die Phasen  $\alpha^{(j)}$  sind unabhängige Zufallsvariablen. Die Komponenten  $q_i^{(j)}$  sind gaußverteilt mit Mittelwert null und Standardabweichung  $l_i^{-1}$ ,  $i = 1, \dots, d$ .<sup>5</sup> Die Phasen  $\alpha^{(j)}$  sind im Intervall  $[0, 2\pi]$  gleichverteilt.

Wie in [Den00, Ebe00] gezeigt wird, erhält man nach dem Zentralen Grenzwertsatz im Limes unendlicher Modenanzahl,  $N \rightarrow \infty$ , daß das Feld  $f_N(x)$  die statistischen Eigenschaften eines Gaußschen

<sup>5</sup>Die normierte Verteilungsfunktion lautet:  $P_q(q) = (2\pi)^{-d/2} \prod_{i=1}^d l_i \exp(-(q_i l_i)^2/2)$ .

Zufallsfeldes annimmt.

Die Korrelationsfunktion  $\overline{\tilde{f}_N(x) \tilde{f}_N(x')}$  ist  $N$ -unabhängig und durch

$$\begin{aligned} \overline{\tilde{f}_N(x) \tilde{f}_N(x')} &= \frac{2\sigma_f^2}{N} \sum_{i,j=1}^N \overline{\cos(q^{(j)} \cdot x + \alpha^{(j)}) \cos(q^{(i)} \cdot x' + \alpha^{(i)})} \\ &= \frac{2\sigma_f^2}{N} \sum_{j=1}^N \overline{\cos(q^{(j)} \cdot x + \alpha^{(j)}) \cos(q^{(j)} \cdot x' + \alpha^{(j)})} = 2\sigma_f^2 \overline{\cos(q \cdot x + \alpha) \cos(q \cdot x' + \alpha)} \\ &= \sigma_f^2 \overline{\cos(q \cdot (x - x'))} = \frac{\sigma_f^2}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} \cos(q \cdot (x - x')) \left( \prod_{i=1}^d l_i \exp\left(-\frac{(q_i l_i)^2}{2}\right) \right) d^d q \\ &= \sigma_f^2 \exp\left(-\sum_{i=1}^d \frac{(x_i - x'_i)^2}{2l_i^2}\right) \quad (2.82) \end{aligned}$$

wie in (2.73) gegeben. Durch Exponenzierung erhält man aus  $f_N(x)$  ( $N \rightarrow \infty$ ) ein logarithmisch normalverteiltes Zufallsfeld  $K(x) = K_D \exp(f_N(x))$  für das Permeabilitätsfeld.

*Bemerkung 2.9.* Die Vektoren  $q^{(j)}$  und die Zahlen  $\alpha^{(j)}$  werden numerisch mit Routinen aus [PTVF92] generiert. Ein Permeabilitätsfeld  $K(x)$  als eine Einzelrealisierung wird somit numerisch durch die Parameter  $(\{q^{(j)}\}, \{\alpha^{(j)}\}, N)$  nach Gl. (2.81) erzeugt.

Da in der Implementierung die Modenanzahl  $N$  endlich ist, werden der Mittelwert und die Varianz des Gaußschen Zufallsfeldes  $f(x)$  auf die vorgegebenen Werte nachkorrigiert. Wir verwenden in den numerischen Experimenten stets  $N = 10^4$ ,  $\bar{f} = 0$  und  $K_D = 1$ .

Auf eine Untersuchung der die Strömung charakterisierenden Parameter für zunehmende Modenanzahl  $N$  gehen wir nicht ein. Diese findet man z.B. in den Arbeiten [Den00, Ebe00].

*Bemerkung 2.10.* Für die Simulationen in Kapitel 5 und 6 nehmen wir an, daß  $K(x)$  in jedem Element einer feinsten Zerlegung des betrachteten Gebiets konstant ist und zwar gleich dem Wert von  $K(x)$  am Elementmittelpunkt. Damit erhalten wir eine deterministische, partielle Differentialgleichung nach Gl. (2.62) für die Strömung.

*Bemerkung 2.11.* Die beschriebene Methode zur Erzeugung eines Zufallsfeldes ist in der Literatur eher unbekannt. Häufig wird in der Literatur die sogenannte „Turning Bands“-Methode (Bandgenerator-Methode) benutzt [MW82, AMGT89] oder die Methode der schnellen Fourier-Transformation (FFT) der Kovarianzmatrix [RGSW93, Cir03]. Diese sind zwar weniger rechenaufwendig, haben aber den Nachteil, daß die Erzeugung eines anisotrop korrelierten Zufallsfeldes in zwei Dimensionen komplizierter ist.

#### 2.4.4 Periodische und andere Felder

Die in den nächsten Kapiteln entwickelte Theorie des Upscalings und das resultierende Mehrgitterverfahren beruhen zunächst darauf, daß das Permeabilitätsfeld logarithmisch normalverteilt ist. Um zu testen, wie gut das Verfahren auch für Medien ist, für die diese Annahme nicht erfüllt ist, betrachten wir außer den Realisierungen des logarithmisch normalverteilten Zufallsfeldes auch deterministische Konfigurationen für das Medium. Wir untersuchen vor allem periodische Medien für das Permeabilitätsfeld wie etwa periodisch geschichtete Medien (Laminat) und schachbrettartige Medien. Diese sind sehr interessant, da man hier theoretische Vorhersagen für die Werte der hochskalierten Permeabilitätsfelder hat (siehe auch Abschnitt 2.5).

Uns interessiert auch das Verhalten für zufällige Medien, die Realisierungen des logarithmisch normalverteilten Feldes sind, aber in vorgegebenen Bereichen auf konstante Permeabilitätswerte gesetzt werden. Diese Bereiche können z.B. Blöcke oder Kanäle sein (siehe Abb. 6.9).

## 2.5 Homogenisierungstheorie

Die mathematische Theorie der Homogenisierung wurde eingeführt, um das Verhalten von zusammengesetzten Materialien (Verbundwerkstoffe) zu beschreiben. Der Ausgangspunkt dafür ist: In einem zusammengesetzten Material sind die Heterogenitäten im Vergleich zur Ausdehnung des Materials sehr klein. Das heißt, zwei Skalen charakterisieren das Material, die mikroskopische mit den Heterogenitäten und die makroskopische, die das globale Verhalten des Materials wiedergibt. Auf der makroskopischen Ebene wirkt das Material homogen.

Das Ziel der Homogenisierungstheorie ist, die makroskopischen Eigenschaften des Materials anzugeben, indem sie die Eigenschaften der Mikrostruktur in Betracht zieht. Dazu nimmt man an, daß die Heterogenitäten im Material gleichverteilt sind. Dies kann man durch ein periodisch zusammengesetztes Medium modellieren, mit einer durch die Heterogenitäten vorgegebenen Periodizitätszelle als kleinster Einheit. Die Periode dieser Zellen läßt man dann gegen null gehen.

Wir beschränken uns auf den Modellfall eines elliptischen Differentialoperators zweiter Ordnung mit periodisch oszillierenden Koeffizienten. Die Beweise der Sätze sind zum Beispiel in den Büchern von Jikov et al. und Cioranescu und Donato enthalten [JKO94, CD99].

Gegeben sei eine symmetrische, 1-periodische Matrixfunktion  $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$  mit Konstanten  $\lambda, \Lambda > 0$ , so daß

$$\lambda|\xi|^2 \leq \sum_{i,j=1}^n A_{ij}(y) \xi_i \xi_j \leq \Lambda|\xi|^2 \quad \text{für alle } \xi \in \mathbb{R}^n \text{ und } y \in \mathbb{R}^n. \quad (2.83)$$

Wir definieren  $A^\epsilon(x) := A(\frac{x}{\epsilon})$  und betrachten das Problem:

**Problem 2.1.** Suche  $u^\epsilon : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  mit

$$-\operatorname{div} A^\epsilon(x) \nabla u^\epsilon(x) = f(x) \quad \text{für } x \in \Omega, \quad (2.84)$$

$$u^\epsilon(x) = 0 \quad \text{für } x \in \partial\Omega, \quad (2.85)$$

wobei  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  ein beschränktes Gebiet sei.

Der makroskopischen Skala entspricht hier  $x$ , der mikroskopischen Skala  $x/\epsilon$ . Der Übergang  $\epsilon \rightarrow 0$  entspricht der mathematischen Homogenisierung des Problems. Dabei stellen sich folgende Fragen:

1. Konvergiert die Folge  $u^\epsilon$  gegen eine Grenzfunktion  $u^0$ ?
2. Falls ja, löst  $u^0$  wieder ein Randwertproblem und sind die Koeffizienten dieses Problems konstant?
3. Ist  $u^0$  eine gute Approximation für  $u^\epsilon$  bzw. kann man mit  $u^0$  eine gute Approximation für  $u^\epsilon$  konstruieren?

Die Antworten auf diese Fragen sind nicht nur im Hinblick auf praxistaugliche Materialkoeffizienten relevant, sondern auch, weil die Substitution des Problems 2.1 durch ein Grenzproblem numerische Berechnungen wesentlich erleichtert.

### Resultate aus der Homogenisierungstheorie

Es ist bekannt, daß für kleine  $\epsilon$  die Lösung  $u^\epsilon$  durch die Lösung  $u^0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  des homogenisierten Problems approximiert werden kann:

**Satz 2.10.** Die Lösungen  $u^\epsilon$  zu Problem 2.1 konvergieren für  $\epsilon \rightarrow 0$  stark in  $L^2(\Omega)$  gegen eine Funktion  $u^0 \in H_0^1(\Omega)$ , die die eindeutige Lösung des Problems

$$\text{suche } u^0 \in H_0^1(\Omega) : \quad -\operatorname{div} A^0 \nabla u^0(x) = f(x) \quad \text{für } x \in \Omega \quad (2.86)$$

ist. Die homogenisierte Matrix (homogenisierter Koeffizient)  $A^0 \equiv A^{hom}$  ist konstant und wird auf dem Einheitswürfel  $Y := [0, 1]^n$  durch

$$A_{ik}^{hom} := \int_Y \sum_{j=1}^n A_{ij}(y) \left( \delta_{jk} + \frac{\partial w_k}{\partial y_j}(y) \right) d^n y \quad (2.87)$$

berechnet, wobei  $w$  die vektorwertige Lösung des sogenannten Zellproblems ist: Suche  $w : Y \rightarrow \mathbb{R}^n$ , 1-periodisch, mit

$$-div A(y) \nabla w_k(y) = div (A(y) e_k) \quad \text{für } y \in Y, k = 1, \dots, n. \quad (2.88)$$

*Bemerkung 2.12.* 1. Falls  $A$  symmetrisch ist, ist  $A^{hom}$  ebenfalls symmetrisch.

2. Im eindimensionalen Fall ist der homogenisierte Koeffizient das harmonische Mittel:

$$A^{hom} = \left( \int_0^1 \frac{1}{A(y)} dy \right)^{-1}.$$

3. Im zweidimensionalen Fall ergibt sich für ein periodisch geschichtetes Medium in  $y_1$ -Richtung, d.h.  $A(y) = A(y_1)$ :

$$A^{hom} = \begin{pmatrix} \left( \int_0^1 \frac{1}{A(y_1)} dy_1 \right)^{-1} & 0 \\ 0 & \int_0^1 A(y_1) dy_1 \end{pmatrix}. \quad (2.89)$$

Für die Approximationseigenschaft gilt folgendes:

**Theorem 2.1.** 1. Es gilt  $u^\epsilon \rightarrow u^0$  in  $L^2(\Omega)$  und  $u^\epsilon \rightharpoonup u^0$  schwach in  $H^1(\Omega)$  für  $\epsilon \rightarrow 0$ .

2. Falls  $A \in (W^{1,\infty}(\mathbb{R}^n))^{n \times n}$  gilt  $\|u^\epsilon - u^0\|_{L^2(\Omega)} \lesssim \epsilon \|u^0\|_{H^2(\Omega)}$  und mit  $w^\epsilon(x) := w(\frac{x}{\epsilon})$  gilt weiter:

$$\|u^\epsilon - u^0 - \epsilon(\nabla u^0) \cdot w^\epsilon - \theta^\epsilon\|_{H^1(\Omega)} \lesssim \epsilon \|u^0\|_{H^2(\Omega)}. \quad (2.90)$$

Dabei erfüllt  $\theta^\epsilon$  auf dem Rand  $\partial\Omega$   $\theta^\epsilon = \epsilon \sum_k \frac{\partial u^0}{\partial x_k} w_k^\epsilon$  und für  $x \in \Omega$

$$-div A^\epsilon \nabla \theta^\epsilon = 0. \quad (2.91)$$

Die Lösung  $u^0$  des Grenzproblems zusammen mit dem Korrekturterm erster Ordnung  $\epsilon \nabla u^0 \cdot w^\epsilon$  ergibt also eine gute Näherung für  $u^\epsilon$  für kleine  $\epsilon$ .

## 2.6 Einfache Mittelungsroutinen

Einfache Mittelungsroutinen zur Berechnung eines effektiven Permeabilitätskoeffizienten findet man in der Literatur bereits in Arbeiten aus den siebziger Jahren [Mat67, GGBM78]. Sie wurden vor allem in Simulationen für die Ölindustrie verwendet. In vielen Fällen bestimmte man einfach durch Volumenmittelung effektive Werte, die im Fall isotroper Medien sinnvoll sind.

Wir erwähnen einige häufig zitierte Mittelungsverfahren, um einen effektiven Koeffizienten für ein Gebiet  $\Omega$  mit einem skalaren Permeabilitätsfeld  $K(x)$  zu bestimmen. Das Volumen von  $\Omega$  sei eins:

1. Zur Potenz  $p \in \mathbb{Z}$  gemittelter Koeffizient

$$\left( \int_\Omega (K(x))^p d^n x \right)^{1/p} \quad (2.92)$$

mit dem arithmetisch gemittelten Koeffizienten für  $p = 1$  und dem harmonisch gemittelten Koeffizienten für  $p = -1$ .



2. Der geometrisch gemittelte Koeffizient

$$\exp\left(\int_{\Omega} \ln K(x) d^n x\right). \quad (2.93)$$

Dieser wird sehr häufig in zwei Dimensionen als effektiver Wert herangezogen, da er für ein logarithmisch normalverteiltes Zufallsmedium mit isotroper Korrelationsfunktion exakt ist. Dies wird in der Arbeit [Koz80] von Kozlov und in [Gel93] gezeigt.

3. In zwei Raumdimensionen geben King bzw. Migdal-Kadanoff [Kin89, CFCPP92] für ein stückweise konstantes Permeabilitätsfeld auf einem quadratischen Vierecksgitter einen effektiven Koeffizienten für je vier benachbarte Werte  $K_i$ ,  $i = 1, \dots, 4$ , wie folgt an:

$$\frac{4(K_1 + K_3)(K_2 + K_4)K_c}{3(K_1 + K_2)(K_3 + K_4)(K_1 + K_3)(K_2 + K_4) + K_c K_s} \quad \text{„King-Wert“} \quad (2.94)$$

mit  $K_c = K_2 K_4 (K_1 + K_3) + K_1 K_3 (K_2 + K_4)$  und  $K_s = \sum_{i=1}^4 K_i$ ,

$$\left(\frac{1}{K_1 + K_2} + \frac{1}{K_3 + K_4}\right)^{-1} \quad \text{„Migdal-Kadanoff-Wert“}. \quad (2.95)$$

Diese sogenannten renormierten Blockkoeffizienten erhält man durch ein äquivalentes elektrisches Widerstandsnetzwerk bzw. durch ein Variationsprinzip für ein System von magnetischen Permeabilitäten.

In einem isotrop lognormalverteilten Medium wird als effektiver Koeffizient

$$K_g \left(1 + \sigma_f^2 \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{n}\right)\right) \quad (2.96)$$

mit dem geometrischen Mittel  $K_g = K_D \exp(\bar{f})$  sehr oft benutzt [DK92a, NO93]. Gutjahr et al. [GGBM78] zeigen, daß dieser Wert in Ordnung  $O(\sigma_f^2)$  exakt ist. Matheron [Mat67] stellte die Vermutung auf, daß der effektive Koeffizient in  $n$  Dimensionen ein gewichtetes Mittel von arithmetischen und harmonischen Mittel ist:

$$\ln K^{\text{eff}} = \left(1 - \frac{1}{n}\right) \ln K_a + \frac{1}{n} \ln K_h \quad (2.97)$$

oder

$$K^{\text{eff}} = K_g \exp\left(\sigma_f^2 \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{n}\right)\right), \quad (2.98)$$

mit  $K_a := \bar{K} = K_g \exp(\sigma_f^2/2)$  und  $K_h := K_g \exp(-\sigma_f^2/2)$ .

*Bemerkung 2.13.* Im Fall eines Tensorfeldes  $K_{ij}(x)$ ,  $i, j = 1, \dots, n$ , definiert man die Mittelung nach einer der oben genannten Mittelungsroutinen durch die Anwendung auf die Komponenten  $K_{ij}(x)$  des Tensors.

Für ein anisotrop korreliertes, skalares Permeabilitätsfeld wird so in keinem Fall eine Richtungsanisotropie im effektiven Koeffizienten wiedergeben.

Die einfachen Mittelungsroutinen benutzen wir in Kapitel 5 und 6 zum iterativen Hochskalieren von Permeabilitätsfeldern, für die wir Vergleichsberechnungen durchführen und die wir in Mehrgitterverfahren einsetzen. Wenn wir dort von einfachen Upscalingsmethoden sprechen, beziehen wir uns immer auf eine der oben genannten.

## 2.7 Finite Elemente

### 2.7.1 Galerkin-Verfahren

In diesem Abschnitt betrachten wir ein Verfahren zur Diskretisierung der partiellen Differentialgleichung

$$-\operatorname{div} K(x) \nabla u(x) = f(x) + \operatorname{div} g(x) \quad \text{für } x \in \Omega, \quad (2.99)$$

mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} u(x) &= u_D(x) && \text{für } x \in \partial\Omega_D, \\ n(x) \cdot (K(x) \nabla u(x)) &= 0 && \text{für } x \in \partial\Omega_N. \end{aligned}$$

Dabei sei  $\Omega \in \mathbb{R}^2$  ein offenes Quadrat,  $\partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N = \partial\Omega$  und  $n(x)$  das äußere Einheits-Normalenfeld auf  $\partial\Omega$ .  $K(x) \in (W^{1,\infty}(\Omega))^{2 \times 2}$  sei eine symmetrische, positiv definite, matrixwertige Funktion. Beim Galerkin-Verfahren geht man von der folgenden Variationsformulierung des Problems (2.99) aus:

**Problem 2.2.** Für  $f \in L^2(\Omega)$ ,  $g \in (L^2(\Omega))^2$  und  $u_D \in H^1(\Omega)$  suche  $u \in H^1(\Omega)$  mit

$$a(u, w) = l(w) \quad \text{für alle } w \in H_D^1(\Omega), \quad (2.100)$$

$$u|_{\partial\Omega_D} = u_D|_{\partial\Omega_D}, \quad (2.101)$$

mit  $H_D^1(\Omega) := \{w \in H^1(\Omega) \mid w = 0 \text{ auf } \partial\Omega_D\}$ .

Dabei bezeichnet

$$a(u, w) := \int_{\Omega} \nabla w \cdot (K \nabla u) \, d^2x \quad \text{und} \quad (2.102)$$

$$l(w) := \int_{\Omega} f w \, d^2x - \int_{\Omega} g \cdot \nabla w \, d^2x + \int_{\partial\Omega_N} g \cdot n w \, dx. \quad (2.103)$$

Definiert man  $v := u - u_D \in H_D^1(\Omega)$  und ersetzt  $l(w) \leftarrow l(w) + a(u_D, w)$ , ergibt sich die Variationsgleichung, bei der die Dirichlet-Randbedingung eliminiert ist:

**Problem 2.3.** Suche  $v \in H_D^1(\Omega)$  mit

$$a(v, w) = l(w) \quad \text{für alle } w \in H_D^1(\Omega). \quad (2.104)$$

Mit den Annahmen an  $K(x)$  erhält man, daß  $a(\cdot, \cdot)$   $H_D^1$ -elliptisch ist. Da  $l \in (H_D^1(\Omega))'$  ist, folgert man für das Variationsproblem bzw. Problem 2.2 nach dem Lemma von Lax-Milgram bzw. Satz 2.3 die Existenz und Eindeutigkeit der Lösung.

Die Idee des Galerkin-Verfahrens ist nun, die Lösung  $v \in V := H_D^1(\Omega)$  von (2.104) durch Lösungen  $v_k$  aus endlich-dimensionalen Teilräumen  $V_k \subset V$  zu approximieren. Die  $v_k \in V_k$  sind dabei Lösungen der endlich-dimensionalen Probleme

$$a(v_k, w_k) = l(w_k) \quad \text{für alle } w_k \in V_k. \quad (2.105)$$

Die Finite-Element-Methode ist eine flexible Methode, um solche  $V_k$  zu konstruieren. Diese Ansatzräume  $V_k$  basieren danach auf Unterteilungen des Gebiets  $\Omega$  in sogenannte Elemente.

### 2.7.2 Gebietszerlegungen

**Definition 2.16.** Eine Zerlegung  $\tau_h := \{T_i\}_{1 \leq i \leq M}$  des Gebiets  $\Omega$  ist eine Menge von Elementen  $T_i \subset \bar{\Omega}$  mit der Eigenschaft:

1.  $T_i \in \tau_h$  ist abgeschlossen,
2.  $\bigcup_i T_i = \bar{\Omega}$ ,
3. Für  $T_i \neq T_j$  gilt  $(T_i \setminus \partial T_i) \cap T_j = \emptyset$ .

Da wir in den numerischen Experimenten ausschließlich mit strukturierten Vierecksgittern arbeiten, konzentrieren wir uns im folgenden auf diesen einfachen Fall einer Zerlegung des Gebiets.

Dazu überziehen wir das Quadrat  $\bar{\Omega}$  mit einem gleichmäßigen, quadratischen Vierecknetz der Maschenweite  $h$ , wie in Abb. 2.5 gezeigt. Dies stellt eine zulässige Zerlegung von  $\Omega$  dar<sup>6</sup>. Wir definieren die Menge der Gitterpunkte  $\Omega_h = \{p^{(i)}\}_{1 \leq i \leq (\sqrt{M}+1)^2}$  durch

$$\Omega_h := \{(p_1, p_2) \in \bar{\Omega} \mid p_1 = ih, p_2 = jh, i, j \in \mathbb{Z}\}, \quad (2.106)$$

und den Mittelpunkt eines Elements  $T_i$  bezeichnen wir mit  $\tilde{x}(T_i)$ . Die Gitterpunkte  $p^{(i)}$  ordnen wir lexikographisch an.

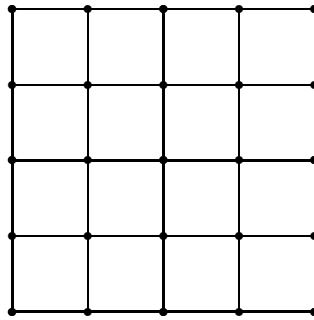


Abbildung 2.5: Quadratisches Vierecksgitter

*Bemerkung 2.14.* Man beginnt oft mit einer sehr groben Zerlegung, die dann nach der folgenden Regel sukzessive verfeinert wird: Ein Element  $T_i \in \tau_h$  wird stets in vier gleichförmige Vierecke als Unterelemente regulär verfeinert, siehe Abb. 2.6. Einer Verfeinerung von  $\tau_h$ , bei dem jedes Element  $T_i \in \tau_h$  genau einmal lokal verfeinert wird, entspricht somit einer Zerlegung  $\tau_{h'}$  des Gebiets  $\Omega$  durch ein gleichmäßiges Vierecknetz mit der Maschenweite  $h' = h/2$ .

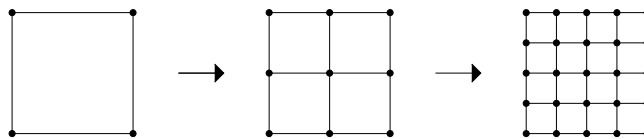


Abbildung 2.6: Verfeinerung eines Elements

Wir nehmen im folgenden an, daß  $\partial\Omega_D$  von Elementen  $T_i$  von  $\tau_h$  aufgelöst wird. Das heißt  $\partial\Omega_D = \bigcup_I (T_i \cap \partial\Omega)$  mit einer geeigneten Indexmenge  $I$ .

### 2.7.3 Bilineare Finite Elemente

Auf den eingeführten Zerlegungen  $\tau_h$  können wir folgende endlich-dimensionale Funktionenräume definieren:

<sup>6</sup>Eine Zerlegung  $\tau = \{T_i\}$  von  $\Omega$  heißt zulässig, falls folgende Bedingungen erfüllt sind:

1.  $\bar{\Omega} = \bigcup_i T_i$
2. Besteht  $T_i \cap T_j$  aus genau einem Punkt, so ist dieser ein Eckpunkt sowohl von  $T_i$  als auch von  $T_j$ .
3. Besteht  $T_i \cap T_j$  für  $i \neq j$  aus mehr als einem Punkt, so ist  $T_i \cap T_j$  eine Kante sowohl von  $T_i$  als auch von  $T_j$ .

**Definition 2.17.** Sei  $\tau_h$  eine Zerlegung des Gebiets  $\Omega$ . Dann bezeichne  $V_h$  den Raum der bilinearen Finite Elemente, der die Menge aller Funktionen  $v_h \in V_h$  ist mit

$$V_h := \{v \in C(\overline{\Omega}) \mid v|_{T_i} \in Q^{(1)} \forall i, v|_{\partial\Omega_D} = 0\}. \quad (2.107)$$

$Q^{(t)}$  bezeichnet die Polynommenge zu Viereckelementen, die aus Tensorprodukten besteht:

$$Q^{(t)} := \left\{ u(x_1, x_2) = \sum_{0 \leq i, k \leq t} c_{ik} x_1^i x_2^k \right\}, \quad (2.108)$$

mit den bilinearen als den einfachsten nicht-konstanten Elementen.

Offensichtlich sind die so definierten Funktionenräume Teilmengen von  $H_D^1(\Omega)$ , enthalten also zulässige Ansatz- und Testfunktionen für das Problem 2.3. Daher kann man sie als Grundlage eines Galerkin-Verfahrens benutzen. Die approximierende Folge für (2.105) bezeichnet man entsprechend mit  $v_h$ .

Der Ansatz für  $V_h$  liefert stückweise Polynome, bei dem zwar  $v_h$  innerhalb eines Elements ein Polynom zweiten Grades ist, die Restriktion auf jede Kante jedoch eine lineare Funktion. Wegen dieser Reduktion des Grades ist der stetige Anschluß durch die Vorgabe der Knotenwerte gewährleistet. In jedem Viereck ist  $v_h \in V_h$  durch die Werte an den vier Gitterpunkten des Elements eindeutig bestimmt. Deshalb ist  $\dim V_h = N := \text{Anzahl der Gitterpunkte } p^{(j)}$ , die nicht auf  $\partial\Omega_D$  liegen.  $v_h$  ist aber auch global durch diese Gitterpunkte gegeben.

Für die Implementierung ist die Wahl einer Basis von  $Q^{(1)}$  notwendig. Als Basis von  $V_h$  wählen wir die sogenannte Standard-Knotenbasis  $\{\psi_i\}_{1 \leq i \leq N}$ , die einfach durch Punktauswertungen auf dem regelmäßigen Punktgitter  $\Omega_h$  definiert ist:

$$\psi_i(p^{(j)}) = \delta_{ij}. \quad (2.109)$$

Für den Gitterpunkt  $p^{(i)}$  mit den Koordinaten  $(p_1^{(i)}, p_2^{(i)})$  ergibt sich für die Ansatzfunktion  $\psi_i(x)$  damit

$$\psi_i(x_1, x_2) = \begin{cases} \frac{1}{h^2} (h - |x_1 - p_1^{(i)}|) \times \\ \quad (h - |x_2 - p_2^{(i)}|) & , \text{ falls } \max\{|x_1 - p_1^{(i)}|, |x_2 - p_2^{(i)}|\} \leq h \\ 0 & , \text{ sonst} \end{cases} \quad (2.110)$$

als bekannte „Hut-Funktion“ (vgl. Abb. 2.7).

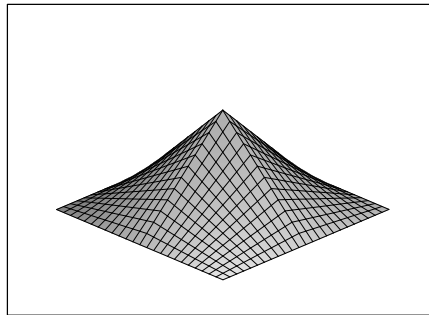


Abbildung 2.7: Hut-Funktion für zwei Dimensionen.

**Definition 2.18.** Für Berechnungen in Kapitel 5 führen wir noch die Interpolierende  $\Pi_h(v(x))$  im Finite-Element-Raum  $V_h$  einer beliebigen Funktion  $v(x)$  auf dem Gitter mit Maschenweite  $h$  ein:

$$\Pi_h(v(x)) := \sum_{j=1}^N v(p^{(j)}) \psi_j^{(h)}(x), \quad (2.111)$$

mit der Standard-Knotenbasis  $\{\psi_i^{(h)}\}$  für eine Zerlegung  $\tau_h$ .

### 2.7.4 Assemblierung (Erzeugung der Steifigkeitsmatrix)

Mit der definierten Knotenbasis  $\{\psi_i\}_{1 \leq i \leq N}$  für  $V_h$  ist das lineare Problem für (2.105) äquivalent zu einem linearen Gleichungssystem

$$A v = b \quad (2.112)$$

mit  $A := (a(\psi_j, \psi_i))_{i,j=1}^N$  und  $b := (l(\psi_i))_{i=1}^N$  zur Bestimmung der Koeffizienten  $v = (v_i)_{i=1}^N$  der Darstellung

$$v_h(x) = \sum_{i=1}^N v_i \psi_i(x). \quad (2.113)$$

Die sogenannte Steifigkeitsmatrix bzw. Diskretisierungsmatrix  $A$  und die rechte Seite (Lastvektor)  $b$  ergeben sich explizit zu

$$A_{ij} := a(\psi_j, \psi_i) = \int_{\Omega} \nabla \psi_i \cdot (K \nabla \psi_j) d^2 x, \quad (2.114)$$

$$b_i := l(\psi_i) = \int_{\Omega} f \psi_i d^2 x - \int_{\Omega} g \cdot \nabla \psi_i d^2 x + \int_{\partial \Omega_N} g \cdot n \psi_i dx + a(u_D, \psi_i). \quad (2.115)$$

*Bemerkung 2.15.* Da die Berechnung der Elementgeometrie für unstrukturierte Gitter und die Auswertung der Koeffizientenfunktion  $K$  auf den Elementen im allgemeinen aufwendig ist, berechnet man die Steifigkeitsmatrix und den Lastvektor, indem man diese über den Teilelementen  $T_i$  der Zerlegung getrennt ermittelt und anschließend aufaddiert. Von Vorteil dafür ist, daß die Basisfunktionen  $\psi_i$  einen relativ kleinen Träger besitzen.

Für regelmäßige Gitterstrukturen, wie wir sie verwenden, wird aber auch eine Assemblierung der Steifigkeitsmatrix über die Gitterpunkte angewandt. Die dazu erforderlichen Informationen über indizierende Teilelemente und benachbarte Gitterpunkte ist in diesem Fall leicht verfügbar.

Bei der Berechnung der lokalen Beiträge für die Steifigkeitsmatrix und den Lastvektor benutzt man geeignete, numerische Quadraturformeln. Die numerischen Experimente der folgenden Kapitel gehen allerdings immer von einem elementweise-konstanten, matrixwertigen Koeffizienten  $K(x)$  aus, so daß man hier  $A_{ij}$  und  $b_i$  für die bilinearen Finite Elemente explizit angeben kann.

Der Übersichtlichkeit halber benutzen wir dazu die sogenannte Stern-Darstellung, die in den inneren Gitterpunkten die Einträge in einer Zeile der Steifigkeitsmatrix angibt. Diese ordnet man gemäß ihrer geometrischen Lage an.

Für einen elementweise-konstanten, matrixwertigen Koeffizienten  $K(x)$  ergibt sich für einen inneren Gitterknoten  $p^{(i)}$  und den folgenden Bezeichnungen für  $K(x)$  um  $p^{(i)}$ :

$K^{(i,1)}$	$K^{(i,0)}$
$K^{(i,2)}$	$K^{(i,3)}$

$$A^* = \frac{1}{12} \begin{bmatrix} K^{(i,1)} \cdot \begin{pmatrix} -2 & 3 \\ 3 & -2 \end{pmatrix} & K^{(i,0)} \cdot \begin{pmatrix} 2 & -3 \\ 3 & -4 \end{pmatrix} + K^{(i,1)} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ -3 & -4 \end{pmatrix} & K^{(i,0)} \cdot \begin{pmatrix} -2 & -3 \\ -3 & -2 \end{pmatrix} \\ K^{(i,1)} \cdot \begin{pmatrix} -4 & -3 \\ 3 & 2 \end{pmatrix} + K^{(i,2)} \cdot \begin{pmatrix} -4 & 3 \\ -3 & 2 \end{pmatrix} & (K^{(i,0)} + K^{(i,2)}) \cdot \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} + (K^{(i,1)} + K^{(i,3)}) \cdot \begin{pmatrix} 4 & -3 \\ -3 & 4 \end{pmatrix} & K^{(i,0)} \cdot \begin{pmatrix} -4 & 3 \\ -3 & 2 \end{pmatrix} + K^{(i,3)} \cdot \begin{pmatrix} -4 & -3 \\ 3 & 2 \end{pmatrix} \\ K^{(i,2)} \cdot \begin{pmatrix} -2 & -3 \\ -3 & -2 \end{pmatrix} & K^{(i,2)} \cdot \begin{pmatrix} 2 & -3 \\ 3 & -4 \end{pmatrix} + K^{(i,3)} \cdot \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ -3 & -4 \end{pmatrix} & K^{(i,3)} \cdot \begin{pmatrix} -2 & 3 \\ 3 & -2 \end{pmatrix} \end{bmatrix}. \quad (2.116)$$

Dabei wird das Skalarprodukt für quadratische Matrizen verwendet:

$$\begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} := K_{11}a + K_{12}b + K_{21}c + K_{22}d. \quad (2.117)$$

*Bemerkung 2.16.* Für den Diskretisierungsstern  $A^*$  gilt, daß die Summe seiner Einträge identisch gleich null ist und im skalaren Fall,  $K(x) > 0$  skalar, er sich reduziert zu:

$$A^* = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} -2K^{(i,1)} & -K^{(i,0)} - K^{(i,1)} & -2K^{(i,0)} \\ -K^{(i,1)} - K^{(i,2)} & 4 \sum_{j=0}^3 K^{(i,j)} & -K^{(i,0)} - K^{(i,3)} \\ -2K^{(i,2)} & -K^{(i,2)} - K^{(i,3)} & -2K^{(i,3)} \end{bmatrix}. \quad (2.118)$$

Für den Lastvektor  $b_i$  erhält man

$$b_i = l(\psi_i) = \frac{h}{2} (K_{1j}^{(i,0)} + K_{2j}^{(i,0)}) - \frac{h}{2} (K_{1j}^{(i,1)} - K_{2j}^{(i,1)}) - \frac{h}{2} (K_{1j}^{(i,2)} + K_{2j}^{(i,2)}) + \frac{h}{2} (K_{1j}^{(i,3)} - K_{2j}^{(i,3)}), \quad (2.119)$$

mit der speziellen Wahl  $f \equiv 0$ ,  $u_D \equiv 0$  und  $g := K(x)e_j$  und dem Einheitsvektor  $e_j$  in  $x_j$ -Richtung. Zur Berechnung der Zellprobleme in Kapitel 5 und 6 benutzen wir diese Wahl.

*Bemerkung 2.17.* Für Gitterpunkte auf dem Dirichlet-Rand sind die Werte der Lösung explizit vorgegeben. Damit können diese Unbekannten im vorhinein eliminiert werden. Am Neumann-Rand  $\partial\Omega_N$  hingegen wird der Differenzenstern (2.116) nur durch die Koeffizienten  $K^{(i,j)}$  der Randlelemente bestimmt und der Lastvektor (2.119) zusätzlich durch das Randintegral  $\int_{\partial\Omega_N} g \cdot n \psi_i dx$  modifiziert.

## 2.7.5 Approximationsätze

Die Approximationsaussagen aus der Theorie der Finiten Elemente für den Fall bilinearer Viereckelemente lauten (siehe z.B. [Bra97]):

**Satz 2.11.** Sei  $\tau_h$  eine Zerlegung von  $\Omega$  in Parallelelogramme.

1. Dann gilt mit einer Konstanten  $C$ , die von  $\Omega$  unabhängig ist, für die Interpolation durch bilineare Elemente:

$$\|u - u_h\|_{H^m(\Omega)} \leq C h^{2-m} |u|_{H^2(\Omega)} \quad \text{für } u \in H^2(\Omega) \quad (0 \leq m \leq 2). \quad (2.120)$$

2. Wenn das Variationsproblem  $H^2$ -regulär ist ( $\|u\|_{H^2} \leq c\|f\|_{L^2}$ ), dann gilt für die Finite-Element-Näherung  $u_h$  durch bilineare Viereckelemente in  $V_h$ :

$$\|u - u_h\|_{H^1(\Omega)} \leq ch\|f\|_{L^2(\Omega)}. \quad (2.121)$$

Mithilfe eines Dualitätsarguments erhält man schließlich:

**Satz 2.12.** Sei  $u \in H^1(\Omega)$  die Lösung des Variationsproblems. Unter den Voraussetzungen von Satz 2.11 mit  $f \in L^2(\Omega)$  und damit  $u \in H^2(\Omega)$  gilt

$$\|u - u_h\|_{L^2(\Omega)} \lesssim h^2 \|f\|_{L^2(\Omega)}. \quad (2.122)$$

# Kapitel 3

## Mehrgitterverfahren

Neben direkten Lösungsverfahren für Systeme von linearen Gleichungen, wie z.B. das Gaußsche Eliminationsverfahren, gibt es iterative Lösungsverfahren, die schrittweise eine exaktere Näherung für die Lösung berechnen. In numerischen Anwendungen dominieren sie gegenüber den direkten Lösern.

Da die Effektivität von einfachen Iterationsverfahren bei ansteigender Problemgröße dramatisch abnimmt, wurden mit den Mehrgitterverfahren neuartige Methoden zur Lösung linearer Gleichungssysteme entwickelt. Das erste Mehrgitterverfahren wurde im Jahr 1961 von Fedorenko vorgestellt [Fed61]. Der große Vorteil der Mehrgitterverfahren ist ihre von der Anzahl der Unbekannten unabhängige Konvergenzrate.

Zunächst betrachten wir einfache Lösungsverfahren, da sie auch ein wesentlicher Bestandteil der Mehrgitterverfahren sind.

### 3.1 Iterative Lösungsverfahren

Wir betrachten lineare Lösungsverfahren für ein lineares Gleichungssystem

$$Ax = b \quad \text{mit } x, b \in \mathbb{R}^n \quad (3.1)$$

und regulärer Matrix  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ .

**Definition 3.1.** Ein Iterationsverfahren  $\Phi = \Phi(b, x^0) : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  ist eine Vorschrift, die zu allen rechten Seiten  $b$  und Startwerten  $x^0$  eine Folge  $(x^{(m)})_{m \in \mathbb{N}}$  mit  $x^{(0)} = x^0$  erzeugt.  $\Phi$  heißt konsistent mit (3.1), wenn die Wahl  $x^{(0)} = x$  zur konstanten Folge  $x^{(m)} \equiv x$  führt.  $\Phi$  heißt konvergent, wenn für alle rechten Seiten und Startwerte die Folge  $(x^{(m)})_{m \in \mathbb{N}}$  gegen die Lösung  $x$  von (3.1) konvergiert.

Für lineare Iterationsverfahren  $\Phi$  gilt für die Folgenglieder

$$x^{(m+1)} = Mx^{(m)} + Nb \quad \text{mit } M, N \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad (3.2)$$

wobei die Matrizen  $M$  und  $N$  von  $A$  abhängen. Äquivalent zur Konsistenz ist die folgende Bedingung:

**Lemma 3.1.** Die lineare Iteration (3.2) ist genau dann konsistent, wenn  $M + NA = I$  mit der Einheitsmatrix  $I \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ist.

*Beweis.* Siehe z.B. [Hac91]. □

Dies führt auf das Iterationsverfahren

$$x^{(m+1)} = x^{(m)} - N(Ax^{(m)} - b), \quad (3.3)$$

für das die Matrix  $N$  offensichtlich eine Approximation von  $A^{-1}$  sein sollte.  $N$  wird dazu über eine leicht zu invertierende Approximation  $W$  von  $A$  konstruiert, was sich als

$$x^{(m+1)} = x^{(m)} - W^{-1}(Ax^{(m)} - b) \Leftrightarrow W(x^{(m+1)} - x^{(m)}) = b - Ax^{(m)} \quad (3.4)$$

schreiben läßt.

Die Matrix  $M = I - NA = I - W^{-1}A$  heißt Iterationsmatrix oder Fehlerfortpflanzungsmatrix, weil für den Fehler  $e^{(m)} := x^{(m)} - x$  mit  $b = Ax$  gilt:

$$e^{(m+1)} = e^{(m)} - W^{-1}Ae^{(m)} = Me^{(m)}. \quad (3.5)$$

Ihr Spektralradius bestimmt die asymptotische Konvergenzrate der Iteration. Die Größe  $d^{(m)} := Ax^{(m)} - b$  nennt man Defekt,  $r^{(m)} := b - Ax^{(m)}$  das Residuum.

Skaliert man die Korrektur des Iterationsverfahrens mit einem Faktor  $\omega \in \mathbb{R}$ , so spricht man von einem gedämpften Verfahren:

$$x^{(m+1)} = x^{(m)} - \omega W^{-1}(Ax^{(m)} - b). \quad (3.6)$$

Ein notwendiges und hinreichendes Kriterium für die Konvergenz ist das folgende.

**Theorem 3.1.** *Ein lineares, konsistentes Iterationsverfahren ist genau dann konvergent, wenn für die Iterationsmatrix  $M$  gilt:*

$$\rho(M) < 1. \quad (3.7)$$

$\rho(M)$  heißt die Konvergenzrate der Iteration.

*Beweis.* Siehe z.B. [Hac91]. □

## 3.2 Einfache lineare Iterationsverfahren

Wir zerlegen die Matrix  $A$  wie folgt:

$$A = E + D + F. \quad (3.8)$$

Dabei sei  $D$  die Diagonalmatrix der Diagonaleinträge von  $A$  und  $E$  bzw.  $F$  die strikte untere bzw. obere Dreiecksmatrix von  $A$ .

1. Das gedämpfte Richardson-Verfahren. Hier wählt man  $W = \frac{1}{\omega}I$  mit sehr kleinem  $\omega > 0$ .
2. Das Jacobi-Verfahren mit  $W = D$ . Komponentenweise bedeutet dies:

$$x_i^{(m+1)} = x_i^{(m)} - A_{ii}^{-1} \left( \sum_{j=1}^n A_{ij}x_j^{(m)} - b_i \right) \quad \text{für } i = 1, \dots, n. \quad (3.9)$$

3. Das gedämpfte Jacobi-Verfahren. Hier ist  $W = \frac{1}{\omega}D$ .
4. Das Gauß-Seidel-Verfahren. Hier lautet die Iterationsvorschrift

$$x_i^{(m+1)} = x_i^{(m)} - A_{ii}^{-1} \left( \sum_{j<i} A_{ij}x_j^{(m+1)} + \sum_{j\geq i} A_{ij}x_j^{(m)} - b_i \right) \quad \text{für } i = 1, \dots, n, \quad (3.10)$$

mit  $W = D + E$ . Für untere Dreiecksmatrixen  $A$  ist dies ein exakter Löser.

5. Das SOR-Verfahren. Hier führt man einen Relaxationsparameter  $\omega$  in (3.10) ein. Dies führt zu  $W = \frac{1}{\omega}(D + \omega E)$ . Für  $\omega < 1$  spricht man von Unterrelaxation, für  $\omega > 1$  von Überrelaxation.
6. Das ILU-Verfahren mit  $W = LU$ , wobei  $L$  und  $U$  aus einer LU-Zerlegung entstehen, bei der Nichtnullelemente außerhalb eines vorgegebenen Besetzungsmusters vernachlässigt werden. Die Zerlegung erfüllt dann  $A = LU - R$  mit einer Restmatrix  $R$ .



7. Das symmetrische Gauß-Seidel-Verfahren. Dieses erhält man durch Kombination eines Iterationsschrittes des Gauß-Seidel-Verfahrens und eines Iterationsschrittes des Gauß-Seidel-Rückwärtsverfahrens, für das  $W = D + F$  ist. Insgesamt ergibt sich dann:  $W = (D + E)D^{-1}(D + F)$ .

*Bemerkung 3.1.* Die Konvergenz dieser Verfahren ist nur für bestimmte Klassen von Matrizen garantiert. Einige Resultate befinden sich im nächsten Abschnitt.

### 3.2.1 Konvergenz der einfachen Iterationsverfahren

Die Konvergenzbeweise können alle in [Hac91] oder [QSS02] gefunden werden. Zunächst führen wir noch folgende Definitionen ein:

**Definition 3.2.** Eine nichtsinguläre Matrix  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  heißt M-Matrix, falls gilt:

$$A_{ii} > 0 \quad \text{für } i = 1, \dots, n, \quad (3.11)$$

$$A_{ij} \leq 0 \quad \text{für } i, j = 1, \dots, n, i \neq j, \quad (3.12)$$

$$(A^{-1})_{ij} \geq 0 \quad \text{für alle } i, j = 1, \dots, n.$$

**Definition 3.3.** Eine Matrix  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  heißt diagonaldominant, wenn

$$|A_{ii}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |A_{ij}| \quad \text{mit } i = 1, \dots, n. \quad (3.13)$$

Wenn die Ungleichung im strengen Sinne gilt, heißt  $A$  streng diagonaldominant.

*Bemerkung 3.2.* Eine streng diagonaldominante Matrix, die symmetrisch mit positiven Diagonalelementen ist, ist auch positiv definit. M-Matrizen sind mit streng diagonaldominanten Matrizen und positiv definiten Matrizen durch folgende Eigenschaft verwandt:

**Satz 3.1.** Sei  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ .

1. Wenn  $A$  streng diagonaldominant ist und die Vorzeichenbedingungen (3.11) und (3.12) erfüllt, dann ist  $A$  eine M-Matrix.
2. Ist  $A$  eine symmetrische M-Matrix, dann ist  $A$  positiv definit.

Konvergenzresultate für die einfachen Iterationsverfahren:

**Satz 3.2.** Ist  $A$  eine streng diagonaldominante Matrix, so sind das Jacobi- und das Gauß-Seidel-Verfahren konvergent.

**Satz 3.3.** Ist  $A$  symmetrisch und positiv definit, so ist das gedämpfte Jacobi-Verfahren für  $0 < \omega < 2/\rho(D^{-1}A)$  konvergent.

**Satz 3.4.** Für eine symmetrische, positiv definite Matrix  $A$  konvergiert das Gauß-Seidel-Verfahren und das symmetrische Gauß-Seidel-Verfahren.

**Satz 3.5 (Ostrowski).** Das *SOR*-Verfahren konvergiert nicht für  $\omega \leq 0$  oder  $\omega \geq 2$ . Ist  $A$  symmetrisch und positiv definit, so ist das *SOR*-Verfahren genau dann konvergent, wenn  $0 < \omega < 2$  gilt.

Die Existenz der Zerlegung für das ILU-Verfahren ist nur in speziellen Fällen gesichert. Für M-Matrizen gilt:

**Satz 3.6.** Sei  $A$  eine M-Matrix und das Besetzungsmuster der ILU-Zerlegung das Muster dieser Matrix. Dann existiert die ILU-Zerlegung, und das ILU-Verfahren konvergiert:

$$\rho(M) < 1 \quad \text{mit } M = I - U^{-1}L^{-1}A. \quad (3.14)$$

*Beweis.* Siehe [Hac91]. □

### 3.3 Klassische Mehrgitterverfahren

Da die Effektivität der einfachen Iterationsverfahren bei ansteigender Problemgröße deutlich abnimmt, benutzt man häufig Mehrgitterverfahren zur Lösung großer und dünnbesetzter linearer Gleichungssysteme. Mehrgitterverfahren zählen zu den schnellsten Gleichungslösern bei Problemen mit sehr vielen Unbekannten, da ihre Konvergenzrate in vielen Fällen nicht von der Anzahl der Unbekannten  $N$  abhängt. Fedorenko [Fed61, Fed64] formulierte als erster Zweigitter- bzw. Mehrgitter-Algorithmen und zeigte, daß der Rechenaufwand nur wie  $O(N)$  ansteigt.

Der Ausgangspunkt des Mehrgitterverfahrens ist die Beobachtung, daß beim Lösen eines Gleichungssystems für die Behandlung der langwelligen und der kurzwelligen Anteile unterschiedliche Vorgehensweisen sinnvoll sind. Durch die Kombination zweier verschiedener Methoden kommt man zu einem Algorithmus, der auf dem gesamten Spektrum wirkungsvoll arbeitet.

Die Effizienz dieses Ansatzes wurde aber erst in den siebziger Jahren von Brandt [Bra73] und Hackbusch [Hac76] erkannt und ausgenutzt. Eine detaillierte Einführung klassischer Mehrgitterverfahren befindet sich z.B. in [Hac85, Wes91].

Während der stetigen Weiterentwicklung der Mehrgitterverfahren schenkte man zunehmend einer mehr algebraischen Sichtweise der Mehrgittermethoden und einem allgemeineren Rahmen bis hin zu Multilevel-Verfahren Aufmerksamkeit [RS85, WKW97].

#### 3.3.1 Glätter

Die Entwicklung der Mehrgitterverfahren beginnt mit einer genauen Analyse der einfachen Iterationsverfahren zur Lösung eines linearen Gleichungssystems

$$Ax = b \tag{3.15}$$

wie dem Jacobi- oder dem Gauß-Seidel-Verfahren. Bei diesen Verfahren konvergiert der Spektralradius der Iterationsmatrix  $\rho(M)$  bei steigender Anzahl von Unbekannten gegen eins.

Für die Steifigkeitsmatrix des zweidimensionalen Laplace-Modellproblems findet man z.B., daß für das Jacobi-Verfahren asymptotisch gilt:

$$\rho_{Jac} = 1 - C_{Jac}h^2 + O(h^4). \tag{3.16}$$

Die Konvergenzrate wird also mit kleinerer Gitterweite  $h \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$  schnell schlechter. Das Gauß-Seidel-Verfahren verhält sich ähnlich, ist aber etwa doppelt so effizient wie das Jacobi-Verfahren. Es gilt  $\rho_{GS} = 1 - 2C_{Jac}h^2$ .

Man erkennt leicht, daß die schlechte Konvergenz von den glatten (niederfrequenten) Fehleranteilen verursacht wird. Während die hochfrequenten Fehlerkomponenten stark gedämpft werden, bleiben die langwelligen Anteile beinahe unverändert. Die einfachen Iterationsverfahren glätten somit den Fehler, statt ihn zu reduzieren. Sie werden daher oft als Glätter bezeichnet.

#### 3.3.2 Die Mehrgitter-Idee

Wir betrachten ein lineares Gleichungssystem, das aus der Diskretisierung einer elliptischen Differentialgleichung auf einem Gitter entsteht. Für ein Lösungsverfahren, das die Eigenschaft der einfachen Iterationsverfahren ausnutzt, erweist sich nun das folgende Vorgehen als sinnvoll:

Man führt zunächst einige Glättungsschritte aus, um alle stark oszillierende Bestandteile des Fehlers kräftig zu dämpfen. Dann geht man zu einem gröberen Gitter über und ermittelt dort näherungsweise den verbleibenden glatten Anteil. Das ist möglich, weil glatte Funktionen bereits auf gröberen Gittern gut approximiert werden können. Die Glättungsschritte auf dem feinen Gitter und die Grobgitterkorrekturen werden abwechselnd wiederholt. Es entsteht ein Iterationsverfahren. Das Gleichungssystem zu dem Problem auf dem gröberen Gitter ist einfacher zu lösen als das gegebene. Wenn man in einem ebenen Gitter z.B. von der Maschenweite  $h$  zu  $2h$  übergeht, sinkt die Zahl der Unbekannten auf etwa ein Viertel. Außerdem ist die Bandbreite der Steifigkeitsmatrix für das gröbere Gitter nur ungefähr halb so groß. Der Rechenaufwand für das Gaußsche Eliminationsverfahren geht ungefähr um den Faktor 16 zurück. Wenn dann nur zwei bis drei Iterationsschritte

gebraucht werden, erreicht man schon eine Ersparnis.

In der Regel wird aber der Aufwand zur Lösung des Gleichungssystems für die Maschenweite  $2h$  immer noch als zu groß angesehen, und man wiederholt die Prozedur im Sinne einer Rekursion. Man vergrößert das Gitter so lange, bis ein kleines und damit einfach lösbares Gleichungssystem vorliegt.

### Der Mehrgitter-Algorithmus

Abstrakt läßt sich diese Situation wie folgt darstellen<sup>1</sup>: Wir nehmen an, daß wir endlich-dimensionale Räume  $V_k$ ,  $k = 0, \dots, J$  sowie einen Operator  $A_0 : V_0 \rightarrow V'_0$  und ein lineares Funktional  $f_0 \in V'_0$  haben. Gelöst werden soll das Problem

$$A_0 u_0 = f_0, \quad (3.17)$$

das sich bei der Darstellung von  $u_0$  bezüglich einer Basis  $\{\psi_i^{(0)}\}$  von  $V_0$  und Darstellung der Funktionale durch die Werte auf dieser Basis  $\{\psi_i^{(0)}\}$  als lineares Gleichungssystem

$$A_{ij} u_j = f_i, \quad \text{mit } A_{ij} = (A_0 \psi_j^{(0)}) (\psi_i^{(0)}) \text{ und } f_i = f_0(\psi_i^{(0)}), \quad (3.18)$$

schreiben läßt (vgl. Kapitel 2).

Es gebe nun

1. Prolongationsoperatoren  $p_k^{k-1} : V_k \rightarrow V_{k-1}$  für  $k = 1, \dots, J$ .
2. Restriktionsoperatoren  $r_{k-1}^k : V'_{k-1} \rightarrow V'_k$  für  $k = 1, \dots, J$ .
3. Grobgitteroperatoren  $A_k : V_k \rightarrow V'_k$  für  $k = 1, \dots, J$ .
4. Glättungsiterationen  $S_k : V_k \times V'_k \rightarrow V_k$  für  $k = 0, \dots, J$ .

Mit  $S_k^\nu(u_k, f_k)$  bezeichnen wir das Ergebnis von  $\nu$  Glättungsschritten bei rechter Seite  $f_k$  und Startwert  $u_k$ ,  $S_k(u_k, f_k) := u_k - W^{-1}(A_k u_k - f_k)$ .

Ein Schritt eines Mehrgitterverfahrens, um eine Approximation für  $u_0$  zu verbessern, ist folgendermaßen definiert:

#### Algorithmus 3.1 (Mehrgitterverfahren).

Mehrgitterzyklus  $MGC(k, u_k, f_k) :=$

Wenn  $k = J$

Gib  $u_J := A_J^{-1} f_J$  zurück.

Sonst

Vorglättung:  $u_k := S_k^{\nu_1}(u_k, f_k)$ .

Defektberechnung:  $d_k := A_k u_k - f_k$ .

Restriktion:  $d_{k+1} := r_k^{k+1} d_k$ .

$e_{k+1} := 0$ .

Grobgitterkorrektur: Schleife  $1, \dots, \gamma$ :

$e_{k+1} := MGC(k+1, e_{k+1}, d_{k+1})$ .

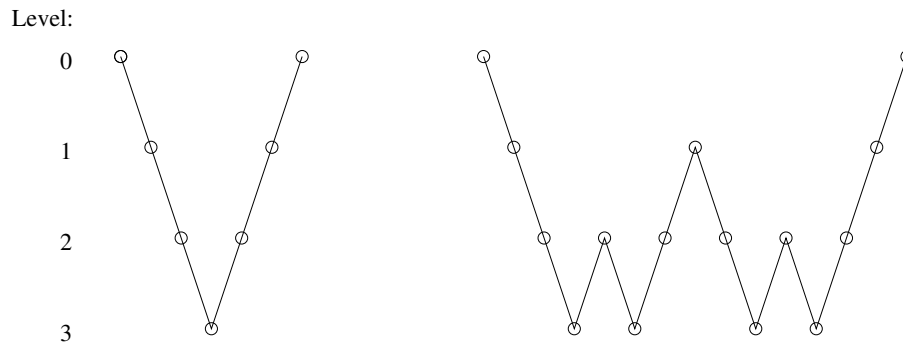
Prolongation:  $u_k := u_k - p_{k+1}^k e_{k+1}$ .

Nachglättung:  $u_k := S_k^{\nu_2}(u_k, f_k)$ .

Gib  $u_k$  zurück.

*Bemerkung 3.3.* Die Konstanten  $\gamma$ ,  $\nu_1$  und  $\nu_2$  sind häufig unabhängig vom Level  $k$ . Für  $\gamma = 1$  heißt die Iteration V-Zyklus, für  $\gamma = 2$  W-Zyklus, siehe Abb. 3.1. Den Fall  $J = 1$  bezeichnet man als Zweigitterverfahren. Gewöhnlich setzt man  $\nu_1 = \nu_2 =: \nu$  und benutzt  $\nu = 1$  oder  $\nu = 2$ .

Alternativ zu obigen Algorithmus kann man auch innerhalb der Schleife für die Grobgitterkorrektur stets  $u_k$  auf den neuesten Stand bringen und erhält damit für den resultierenden Algorithmus einen neuen Defekt (siehe Anhang A.2).

Abbildung 3.1: V-Zyklus und W-Zyklus für  $J = 3$ .

Die Mehrgitterverfahren können in verschiedene Klassen eingeteilt werden:

**Geometrische Mehrgitterverfahren** Bei diesen entstehen die endlich-dimensionalen Räume  $V_k$  sowie die Operatoren  $A_k$  und die rechten Seiten  $f_k$  durch Diskretisieren eines kontinuierlichen Problems auf größeren Gittern. Die Grobgitter ergeben sich aufgrund fester Vergrößerungsregeln. Die Transferoperatoren erhält man durch einfache Interpolation. Als Glätter setzt man häufig angepaßte einfache Iterationsverfahren ein. Die geometrischen Mehrgitterverfahren bezeichnen wir auch als klassische Verfahren.

**Algebraische Mehrgitterverfahren (AMG)** Bei diesen Mehrgitterverfahren geht man von einer Matrixdarstellung des Problems aus. Die Grobgitterräume zusammen mit den Transferoperatoren und den Grobgitteroperatoren werden rekursiv konstruiert. D.h. die Grobgitterräume werden abhängig von der Matrix  $A_0$  durch algebraische Auswahlregeln oder Aggregation bestimmt. Auch die Transferoperatoren wählt man matrixabhängig. Die Operatoren  $A_k$ ,  $k > 0$ , definiert man über das sogenannte Galerkinprodukt:

$$A_{k+1} := \tau_k^{k+1} A_k p_{k+1}^k. \quad (3.19)$$

Als Glätter verwendet man unverändert die einfachen Iterationsverfahren.

**Mischformen** Hierunter fallen sogenannte algebraisch definierte Mehrgitterverfahren, elementbasierte AMG-Verfahren wie auch andere Kombinationen, die die Eigenschaften der obigen Mehrgitterverfahren mischen. Auch das Mehrgitterverfahren, das wir auf der Basis der Coarse Graining Methode entwickeln, zählt dazu.

Im Fall konformer Finite Elemente, d.h. im Fall von ineinander geschachtelten Finite-Element-Räumen, ergeben sich die Prolongation  $p$  und die Restriktion  $r$  auf kanonische Weise. Die natürliche Wahl für die Prolongation ist in diesem Fall die Inklusion, für die Restriktion die Adjungierte der Prolongation und für den Grobgitteroperator das Galerkinprodukt. Dies nennt man den Galerkin-Fall. Die Prolongations- bzw. Restriktionsmatrix erhält man aus der Matrixdarstellung der Injektion  $j : V_k \hookrightarrow V_{k-1}$  bzw. aus der des adjungierten Operators  $j^* : V'_{k-1} \hookrightarrow V'_k$ .

Wir betrachten die Komponenten des Mehrgitterverfahrens für konforme Finite Elemente mit ineinander geschachtelten Gittern im Detail.

### 3.3.3 Transferoperatoren

Wir gehen von den in Abschnitt 2.7.2 definierten geschachtelten Zerlegungen

$$\tau_0, \tau_1, \dots, \tau_J, \quad \tau_k := \tau_{h_k}, \quad h_k = \frac{h_{k+1}}{2}, \quad (3.20)$$

<sup>1</sup>Die Funktionalformulierung überträgt sich bei Basiswahl in eine Matrixformulierung.

des Gebiets  $\Omega$  aus. Im Kontext der Finite Elemente wählen wir für jede Zerlegung  $\tau_k$ ,  $0 \leq k \leq J$ , analog zu (2.107), einen endlich-dimensionalen Ansatzraum  $V_k := V_{h_k}$ . Wir wählen mit (2.109)

$$V_k := \text{span}\{\psi_1^{(k)}, \psi_2^{(k)}, \dots, \psi_{N_k}^{(k)}\} \quad (3.21)$$

mit der Knotenbasis  $\{\psi_i^{(k)}\}$  von  $\tau_k$ .

Damit sind die Finite-Element-Räume der stückweisen bilinearen Funktionen in  $\tau_k$  ebenfalls geschachtelt:

$$V_0 \subset V_1 \subset \dots \subset V_J \subset H^1(\Omega). \quad (3.22)$$

Die diskreten Probleme, analog zur Formulierung aus Abschnitt 2.7.1, auf dem Level  $k$  lauten:

$$\text{Suche } u_k \in V_k \quad \text{mit } a(u_k, v_k) = f(v_k) \quad \text{für alle } v_k \in V_k. \quad (3.23)$$

Durch die Basiswahl hat man eine Identifizierung mit dem  $\mathbb{R}^{N_k}$ , d.h. es existiert ein Isomorphismus

$$P_k : \mathbb{R}^{N_k} \rightarrow V_k \quad (3.24)$$

definiert durch

$$V_k \ni v_k = \sum_{i=1}^{N_k} v_i^{(k)} \psi_i^{(k)} \longmapsto (v_i^{(k)})_{1 \leq i \leq N_k} := \begin{pmatrix} v_1^{(k)} \\ \vdots \\ v_{N_k}^{(k)} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N_k}. \quad (3.25)$$

Die Adjungierte von  $P_k$  bezeichnen wir  $R_k = P_k^* : V'_k \rightarrow \mathbb{R}^{N_k}$ .

Damit kann man das folgende kommutative Diagramm konstruieren,

$$\begin{array}{ccc} V_k & \xrightarrow{\text{Inklusion}} & V_{k-1} \\ P_k \uparrow & & \uparrow P_{k-1} \\ \mathbb{R}^{N_k} & \xrightarrow{p_k^{k-1}} & \mathbb{R}^{N_{k-1}} \end{array} \quad (3.26)$$

woraus man eine Definition für die Darstellung der Prolongation ableiten kann:

**Definition 3.4.** Die kanonische Prolongation  $p_k^{k-1} : \mathbb{R}^{N_k} \rightarrow \mathbb{R}^{N_{k-1}}$  lautet

$$p_k^{k-1} = (P_{k-1})^{-1} P_k. \quad (3.27)$$

Die kanonische Restriktion ist die Adjungierte:  $r_{k-1}^k = (p_k^{k-1})^*$ .

Die Restriktion  $r_{k-1}^k : V'_{k-1} \rightarrow V'_k$  als Adjungierte der Prolongation ist dann definiert durch

$$(r_{k-1}^k f_{k-1})(\psi^{(k)}) = f_{k-1}(p_k^{k-1} \psi^{(k)}) \quad \text{für alle } \psi^{(k)} \in V_k. \quad (3.28)$$

Durch die Basiswahl und die Identifizierung mit dem  $\mathbb{R}^{N_k}$  bedeutet das für die Matrizen:  $r_{k-1}^k = (p_k^{k-1})^t$ . Die Matrixdarstellung der Transferoperatoren für zwei aufeinanderfolgende Gitter erhält man aus der Darstellung der Grobgitter-Basisvektoren  $\{\psi_i^{(k)}\}_{1 \leq i \leq N_k}$  durch die Feingitter-Basisvektoren  $\{\psi_i^{(k-1)}\}_{1 \leq i \leq N_{k-1}}$ :

$$\psi_i^{(k)} = \sum_{j=1}^{N_{k-1}} (r_{k-1}^k)_{ij} \psi_j^{(k-1)} = \sum_{j=1}^{N_{k-1}} (p_k^{k-1})_{ji} \psi_j^{(k-1)}. \quad (3.29)$$

Die bilinearen Finite Elemente, wie wir sie in Kapitel 2 eingeführt haben, liefern für die Prolongations- und Restriktionsmatrizen eine einfache Interpolationsvorschrift. In Sternschreibweise lautet die Prolongationsmatrix dafür:

$$p_k^{k-1} := \begin{bmatrix} 1/4 & 1/2 & 1/4 \\ 1/2 & 1 & 1/2 \\ 1/4 & 1/2 & 1/4 \end{bmatrix}. \quad (3.30)$$

Der Stern gibt die Werte der Feingitterfunktion an, die durch Prolongation einer Grobgitterfunktion entstehen, die den Wert eins an einem Gitterpunkt und sonst null hat. Die Prolongation (3.30) entspricht der Interpolation mit einem bilinearen Polynom. Wir bezeichnen sie als Standard-Prolongation.

*Bemerkung 3.4.* Die einfachste Restriktion ist die Injektion  $r_{k-1}^{k, inj}$ . Dabei werden an den Knoten des groben Gitters einfach die Werte der entsprechenden Knoten des feineren Gitters übernommen. Normalerweise wird aber als Restriktion der zur Prolongation adjungierte Operator verwendet.

*Bemerkung 3.5.* Es finden auch andere, problemangepaßte Prolongationen und Restriktionen Verwendung. Für eine elliptische partielle Differentialgleichung mit unstetigen Koeffizienten wird in [ABDP81, Den82a] eine Modifikation der Transferoperatoren angegeben. Eine Verallgemeinerung, die auch auf die Konvektions-Diffusions-Gleichung angewandt werden kann, gab de Zeeuw in [Zee90] an. Wir diskutieren diese Möglichkeiten im Abschnitt 3.4.

### 3.3.4 Grobgitteroperator und Gitterhierarchie

Prinzipiell stehen zwei Möglichkeiten zur Wahl, den Grobgitteroperator  $A_k$  zu bestimmen:

1. Berechnung durch das Galerkinprodukt (3.19) mithilfe der Transferoperatoren. Hier ist nach wenigen Vergrößerungsschritten der Grobgitteroperator entscheidend von den Transferoperatoren mitbestimmt.
2. Berechnung des Grobgitteroperators durch einen kontinuierlichen Operator. Das bedeutet: Diskretisierung eines kontinuierlichen Problems auf den gewählten gröberen Zerlegungen des Gebiets.

Die erste Möglichkeit benutzen wir bei den algebraischen Mehrgitterverfahren, die wir in den nächsten Abschnitten vorstellen. Auf die zweite Möglichkeit greifen wir bei den Mehrgitterverfahren zurück, bei denen wir mithilfe der Coarse Graining Methode oder anderen Upscalingsprozeduren den Grobgitteroperator bestimmen.

#### Gitterhierarchie durch Vergrößerung

Der klassische Mehrgitteransatz setzt eine Hierarchie von Gittern voraus. Gewöhnlich erhält man durch sukzessive Verfeinerung aus einer groben Zerlegung des Gebiets eine solche Hierarchie von zunehmend feineren Gittern.

Wir beschränken uns mit  $\Omega \in \mathbb{R}^2$ , das stets ein rechtwinkliges Gebiet sei, auf uniforme Gitter über  $\Omega$ , bei denen die Maschenweiten in die zwei Koordinatenrichtungen gleich seien. Anstelle der sukzessiven Verfeinerung erzeugen wir eine Gitterhierarchie durch sukzessive Vergrößerung: Wir wählen zuerst eine sehr feine Zerlegung des Gebiets  $\Omega$  als Gitter aus Viereckelementen wie in Abschnitt 2.7.2 eingeführt. Daraus generieren wir durch geometrisches Vergrößern geschachtelte gröbere Gitter. Dazu werden vier benachbarte Elemente zu einem Element der nächst gröberen Zerlegung vereinigt. Die Abbildung 3.2 zeigt die geometrische Vergrößerung.

Damit erhält man die Zerlegungen

$$\tau_{h_0}, \tau_{h_1}, \dots, \tau_{h_J} \quad \text{mit } h_k = 2h_{k-1}, \quad (3.31)$$

denen die die Finite-Element-Räume  $V_k := V_{h_k}$  zugeordnet sind:

$$V_0 \subset V_1 \subset \dots \subset V_J. \quad (3.32)$$

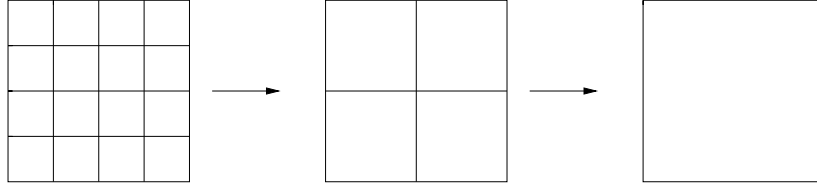


Abbildung 3.2: Geometrische Vergrößerung

Die Räume  $V_k$  zu den gröberen Gittern treten nur in den Hilfsproblemen im Mehrgitter-Algorithmus auf. Die Gitterhierarchie ist damit durch

$$\Omega_k := \{(x_1, x_2) \in \bar{\Omega} \mid x_1 = ih_k, x_2 = jh_k, i, j \in \mathbb{Z}\} \quad \text{für } k = 0, \dots, J \quad (3.33)$$

mit der Maschenweite

$$h_k = h_{k+1}/2, \quad k = 0, \dots, J-1$$

und der Maschenweite  $h_J$  des größten Gitters definiert.

### 3.3.5 Mehrgitter-Konvergenz

Dieser Abschnitt ist eine kurze Zusammenfassung aus [Hac85, Hac02]. Die Beweise findet man in jedem Buch über Konvergenztheorie für Mehrgitterverfahren.

Die klassische Mehrgitter-Konvergenztheorie basiert auf der Zerlegung der Iterationsmatrix für das Zweigitterverfahren mit  $J = 1$ :

$$M_k^{ZGM}(\nu_1, \nu_2) := S_k^{\nu_2} (I - p_{k+1}^k A_{k+1}^{-1} r_k^{k+1} A_k) S_k^{\nu_1}. \quad (3.34)$$

Für den Fall  $\nu_2 = 0$ ,  $\nu_1 = \nu$ , ist die Norm von  $M_k^{ZGM}$  beschränkt durch

$$\|M_k^{ZGM}\| \leq \|A_k^{-1} - p_{k+1}^k A_{k+1}^{-1} r_k^{k+1}\| \|A_k S_k^\nu\|. \quad (3.35)$$

Als Matrixnorm kann die der euklidischen Vektornorm zugeordnete Matrixnorm, d.h. die Spektralnorm, verwendet werden. Die Glättungseigenschaft, definiert durch

$$\|A_k S_k^\nu\| \leq C_s \eta(\nu) h_k^{-2m} \quad \text{für alle } \nu \geq 1, \quad C_s > 0, \quad (3.36)$$

wobei  $\eta : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$  mit  $\lim_{\nu \rightarrow \infty} \eta(\nu) = 0$ , und die Approximationseigenschaft, definiert durch

$$\|A_k^{-1} - p_{k+1}^k A_{k+1}^{-1} r_k^{k+1}\| \leq C_a h_k^{2m}, \quad C_a > 0, \quad (3.37)$$

führen dann zu

$$\|M_k^{ZGM}\| \leq C_a C_s \eta(\nu) \quad \text{für } \nu \geq 1. \quad (3.38)$$

Daraus folgt die Konvergenz für das Zweigitterverfahren für eine genügend große Anzahl von Glättungsschritten  $\nu$ .

Die Glättungseigenschaft (3.36) ist von algebraischer Natur. Man weist sie z.B. durch das Spektral-Lemma oder Reuskens Lemma nach [Hac02]. Die Approximationseigenschaft beschreibt, wie gut die Grobgittermatrix  $A_{k+1}$  als Näherung für den diskreten Differentialoperator ist. Für den Fall konformer Finite Elemente (Galerkin-Fall) für partielle Differentialgleichungen zweiter Ordnung basiert der Beweis für die Approximationseigenschaft auf den Standard-Fehlerabschätzungen für die Finite-Element-Näherungen. Wichtig dafür ist, daß die Fehlerordnungen  $m_p$  und  $m_r$  der Prolongation und Restriktion, d.h. der größte Grad plus eins von Polynomen, die exakt interpoliert werden,

$$m_p + m_r > 2m \quad (3.39)$$

erfüllen.  $2m$  ist die Ordnung des betrachteten Differentialoperators.

Um die Konvergenz im Mehrgitter-Fall für den W-Zyklus nachzuweisen, betrachtet man das Verfahren als gestörtes Zweigitterverfahren. Aus der Zweigitter-Konvergenz schließt man dann auf die Mehrgitter-Konvergenz.

**Satz 3.7.** *Die Glättungs- und Approximationseigenschaft, sowie*

$$\|S_k^\nu\| \leq C_s, \quad 0 < \nu < \bar{\nu}, \quad k \leq J, \quad (3.40)$$

und

$$C_p^{-1} \|u_{k+1}\| \leq \|p_{k+1}^k u_{k+1}\| \leq C_p \|u_{k+1}\| \quad \text{für alle } u_{k+1} \in \mathbb{R}^{N_{k+1}}, \quad k \leq J, \quad C_p > 0,$$

seien gültig. Dann gibt es für  $\gamma \geq 2$  ein genügend großes  $\nu$ , so daß

$$\|M_k^{MG M}(\nu, 0)\| \leq \zeta < 1, \quad \text{mit } \zeta \in (0, 1), \quad (3.41)$$

unabhängig von  $k \leq J$  gilt.

*Bemerkung 3.6.* Unter der Annahme eines symmetrischen Mehrgitterverfahrens mit  $A_0$  symmetrisch, positiv definit,  $r_{k-1}^k = (p_k^{k-1})^t$ ,  $A_{k+1} = r_k^{k+1} A_k p_{k+1}^k$ ,  $\nu_1 = \nu_2$  und mit einem symmetrischen Glätter, erhält man auch die Konvergenz des V-Zyklus.

*Bemerkung 3.7.* Die Theorie wie auch die Praxis zeigen, daß das klassische Mehrgitterverfahren mit bilinearer Prolongation sehr schnell und unabhängig von der Gitterweite im Fall glatter Koeffizientenfunktionen konvergiert. Es ist aber oftmals für kompliziertere Probleme, bei denen etwa springende Koeffizienten oder Anisotropie vorliegen, nicht robust. Nur in Spezialfällen kann man hier die Konvergenz mit modifizierten Glättern verbessern. Ein vielversprechender Ansatz, um auch solche Probleme effizient lösen zu können, sind die algebraischen Mehrgitterverfahren.

### 3.3.6 Aufwand eines Mehrgitterzyklus

Ein Mehrgitterzyklus für  $N$  Unbekannte hat folgenden Rechenaufwand:

1. Ein Schritt eines V-Zyklus hat den Aufwand  $O(N)$  unabhängig von der Raumdimension.
2. Ein Schritt des W-Zyklus hat den Aufwand  $O(N \log N)$  in einer Raumdimension,  $O(N)$  in mehr als einer Raumdimension.



## 3.4 Verfahren mit matrixabhängiger Prolongation und algebraische Mehrgitterverfahren

### 3.4.1 Einführung

Die Wahl der geeigneten Verfahrenskomponenten ist für viele Probleme entscheidend für ein gutes Konvergenzverhalten des Mehrgitterverfahrens. Insbesondere ist im Fall der Diskretisierung auf den verschiedenen groben Gittern die Wahl des kontinuierlichen Problems, also der Grobgitteroperatoren, ein zentrales Problem. Werden die Verfahrenskomponenten schlecht gewählt, führt dies zur Verlangsamung der Konvergenz oder sogar zum Zusammenbruch des Verfahrens. Zur Verbesserung der Verfahren gibt es für die Wahl der Verfahrenskomponenten verschiedene Ansätze:

Einerseits die Ansätze aus [ABDP81, Den82a] zu operatorabhängigen Transferabbildungen und andererseits die algebraische Mehrgittermethode (AMG) [RS85, RS87], bei der auf geometrische Informationen verzichtet wird und die Information zur Wahl der Grobgitteroperatoren allein aus der Matrix des diskreten Operators gewonnen wird. Zwischen diesen beiden Ansätzen bewegen sich die algebraisch definierten Mehrgitterverfahren [BCF<sup>+</sup>00, JV01, HV01]. Diese gewinnen, ähnlich wie die algebraischen Mehrgittermethoden, die Information zur Bildung der Grobgitteroperatoren und der Transferabbildungen allein aus dem diskreten Feingitteroperator. Im Gegensatz zu AMG-Verfahren sind jedoch die groben Gitter bereits vorgegeben und werden nicht ebenfalls aus der Feingittermatrix bestimmt.

### Probleme des klassischen Mehrgitterverfahrens

Eine essentielle Eigenschaft der Mehrgittermethode ist, daß der Glättungsschritt und die Grobgitterkorrektur eine Reduktion der Fehlerkomponenten auf dem gesamten Frequenzspektrum liefern. Dazu müssen der Glätter und die Grobgitterkorrektur aufeinander abgestimmt sein. Benutzt man ein einfaches Iterationsverfahren aus Abschnitt 3.2 als Glätter im Mehrgitterverfahren, so muß der Grobgitteroperator alle niederfrequenten Fehleranteile in einem Mehrgitterzyklus verkleinern, so daß insgesamt alle Fehlerkomponenten reduziert werden.

Die Möglichkeit, daß man angepaßte Glättungsverfahren benutzt, um ein effizientes Mehrgitterverfahren zu gewinnen, ist in der Literatur ebenfalls diskutiert worden [Wit89a, Wit89b], z.B. durch Einsetzung robuster Iterationsverfahren wie  $ILU_\beta$  als Glätter. Oft tendiert man aber zu dem Ansatz, der insbesondere in den algebraischen Mehrgitterverfahren verwendet wird, mit einem einfachen Glätter zu arbeiten, dafür aber den Grobgitteroperator geeignet zu wählen.

Damit der Grobgitteroperator problemangepaßt ist, müssen bei Verwenden des Galerkinprodukts und geometrischen Vergrößern die Transferoperatoren richtig gewählt werden. Dies muß besonders bei stark variierenden Koeffizienten Berücksichtigung finden. In solchen Fällen müssen durch die Abbildungen zwischen den Gittern physikalisch relevante Größen erhalten werden.

Betrachtet man die Strömung in einem Medium, ist der Fluß solch eine Größe. Die Standard-Prolongation erfüllt obige Forderung im Fall einer stückweise stetigen Koeffizientenfunktion, die stark variiert, nicht. Damit hat das entsprechende Mehrgitterverfahren eine schlechte Konvergenzrate, siehe z.B. [Bra77, ABDP81]. Die Standard-Prolongation bzw. der Grobgitteroperator liefert hier an den Unstetigkeitsstellen die Stetigkeit von  $\nabla u$ . Hier ist aber nur der Fluß  $K\nabla u$  stetig.

Eine geeignete Prolongation sollte in diesem Fall auf der Stetigkeit des Flusses basieren. Dies ist der Ansatz der operator- oder matrixabhängigen Transferabbildungen. Sie benutzen Informationen aus den Operatoren  $A_k$ , um die Erhaltung des Flusses zu gewährleisten. Dies resultiert in lokalen Transferoperatoren, die gewichteten Interpolationen entsprechen. Wir erläutern dieses Vorgehen zunächst im Fall eines eindimensionalen Problems.

### 3.4.2 Operatorabhängige Prolongation im eindimensionalen Fall

Betrachten wir die eindimensionale, homogene Differentialgleichung

$$\frac{d}{dx} \left( K(x) \frac{d}{dx} u(x) \right) = 0 \quad (3.42)$$

auf einem Intervall  $[x_a, x_e] \in \mathbb{R}$  mit den Randdaten  $u(x_a) = \alpha$  und  $u(x_e) = \beta$ ,  $\alpha \neq \beta$ , und  $K(x) > 0$  für  $x \in [x_a, x_e]$ . Die allgemeine Lösung lautet damit:

$$u(x) = \frac{\beta - \alpha}{\int_{x_a}^{x_e} \frac{1}{K(x)} dx} \int_{x_a}^x \frac{1}{K(y)} dy + \alpha. \quad (3.43)$$

Sie läßt sich folgendermaßen zur Definition der Prolongation benutzen: Seien  $x_a$  und  $x_e$  Punkte auf einem groben Gitter, so wird für sie die Prolongation als Identität definiert. Für den Feingitterpunkt  $x_f := (x_a + x_e)/2$ , dem Mittelpunkt des Intervalls, kann man die Lösung (3.43) für eine Prolongation heranziehen. Wir betrachten den Wert  $u(x_f)$  als den Wert der Prolongation für  $x_f$  aus den Grobgitterpunkten  $x_a$  und  $x_e$ , d.h.

$$u(x_f) = p_1 \alpha + p_2 \beta \quad (3.44)$$

mit den Gewichten

$$p_2 = \left( \int_{x_a}^{x_e} \frac{1}{K(x)} dx \right)^{-1} \int_{x_a}^{x_f} \frac{1}{K(x)} dx \quad \text{und} \quad p_1 = 1 - p_2. \quad (3.45)$$

Damit erhält man den Prolongationsstern

$$[p_1 \quad 1 \quad p_2], \quad (3.46)$$

der von der Koeffizientenfunktion  $K(x)$  abhängt und sich von der Standard-Prolongation

$$[1/2 \quad 1 \quad 1/2] \quad (3.47)$$

in einer Raumdimension für nicht-konstantes  $K$  unterscheidet. Die Prolongation wird damit direkt durch die Lösung des lokalen homogenen Problems (3.42) bestimmt und gibt dadurch die Stetigkeit des Flusses  $K \frac{d}{dx} u$  bzw. eine eventuelle Unstetigkeit von  $\frac{d}{dx} u$  diskret wieder: Aus (3.47) erhält man

$$u(x_f) - u(x_a) = u(x_e) - u(x_f), \quad (3.48)$$

was der diskreten Stetigkeitsbedingung von  $\frac{d}{dx} u$  in  $x_f$  entspricht. Aus (3.46) erhält man mit der Trapezregel hingegen

$$K\left(\frac{x_a + x_f}{2}\right)(u(x_f) - u(x_a)) = K\left(\frac{x_f + x_e}{2}\right)(u(x_e) - u(x_f)), \quad (3.49)$$

was der diskreten Stetigkeitsbedingung von  $K \frac{d}{dx} u$  in  $x_f$  entspricht. Die Interpolation (3.46) ist außerdem exakt, falls die Lösung in den Grobgitterpunkten bereits bestimmt ist.

**Beispiel 3.1.** Ist  $K(x)$  auf dem Intervall durch

$$K(x) = \begin{cases} K_1 & \text{für } x \in [x_a, x_f] \\ K_2 & \text{für } x \in ]x_f, x_e] \end{cases} \quad (3.50)$$

gegeben, erhält man den Prolongationsstern für den Punkt  $x_f$  (vgl. [ABDP81])

$$[p_1 \quad 1 \quad p_2] = \left[ \frac{K_1}{K_1 + K_2} \quad 1 \quad \frac{K_2}{K_1 + K_2} \right]. \quad (3.51)$$

Das geschilderte Vorgehen läßt sich auf diskrete Operatoren übertragen. Die Forderung, daß das Ergebnis der Prolongation in den Feingitterpunkten durch die Lösung des lokalen homogenen Problems bestimmt ist, schreibt sich als

$$(A_k p_{k+1}^k u_{k+1})(x_i) = 0 \quad \text{für } x_i \in \Omega_k \setminus \Omega_{k+1}. \quad (3.52)$$

Daraus erhält man mittels der Steifigkeitsmatrix eine matrixabhängige Prolongation.

Den Ansatz aus Gl. (3.52), daß die Prolongationsgewichte für die Feingitterpunkte durch lokales Invertieren der homogenen Differentialgleichung mit den, bereits durch die Identität als Prolongation, bestimmten Werten in den Grobgitterpunkten als Randdaten, entstehen, kann man auch für den mehrdimensionalen Fall fordern. Darauf gehen wir in Abschnitt 3.4.5 ein.

### 3.4.3 Basisfunktionen im eindimensionalen Fall

Die lokale homogene Differentialgleichung kann ebenso genutzt werden, um lokal angepaßte Basisfunktionen zu ermitteln. Diese lösen die homogene Differentialgleichung

$$\frac{d}{dx} \left( K(x) \frac{d}{dx} u(x) \right) = 0 \quad (3.53)$$

mit geeigneten Randdaten und enthalten so – im Gegensatz zu den Standard-Knotenbasisfunktionen – bereits Informationen über die Koeffizientenfunktion, wodurch sie lokal an die Struktur des Mediums angepaßt sind.

Für das homogene Dirichlet-Problem (3.53) mit den Randwerten  $u(x_a) = \alpha$ ,  $u(x_e) = \beta$  und einer äquidistanten Zerlegung des Intervalls  $[x_a, x_e]$  in Teilintervalle  $[x_i, x_{i+1}]$  mit  $x_a = x_1 < x_2 < \dots < x_{N_k} = x_e$  erhält man für die Basisfunktion des Finite-Element-Raumes  $V_k$  zum Punkt  $x_i$ :

$$\phi_i^{(k)}(x) = \begin{cases} \left( \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{1}{K(x)} dx \right)^{-1} \int_{x_{i-1}}^x \frac{1}{K(y)} dy & \text{für } x \in [x_{i-1}, x_i] \\ 1 - \left( \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{1}{K(x)} dx \right)^{-1} \int_{x_i}^x \frac{1}{K(y)} dy & \text{für } x \in ]x_i, x_{i+1}] \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.54)$$

*Bemerkung 3.8.*  $\phi_i^{(k)}(x)$  geht aus der Lösung (3.43) des homogenen Problems über den Intervallen  $[x_{i-1}, x_i]$  bzw.  $[x_i, x_{i+1}]$  mit den Randbedingungen  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 1$  bzw.  $\alpha = 1$ ,  $\beta = 0$  hervor.

Die Gewichte der Prolongationen lassen sich nun direkt als Werte der operatorabhängigen Basisfunktionen an den Mittelpunkten der Teilintervalle interpretieren.

**Beispiel 3.2.** Sei  $K(x)$  gegeben durch:

$$K(x) = \begin{cases} K_1 & \text{für } x_i \leq x < (x_{i+1} + x_i)/2, i = 1, \dots, N_k - 1 \\ K_2 & \text{für } (x_{i+1} + x_i)/2 \leq x < x_{i+1}, i = 1, \dots, N_k - 1. \end{cases} \quad (3.55)$$

Dann erhält man für die angepaßte Basisfunktion  $\phi_i^{(k)}(x)$  im Vergleich zur Knotenbasisfunktion den in Abbildung 3.3 gezeigten Verlauf.

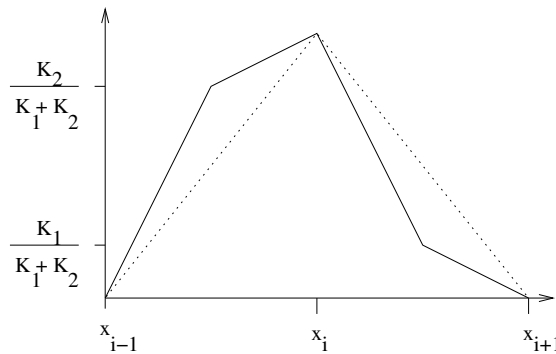


Abbildung 3.3: Angepaßte Basisfunktion und Knotenbasisfunktion ( $K_1 = 1/5$ ,  $K_2 = 4/5$ ).

*Bemerkung 3.9.* Die Idee der angepaßten Basisfunktionen ist auch der Ansatz, der der Mehrskalenelement-Theorie von Hou et al. zugrundeliegt [HW97, HWC99, CH00, EHW00, EW02a, EW02b]. Die Mehrskalen-Methode erzeugt adaptiv angepaßte Basisfunktionen durch lokales Lösen der homogenen Differentialgleichung. Die Basisfunktionen beinhalten damit die mikroskaligen Eigenschaften der Koeffizientenfunktion. In dem Raum der so gewonnenen Basisfunktionen wird dann das globale Problem auf einer groben Zerlegung des Gebiets berechnet. Wir gehen darauf genauer in Kapitel 5 ein.

### 3.4.4 Bemerkungen zum zweidimensionalen Fall

Im zweidimensionalen Fall ist es nicht mehr möglich, die Prolongation in den Feingitterpunkten als lokale Inverse der Steifigkeitsmatrix direkt aus der Beziehung (3.52) zu bestimmen. Dies liegt daran, daß im Mehrdimensionalen ein gegebener Feingitterpunkt nicht nur mit Grobgitterpunkten über die Steifigkeitsmatrix, sondern auch mit benachbarten Feingitterpunkten gekoppelt ist.

Hier lassen sich nur durch näherungsweise Erfüllen von Gl. (3.52) matrixabhängige Prolongationen definieren. Diese geben die Stetigkeit des Flusses approximativ wieder, was von der Standard-Prolongation (3.30) keineswegs getan wird.

*Bemerkung 3.10.* Aus der kontinuierlichen homogenen Differentialgleichung

$$-\nabla \cdot K(x) \nabla u(x) = 0 \quad (3.56)$$

läßt sich auch nicht direkt eine operatorabhängige Basis im mehrdimensionalen Fall herleiten. Fordert man, daß eine Basisfunktion die Differentialgleichung lokal löst, steht man vor dem Problem der Wahl der richtigen Randbedingungen.

Eine Möglichkeit, dieses Problem zu überwinden, ist in zwei Raumdimensionen, die Randbedingungen aus der Lösung des eindimensionalen Problems entlang des Randes

$$-\frac{d}{dx_2} \left( K(x_i, x_2) \frac{d}{dx_2} u(x_i, x_2) \right) = 0 \quad (3.57)$$

mit den Randbedingungen  $u(x_i, x_{2j-1}) = 0$ ,  $u(x_i, x_{2j}) = 1$  zu bestimmen. Diese Vorgehensweise wird auch in der erwähnten Mehrskalen-Finite-Element-Methode benutzt [HW97].

### 3.4.5 Matrixabhängige Transferoperatoren

Mehrgitterverfahren mit matrixabhängigen Transferoperatoren sind die Vorläufer der rein algebraischen Mehrgitterverfahren. Zum iterativen Lösen benutzt man den Mehrgitter-Algorithmus 3.1. Der Unterschied reiner AMG-Verfahren zu klassischen Mehrgitterverfahren liegt in den Grobgittermatrizen  $A_k$  und den Transferoperatoren  $p_k^{k-1}$ ,  $r_{k-1}^k$ . Bei Galerkin-Verfahren mit matrixabhängigen Transferoperatoren wird nur die Berechnung der Prolongations- und Restriktionsmatrix verändert. Man benutzt aber weiterhin die Gitterhierarchie wie beim klassischen Mehrgitterverfahren (Abschnitt 3.3.4). Beschreibungen typischer Vertreter dieser Verfahren findet man in [ABDP81, Den82a, Hac85, Zee90, Fuh93, Reu94, Kna95].

#### Matrixabhängige Prolongation

Wir leiten matrixabhängige Prolongationen  $p_k^{k-1}$  aus der näherungsweise Erfüllung der Beziehung (3.52) her. Dazu benötigt man eine Transformation, die die Fein- und Grobgitterunbekannten entkoppelt. Die Grobgittergleichungen können damit gelöst werden, und die Feingitterunbekannten können aus der Lösung mittels der Transformation prolongiert werden. Da solche Transformationen i.a. nicht lokal sind, benutzt man Approximationen dafür und erfüllt Gl. (3.52) nur angenähert.

Wir formulieren die Transformation, indem man folgenden Ansatz benutzt: Die Prolongationsabbildung kann als Transformation interpretiert werden, um eine Block-Gauß-Zerlegung für den Operator  $A_k$  durchzuführen. Dazu betrachten wir die diskreten Probleme

$$A_k u_k = b_k \quad (3.58)$$

auf den Gittern  $\Omega_k$ . Wir unterdrücken im folgenden den Index  $k$ , wenn wir nur Gleichungen auf einem Level betrachten oder aus dem Zusammenhang klar ist, auf welchem Gitterlevel sich die Größen beziehen.

Benutzt man eine Fein-Grobgitterpunkt-Numerierung, kann man die Steifigkeitsmatrix  $A_k$  durch seine „Fein-ohne-grob-Anteile“ und seine „Grob-Anteile“ darstellen:

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad (3.59)$$

wobei  $u_1$  die Unbekannten in  $\Omega_k \setminus \Omega_{k+1}$  und  $u_2$  die Unbekannten des nächst größeren Gitters  $\Omega_{k+1}$  bezeichnen. Im folgenden nehmen wir an, daß  $A_k$  durch einen 9-Punkte-Stern darstellbar ist. In diesem Fall ist  $A_{22}$  eine Diagonalmatrix.

Die optimale matrixabhängige Prolongation resultiert nun aus einer exakten Block-Gauß-Elimination der Außerdiagonalblöcke  $A_{12}$  und  $A_{21}$ . Man transformiert  $A_k$  also nach

$$\begin{pmatrix} I & -A_{11}^{-1}A_{12} \\ 0 & I \end{pmatrix}^t \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & -A_{11}^{-1}A_{12} \\ 0 & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & A_S \end{pmatrix}, \quad (3.60)$$

mit der Schurkomplement-Matrix  $A_S := A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}$  von  $A_k$ . Die damit verbundene matrixabhängige Prolongation und Restriktion zwischen dem Gitterlevel  $k+1$  und  $k$  lautet

$$p_{k+1}^k = \begin{pmatrix} -A_{k,11}^{-1}A_{k,12} \\ I \end{pmatrix}, \quad r_k^{k+1} = (p_{k+1}^k)^t = \begin{pmatrix} -A_{k,21}A_{k,11}^{-1} & I \end{pmatrix} \quad (3.61)$$

und der Grobgitteroperator auf dem Level  $k+1$  aufgrund des Galerkinprodukts ist:

$$A_{k+1} = r_k^{k+1} A_k p_{k+1}^k = A_S. \quad (3.62)$$

Durch diese Block-Gauß-Zerlegung wird der zugrundegelegte Finite-Element-Raum implizit in den Unterraum, der von den Basisfunktionen zu den Gitterpunkten  $\Omega_k \setminus \Omega_{k+1}$  aufgespannt wird, und sein orthogonales Komplement bezüglich der Bilinearform  $a(\cdot, \cdot)$  aus (2.102) zerlegt.

*Bemerkung 3.11.* Im allgemeinen ist die Inverse des Feingitterblocks,  $A_{11}^{-1}$ , kein lokaler Operator<sup>2</sup>. Die Grobgittermatrix  $A_{k+1}$  ist daher nicht mehr dünnbesetzt.

*Bemerkung 3.12.* Im eindimensionalen Fall allerdings ist  $A_{11}^{-1}$  eine Diagonalmatrix, falls  $A_k$  durch einen 3-Punkte-Stern

$$A_k(x_i) = [a_{-1}(x_i) \quad a_0(x_i) \quad a_1(x_i)] \quad (3.63)$$

auf dem Gitter  $G_k := G_{h_k} := \{x \in \mathbb{R} \mid x = ih_k, i \in \mathbb{Z}\}$  gegeben ist. Damit sind die Prolongation  $p_{k+1}^k$  und die Grobgittermatrix lokale Größen. Für die matrixabhängige Prolongation erhält man

$$p_{k+1}^k(x_{i+1}) = \begin{bmatrix} -\frac{a_1(x_i)}{a_0(x_i)} & 1 & -\frac{a_{-1}(x_{i+2})}{a_0(x_{i+2})} \end{bmatrix}. \quad (3.64)$$

Das Galerkinprodukt liefert

$$A_{k+1}(x_{i+1}) = \begin{bmatrix} -\frac{a_{-1}(x_i)a_{-1}(x_{i+1})}{a_0(x_i)} & \frac{a_{-1}(x_i)a_{-1}(x_{i+1})}{a_0(x_i)} + \frac{a_1(x_{i+1})a_1(x_{i+2})}{a_0(x_{i+2})} & -\frac{a_1(x_{i+1})a_1(x_{i+2})}{a_0(x_{i+2})} \end{bmatrix} \quad (3.65)$$

mit  $x_{i+1} \in G_{k+1}$ .

**Beispiel 3.3.** Betrachtet man den Spezialfall von Gl. (3.53) mit stückweise konstantem  $K(x)$  auf dem eindimensionalen Gitter  $G_k$ , wobei  $K(x)$  nur Sprünge an den Gitterpunkten aufweist,

$$K(x) = \text{const.} \quad \text{für } x \in [x_i, x_{i+1}[ , i = 1, \dots, N_k - 1, \quad (3.66)$$

dann erhält man mit Finiten Elementen auf  $G_k$  den Stern

$$A_k(x_{i+1}) = \frac{1}{h_k} [-K(x_i) \quad K(x_i) + K(x_{i+1}) \quad -K(x_{i+1})]. \quad (3.67)$$

Mit der entsprechenden Prolongation (3.64)

$$p_{k+1}^k(x_{i+1}) = \begin{bmatrix} \frac{K(x_i)}{K(x_i)+K(x_{i-1})} & 1 & \frac{K(x_{i+1})}{K(x_{i+1})+K(x_{i+2})} \end{bmatrix} \quad \text{für } x_{i+1} \in G_{k+1} \quad (3.68)$$

erhält man den Stern

$$A_{k+1}(x_{i+1}) = \frac{2}{h_{k+1}} \left[ -\frac{K(x_{i-1})K(x_i)}{K(x_{i-1})+K(x_i)} \quad \frac{K(x_{i-1})K(x_i)}{K(x_{i-1})+K(x_i)} + \frac{K(x_{i+1})K(x_{i+2})}{K(x_{i+1})+K(x_{i+2})} \quad -\frac{K(x_{i+1})K(x_{i+2})}{K(x_{i+1})+K(x_{i+2})} \right]. \quad (3.69)$$

<sup>2</sup>Wir bezeichnen einen Operator lokal, wenn er durch einen 9-Punkte-Stern darstellbar ist.

Der Prolongationsstern aus (3.68) stimmt mit der exakten Prolongation (3.51) aus der Lösung des eindimensionalen Falls überein.

*Bemerkung 3.13.* Vergleicht man den Stern aus (3.69) mit dem aus (3.3) ergibt sich für den Koeffizienten eines Intervalles auf dem groben Gitter das harmonische Mittel der entsprechenden Feingitterwerte. D.h. eine direkte Diskretisierung auf dem gröberen Gitter  $G_{k+1}$  mit den lokal harmonisch gemittelten Koeffizienten des Feingitters führt auf den gleichen Grobgitteroperator. Wendet man die entsprechende matrixabhängige Prolongation mit dem Galerkinprodukt auf jedem gröberen Gitter an, so erhält man auf  $G_J$  das globale harmonische Mittel als einen effektiven Koeffizienten aus dem Mehrgitterverfahren. Damit erhält man das gleiche Resultat wie für den homogenisierten Koeffizienten aus der Homogenisierungstheorie in einer Raumdimension (vgl. Abschnitt 2.5).

*Bemerkung 3.14.* Mit der Standard-Prolongation

$$p_{k+1}^k = [1/2 \quad 1 \quad 1/2], \quad (3.70)$$

die linear interpoliert, ergibt sich mithilfe des Galerkinproduktes das lokale arithmetische Mittel für den Koeffizienten auf dem gröberen Gitter. Im Vergleich zum obigen exakten Resultat zeigt dies ebenfalls, daß (3.70) keine gute Wahl für die Prolongation ist.

### Definition der matrixabhängigen Prolongation

Wie erwähnt, bestimmen wir die matrixabhängige Prolongation in den Punkten  $\Omega_k \setminus \Omega_{k+1}$  als approximative Invertierung des diskreten Feingitteroperators  $A_k$ . In den Grobgitterpunkten definieren wir die Prolongation als Identität:  $(0 \quad I) p_{k+1}^k = I$ . So ist

$$(I \quad 0) A_k p_{k+1}^k = 0 \quad (3.71)$$

aus Gl. (3.52) äquivalent zu

$$p_{k+1}^k = \begin{pmatrix} -A_{k,11}^{-1} A_{k,12} \\ I \end{pmatrix}, \quad (3.72)$$

mit der Prolongation (3.61) aus der Block-Gauß-Elimination von (3.60). Da im allgemeinen  $A_{11}^{-1}$  eine vollbesetzte Matrix ist, ist die Idee bei der Konstruktion von  $p_{k+1}^k$ , eine Approximation für die Matrixen  $A_{11}$  und  $A_{12}$  aus  $A_k$  zu benutzen. Dies bedeutet, man ersetzt in  $A_k$  die Kopplungen der Feingitterpunkte  $\Omega_k \setminus \Omega_{k+1}$  durch eine geeignete Wahl,

$$(A_{11} \quad A_{12}) \rightarrow (\tilde{A}_{11} \quad \tilde{A}_{12}), \quad (3.73)$$

so daß man meistens eine reduzierte Kopplungsstruktur hat. Die Ersetzung sollte folgenden Anforderungen genügen:

1.  $\tilde{A}_{11}$  ist leicht zu invertieren.
2.  $\tilde{A}_{11}^{-1} \tilde{A}_{12}$  ist eine gute Näherung für  $A_{11}^{-1} A_{12}$ .
3.  $\begin{pmatrix} -\tilde{A}_{11}^{-1} \tilde{A}_{12} \\ I \end{pmatrix}$  ist ein lokaler Operator.

**Definition 3.5.** Damit definieren wir den matrixabhängigen Prolongationsoperator durch

$$\tilde{p}_{k+1}^k = \begin{pmatrix} -\tilde{A}_{11}^{-1} \tilde{A}_{12} \\ I \end{pmatrix}. \quad (3.74)$$

Die matrixabhängige Restriktion lautet:  $\tilde{r}_k^{k+1} = (-A_{21} \tilde{A}_{11}^{-1} \quad I)$ .<sup>3</sup>

<sup>3</sup>Es gilt damit wie in (3.60):

$$\begin{pmatrix} I & 0 \\ -A_{21} \tilde{A}_{11}^{-1} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{A}_{11} & \tilde{A}_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & -\tilde{A}_{11}^{-1} \tilde{A}_{12} \\ 0 & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{A}_{11} & 0 \\ 0 & A_{22} - A_{21} \tilde{A}_{11}^{-1} \tilde{A}_{12} \end{pmatrix}.$$

Für  $A_{21} \neq (\tilde{A}_{12})^t$  gilt somit nicht mehr  $\tilde{r}_k^{k+1} = (\tilde{p}_{k+1}^k)^t$ . Damit ist das Mehrgitterverfahren bezüglich der Transferoperatoren nicht mehr symmetrisch, wenn man die Matrix  $A_{12}$  zu  $\tilde{A}_{12}$  abändert.

*Bemerkung 3.15.* Zur numerischen Berechnung der matrixabhängigen Prolongation ist folgende Sehensweise nützlich: Die Prolongation  $\tilde{p}_{k+1}^k$  stellt eine Prolongation aus einer exakten Block-Gauß-Zerlegung der fiktiven Steifigkeitsmatrix

$$\tilde{A}_k = \begin{pmatrix} \tilde{A}_{11} & \tilde{A}_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \quad (3.75)$$

dar. Gegenüber  $A_k$  stammt  $\tilde{A}_k$  aus einer fehlerhaften Diskretisierung, die veränderte Gleichungen für die Feingitterpunkte besitzt. Man berechnet also zuerst  $\tilde{A}_k$  und daraus  $\tilde{p}_{k+1}^k$  und  $\tilde{r}_k^{k+1}$ .

Um  $\tilde{A}_{11}$  und  $\tilde{A}_{12}$  zu konstruieren, verwenden wir folgende Notationen: Wir zerlegen das Gitter  $\Omega_k$  aus (3.33) in vier disjunkte Teilgitter ( $k \geq 0$ ):

$$\begin{aligned} \Omega_k^{00} &:= \{(x_1, x_2) \in \Omega_k \mid x_1 = 2ih_k, x_2 = 2jh_k, i, j \in \mathbb{Z}\} = \Omega_{k+1} \\ \Omega_k^{10} &:= \{(x_1, x_2) \in \Omega_k \mid x_1 = (2i+1)h_k, x_2 = 2jh_k, i, j \in \mathbb{Z}\} \\ \Omega_k^{01} &:= \{(x_1, x_2) \in \Omega_k \mid x_1 = 2ih_k, x_2 = (2j+1)h_k, i, j \in \mathbb{Z}\} \\ \Omega_k^{11} &:= \{(x_1, x_2) \in \Omega_k \mid x_1 = (2i+1)h_k, x_2 = (2j+1)h_k, i, j \in \mathbb{Z}\}. \end{aligned}$$

Daraus entsteht die Matrixpartitionierung

$$A_k = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \left( \begin{array}{cc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ \hline a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{array} \right), \quad (3.76)$$

wobei  $(a_{11} \ a_{12} \ a_{13})$  die Gleichungen bezüglich der Gitterpunkte in  $\Omega_k^{11}$  enthält.  $(a_{21} \ a_{22} \ a_{23})$  enthält die zu  $\Omega_k^{10} \cup \Omega_k^{01}$  und  $(a_{31} \ a_{32} \ a_{33})$  die zu den Grobgitterpunkten  $\Omega_{k+1}$  gehörigen Gleichungen. Da  $A_k$  durch einen 9-Punkte-Stern gegeben ist, sind  $a_{11}$  und  $a_{33}$  diagonal.

### 3.4.6 Explizite Prolongationen im zweidimensionalen Fall

#### Prolongationen mit diagonalen Matrix $\tilde{A}_{11}$

Die einfachste Näherung  $\tilde{A}_k$  für  $A_k$ , die die genannten Forderungen aus dem vorherigen Abschnitt erfüllt, ist durch

$$\tilde{A}_{11} = \text{diag}(A_{11}) \quad \text{und} \quad \tilde{A}_{12} = \begin{pmatrix} \tilde{a}_{13} \\ \tilde{a}_{23} \end{pmatrix}. \quad (3.77)$$

mit geeigneten Matrizen  $\tilde{a}_{13}$  und  $\tilde{a}_{23}$  gegeben. Diese Variante für  $\tilde{A}_k$  läßt sich z.B. dadurch erreichen, daß man Kopplungen zwischen den Unbekannten in  $\Omega_k \setminus \Omega_{k+1}$  mittels linearer Interpolation durch Kopplungen mit Grobgitterpunkten ersetzt. Diese Idee geht auf Reusken zurück [Reu94].

Betrachten wir z.B. einen Gitterpunkt aus  $\Omega^{11}$ . Die Elimination von Kopplungen mit Unbekannten aus  $\Omega_k \setminus \Omega_{k+1}$  erreicht man, indem man den Stern

$$\begin{bmatrix} A_{-1,1} & A_{0,1} & A_{1,1} \\ A_{-1,0} & A_{0,0} & A_{1,0} \\ A_{-1,-1} & A_{0,-1} & A_{1,-1} \end{bmatrix} \quad (3.78)$$

von  $A_k$  durch den Stern

$$\begin{bmatrix} A_{-1,1} + \frac{1}{2}(A_{0,1} + A_{-1,0}) & 0 & A_{1,1} + \frac{1}{2}(A_{0,1} + A_{1,0}) \\ 0 & A_{0,0} & 0 \\ A_{-1,-1} + \frac{1}{2}(A_{0,-1} + A_{-1,0}) & 0 & A_{1,-1} + \frac{1}{2}(A_{0,-1} + A_{1,0}) \end{bmatrix} \quad (3.79)$$

ersetzt. In diesem sind zusätzlich die annullierten Verbindungen durch Interpolationen von Grobgitterkopplungen ersetzt. Dies führt man analog für die Feingitterpunkte aus  $\Omega^{11} \cup \Omega^{11}$  aus. Reusken bezeichnet diese Methode als „Lumping“. Der Algorithmus hierzu lautet:

**Algorithmus 3.2 (Lumping).** Gegeben sei das lineare Gleichungssystem

$$A_k u_k = b_k \quad \Leftrightarrow \quad \sum_{j=1}^{N_k} a_{ij} u_j = b_i \quad \text{für } i = 1, \dots, N_k \quad (3.80)$$

auf dem Gitter  $\Omega_k$ . Sei  $F$  bzw.  $C$  die Indexmenge der Gitterpunkte  $x_i$  aus  $\Omega_k \setminus \Omega_{k+1}$  bzw.  $\Omega_{k+1}$ . Die neuen Matrixeinträge  $\tilde{a}_{ij}$  berechnen sich wie folgt:

Schleife: Für  $i \in F$  ersetze in der Gleichung  $\sum_{j=1}^{N_k} a_{ij} u_j = b_i$  alle Unbekannten  $u_j$  mit  $j \neq i$  und  $j \in F$  durch

$$u_j \rightarrow \frac{1}{n} \sum_{l \in C} d_{jl} u_l. \quad (3.81)$$

Die Koeffizienten  $d_{jl}$  sind durch

$$d_{jl} := \begin{cases} 1 & \text{für } a_{jl} \neq 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.82)$$

definiert. Die Summe in (3.81) läuft somit über alle Nachbarn  $x_l$  von  $x_j$  mit  $l \notin F$ .  $n := \sum_{l \in C} d_{jl}$  ist die Anzahl solcher Nachbarn.

Schreibe die neue Gleichung in der Form  $\sum_{j=1}^{N_k} \tilde{a}_{ij} u_j = b_i$ .

Ein modifizierter Algorithmus, der zusätzlich die Kopplungsstärke der zu elimierenden Feingitterpunkte zu den Grobgitterpunkten berücksichtigt, kann bei Wagner gefunden werden [Wag93]:

**Algorithmus 3.3 (Matrixgewichtetes Lumping).** Gegeben sei das lineare Gleichungssystem

$$A_k u_k = b_k \quad \Leftrightarrow \quad \sum_{j=1}^{N_k} a_{ij} u_j = b_i \quad \text{für } i = 1, \dots, N_k \quad (3.83)$$

auf dem Gitter  $\Omega_k$ . Sei  $F$  bzw.  $C$  die Indexmenge der Gitterpunkte  $x_i$  aus  $\Omega_k \setminus \Omega_{k+1}$  bzw.  $\Omega_{k+1}$ . Die neuen Matrixeinträge  $\tilde{a}_{ij}$  berechnen sich wie folgt:

Schleife: Für  $i \in F$  ersetze in der Gleichung  $\sum_{j=1}^{N_k} a_{ij} u_j = b_i$  alle  $u_j$  mit  $j \neq i$  und  $j \in F$

- für  $|\sum_{l \in C} a_{jl} d_{jl}| > \epsilon a_{ii}$  durch

$$u_j \rightarrow \frac{\sum_{l \in C} a_{jl} d_{jl} u_l}{\sum_{l \in C} a_{jl} d_{jl}}. \quad (3.84)$$

- für  $|\sum_{l \in C} a_{jl} d_{jl}| \leq \epsilon a_{ii}$  durch

$$u_j \rightarrow \frac{\sum_{l \in C} d_{jl} u_l}{\sum_{l \in C} d_{jl}}. \quad (3.85)$$

Schreibe die neue Gleichung in der Form  $\sum_{j=1}^{N_k} \tilde{a}_{ij} u_j = b_i$ .

Die Koeffizienten  $d_{jl}$  sind wie im Algorithmus 3.2 definiert. Falls  $\epsilon$  nicht spezifiziert wird, setzen wir  $\epsilon = 10^{-3}$ .

*Bemerkung 3.16.* Für die nach Definition 3.5 aus den Algorithmen 3.2 und 3.3 resultierenden Transferoperatoren gilt nicht  $\tilde{r}_k^{k+1} = (\tilde{p}_{k+1}^k)^t$ .



*Bemerkung 3.17.* Aus der Darstellbarkeit von  $A_k$  durch einen 9-Punkte-Stern folgt, daß  $A_{k+1} = \tilde{r}_k^{k+1} A_k \tilde{p}_{k+1}^k$  mit den matrixabhängigen Transferoperatoren nach Algorithmus 3.2 oder Algorithmus 3.3 wieder durch einen 9-Punkte-Stern gegeben ist [Wag93].

Betrachtet man die oben definierte Prolongation unter dem Gesichtspunkt, die Gitterpunkte  $\Omega^{00} \cup \Omega^{10} \cup \Omega^{01}$  durch die lokale Inverse der Feingittermatrix zu prolongieren, findet man:

$$(I \ 0) A_k \tilde{p}_{k+1}^k = \begin{pmatrix} a_{13} - a_{11} \tilde{a}_{11}^{-1} \tilde{a}_{12} - a_{12} \tilde{a}_{22}^{-1} \tilde{a}_{23} \\ a_{23} - a_{21} \tilde{a}_{11}^{-1} \tilde{a}_{13} - a_{22} \tilde{a}_{22}^{-1} \tilde{a}_{23} \end{pmatrix} \neq 0. \quad (3.86)$$

Dies zeigt, daß i.a. diese Prolongationen nicht optimal sind, insbesondere dann nicht, wenn  $A_{11}$  aus  $A_k$  nicht diagonal ist<sup>4</sup>.

*Bemerkung 3.18.* Die Transferarten nach Algorithmus 3.2 und 3.3 benutzt das sogenannte Schurkomplement-Mehrgitterverfahren [Reu94, Wag93, WKW97], das wir im Abschnitt 3.4.9 vorstellen.

### Prolongationen mit Dreiecksmatrix $\tilde{A}_{11}$

Eine andere Möglichkeit, eine Näherung  $\tilde{A}_k$  für  $A_k$  anzugeben, bietet der Ansatz einer Dreiecksmatrix für  $\tilde{A}_{11}$ . Wir wählen im folgenden

$$\tilde{A}_{11} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ 0 & \tilde{a}_{22} \end{pmatrix} \quad (3.87)$$

mit einer geeigneten Diagonalmatrix  $\tilde{a}_{22}$ . Dann ergibt sich

$$\tilde{A}_{11}^{-1} = \begin{pmatrix} a_{11}^{-1} & -a_{11}^{-1} a_{12} \tilde{a}_{22}^{-1} \\ 0 & \tilde{a}_{22}^{-1} \end{pmatrix}, \quad (3.88)$$

und man kann die Prolongation

$$\tilde{p}_{k+1}^k = \begin{pmatrix} -\tilde{A}_{11}^{-1} \begin{pmatrix} a_{13} \\ \tilde{a}_{23} \end{pmatrix} \\ I \end{pmatrix} \quad (3.89)$$

als matrixabhängige Prolongation der defektbehafteten Diskretisierung

$$\tilde{A}_k = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & \tilde{a}_{22} & \tilde{a}_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \quad (3.90)$$

definieren. Wir setzen in  $\tilde{A}_k$  zusätzlich  $a_{32} = (\tilde{a}_{23})^t$  und erhalten damit für die matrixabhängige Restriktion aus Definition 3.5:  $\tilde{r}_k^{k+1} = (\tilde{p}_{k+1}^k)^t$ .

Bezüglich der Forderung, die Prolongation aus der lokalen Inversen zu konstruieren, erhalten wir:

$$(I \ 0) A_k \tilde{p}_{k+1}^k = \begin{pmatrix} 0 \\ -a_{21} a_{11}^{-1} (a_{13} - a_{12} \tilde{a}_{22}^{-1} \tilde{a}_{23}) + (I - \tilde{a}_{22}^{-1} a_{22}) a_{23} \end{pmatrix}. \quad (3.91)$$

In den Punkten von  $\Omega^{11}$  wird die Prolongation also als Inverse von  $A_k$  gewählt, ein Fehler wird nur in den Punkten von  $\Omega^{10} \cup \Omega^{01}$  induziert.

In der Literatur findet man verschiedene Möglichkeiten für eine Prolongation nach Gl. (3.89). Wir geben drei an. Den Stern von  $A_k$  bezeichnen wir dabei stets wie in (3.78).

**Einfache Prolongation nach Alcouffe et al.** [ABDP81]: Hier gilt  $\tilde{a}_{23} = a_{23}$  und  $\tilde{a}_{22} = \text{diag}(a_{22})$ . Dies entspricht folgenden veränderten Sternen von  $\tilde{A}_k$  für die Gitterpunkte aus  $\Omega^{10}$  und  $\Omega^{01}$ :

$$\text{für } \Omega^{10} : \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ A_{-1,0} & A_{0,0} & A_{1,0} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{für } \Omega^{01} : \begin{bmatrix} 0 & A_{0,1} & 0 \\ 0 & A_{0,0} & 0 \\ 0 & A_{0,-1} & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.92)$$

<sup>4</sup>Bei einer Schachbrett-Numerierung der Gitterpunkte und einem 5-Punkte-Stern wäre z.B.  $A_{11}$  diagonal.

**Blockweise Prolongation nach Alcouffe et al.** [ABDP81, Den82a, Den82b]: Die modifizierten Matrizen  $\tilde{a}_{22}$  und  $\tilde{a}_{23}$  erhält man durch folgende Substitutionen der Sterne von  $\tilde{A}_k$ :

$$\text{für } \Omega^{10} : \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sum'_i A_{-1,i} & \sum'_i A_{0,i} & \sum'_i A_{1,i} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{für } \Omega^{01} : \begin{bmatrix} 0 & \sum'_i A_{i,1} & 0 \\ 0 & \sum'_i A_{i,0} & 0 \\ 0 & \sum'_i A_{i,-1} & 0 \end{bmatrix} \quad (3.93)$$

mit  $\sum'_i := \sum_{i=-1}^1$ .

**Prolongation nach de Zeeuw** [Zee90]: Definiert man

$$\begin{aligned} d_n &:= \max\left(|\sum'_i A_{i,1}|, |A_{-1,1}|, |A_{1,1}|\right), \\ d_s &:= \max\left(|\sum'_i A_{i,-1}|, |A_{-1,-1}|, |A_{1,-1}|\right), \\ d_o &:= \max\left(|\sum'_i A_{-1,i}|, |A_{-1,1}|, |A_{-1,-1}|\right), \\ d_w &:= \max\left(|\sum'_i A_{1,i}|, |A_{1,-1}|, |A_{1,1}|\right) \end{aligned}$$

und ersetzt die Sterne in  $\Omega^{10}$  und  $\Omega^{01}$  mit den folgenden Substitutionen

$$\text{für } \Omega^{10} : \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ d_w & d_w + d_o & d_o \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{für } \Omega^{01} : \begin{bmatrix} 0 & d_n & 0 \\ 0 & d_n + d_s & 0 \\ 0 & d_s & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.94)$$

so erhält man den in [Zee90] beschriebenen Prolongationsoperator, der in einem allgemeineren Rahmen für Konvektions-Diffusions-Probleme eingeführt wird.

*Bemerkung 3.19.* Für (3.93) und (3.94) werden die Prolongationen in den Punkten aus  $\Omega^{10} \cup \Omega^{01}$  durch geeignetes Aufsummieren der Spalten bzw. Zeilen des 9-Punkte-Sterns auf die Prolongation im eindimensionalen Fall, Gl. (3.64), für einen 3-Punkte-Stern zurückgeführt. Die Prolongationsgewichte entstehen damit durch arithmetisches und harmonisches Mitteln des 9-Punkte-Sterns. In Gitterpunkten aus  $\Omega^{00}$  ist die Prolongation immer als Identität definiert.

*Bemerkung 3.20.* Durch das Galerkinprodukt,  $A_{k+1} = \tilde{r}_k^{k+1} A_k \tilde{p}_{k+1}^k$ , mit den beschriebenen matrixabhängigen Transferabbildungen bleibt die Eigenschaft, daß  $A_k$  durch einen 9-Punkte-Stern gegeben ist, für  $A_{k+1}$  erhalten. Die Transferabbildungen können daher rekursiv für  $A_{k+1}$  gebildet werden.

*Bemerkung 3.21.* Im allgemeinen kann die Gültigkeit der Approximationseigenschaft (3.37) unter Verwendung matrixabhängiger Prolongationen nicht mehr gezeigt werden, so daß man für solche Mehrgitterverfahren keinen theoretischen Konvergenznachweis hat.

### 3.4.7 Algebraische Verfahren (AMG)

Wir betrachten in dieser Arbeit verschiedene algebraische Mehrgitterverfahren bzw. Mischformen: das Ruge-Stüben-Verfahren (RS), das Schurkomplement-Verfahren (SC) und das Coarsening-Verfahren (CN). Außerdem benutzen wir in Kapitel 6 Mehrgitterverfahren, bei denen zur Berechnung des Grobgitteroperators einfache Upscalingmethoden verwendet werden.

Das Ruge-Stüben- und Schurkomplement-Verfahren greifen auf das Galerkinprodukt zurück, um die Grobgitteroperatoren zu bilden. Der Grobgitteroperator beim Coarsening-Verfahren hingegen beruht auf einer Diskretisierung auf gröberen Gittern. Das Ruge-Stüben- und Coarsening-Verfahren wählen den Grobgitteroperator so, daß er im Zusammenspiel mit dem Glätter effizient arbeitet. Das heißt, der Grobgitteroperator wird so konstruiert, daß er das vom Glätter nicht reduzierte Fehlerspektrum approximiert. Das Coarsening-Verfahren bewerkstelligt dies durch das Verwenden der Coarse Graining Methode für die kontinuierlichen Probleme auf den Grobgittern. Das Ruge-Stüben-Verfahren erreicht dies, indem es die gröberen Gitter problemangepaßt konstruiert. Beim Schurkomplement-Verfahren wird der Grobgitteroperator nur durch das Verwenden matrixabhängiger Transferoperatoren problemangepaßt bestimmt. Insofern gehört es nicht zu den reinen AMG-Verfahren. Durch seine Anlehnung an eine Block-Gauß-Elimination ist sein Algorithmus aber modifiziert, so daß das Verfahren auch kein klassisches Mehrgitterverfahren darstellt.

Das Coarsening- und Schurkomplement-Verfahren benutzen ein geometrisches Vergrößern der Gitter. Beim Ruge-Stüben-Verfahren werden die gröberen Gitter unabhängig von der Geometrie des Problems allein aus Informationen aus der Matrix erzeugt. Dies liefert nur in speziellen Fällen eine geometrische Vergrößerung. Auf das Coarsening-Mehrgitterverfahren gehen wir im Kapitel 5 ein.

### 3.4.8 Das Ruge-Stüben-Verfahren

Für Probleme wie etwa anisotrope Medien ist die Gitterhierarchie, die im klassischen Mehrgitterverfahren angewandt wird, nicht optimal. Das Ruge-Stüben-Verfahren besitzt dagegen die Eigenschaft, die gröberen Gitter mit einer Vergrößerungsstrategie problemangepaßt zu wählen. Da geometrische Informationen über die gröberen Gitter fehlen, benutzt es auch matrixabhängige Transferoperatoren.

Die Untersuchung anisotroper Probleme zeigt, daß von einfachen Iterationsverfahren, wie Jacobi- oder Gauß-Seidel-Verfahren, stark oszillierende Fehleranteile in Richtung großer Kopplungen sehr gut und in Richtung sehr kleiner Kopplungen der Unbekannten kaum geglättet werden. Aus diesem Grund ist eine Interpolation in Richtung der schwachen Kopplung nicht sinnvoll und muß vermieden werden, wenn man einfache Iterationsverfahren benutzt. Deshalb vergrößert das Ruge-Stüben-Verfahren die Gitter vorzugsweise in Richtung der starken Kopplung und nicht in Richtung der schwachen.

*Bemerkung 3.22.* Für ein strukturiertes Gitter und einer Anisotropie in einer Richtung bezeichnet man dies als „Semi-Coarsening“.

*Bemerkung 3.23.* Jedes algebraische Mehrgitterverfahren durchläuft vor der Mehrgitteriteration eine Vorbereitungs- oder sogenannte „Setup“-Phase, um die Mehrgitter-Komponenten bereitzustellen. Das Ruge-Stüben-Verfahren konstruiert darin die Gitterhierarchie durch Vergrößerung und berechnet die Transferoperatoren und die Grobgitteroperatoren durch das Galerkinprodukt.

Der Mehrgitter-Algorithmus des Ruge-Stüben-Verfahrens lautet dann unter der Voraussetzung, daß man eine Gitterhierarchie  $\Omega_{k+1} \subset \Omega_k$ ,  $k = 0, \dots, J-1$ , Transferoperatoren  $p_{k+1}^k, r_k^{k+1}$ , Grobgittermatrizen  $A_k$  und Glätter  $S_k$  auf  $\Omega_k$  hat, analog zum klassischen Mehrgitter-Algorithmus 3.1.

Wir orientieren uns im weiteren an der Originalarbeit von Ruge und Stüben [RS87], um die Ideen darzustellen.

### Algebraische Glattheit

Sei  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  symmetrisch, positiv definit,  $D := \text{diag}(A)$ ,  $S$  ein Glätter und seien die diskreten Normen

$$\|u\|_{h^i}^2 := (u, u)_{h^i}, \quad \text{für } u \in \mathbb{R}^n, i = 1, 2, \quad (3.95)$$

durch die Skalarprodukte  $(u, v)_{h^1} := (Au, v)$  und  $(u, v)_{h^2} := (D^{-1}Au, Av)$  definiert.  $(\cdot, \cdot)$  sei das euklidische Skalarprodukt.

Einen Fehler  $e \in \mathbb{R}^n$  bezeichnet man nun im algebraischen Sinn glatt, falls er sich durch Anwenden des Glätters  $S$  nicht mehr verändert:

$$\|Se\|_{h^1} \approx \|e\|_{h^1}. \quad (3.96)$$

Abhängig von der Matrix  $A$  kann ein algebraisch glatter Fehler noch sehr stark auf einem geometrischen Gitter oszillieren. Für einfache Iterationsverfahren, wie z.B. das Gauß-Seidel-Verfahren, findet man

$$\|Se\|_{h^1}^2 \leq \|e\|_{h^1}^2 - \alpha \|e\|_{h^2}^2 \quad (3.97)$$

mit  $\alpha > 0$ , z.B.  $\alpha = 1/4$  für das Gauß-Seidel-Verfahren. Damit muß ein glatter Fehler  $\|e\|_{h^2} \ll \|e\|_{h^1}$  genügen. Mit der Cauchy-Schwarz-Ungleichung ergibt sich

$$\begin{aligned} \|e\|_{h^1}^2 &= (Ae, e) = (D^{-1/2}Ae, D^{1/2}e) \\ &\leq \|D^{-1/2}Ae\| \|D^{1/2}e\| = \|e\|_{h^2} (De, e)^{1/2}, \end{aligned}$$

so daß  $\|e\|_{h^2} \ll \|e\|_{h^1}$  die Bedingung  $\|e\|_{h^1}^2 \ll (De, e)$  impliziert:

$$(Ae, e) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} (e_i - e_j)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} e_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} e_j^2 \quad (3.98)$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} (e_i - e_j)^2 + \sum_{i=1}^n e_i^2 \sum_{j=1}^n a_{ij} \ll \sum_{i=1}^n a_{ii} e_i^2. \quad (3.99)$$

Für den Fall, daß  $\sum_{i \neq j} |a_{ij}| \approx a_{ii}$  ist, bedeutet das für eine feste Fehlerkomponente  $e_i$ :

$$\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} (-a_{ij}) (e_i - e_j)^2 \ll a_{ii} e_i^2, \quad (3.100)$$

$$\sum_{j \neq i} \frac{(-a_{ij}) (e_i - e_j)^2}{a_{ii} e_i^2} \ll 2. \quad (3.101)$$

Ein algebraisch glatter Fehler variiert also wenig in der Richtung von starken Kopplungen, d.h. von  $e_i$  zu  $e_j$ , wenn  $\frac{|a_{ij}|}{a_{ii}}$  sehr groß ist. Dies gibt ein Kriterium, um starke und schwache Verbindungen im Kontext von algebraischen Mehrgitterverfahren zu definieren und damit eine Vergrößerungsstrategie zu entwickeln.

**Definition 3.6.** Die Menge  $V^{(k)} := \{v_1, \dots, v_{n_k}\}$  sei im folgenden die Menge der Unbekannten, wobei  $v_i$  die Unbekannte am Gitterpunkt  $x_i \in \Omega_k$  sei. Wir zerlegen  $V^{(k)}$  in die disjunkten Mengen  $C^{(k)}$  der C-Unbekannten und  $F^{(k)}$  der F-Unbekannten:  $V^{(k)} = C^{(k)} \cup F^{(k)}$ . Die C-Unbekannten bilden das gröbere Gitter  $\Omega_{k+1}$ . Beziehen wir uns auf ein Level, vernachlässigen wir wieder den Index  $k$ . Wir führen die Notation ein:

$$\sum_{v_j \in C} \quad \text{oder} \quad \sum_{v_i \in F} \quad \text{anstelle von} \quad \sum_{j \text{ mit } v_j \in C} \quad \text{oder} \quad \sum_{i \text{ mit } v_i \in F} .$$

**Vergrößerungsstrategie**

Für die Vergrößerungsstrategie ist die Idee der starken Verbindung wichtig.

**Definition 3.7.** Eine Unbekannte  $v_i \in V$  ist stark verbunden mit einer Unbekannten  $v_j \in V$  bezüglich der Matrix  $A$ , wenn

$$-a_{ij} \geq \theta \max_{l \neq i} (-a_{il}). \quad (3.102)$$

Der Wert von  $\theta \in ]0, 1]$  ist dabei ein fester Parameter.

$N_i$  bzw.  $N_i^s$  bezeichnet die Menge aller Nachbarn bzw. die Menge aller stark verbundenen Nachbarn von  $v_i$ ,

$$N_i := \{v_j \in V \mid j \neq i, a_{ij} \neq 0\}, \quad (3.103)$$

$$N_i^s := \{v_j \in N_i \mid -a_{ij} \geq \theta \max_{l \neq i} (-a_{il})\}. \quad (3.104)$$

Die Menge von Unbekannten, die mit  $v_i$  stark verbunden sind, bezeichnen wir  $(N_i^s)^t := \{v_j \in V \mid v_i \in N_j^s\}$ . Die Interpolationsunbekannten  $C_i$  sind die starken C-Unbekannten in der Nachbarschaft von  $v_i$ :

$$C_i := N_i^s \cap C. \quad (3.105)$$

Die Menge der Nicht-Interpolationsunbekannten  $D_i := N_i \setminus C_i$  wird in die starken Unbekannten  $D_i^s$  und die schwachen  $D_i^w$  aufgeteilt:

$$D_i^s := D_i \cap N_i^s, \quad D_i^w := D_i \setminus D_i^s. \quad (3.106)$$

*Bemerkung 3.24.* Wenn  $\theta$  aus der Bedingung (3.102) nicht weiter spezifiziert ist, wählen wir  $\theta = 1/4$ .

Der Vergrößerungsalgorithmus orientiert sich an den folgenden Kriterien, um eine möglichst gute Interpolation, aber auch eine vernünftige numerische Komplexität zu gewährleisten:

1. Für jede Unbekannte  $v_i \in F$  sollte entweder  $v_j \in N_i^s$  in  $C$  sein, oder  $v_j$  sollte wenigstens mit einer Unbekannten aus  $C_i$  stark verbunden sein.
2.  $C$  sollte eine möglichst große Menge von Unbekannten sein, die die Eigenschaft hat, daß keine zwei C-Unbekannten stark miteinander verbunden sind.

Der Vergrößerungsalgorithmus, um die Unbekannten in C- und F-Unbekannten aufzuteilen, besteht aus zwei Schritten. Im ersten Schritt erfolgt eine Aufteilung der Unbekannten, so daß die C-Unbekannten gleichförmig über das Gitter verteilt sind. Damit wird dem zweiten Kriterium Rechnung getragen.

Im zweiten Schritt werden die versuchsweisen F-Unbekannten dann getestet, ob sie das erste Kriterium erfüllen, das strikt eingehalten werden soll. F-Unbekannte, die es nicht erfüllen, werden zu C-Unbekannten.

**Algorithmus 3.4 (RS-Vergrößerung 1).** Die Matrix  $A$  und die Menge der Unbekannten  $V = \{v_1, \dots, v_n\}$  sei bekannt:

Setze  $C = F = \emptyset$ ,  $U = V$ .

Schleife: Für  $i = 1, \dots, n$ :

$$z_i = |(N_i^s)^t|.$$

Schleife: Solange  $U \neq \emptyset$ :

Hole  $v_i \in U$  mit  $z_i$  maximal.

Setze  $C = C \cup \{v_i\}$ ,  $U = U \setminus \{v_i\}$ .

Schleife: Für alle  $v_j \in (N_i^s)^t \cap U$ :

Setze  $F = F \cup \{v_j\}$ ,  $U = U \setminus \{v_j\}$ .

Schleife: Für alle  $v_k \in N_j^s \cap U$ :

$$z_k = z_k + 1.$$

Schleife: Für alle  $v_j \in N_i^s \cap U$ :

$$z_j = z_j - 1.$$

In Algorithmus 3.4 werden anfänglich solche Unbekannte zu C-Unbekannten, für die es viele, mit ihnen stark verbundene, Unbekannte gibt. Danach wählt man solche Unbekannte als C-Unbekannten, von denen viele F-Unbekannte abhängen. Algorithmus 3.4 garantiert, daß jede F-Unbekannte wenigstens eine starke Verbindung zu einer C-Unbekannten hat.

**Algorithmus 3.5 (RS-Vergrößerung 2).** Eine versuchsweise Aufteilung in C- und F-Unbekannte nach Algorithmus 3.4 sei gegeben, dann erhält man die endgültige Aufteilung wie folgt:

Setze  $T = \emptyset$ .  
 Schleife: Solange  $F \setminus T \neq \emptyset$ :  
   Hole  $v_i \in F \setminus T$ .  
   Setze  $T = T \cup \{v_i\}$ , ende = 0.  
   Setze  $C_i = N_i^s \cap C$ ,  $D_i^s = N_i^s \setminus C_i$ ,  $D_i^w = N_i \setminus N_i^s$ ,  $\overline{C}_i = \emptyset$ .  
   Schleife 1: Solange ende = 0:  
     Schleife 2: Für alle  $v_k \in D_i^s$ :  
       Wenn  $N_k^s \cap C_i = \emptyset$   
         Wenn  $\overline{C}_i \neq \emptyset$   
           Setze  $C = C \cup \{v_i\}$ ,  $F = F \setminus \{v_i\}$ .  
           ende = 1.  
           Gehe zu Schleife 1.  
       Sonst  
         Setze  $\overline{C}_i = \{v_k\}$ ,  $C_i = C_i \cup \{v_k\}$ ,  $D_i^s = D_i^s \setminus \{v_k\}$ .  
         Gehe zu Schleife 1.  
     ende = 1.  
   Wenn  $v_i \in F$   
     Setze  $C = C \cup \overline{C}_i$ ,  $F = F \setminus \overline{C}_i$ .

In Algorithmus 3.5 wird sukzessive jede F-Unbekannte hinsichtlich des ersten Kriteriums geprüft. Wenn eine Unbekannte  $v_k \in D_i^s$  gefunden wird, die nicht stark mit einer C-Unbekannten in  $C_i$  verbunden ist, wird  $v_k$  probeweise in den Mengen  $C_i$  und  $\overline{C}_i$  aufgenommen und  $v_i$  neu getestet. Falls das erste Kriterium jetzt erfüllt ist, wird  $v_k$  zu einer C-Unbekannten. Falls dies nicht der Fall ist, wird  $v_i$  als C-Unbekannte markiert und die nächste F-Unbekannte wird geprüft. Der Algorithmus endet, wenn alle F-Unbekannte in der Menge  $T$  der geprüften Unbekannten sind.

## Interpolation

Da die Gitter beim Ruge-Stüben-Verfahren nicht auf geometrisch vergrößerten Gittern beruhen, kann die Prolongation nicht durch einen Stern angegeben werden. Die lokale Interpolation hängt außerdem sehr davon ab, wie die Gitter levelabhängig vom Vergrößerungsalgorithmus erzeugt werden. Man definiert die Interpolation  $p_{k+1}^k$  von  $e_{k+1} \in \mathbb{R}^{n_{k+1}}$  vom groben zum feinen Gitter durch:

$$(p_{k+1}^k e_{k+1})_i := \sum_{v_j \in C^{(k+1)}} w_{ij} (e_{k+1})_j \quad \text{mit } v_i \in V^{(k)}. \quad (3.107)$$

In den C-Unbekannten ist die Prolongation stets als Identität definiert, und die Restriktion ist  $(p_{k+1}^k)^t$ .

Die Interpolationsgewichte, die im Ruge-Stüben-Verfahren benutzt werden und für die in einer etwas vereinfachten Form die Eigenschaft (3.114) gezeigt werden kann (Theorem 5.5 in [RS87]), lauten:

$$w_{ij} = \delta_{ij} \quad \text{für } v_i \in C^{(k)}, v_j \in C^{(k+1)}, \quad (3.108)$$

$$w_{ij} = 0 \quad \text{für } v_i \in F^{(k)}, v_j \in C^{(k+1)} \setminus C_i^{(k)}, \quad (3.109)$$

und

$$w_{ij} = -\frac{1}{\tilde{a}_{ii}} \left( a_{ij} + \sum_{v_l \in D_i^s} \frac{a_{il} a_{lj}}{\sum_{v_m \in C_i} a_{lm}} \right), \quad (3.110)$$

$$\tilde{a}_{ii} := a_{ii} + \sum_{v_l \in D_i^w} a_{il}, \quad \text{für } v_i \in F^{(k)}, v_j \in C_i^{(k)}. \quad (3.111)$$

*Bemerkung 3.25.* Die Prolongation kann im Rahmen der Darstellung aus Abschnitt 3.4.5 aus einer Diskretisierungsmatrix

$$\tilde{A}_k = \begin{pmatrix} \tilde{A}_{11} & \tilde{A}_{12} \\ \tilde{A}_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \quad (3.112)$$

mit diagonalem  $\tilde{A}_{11} \neq \text{diag}(A_{11})$  und  $\tilde{A}_{21} = \tilde{A}_{12}^t$  berechnet werden.

### Konvergenz des Ruge-Stüben-Verfahrens

Wir beschränken uns auf ein Konvergenzresultat für den Zweilevel-Fall mit einem Nachglättungsschritt. Um das Verhalten im allgemeineren Multilevel-Fall zu untersuchen, benötigt man stärkere Voraussetzungen an die Prolongation [Wag99].

Unter der Annahme, daß die Glättungseigenschaft (3.97) gültig ist, ergibt sich eine allgemeine Bedingung (3.114) an die Prolongation  $p_k^{k-1}$ ,  $k = J = 1$ , die eine Abschätzung des Zweilevel-Operators  $\|M_2(0, 1)\|$  erlaubt.

**Theorem 3.2.** *Sei  $A$  symmetrisch, positiv definit,*

$$M_0(0, 1) := S (I - p_1^0 (r_0^1 A p_1^0)^{-1} r_0^1 A), \quad (3.113)$$

$r_0^1 = (p_1^0)^t$  und  $S$  erfülle die Glättungseigenschaft (3.97). Die Interpolation habe vollen Rang und für jedes  $e \in \mathbb{R}^{n_0}$  gelte

$$\min_{\eta \in \mathbb{R}^{n_1}} (D(e - p_1^0 \eta), e - p_1^0 \eta) \leq \beta \|e\|_{h^1}^2 \quad (3.114)$$

mit einem  $\beta > 0$  unabhängig von  $e$ . Dann gilt mit einem  $0 < \alpha \leq \beta$

$$\|M_0(0, 1)\|_{h^1} \leq \sqrt{1 - \frac{\alpha}{\beta}}. \quad (3.115)$$

*Beweis.* Da das Bild von  $T := I - p_1^0 (r_0^1 A p_1^0)^{-1} r_0^1 A$  orthogonal zum Bild von  $p_1^0$  bezüglich des Skalarproduktes  $(\cdot, \cdot)_{h^1}$  ist,  $(T e, p_1^0 \eta)_{h^1} = 0$  für alle  $e \in \mathbb{R}^{n_0}$ , gilt:

$$\|e\|_{h^1}^2 = (A e, e - p_1^0 \eta) \quad \text{für alle } e \in \text{Bild}(T).$$

Damit erhält man

$$\begin{aligned} \|e\|_{h^1}^2 &= (D^{-1/2} A e, D^{1/2} (e - p_1^0 \eta)) \\ &\leq \|D^{-1/2} A e\| \|D^{1/2} (e - p_1^0 \eta)\| \\ &= \|e\|_{h^2} \|D^{1/2} (e - p_1^0 \eta)\|. \end{aligned}$$

Aufgrund (3.114) ergibt sich damit  $\|e\|_{h^1}^2 \leq \beta \|e\|_{h^2}^2$  für alle  $e \in \text{Bild}(T)$ . Damit gilt

$$\|T e\|_{h^1}^2 \leq \beta \|T e\|_{h^2}^2 \quad \text{für alle } e \in \mathbb{R}^{n_0}$$

und schließlich mit (3.97)

$$\begin{aligned} 0 &\leq \|S T e\|_{h^1}^2 \leq \|T e\|_{h^1}^2 - \alpha \|T e\|_{h^2}^2 \\ &\leq \|T e\|_{h^1}^2 - \frac{\alpha}{\beta} \|T e\|_{h^1}^2 \\ &= \left(1 - \frac{\alpha}{\beta}\right) \|T e\|_{h^1}^2 \leq \left(1 - \frac{\alpha}{\beta}\right) \|e\|_{h^1}^2. \end{aligned}$$

□

### 3.4.9 Das Schurkomplement-Mehrgitterverfahren

Die Idee des Schurkomplement-Mehrgitterverfahrens leitet sich aus der Block-Gauß-Elimination eines linearen Gleichungssystems ab, ähnlich wie in Abschnitt 3.4.5 diskutiert. Für

$$A u = b, \quad \text{mit } A \in \mathbb{R}^{n \times n}, u, b \in \mathbb{R}^n, \quad (3.116)$$

mit der Blockdarstellung

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \quad (3.117)$$

ergibt sich die Lösung aus:

$$A_s u_2 = b_2 - A_{21} A_{11}^{-1} b_1, \quad (3.118)$$

$$A_{11} u_1 = b_1 - A_{12} u_2, \quad (3.119)$$

mit dem Schurkomplement  $A_s = A_{22} - A_{21} A_{11}^{-1} A_{12}$ . Wäre  $A_{11}$  leicht zu invertieren und  $A_s$  dünnbesetzt, wäre das Problem leicht zu lösen. Aus diesem Grund ersetzt man im Schurkomplement-Verfahren die Matrix  $A$  durch eine Matrix  $\tilde{A}$ , die eine gute Näherung für  $A$  ist und die genannten Forderungen erfüllt. Entsprechen die Unbekannten in  $u_2$  den Unbekannten auf einem größeren Gitter, wird Gleichung (3.118) auf diesem Gitter gelöst. Dazu kann das Verfahren rekursiv aufgerufen werden. Die Unbekannten in  $u_1$  werden dann nach Gleichung (3.119) aus  $u_2$  berechnet.

Um eine Matrix  $\tilde{A}$  mit den Eigenschaften

- $\tilde{A}^{-1}$  ist eine gute Näherung von  $A^{-1}$ ,
- $\tilde{A}_{11}$  ist leicht zu invertieren,
- $\tilde{A}_s = \tilde{A}_{22} - \tilde{A}_{21} \tilde{A}_{11}^{-1} \tilde{A}_{12}$  ist dünnbesetzt,

zu konstruieren, werden die Algorithmen 3.2 und 3.3 aus Abschnitt 3.4.6 benutzt. Die Algorithmen werden dort zur Berechnung von matrixabhängigen Transferabbildungen verwendet, die auch im Schurkomplement-Verfahren Anwendung finden.

Die Idee des Schurkomplement-Mehrgitterverfahrens geht auf Reusken zurück und wurde von Wagner ausgebaut [Reu94, WKW97].

#### Block-Gauß-Elimination

Wir legen im folgenden die Notationen aus Abschnitt 3.4.8 zugrunde. Insbesondere nehmen wir an, daß die Menge der Unbekannten  $V^{(k)} = \{v_1, \dots, v_{n_k}\}$  wieder in die Mengen  $F^{(k)}$  und  $C^{(k)}$  der F- und C-Unbekannten zerlegt sei.

Die Matrix  $A_k$  sei entsprechend den F- und C-Unbekannten in vier Blöcke zerlegt, bei der die Blockmatrix  $A_{11}$  bzw.  $A_{12}$  den Kopplungen zwischen den F-Unbekannten untereinander bzw. den Kopplungen der F-Unbekannten zu den C-Unbekannten entspricht. Für die Blockmatrix  $A_{22}$  bzw.  $A_{21}$  gilt entsprechendes für die C-Unbekannten.

Aus der Blockdarstellung wird eine modifizierte Matrix  $\tilde{A}_k$ ,

$$A_k = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \tilde{A}_{11} & \tilde{A}_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \tilde{A}_k, \quad (3.120)$$

gewonnen, indem man einen der Lumping-Algorithmen 3.2 oder 3.3 aus Abschnitt 3.4.6 verwendet. Die Blockmatrizen  $\tilde{A}_{11}$  und  $\tilde{A}_{12}$  sind für den Algorithmus 3.3 z.B. durch

$$\tilde{A}_{11} = \text{diag}(A_{11}), \quad (3.121)$$

$$(\tilde{A}_{12})_{ij} = a_{ij} + \sum_{v_l \in D_i} \frac{a_{il} a_{lj}}{\sum_{v_m \in C_i} a_{jm}}, \quad (\epsilon = 0), \quad (3.122)$$



gegeben.

Für das Zweigitterverfahren wird  $\tilde{A}_k$  durch die Block-Elimination exakt invertiert:

$$\tilde{A}_k^{-1} = \begin{pmatrix} I & -\tilde{A}_{11}^{-1}\tilde{A}_{12} \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{A}_{11}^{-1} & 0 \\ 0 & A_s^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ -A_{21}\tilde{A}_{11}^{-1} & I \end{pmatrix} \quad (3.123)$$

mit  $A_s = A_{22} - A_{21}\tilde{A}_{11}^{-1}\tilde{A}_{12}$ . Mit der Definition 3.5 für die matrixabhängigen Transferoperatoren und dem Galerkinprodukt für den Grobgitteroperator,

$$\tilde{p}_{k+1}^k = \begin{pmatrix} -\tilde{A}_{k,11}^{-1}\tilde{A}_{k,12} \\ I \end{pmatrix}, \quad \tilde{r}_k^{k+1} = \begin{pmatrix} -A_{k,21}\tilde{A}_{k,11}^{-1} & I \end{pmatrix}, \quad (3.124)$$

$$A_{k+1} = \tilde{r}_k^{k+1}\tilde{A}_k\tilde{p}_{k+1}^k = A_{k,22} - A_{k,21}\tilde{A}_{k,11}^{-1}\tilde{A}_{k,12}, \quad k = 0 \ (J = 1), \quad (3.125)$$

erhält man dann für die Inverse:

$$\tilde{A}_k^{-1} = \begin{pmatrix} \tilde{A}_{k,11}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \tilde{p}_{k+1}^k A_{k+1}^{-1} \tilde{r}_k^{k+1}, \quad k = 0. \quad (3.126)$$

Das Gleichungssystem

$$\tilde{A}_k u_k = b_k \Leftrightarrow u_k = \tilde{A}_k^{-1} b_k = \begin{pmatrix} \tilde{A}_{k,11}^{-1} b_{k,1} \\ 0 \end{pmatrix} + \tilde{p}_{k+1}^k A_{k+1}^{-1} \tilde{r}_k^{k+1} b_k \quad (3.127)$$

kann dann in zwei Schritten gelöst werden: Zunächst berechnet man auf dem Level  $k + 1$  durch

$$A_{k+1}^{-1} \tilde{r}_k^{k+1} b_k \quad (3.128)$$

die Grobgitterunbekannten  $u_{k,2}$  und dann mit

$$\tilde{A}_{k,11}^{-1} b_{k,1} + (\tilde{p}_{k+1}^k u_{k,2})_1 \quad (3.129)$$

die Feingitterunbekannten in  $u_{k,1}$ . Auf Level  $k + 1$  kann die Methodik wieder angewandt werden. Für das Mehrgitterverfahren,  $J > 1$ , werden die Matrizen  $A_k$  für die größeren Gitter rekursiv berechnet. Es setzt also voraus, daß eine Gitterhierarchie  $\Omega_{k+1} \subset \Omega_k$ ,  $k = 0, \dots, J - 1$ , gegeben sei, auf allen Gittern eine Grob-Fein-Numerierung, d.h. eine Zerlegung in F- und C-Unbekannte, vorhanden sei und  $A_k$  eine entsprechende Blockstruktur wie in (3.120) habe.

### Der Mehrgitter-Algorithmus

**Algorithmus 3.6 (Schurkomplement-Vorbereitung).** Die Matrix  $A_0$  mit einer Blockstruktur wie in (3.120) sei gegeben, und  $\tilde{A}_k$  sei definiert durch (3.121) und (3.122) bzw. Algorithmus 3.2 oder 3.3. Dann lautet die Setup-Phase für das Schurkomplement-Mehrgitterverfahren:

Schleife  $k = 0, \dots, J$ :

Berechne  $\tilde{A}_k$  aus  $A_k$ .

Berechne  $\tilde{p}_{k+1}^k = \begin{pmatrix} -\tilde{A}_{k,11}^{-1}\tilde{A}_{k,12} \\ I \end{pmatrix}$ ,  $\tilde{r}_k^{k+1} = \begin{pmatrix} -A_{k,21}\tilde{A}_{k,11}^{-1} & I \end{pmatrix}$ .

Berechne  $A_{k+1} = \tilde{r}_k^{k+1}\tilde{A}_k\tilde{p}_{k+1}^k = A_{k,22} - A_{k,21}\tilde{A}_{k,11}^{-1}\tilde{A}_{k,12}$ .

*Bemerkung 3.26.* Die Grobgittermatrix  $A_{k+1}$  ist das Schurkomplement von  $\tilde{A}_k$  und kann auch durch das Galerkinprodukt  $A_{k+1} = \tilde{r}_k^{k+1}\tilde{A}_k\tilde{p}_{k+1}^k$  berechnet werden (siehe auch Gl. (3.62)). Für eine symmetrische Matrix  $A_0$  sind die Grobgittermatrizen nicht notwendigerweise wieder symmetrisch.

Das korrespondierende Mehrgitterverfahren kann nun als algebraische Mehrgitteriteration mit dem zusätzlichen Schritt

$$u_{k,1} = u_{k,1} - \tilde{A}_{k,11}^{-1} d_{k,1} \quad (3.130)$$

geschrieben werden.

**Algorithmus 3.7 (Schurkomplement-Verfahren).** Seien  $\tilde{p}_{k+1}^k$ ,  $\tilde{r}_k^{k+1}$  und  $A_k$  gemäß Algorithmus 3.6 berechnet und Glätter  $S_k$  auf  $\Omega_k$  und ein Startvektor  $u_k$  gegeben.

Mehrgitterzyklus  $MGC-SC(k, u_k, b_k) :=$

Wenn  $k = J$

Gib  $u_J := A_J^{-1}b_J$  zurück.

Sonst

Vorglättung:  $u_k := S_k^{\nu_1}(u_k, b_k)$ .

Defektberechnung:  $d_k := A_k u_k - b_k$ .

$u_{k,1} = u_{k,1} - \tilde{A}_{k,11}^{-1} d_{k,1}$ .

Restriktion:  $d_{k+1} := \tilde{r}_k^{k+1} d_k$ .

$e_{k+1} := 0$ .

Grobgitterkorrektur: Schleife  $1, \dots, \gamma$ :

$e_{k+1} := MGC-SC(k+1, e_{k+1}, d_{k+1})$ .

Prolongation:  $u_k := u_k - \tilde{p}_{k+1}^k e_{k+1}$ .

Nachglättung:  $u_k := S_k^{\nu_2}(u_k, b_k)$ .

Gib  $u_k$  zurück.

### Interpolation

Das Schurkomplement-Mehrgitterverfahren benutzt die in Abschnitt 3.4.6 vorgestellten matrix-abhängigen Transferoperatoren, die man mit Algorithmus 3.2 oder Algorithmus 3.3 in der Setup-Phase konstruiert.

### Gitterhierarchie

Die gröberen Gitter  $\Omega_k$ ,  $k > 0$ , für das Schurkomplement-Mehrgitterverfahren können entweder durch geometrisches Vergrößern wie im klassischen Verfahren oder durch eine Vergrößerungsstrategie wie im Ruge-Stüben-Verfahren konstruiert werden. Darauf kommen wir in den numerischen Experimenten nicht zurück. Die nötige Zerlegung in F- und C-Unbekannte der Gitter ergibt sich im ersten Fall durch die Unbekannten von  $\Omega_k \setminus \Omega_{k+1}$  bzw.  $\Omega_{k+1}$  als F- bzw. C-Unbekannte.

## Kapitel 4

# Die Coarse Graining Methode

Der Einfluß eines stark variierenden Permeabilitätsfeldes auf die Lösung der Strömungsgleichung hängt sehr von der Auflösung des betrachteten Feldes ab. Um den Einfluß aller beteiligten Skalen zu erfassen, muß man die Strömungsgleichung auf der feinsten Skala lösen. Da dies aus rechen- technischer Sicht oftmals unmöglich ist und man in der Praxis selten an den feinaufgelösten Größen, sondern oft nur an gemittelten Größen interessiert ist, betrachtet man die Strömungsgleichung auf einer größeren Längenskala, die die feinskaligen Fluktuationen des Permeabilitätsfeldes nicht mehr auflöst. Die Lösung der Strömungsgleichung auf der größeren Skala soll aber die Eigenschaften, die von Interesse sind, korrekt wiedergeben.

Die Methode des Coarse Grainings liefert für dieses Vorgehen eine Modellierung der Strömungs- gleichung auf größeren Längenskalen, die den Einfluß der nicht aufgelösten Skalen berücksichtigt. Dazu wird in der Theorie des Coarse Grainings die feinskalige Strömungsgleichung auf eine be- liebige gewählte Längenskala hochskaliert. Dieses als Upscaling bezeichnete Verfahren beruht auf der Glättung kleinskaliger Fluktuationen durch eine partielle Mittelungsprozedur. Die Mittelungs- prozedur wird im Fourier-Raum mithilfe einer Abschneidefunktion für die hochfrequenten Anteile durchgeführt.

Das Konzept der Coarse Graining Methode wurde ursprünglich für den Bereich der „Large-Eddy“- Simulationen in der Strömungsmechanik und für die Turbulenztheorie entwickelt [Mac94]. Eine kurze Beschreibung ist in dem Leitartikel [BG90] enthalten. In den neueren Arbeiten [Att02] und [AEN02] ist die Coarse Graining Methode auf die Strömung in porösen Medien angewendet worden. In der vorliegenden Arbeit wird sie davon ausgehend weiterentwickelt und ausformuliert.

Wir leiten in diesem Kapitel die hochskalierte Strömungsgleichung ab, in der der Einfluß der subskaligen Fluktuationen des Permeabilitätsfeldes durch einen skalenabhängigen effektiven Permeabilitätstensor  $K^{\text{eff}}$  modelliert wird.

Der gewonnene effektive Permeabilitätstensor kann störungstheoretisch berechnet werden. Durch ein Aufsummieren von Beiträgen aus der Störungstheorie kann das Resultat auch mittels einer Renormierungsgruppen-Analyse erweitert werden. Zusätzlich können Resultate für die Abwei- chung der hochskalierten Lösung der Strömungsgleichung wie auch des hochskalierten Permea- bilitätstensors in niedrigster Ordnung Störungstheorie angegeben werden. Da explizite Resultate im allgemeinen nur im Fall eines isotropen Mediums angegeben werden können, beschränken wir uns oft auf diesen Fall.

In der Theorie des Coarse Grainings wird das feinskalige Permeabilitätsfeld  $K(x)$  als Gaußsches Zu- fallsfeld modelliert, das logarithmisch normalverteilt ist. Die Korrelationsfunktion für ein skalares Feld  $K(x)$  sei in  $d$  Raumdimensionen durch die Fourier-Transformierte  $\overline{\hat{k}(q)\hat{k}(q')} = K_g^2 \hat{w}(q, q') + O(\sigma_f^4)$  mit

$$\hat{w}(q, q') = (2\pi)^d \delta(q + q') \omega(q) = \sigma_f^2 \delta(q + q') \prod_{i=1}^d (2\pi)^{3/2} l_i \exp\left(-\frac{q_i^2 l_i^2}{2}\right) \quad (4.1)$$

wie in Abschnitt 2.4 gegeben. Sie ist im allgemeinen anisotrop.

*Bemerkung 4.1.* Die Coarse Graining Methode ist im Vergleich zu bestehenden Theorien, wie der Homogenisierungstheorie, weitaus weniger rigoros und stellt nur eine approximative Theorie dar. Sie hat aber den Vorteil, daß sie einen skalenabhängigen Operator bzw. skalenabhängigen effektiven Permeabilitätskoeffizienten liefert und im Grenzfall eines Upscalings zu sehr großen Skalen unter bestimmten Voraussetzungen den effektiven Koeffizienten aus der Homogenisierungstheorie liefert. Darauf gehen wir insbesondere im nächsten Kapitel ein.

Im folgenden schreiben wir für die Raumintegration kurz  $\int \dots \equiv \int_{\mathbb{R}^d} \dots$

## 4.1 Coarse Graining der Strömungsgleichung

Anschaulich ist das Ziel der Coarse Graining Methode, eine Funktion über lokale Volumen von der Größe  $\lambda^d$  zu mitteln, um die Funktion auf einer Längenskala zu erhalten, die einer größeren Auflösung entspricht. Im folgenden sei die gröbere Längenskala stets durch die Länge  $\lambda$  charakterisiert. Strukturen mit einer charakteristischen Länge kleiner als  $\lambda$  werden auf dieser Skala nicht mehr aufgelöst.

Motiviert wird die Methode des Coarse Grainings durch folgenden einfachen Zusammenhang: Das Glätten einer Funktion  $u(x)$ , d.h. das Ausmitteln von Fluktuationen von  $u(x)$  über ein typisches Volumen  $\lambda^d$  um  $x$  im Ortsraum, ist etwa durch

$$u(x)|_\lambda = \frac{1}{\int W_\lambda(x, x') d^d x'} \int W_\lambda(x, x') u(x + x') d^d x' \quad (4.2)$$

mit einer geeigneten Glättungsfunktion  $W_\lambda(x, x')$  gegeben. Dabei werden Anteile von  $u$ , deren Wellenlänge kleiner als  $\lambda$  sind, ausgemittelt. Diese Mittelungsprozedur entspricht dem Eliminieren der hochfrequenten Moden von  $u$ , d.h. dem Eliminieren der Funktionswerte von  $\hat{u}$  zu großen Wellenvektoren im Fourier-Raum.

Der Ausgangspunkt der Coarse Graining Theorie ist die Strömungsgleichung (2.62)

$$-\operatorname{div} K(x) \nabla u(x) = f(x) \quad (4.3)$$

mit einer Realisierung eines logarithmisch normalverteilten Zufallsfeldes als skalares Permeabilitätsfeld  $K(x)$ ,  $x \in \mathbb{R}^d$ . Als Randbedingungen nehmen wir Nullrandbedingungen im Unendlichen und im folgenden stets  $K(x) \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d)$ ,  $u(x) \in H_0^2(\mathbb{R}^d)$  an. Wir spalten  $K(x)$ , wie in Abschnitt 2.4.2 geschildert, in seinen Mittelwert  $\bar{K} \equiv \bar{K}(x)$  und die Fluktuationen  $k(x)$  um diesen Mittelwert auf und betrachten die Strömungsgleichung in ihrer Darstellung im Fourier-Raum. Dazu benutzen wir in diesem Kapitel die Aussagen aus dem Paragraphen 2.2 über Fourier-Integrale. Aus (4.3) erhält man durch Fourier-Transformation:

$$\bar{K} q^2 \hat{u}(q) - i q_j \int \hat{k}(q - q') i q'_j \hat{u}(q') d^d q' = \hat{f}(q). \quad (4.4)$$

*Bemerkung 4.2.* Als Fourier-Variablen verwenden wir hier stets  $q, q' \in \mathbb{R}^d$ , um eine Verwechslung mit der Bezeichnung für die Permeabilität auszuschließen, und benutzen Einsteins Summenkonvention: über mehrfach auftretende Indizes wird von 1 bis  $d$  summiert.

Um die Coarse Graining Theorie auch im Rahmen von anisotrop korrelierten Permeabilitätsfeldern verwenden zu können, betrachten wir allgemeiner für  $K(x)$  ein Tensorfeld

$$K : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}, \quad x \mapsto K_{ij}(x) = \bar{K}_{ij} + k_{ij}(x), \quad i, j = 1, \dots, d. \quad (4.5)$$

Dabei sei  $K_{ij}(x) \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d)$  eine Realisierung eines skalaren, lognormalverteilten Zufallsfeldes mit Mittelwert  $\bar{K}_{ij}$  und Fluktuationen  $k_{ij}(x)$ , und  $K_{ij}$  erfülle die Elliptizitätsbedingung

$\sum_{i,j=1}^d K_{ij}(x)\xi_i\xi_j \geq \Lambda|\xi|^2$  für alle  $\xi \in \mathbb{R}^d$ ,  $x \in \mathbb{R}^d$ , mit  $\Lambda > 0$ . Die fouriertransformierte Strömungsgleichung lautet damit:

$$-iq_i \overline{K}_{ij} q_j \hat{u}(q) - iq_i \int \hat{k}_{ij}(q-q') iq'_j \hat{u}(q') d^d q' = \hat{f}(q). \quad (4.6)$$

**Definition 4.1.** Motiviert durch die Wirkungsweise des Ausmittelns von hochfrequenten Moden im Fourier-Raum, führen wir nun Projektoren ein:

$$P_{\lambda,q}^+(\hat{u}(q)) := \begin{cases} \hat{u}(q) & \text{falls } |q_i| > a_s/\lambda \text{ für ein } i \in \{1, \dots, d\} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.7)$$

und

$$P_{\lambda,q}^-(\hat{u}(q)) := \begin{cases} \hat{u}(q) & \text{falls } |q_i| \leq a_s/\lambda \text{ für alle } i \in \{1, \dots, d\} \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \quad (4.8)$$

mit  $P_{\lambda,q}^+(P_{\lambda,q}^+(\hat{u}(q))) = P_{\lambda,q}^+(\hat{u}(q))$  und analog für  $P_{\lambda,q}^-$ . Der Parameter  $a_s \geq 1$  ist eine Konstante.

*Bemerkung 4.3.* Wenn es möglich ist, unterdrücken wir der Übersichtlichkeit halber den Index  $\lambda$  bzw.  $q$  und schreiben oft  $P_{\lambda,q,q'}^+(\hat{u}(q,q'))$  anstelle von  $P_{\lambda,q}^+(P_{\lambda,q'}^+(\hat{u}(q,q')))$ .

Die Fourier-Transformierte von  $u$  kann damit in seine Projektion auf die Funktionswerte für kleine und große Wellenvektoren zerlegt werden:

$$\hat{u}(q) = P_{\lambda}^-(\hat{u}(q)) + P_{\lambda}^+(\hat{u}(q)). \quad (4.9)$$

Wir nehmen an, daß die Greensche Funktion  $\hat{G}(q,q')$  der Strömungsgleichung im Fourier-Raum existiert, und führen sie wie im Abschnitt 2.2.2 ein.  $\hat{G}(q,q')$  löse

$$q_i \overline{K}_{ij} q_j \hat{G}(q,q') - iq_i \int \hat{k}_{ij}(q-q'') iq''_j \hat{G}(q'',q') d^d q'' = \delta(q+q') \quad (4.10)$$

$$\Leftrightarrow \int (q''_i \overline{K}_{ij} q''_j \delta(q-q'') - iq_i \hat{k}_{ij}(q-q'') iq''_j) \hat{G}(q'',q') d^d q'' = \delta(q+q'). \quad (4.11)$$

Im Fall, daß die Fluktuationen  $\hat{k}$  identisch null sind, löst  $\hat{G}(q,q')$  die Gleichung

$$q_i \overline{K}_{ij} q_j \hat{G}(q,q') = \delta(q+q'), \quad (4.12)$$

woraus man  $\hat{G}(q,q') = g(q)\delta(q+q')$  für  $\hat{k} \equiv 0$  mit der

**Definition 4.2.**

$$g(q) = \left( \sum_{i,j=1}^d q_i \overline{K}_{ij} q_j \right)^{-1} \quad (4.13)$$

erhält.

Formal kann man mit Gl. (4.10)  $\hat{G}(q,q')$  in eine Reihe in  $g$  durch Wiedereinsetzen entwickeln:

$$\begin{aligned} \hat{G}(q,q') &= g(q)\delta(q+q') + g(q) iq_i \int \hat{k}_{ij}(q-q'') iq''_j g(q'')\delta(q''+q') d^d q'' \\ &\quad + g(q) iq_i \int \hat{k}_{ij}(q-q'') iq''_j g(q'') iq''_l \times \\ &\quad \int \hat{k}_{lm}(q''-q''') iq'''_m g(q''')\delta(q''' + q') d^d q''' d^d q'' + \dots \end{aligned} \quad (4.14)$$

Mit  $g(q)$  schreibt sich die Lösung  $\hat{u}(q)$  mithilfe (4.6) nun als:

$$\hat{u}(q) = g(q)\hat{f}(q) + g(q) iq_i \int \hat{k}_{ij}(q-q') iq'_j \hat{u}(q') d^d q'. \quad (4.15)$$

Mit den definierten Projektoren erhalten wir

$$P_{\lambda,q}^+(\hat{u}(q)) = P_{\lambda,q}^+(g(q)\hat{f}(q)) + P_{\lambda,q}^+\left(g(q)iq_i \int \hat{k}_{ij}(q-q')iq'_j \hat{u}(q') d^d q'\right) \quad (4.16)$$

und den entsprechenden Ausdruck für  $P_{\lambda,q}^-(\hat{u}(q))$ .

*Bemerkung 4.4.*  $P_{\lambda}^-(\hat{u}(q))$  und  $P_{\lambda}^+(\hat{u}(q))$  sind durch das enthaltene Faltungsintegral über  $\hat{u}(q') = P_{\lambda}^-(\hat{u}(q')) + P_{\lambda}^+(\hat{u}(q'))$  miteinander gekoppelt. Die Idee der Coarse Graining Methode ist, einen geschlossenen Ausdruck für  $P_{\lambda}^-(\hat{u}(q))$  zu erhalten, das nur noch niederfrequente Komponenten enthält und damit im Ortsraum einer Größe entspricht, die keine Oszillationen mit Periodenlängen kleiner als  $\lambda$  enthält. Die Strategie ist daher, die Lösung für  $P_{\lambda}^+(\hat{u}(q))$  in die Gleichung für  $P_{\lambda}^-(\hat{u}(q))$  einzusetzen, um einen geschlossenen Ausdruck für  $P_{\lambda}^-(\hat{u}(q))$  zu erhalten.

**Definition 4.3.** Wir führen dazu die Operatoren  $\mathcal{L}$  und  $\mathcal{R}$  ein:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \hat{u} &:= \int L(q,q') \hat{u}(q') d^d q' \\ &:= \int \left( q'_i \overline{K}_{ij} q'_j \delta(q-q') - iq_i \hat{k}_{ij}(q-q') iq'_j \right) \hat{u}(q') d^d q', \end{aligned} \quad (4.17)$$

$$\mathcal{R} \hat{u} := \int R(q,q') \hat{u}(q') d^d q' := iq_i \int \hat{k}_{ij}(q-q') iq'_j \hat{u}(q') d^d q'. \quad (4.18)$$

Für  $L(q,q'')$  ergibt sich mit Gl. (4.11) die Beziehung

$$\int L(q,q'') \hat{G}(q'',q') d^d q'' = \delta(q+q'). \quad (4.19)$$

Als Inverse von  $L$ , die (4.19) mit  $\frac{1}{(2\pi)^{2d}} \delta(q-q')$  erfüllt, erhalten wir damit:

$$L^{-1}(q,q') := (2\pi)^{-2d} \hat{G}(q,-q').$$

Die Greensche Funktion,  $P_{\lambda,q'}^+(\hat{G}(q,q'))$ , der Strömungsgleichung im Fourier-Raum projiziert auf die hochfrequenten Anteile löst wegen (4.11):

$$\int P_{\lambda,q}^+ \left( q''_i \overline{K}_{ij} q''_j \delta(q-q'') - iq_i \hat{k}_{ij}(q-q'') iq''_j \right) P_{\lambda,q'}^+(\hat{G}(q'',q')) d^d q'' = P_{\lambda,q,q'}^+(\delta(q+q')). \quad (4.20)$$

Damit ergibt sich mit der Definition von  $L$

$$\int P_{\lambda,q}^+(L(q,q'')) P_{\lambda,q'}^+(\hat{G}(q'',q')) d^d q'' = P_{\lambda,q,q'}^+(\delta(q+q')). \quad (4.21)$$

Das heißt, die Inverse von  $P_{\lambda,q}^+(L(q,q''))$  lautet:

$$\left( P_{\lambda,q'}^+(L(q'',q')) \right)^{-1} := (2\pi)^{-2d} P_{\lambda,q'}^+(\hat{G}(q'',-q')). \quad (4.22)$$

Sie definiert den Operator:

$$(P^+ \mathcal{L})^{-1} \hat{u} := \int \left( P_{\lambda,q'}^+(L(q,q')) \right)^{-1} \hat{u}(q') d^d q' = \int P_{\lambda,q'}^+(\hat{G}(q,-q')) \hat{u}(q') d^d q'. \quad (4.23)$$

Aus Gl. (4.6) folgt nun mit den Operatoren  $\mathcal{L}$  und  $\mathcal{R}$ :

$$\mathcal{L} \hat{u} = \hat{f} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{u} = g\hat{f} + g\mathcal{R} \hat{u} \quad (4.24)$$

$$\Rightarrow \quad \mathcal{L} \hat{u} = g^{-1} \hat{u} - \mathcal{R} \hat{u} \quad \text{bzw.} \quad g^{-1} \hat{u} = \hat{f} + \mathcal{R} \hat{u}. \quad (4.25)$$

Damit erhält man für  $P^-(\hat{u})$  und analog für  $P^+(\hat{u})$ :

$$P^-(\hat{u}) = P^-(g\hat{f} + g\mathcal{R}\hat{u}) = P^-(g\hat{f} + g\mathcal{R}(P^-(\hat{u}) + P^+(\hat{u}))), \quad (4.26)$$

$$P^+(\hat{u}) = P^+(g\hat{f} + g\mathcal{R}\hat{u}) = P^+(g\hat{f} + g\mathcal{R}(P^-(\hat{u}) + P^+(\hat{u}))). \quad (4.27)$$

Daraus folgt

$$P^+(g^{-1}\hat{u}) = P^+(\hat{f}) + P^+(\mathcal{R}P^-(\hat{u}) + \mathcal{R}P^+(\hat{u})) \quad (4.28)$$

und

$$P^+(\mathcal{L}P^+(\hat{u})) = P^+(g^{-1}P^+(\hat{u}) - \mathcal{R}P^+(\hat{u})) \quad (4.29)$$

$$\stackrel{(4.28)}{=} P^+(\hat{f}) + P^+(\mathcal{R}P^-(\hat{u})) = P^+(\hat{f} + \mathcal{R}P^-(\hat{u})). \quad (4.30)$$

Das Verwenden des inversen Operators  $(P^+\mathcal{L})^{-1}$  ermöglicht nun, die Lösung der Strömungsgleichung  $P^+(\hat{u})$  in einer kompakten Form zu schreiben:

$$P^+(\hat{u}) = P^+\left((P^+\mathcal{L})^{-1}P^+(\hat{f}) + (P^+\mathcal{L})^{-1}P^+(\mathcal{R}P^-(\hat{u}))\right). \quad (4.31)$$

Damit ist es gelungen, die Lösung  $P^+(\hat{u})$  als Ausdruck in der auf kleine Wellenvektoren projizierte Lösung  $P^-(\hat{u})$  darzustellen.  $P^+(\hat{u})$  kann nun in Gl. (4.26) eingesetzt werden, um einen geschlossenen Ausdruck für  $P^-(\hat{u})$  zu gewinnen:

$$P^-(\hat{u}) = P^-(g\hat{f}) + P^-(g\mathcal{R}P^-(\hat{u})) + P^-(g\mathcal{R}P^+(\hat{u})) \quad (4.32)$$

$$\begin{aligned} &= P^-(g\hat{f}) + P^-(g\mathcal{R}P^-(\hat{u})) \\ &\quad + P^-\left(g\mathcal{R}P^+\left((P^+\mathcal{L})^{-1}P^+(\hat{f}) + (P^+\mathcal{L})^{-1}P^+(\mathcal{R}P^-(\hat{u}))\right)\right) \end{aligned} \quad (4.33)$$

$$\begin{aligned} &= P^-(g\hat{f} + g\mathcal{R}P^-(\hat{u})) + P^-\left(g\mathcal{R}P^+\left((P^+\mathcal{L})^{-1}P^+(\hat{f})\right)\right) \\ &\quad + P^-\left(g\mathcal{R}P^+\left((P^+\mathcal{L})^{-1}P^+(\mathcal{R}P^-(\hat{u}))\right)\right). \end{aligned} \quad (4.34)$$

Die auf Werte zu kleinen Wellenvektoren projizierte Lösung  $P^-(\hat{u})$  läßt sich mit (4.34) in zwei Anteile zerlegen:

$$P_q^-(g(q)^{-1}\hat{u}(q)) = S(q) + Q(q) \quad (4.35)$$

mit

$$S(q) := P_q^-\left(\hat{f}(q) + \int R(q, q')P_{q'}^-(\hat{u}(q'))d^d q'\right) \quad (4.36)$$

und  $Q(q) = Q_1(q) + Q_2(q)$ , wobei

$$\begin{aligned} Q_1(q) &:= P_q^-\left(\int R(q, q')P_{q'}^+\left(\int (P_{q''}^+(L(q', q'')))^{-1}P_{q''}^+(\hat{f}(q''))d^d q''\right)d^d q'\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{2d}}P_q^-\left(\int R(q, q')P_{q'}^+\left(\int P_{q''}^+(\hat{G}(q', -q''))\hat{f}(q'')d^d q''\right)d^d q'\right) \end{aligned} \quad (4.37)$$

und

$$\begin{aligned} Q_2(q) &:= \\ &P_q^-\left(\int R(q, q')P_{q'}^+\left(\int (P_{q''}^+(L(q', q'')))^{-1}P_{q''}^+\left(\int R(q'', q''')P_{q'''}^-(\hat{u}(q'''))d^d q'''\right)d^d q''\right)d^d q'\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{2d}}P_q^-\left(\int R(q, q')P_{q'}^+\left(\int P_{q''}^+(\hat{G}(q', -q''))\int R(q'', q''')P_{q'''}^-(\hat{u}(q'''))d^d q'''\right)d^d q'\right). \end{aligned} \quad (4.38)$$

In der Aufspaltung von  $P_q^-(g(q)^{-1}\hat{u}(q))$  resultiert der Term  $S(q)$  vom Einfluß kleiner Wellenvektoren, da in  $S(q)$  nur  $P_q^-(\hat{f}(q))$  und  $P_{q'}^-(\hat{u}(q'))$  eingehen.  $Q(q)$  beinhaltet hingegen den Einfluß auf die hochskalierte Lösung, der von den Wellenvektoren verursacht wird, die zu den hochfrequenten Anteilen mit  $|q_i| > a_s/\lambda$  gehören.

$Q(q)$  beschreibt also den Einfluß der kleinskaligen Fluktuationen auf die hochskalierte Größe  $P_q^-(g(q)^{-1}\hat{u}(q))$ , die ihrerseits einer lokal volumengemittelten Größe im Ortsraum entspricht. Man kann daher annehmen, daß der Einfluß der subskaligen Fluktuationen durch den Mittelwert gut approximiert wird und die Fluktuationen um diesen klein sind.

Wir spalten daher formal  $Q(q)$  in seinen Ensemblemittelwert und die Fluktuationen

$$Q(q) = Q_1(q) + Q_2(q) = \overline{Q_1(q)} + \delta Q_1(q) + \overline{Q_2(q)} + \delta Q_2(q) \quad (4.39)$$

auf.

*Bemerkung 4.5.* Der Term  $Q_1(q)$  verschwindet, wenn der Quellterm  $\hat{f}(q) \equiv 0$  ist. Er verschwindet aber auch für den Fall, daß der Quellterm  $f(x)$  keine kurzwelligen Anteile enthält.

Da  $f$  von außen vorgegeben wird, enthält es sehr häufig nur Komponenten, die auf Längenskalen größer als  $\lambda$  variieren, d.h. keine Fourier-Komponenten zu großen Wellenvektoren  $q$ . Damit ist die Forderung

$$\hat{f}(q) := P_{\lambda,q}^-(F(q)) \quad (4.40)$$

mit einer geeigneten Funktion  $F(q)$  im Fourier-Raum in vielen Anwendungen physikalisch sinnvoll.

Wir nehmen im folgenden an, daß  $\hat{f}$  stets die Bedingung (4.40) erfüllt. Damit gilt in (4.37) dann:  $P_{q''}^+(\hat{f}(q'')) \equiv 0$ , woraus sich  $Q_1(q) \equiv 0$  ergibt.

Wir erhalten unter dieser Voraussetzung insgesamt

$$P_q^-(g(q)^{-1}\hat{u}(q)) = S(q) + \overline{Q_2(q)} + \delta Q_2(q) \quad (4.41)$$

mit

$$\begin{aligned} \overline{Q_2(q)} &= \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{2d}} P_q^- \left( i q_i \int \overline{\hat{k}_{il}(q-q') i q'_l P_{q'}^+ (P_{q''}^+ (\hat{G}(q', -q'')) i q''_m \hat{k}_{mj}(q''-q) i q_j P_q^- (\hat{u}(q))} d^d q'' d^d q' \right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{2d}} P_q^- \left( i q_i \int \overline{\hat{k}_{il}(q-q') i q'_l P_{q'}^+ (P_{q''}^+ (\hat{G}(q', -q'')) i q''_m \hat{k}_{mj}(q''-q)} d^d q'' d^d q' i q_j \hat{u}(q) \right) \\ &=: P_q^- (i q_i \delta K_{ij}^{\text{eff}}(q, \lambda) i q_j \hat{u}(q)), \end{aligned} \quad (4.42)$$

wobei wir  $R(q, q') = i q_i \hat{k}_{ij}(q-q') i q'_j$  und die Translationsinvarianz durch die Ensemblemittelung im Fourier-Raum,  $q - q''' = 0$ , ausgenutzt haben.

Das definierte  $\delta K^{\text{eff}}(q, \lambda)$  kann als skalenabhängiger, (partieller) effektiver Permeabilitätstensor verstanden werden. Er wird von den kleinskaligen Heterogenitäten induziert, die auf Längenskalen kleiner als  $\lambda$  variieren. Damit erhält man aus Gl. (4.41) und (4.36):

$$\begin{aligned} P_q^-(g(q)^{-1}\hat{u}(q)) &= P_q^-(\hat{f}(q)) + P_q^- \left( i q_i \int \hat{k}_{ij}(q-q') i q'_j P_{q'}^- (\hat{u}(q')) d^d q' \right) \\ &\quad + P_q^- (i q_i \delta K_{ij}^{\text{eff}}(q, \lambda) i q_j \hat{u}(q)) + \delta Q_2(q). \end{aligned} \quad (4.43)$$

*Bemerkung 4.6.* Einer Fourier-Transformation zufolge entspricht  $\delta K^{\text{eff}}(q)$  in (4.43) einem nicht-lokalen Term im Ortsraum, wie er auch in [NO93] gefunden wird. Um  $\delta K^{\text{eff}}(q)$  zu lokalisieren, kann man  $\delta K^{\text{eff}}(q)$  für  $q = 0$  auswerten. Physikalisch sinnvoll ist dies, da in  $P_q^- (i q_i \delta K_{ij}^{\text{eff}}(q, \lambda) i q_j \hat{u}(q))$  nur die Funktionswerte von  $\delta K^{\text{eff}}$  für kleine Wellenzahlvektoren relevant sind. Aus diesem Grund kann man  $\delta K^{\text{eff}}(q)$  darin näherungsweise durch  $\delta K^{\text{eff}}(q = 0)$  ersetzen. Die Approximation

$$\delta K^{\text{eff}}(q) \approx \delta K^{\text{eff}}(q = 0) \quad (4.44)$$



wird wegen der Projektion  $P_{\lambda,q}^-$  in (4.43) auch für zunehmendes  $\lambda$  immer besser, und für ein globales Hochskalieren mit  $\lambda \rightarrow \infty$  ist die Lokalisierung exakt (siehe auch [HC99]).

Motiviert durch diesen Zusammenhang entwickeln wir  $\delta K^{\text{eff}}(q, \lambda)$  in  $P_q^- (iq_i \delta K_{ij}^{\text{eff}}(q, \lambda) iq_j \hat{u}(q))$  in eine Taylorreihe um  $q = 0$ :

$$\delta K_{ij}^{\text{eff}}(q, \lambda) = \delta K_{ij}^{\text{eff}}(0, \lambda) + r_{ij}(q, \lambda), \quad (4.45)$$

mit

$$\begin{aligned} r_{ij}(q, \lambda) &= \sum_{0 < |\alpha| \leq n} \frac{1}{\alpha!} q^\alpha \left( D_{(\xi)}^\alpha \delta K_{ij}^{\text{eff}}(\xi, \lambda) \right)_{\xi=0} \\ &+ \sum_{|\alpha|=n+1} \frac{1}{\alpha!} q^\alpha \left( D_{(\xi)}^\alpha \delta K_{ij}^{\text{eff}}(\xi, \lambda) \right)_{\xi=\theta q} \quad \text{mit } \theta \in [0, 1], \alpha \in \mathbb{N}^d, \\ \alpha! &:= \alpha_1! \cdot \dots \cdot \alpha_d!, \quad q^\alpha := q_1^{\alpha_1} \cdot \dots \cdot q_d^{\alpha_d}, \end{aligned} \quad (4.46)$$

für  $\delta K_{ij}^{\text{eff}} \in C^{n+1}(\mathbb{R}^d)$ . Damit können wir nun für  $P_{\lambda,q}^-(\hat{u}(q))$  mit Gl. (4.43)

$$\begin{aligned} -iq_i (\overline{K}_{ij} + \delta K_{ij}^{\text{eff}}(0, \lambda)) iq_j P_{\lambda,q}^-(\hat{u}(q)) - P_{\lambda,q}^- \left( iq_i \int \hat{k}_{ij}(q - q') iq'_j P_{\lambda,q'}^-(\hat{u}(q')) d^d q' \right) \\ - iq_i r_{ij}(q, \lambda) iq_j P_{\lambda,q}^-(\hat{u}(q)) - \delta Q_2(q) = P_{\lambda,q}^-(\hat{f}(q)) \end{aligned} \quad (4.47)$$

schreiben. Vernachlässigt man die Korrekturterme

$$iq_i r_{ij}(q, \lambda) iq_j P_{\lambda,q}^-(\hat{u}(q)) + \delta Q_2(q),$$

entspricht Gl. (4.47) einer auf die Skala  $\lambda$  hochskalierten Strömungsgleichung im Fourier-Raum,

$$P_{\lambda,q}^- \left( qi (\overline{K}_{ij} + \delta K_{ij}^{\text{eff}}(0, \lambda)) q_j \hat{u}(q) - iq_i \int \hat{k}_{ij}(q - q') iq'_j P_{\lambda,q'}^-(\hat{u}(q')) d^d q' \right) = P_{\lambda,q}^-(\hat{f}(q)), \quad (4.48)$$

in die ein effektiver Permeabilitätstensor

$$\begin{aligned} K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) &:= \overline{K}_{ij} + \delta K_{ij}^{\text{eff}}(0, \lambda) \\ &= \overline{K}_{ij} + \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int \overline{\hat{k}_{il}(-q') iq'_l P_{\lambda,q'}^+ (P_{\lambda,q''}^+(\hat{G}(q', -q'')) iq''_m \hat{k}_{mj}(q''))} d^d q'' d^d q' \end{aligned} \quad (4.49)$$

eingeht. Aufgrund (4.48) lautet damit das auf die Skala  $\lambda$  hochskalierte Permeabilitätsfeld im Fourier-Raum

$$P_{\lambda,q}^- \left( K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) \delta(q - q') + \hat{k}_{ij}(q - q') \right) \quad (4.50)$$

und die hochskalierte Strömungsgleichung im Ortsraum:

$$-div (K^{\text{eff}}(\lambda) + k(x)|_\lambda) \nabla u_\lambda(x) = f(x)|_\lambda \quad (4.51)$$

mit den auf die Skala  $\lambda$  skalierten Größen  $k(x)|_\lambda$  und  $f(x)|_\lambda$  und der Lösung  $u_\lambda(x)$ .

**Satz 4.1.** *Der partielle effektive Permeabilitätstensor  $\delta K^{\text{eff}}(0, \lambda)$  ist für die Korrelationsfunktion  $\hat{w}$  aus (4.1) symmetrisch und negativ definit, falls  $\overline{K}$  diagonal ist und die Fluktuation  $\hat{k}$  eine skalare Größe ist.*

*Beweis.* Für ein lognormalverteiltes Zufallsfeld ist  $g(q)$  aus Gl. (4.13) stets positiv. Setzt man die Störungsreihe für  $\hat{G}(q, q')$  aus (4.14) in  $\delta K^{\text{eff}}$  ein und benutzt, daß gerade  $n$ -Punktkorrelationsfunktionen eines Gaußschen Zufallsfeldes in Produkte der Zweipunktfunktion zerfallen bzw. ungerade  $n$ -Punktfunktionen nicht beitragen, findet man leicht, daß die Diagonalterme von  $\delta K^{\text{eff}}$  negativ sind. Für  $i \neq j$  verschwindet  $\delta K^{\text{eff}}$  aufgrund der Symmetrie von  $g(q)$  und  $\hat{w}(q)$  bezüglich  $q_i$ .  $\square$

*Bemerkung 4.7.* Für  $\lambda = 0$  erhält man aus (4.47) die ursprüngliche Strömungsgleichung im Fourier-Raum (4.6). In diesem Fall gilt:

$$Q(q) \equiv 0, \quad (4.52)$$

wegen der Projektoren  $P^+$  in  $Q(q)$ , und damit:  $P_q^-(g(q)^{-1}\hat{u}(q)) = S(q)$ . Für den effektiven Permeabilitätstensor gilt damit:  $K^{\text{eff}}(\lambda = 0) = \bar{K}$ .

*Bemerkung 4.8.* Falls der Quellterm  $f(x)$  nicht langwellig ist, sondern etwa Konzentrationen im Ortsraum aufweist, erfüllt  $\hat{f}(q)$  i.a. nicht mehr die Bedingung (4.40). Wenn  $\hat{f}$  nicht (4.40) genügt, enthält  $\hat{f}$  in  $Q_1(q)$  Beiträge zu großen Wellenvektoren. In diesem Fall gilt aber wenigstens  $\overline{Q_1(q)} \equiv 0$ . Aufgrund der Ensemblemittelung muß  $\overline{Q_1(q)}$  im Ortsraum nämlich translationsinvariant sein. Daher spielen in  $Q_1$  nur Beiträge eine Rolle, für die  $q - q'' = 0$  gilt. Wegen  $P_q^-$  und  $P_{q''}^+$  in  $Q_1$  gibt es aber keine Beiträge, und man hat  $\overline{Q_1(q)} \equiv 0$ .

## 4.2 Störungstheoretische Berechnung von $K^{\text{eff}}(\lambda)$

Wir gehen in allen theoretischen Berechnungen von einem skalaren Permeabilitätsfeld  $K_{ij}(x) = K(x)\delta_{ij}$  aus. Damit liefert (4.49) für den effektiven Permeabilitätskoeffizienten die

**Definition 4.4.**

$$K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) = \bar{K}_{ij} + \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int \overline{\hat{k}(-q')iq'_i P_{\lambda,q'}^+ (P_{\lambda,q''}^+ (\hat{G}(q', -q''))iq''_j \hat{k}(q''))} d^d q'' d^d q'. \quad (4.53)$$

Für ein schwach heterogenes Permeabilitätsfeld, d.h. für Varianzen  $\sigma_f^2 \ll 1$  in (4.1), ergibt sich für  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  ein explizites Resultat einschließlich der Ordnung  $O(\sigma_f^2)$  in der störungstheoretischen Näherung. In dieser Näherung reduziert man die Greensche Funktion  $\hat{G}(q, q')$  auf die Greensche Funktion der homogenen Strömungsgleichung:

$$\hat{G}(q, q') = g(q)\delta(q + q'). \quad (4.54)$$

### Isotrope Korrelation

Im isotropen Medium vereinfacht sich der effektive Permeabilitätstensor wegen der isotropen Korrelationsfunktion aus (4.1) in  $O(\sigma_f^2)$ ,

$$\omega(q) = \sigma_f^2 (2\pi)^{d/2} l_0^d \exp(-l_0^2 q^2 / 2),$$

und  $g(q) = (\bar{K}q^2)^{-1}$  mit  $\bar{K} = K_g(1 + \frac{\sigma_f^2}{2} + O(\sigma_f^4))$  zu einer skalaren Größe

$$K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) = K^{\text{eff}}(\lambda)\delta_{ij} \quad (4.55)$$

mit

$$K^{\text{eff}}(\lambda) = K_g \left( 1 + \frac{\sigma_f^2}{2} \right) - \int P_{\lambda,q}^+ \left( \omega(q) \frac{K_g q_1^2}{(2\pi)^d q^2} \right) d^d q. \quad (4.56)$$

Es gilt nun:

$$\begin{aligned} K^{\text{eff}}(\lambda) &= K_g \left( 1 + \frac{\sigma_f^2}{2} \right) - \sigma_f^2 K_g \frac{(2\pi l_0^2)^{d/2}}{(2\pi)^d} \int P_{\lambda,q}^+ \left( \exp(-l_0^2 q^2 / 2) \frac{q_1^2}{q^2} \right) d^d q \\ &= K_g \left( 1 + \frac{\sigma_f^2}{2} \right) - K_g C \left( \int \exp(-l_0^2 q^2 / 2) \frac{q_1^2}{q^2} d^d q + \int P_{\lambda,q}^- \left( \exp(-l_0^2 q^2 / 2) \frac{q_1^2}{q^2} \right) d^d q \right) \\ &= K_g \left( 1 + \frac{\sigma_f^2}{2} \right) - \frac{K_g C}{d} \left( \int \exp(-l_0^2 q^2 / 2) d^d q + \int P_{\lambda,q}^- \left( \exp(-l_0^2 q^2 / 2) \right) d^d q \right) \\ &= K_g \left( 1 + \frac{\sigma_f^2}{2} \right) - \frac{K_g C}{d} \left( \left( \int \exp(-l_0^2 q^2 / 2) dq \right)^d + \left( \int P_{\lambda,q}^- \left( \exp(-l_0^2 q^2 / 2) \right) dq \right)^d \right), \end{aligned}$$

mit  $C := \sigma_f^2 (2\pi l_0^2)^{d/2} / (2\pi)^d$ .

Damit erhält man für  $d = 1, 2, 3$ :

$$\begin{aligned} K^{\text{eff}}(\lambda) &= K_g \left( 1 + \frac{\sigma_f^2}{2} \right) + \delta K^{\text{eff}}(\lambda) \\ &= K_g + \sigma_f^2 \frac{K_g}{d} \left( \frac{d}{2} - 1 + \left( \text{erf} \left( \frac{l_0 a_s}{\sqrt{2} \lambda} \right) \right)^d \right) \end{aligned} \quad (4.57)$$

in der Ordnung  $O(\sigma_f^2)$ . Die Fehlerfunktion  $\text{erf}(x)$  ist wie folgt definiert:

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt. \quad (4.58)$$

Für den Fall, daß  $\lambda = 0$  ist, werden in der Coarse Graining Methode alle Fluktuationen der Permeabilität exakt modelliert.  $K^{\text{eff}}$  ist durch den arithmetischen Mittelwert  $K_a = \bar{K}$  bzw.  $K_g(1 + \sigma_f^2/2)$  in  $O(\sigma_f^2)$  gegeben.

Im Fall  $\lambda/l_0 \gg 1$  findet man aus (4.57) für den effektiven Permeabilitätskoeffizienten:

$$K^{\text{eff}}(\lambda) \rightarrow K_g(1 - \sigma_f^2/2) \quad \text{für } d = 1, \quad (4.59)$$

$$K^{\text{eff}}(\lambda) \rightarrow K_g \quad \text{für } d = 2, \quad (4.60)$$

$$K^{\text{eff}}(\lambda) \rightarrow K_g(1 + \sigma_f^2/6) \quad \text{für } d = 3, \quad (4.61)$$

für  $\lambda/l_0 \rightarrow \infty$ . Für die Skalen dazwischen fällt der effektive Wert  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  vom arithmetischen Mittel zum Grenzwert für  $\lambda \rightarrow \infty$  monoton ab, wie in Abb. 4.1 dargestellt.

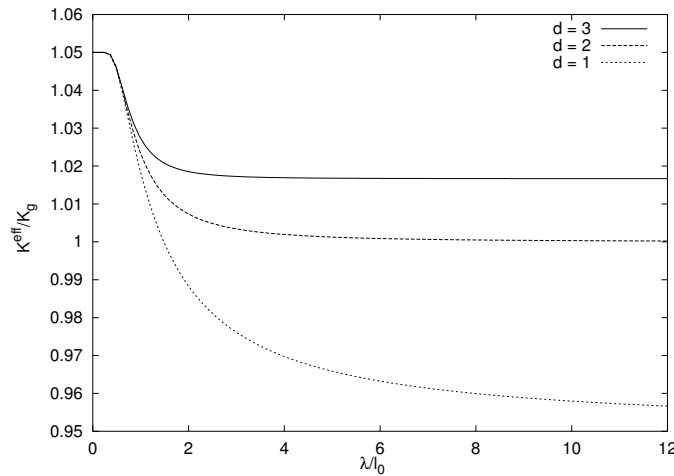


Abbildung 4.1:  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  in der Ordnung  $O(\sigma_f^2)$  aus der Störungstheorie für  $d$  Raumdimensionen mit  $\sigma_f^2 = 0.1$  ( $a_s = 1$ ).

### Anisotrope Korrelation

Wir gehen von einem skalaren Permeabilitätsfeld mit anisotroper Korrelationsfunktion aus. Für das anisotrop korrelierte Medium betrachten wir ausschließlich den Fall mit  $l_1 \neq l_2$  in  $d = 2$  Raumdimensionen. Mit  $g(q)$  wie im isotropen Fall und

$$\omega(q) = \sigma_f^2 \prod_{i=1}^2 (2\pi l_i^2)^{1/2} \exp(-l_i^2 q_i^2/2)$$

erhält man in niedrigster Ordnung Störungstheorie:

$$\begin{aligned}
\delta K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) &= -K_g \sigma_f^2 \int P_{\lambda,q}^+ \left( \frac{q_i q_j \sqrt{2\pi l_1^2} \sqrt{2\pi l_2^2}}{q^2 (2\pi)^2} \exp\left(-\frac{q_1^2 l_1^2}{2} - \frac{q_2^2 l_2^2}{2}\right) \right) d^2 q \\
&= C \int_0^\infty d\Lambda \int P_{\lambda,q}^+ \left( q_i q_j \exp\left(-q_1^2 (l_1^2/2 + \Lambda) - q_2^2 (l_2^2/2 + \Lambda)\right) \right) d^2 q \\
&= C \int_0^\infty d\Lambda \int q_i q_j \exp\left(-q_1^2 (l_1^2/2 + \Lambda) - q_2^2 (l_2^2/2 + \Lambda)\right) d^2 q \\
&\quad - C \int_0^\infty d\Lambda \int P_{\lambda,q}^- \left( q_i q_j \exp\left(-q_1^2 (l_1^2/2 + \Lambda) - q_2^2 (l_2^2/2 + \Lambda)\right) \right) d^2 q
\end{aligned} \tag{4.62}$$

mit  $C := -K_g \sigma_f^2 l_1 l_2 / (2\pi)$ . Für die Außerdiagonalterme findet man sofort:

$$\delta K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) \equiv 0 \quad \text{für } i \neq j. \tag{4.63}$$

Die detaillierte Berechnung von (4.62) für  $i = j$  befindet sich im Anhang A.3. Man findet

$$\delta K_{11}^{\text{eff}}(\lambda) = -K_g \sigma_f^2 l_1 l_2 \left( \frac{1}{l_1(l_1 + l_2)} + \frac{1}{2} \int_0^\infty f(\lambda/a_s, \Lambda, l_1, l_2) d\Lambda \right), \tag{4.64}$$

$$\delta K_{22}^{\text{eff}}(\lambda) = -K_g \sigma_f^2 l_1 l_2 \left( \frac{1}{l_2(l_1 + l_2)} + \frac{1}{2} \int_0^\infty f(\lambda/a_s, \Lambda, l_2, l_1) d\Lambda \right), \tag{4.65}$$

mit

$$f(x, \Lambda, l_1, l_2) := \left( -\frac{\text{erf}\left(\frac{\sqrt{l_1^2 + \Lambda}}{\sqrt{2x}}\right)}{\sqrt{l_1^2 + \Lambda}^3} + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\exp\left(-\frac{l_1^2 + \Lambda}{2x}\right)}{x(l_1^2 + \Lambda)} \right) \frac{\text{erf}\left(\frac{\sqrt{l_2^2 + \Lambda}}{\sqrt{2x}}\right)}{\sqrt{l_2^2 + \Lambda}}.$$

Wir erhalten damit einen richtungsabhängigen effektiven Permeabilitätskoeffizienten

$$K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) = K_g (1 + \sigma_f^2/2) \delta_{ij} + \delta K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) \tag{4.66}$$

in Form eines diagonalen Tensors. Der Verlauf von  $K_{ii}^{\text{eff}}(\lambda)$  ist in Abb. 4.2 für zwei Paare von Korrelationslängen für die Varianz  $\sigma_f^2 = 0.1$  dargestellt. Zum einen für  $(l_1, l_2) = (l_0, l_0/4)$  und zum anderen für  $(l_1, l_2) = (4l_0, l_0/4)$  mit festem  $l_0$ . Als numerisches Integrationsverfahren für die Integration in  $\delta K_{ii}^{\text{eff}}$  benutzen wir eine angepasste, stückweise Romberg-Integration aus [PTVF92]. Man erkennt, daß die effektive Permeabilität in Richtung der größeren Korrelationslänge jeweils höher als in die Richtung der kleineren Korrelationslänge ist. Außerdem wird die Differenz zwischen  $K_{11}^{\text{eff}}$  und  $K_{22}^{\text{eff}}$  für zunehmende Anisotropie größer.

*Bemerkung 4.9.* Für  $l_1 = l_2 = l_0$  vereinfacht sich  $f$  zu

$$f(x, \Lambda, l_0, l_0) = \frac{d}{d\Lambda} \frac{\left( \text{erf}\left(\frac{\sqrt{l_0^2 + \Lambda}}{\sqrt{2x}}\right) \right)^2}{l_0^2 + \Lambda},$$

und man erhält für  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  das Resultat aus dem isotropen Fall für  $d = 2$ .

#### 4.2.1 Berechnung mit einer weichen Abschneidefunktion

Die Projektoren  $P_{\lambda,q'}^+$  und  $P_{\lambda,q''}^+$  in  $\delta K^{\text{eff}}(\lambda)$  entsprechen einer scharfen Abschneidefunktion im Fourier-Raum. In der bestehenden Literatur über das Hochskalieren der Permeabilität wird oft eine weiche Abschneidefunktion benutzt, wie z.B. in [Att02, AEN02], um hochfrequente Moden herauszufiltern und damit einen effektiven Permeabilitätswert zu berechnen.

Wir geben die Resultate für  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  in niedrigster, nicht-trivialer Ordnung Störungstheorie auch für eine weiche Abschneidefunktion an. Der Vorteil dieser weichen Abschneidefunktion ist, daß  $K^{\text{eff}}(\lambda)$

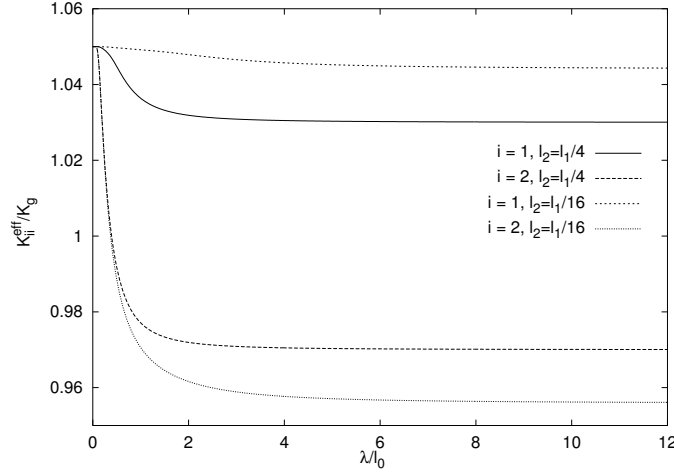


Abbildung 4.2:  $K_{ii}^{\text{eff}}(\lambda)$  für Korrelationslängen  $l_2 = l_1/4$  und  $l_2 = l_1/16$  in der Ordnung  $O(\sigma_f^2)$  für  $d = 2$  und  $\sigma_f^2 = 0.1$  ( $a_s = 1$ ).

leichter berechnet werden kann und man im anisotropen Fall einen expliziten Ausdruck erhält. Den weichen Abschnieder werden wir auch in den kommenden Abschnitten bei einigen Berechnungen verwenden. Wir ersetzen dazu die Integration über den Projektor

$$\int P_{\lambda,q}^+(f(q)) d^d q \quad \text{durch} \quad \int \left(1 - \exp\left(-\frac{q^2 \lambda^2}{2a_w^2}\right)\right) f(q) d^d q \quad (4.67)$$

mit einer Konstante  $a_w \geq 1$ . Im isotropen Fall erhalten wir so aus Gl. (4.56)  $K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) = K^{\text{eff}}(\lambda) \delta_{ij}$  mit:

$$K^{\text{eff}}(\lambda) = K_g \left(1 + \frac{\sigma_f^2}{2}\right) - \frac{K_g \sigma_f^2}{d} \left(1 - \left(\frac{l_0^2}{l_0^2 + \lambda^2/a_w^2}\right)^{d/2}\right). \quad (4.68)$$

Dieses Ergebnis findet auch Attinger in [Att02].

Im anisotrop korrelierten Fall für  $d = 2$  ergibt sich:

$$\begin{aligned} K_{11}^{\text{eff}}(\lambda) &= K_g \left(1 + \frac{\sigma_f^2}{2}\right) - K_g \sigma_f^2 F(\lambda/a_w, l_1, l_2), \\ K_{22}^{\text{eff}}(\lambda) &= K_g \left(1 + \frac{\sigma_f^2}{2}\right) - K_g \sigma_f^2 F(\lambda/a_w, l_2, l_1), \\ K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) &= 0 \quad \text{für } i \neq j, \end{aligned} \quad (4.69)$$

mit

$$F(x, l_1, l_2) := \frac{l_2}{l_1 + l_2} - \frac{l_1 l_2}{l_1^2 + x^2 + \sqrt{(l_1^2 + x^2)(l_2^2 + x^2)}}.$$

Die Berechnungen sind im Anhang A.3. Aus dem Resultat (4.69) für  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  im anisotropen Fall ergibt sich, daß

$$K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) = K_g (1 + \sigma_f^2/2) \delta_{ij} \quad \text{für } \lambda = 0 \quad (4.70)$$

und auch

$$K_{11}^{\text{eff}}(\lambda) = K_g (1 + \sigma_f^2/2) \quad \text{für } l_1 \rightarrow \infty \quad (4.71)$$

ist.

*Bemerkung 4.10.* Im Grenzfall eines geschichteten Mediums ( $l_1 \rightarrow \infty$ ) erhält man somit für die effektive Permeabilität in Richtung der Schichten das arithmetische Mittel  $K_g(1 + \sigma_f^2/2)$  in der betrachteten Ordnung  $O(\sigma_f^2)$  unabhängig von  $\lambda$ . Für  $l_2 \rightarrow \infty$  findet man hingegen für die Permeabilität in 1-Richtung:

$$K_{11}^{\text{eff}}(\lambda) = K_g \left( 1 + \frac{\sigma_f^2}{2} \right) - K_g \sigma_f^2 \left( 1 - \frac{l_1}{\sqrt{l_1^2 + \lambda^2/a_w^2}} \right). \quad (4.72)$$

Dies stimmt mit dem Ergebnis im isotropen Fall (4.68) für  $d = 1$  und  $l_0 = l_1$  überein.

*Bemerkung 4.11.* Diese Ergebnisse entsprechen den Resultaten aus der Homogenisierungstheorie für ein geschichtetes Medium in zwei Dimensionen. Darin erhält man ebenfalls das arithmetische Mittel bzw. das eindimensionale Ergebnis in Richtung der Schichten bzw. senkrecht zu den Schichten (vgl. Abschnitt 2.5, Gl. (2.89)).

Der Vergleich der Ergebnisse für  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  aus der Störungstheorie für den Fall einer scharfen bzw. weichen Abschneidefunktion im Fourier-Raum, gekennzeichnet durch S bzw. W, ist in Abb. 4.3 gezeigt. Der Vergleich zeigt, daß in zwei und drei Dimensionen die Berechnungen mit der weichen

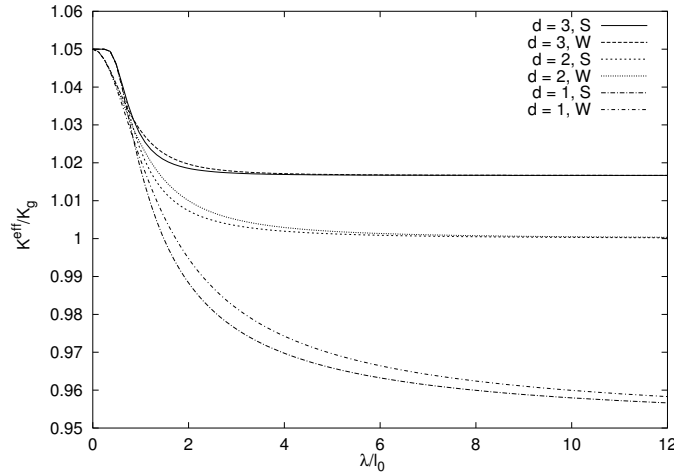


Abbildung 4.3: Im isotropen Fall  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  in Ordnung  $O(\sigma_f^2)$  Störungstheorie berechnet mit einer scharfen (S) bzw. weichen (W) Abschneidefunktion für  $\sigma_f^2 = 0.1$  und  $a_s = a_w = 1$ .

Abschneidefunktion aus (4.67) die effektive Permeabilität sehr gut approximieren.

## 4.3 Statistische Eigenschaften

Wir gehen in diesem Abschnitt kurz auf die statistischen Eigenschaften des Permeabilitätsfeldes ein, das aus der hochskalierten Strömungsgleichung auf einer größeren Skala, charakterisiert durch die Länge  $\lambda$ , resultiert.

### 4.3.1 Varianz des hochskalierten Permeabilitätsfeldes $K(x)|_\lambda$

Aus dem hochskalierten Permeabilitätsfeld (4.50) im Fourier-Raum ergibt sich entsprechend das Permeabilitätsfeld auf der Längenskala  $\lambda$  im Ortsraum zu

$$K(x)|_\lambda := K^{\text{eff}}(\lambda) + k(x)|_\lambda \quad (4.73)$$

mit dem Ensemblemittelwert  $\overline{K(x)|_\lambda} = K^{\text{eff}}(\lambda)$  und den Fluktuationen  $k(x)|_\lambda$ . Die Fluktuationen  $k(x)|_\lambda$  ergeben sich aus  $P_{\lambda,q}^-(\hat{k}(q - q'))$  im Fourier-Raum. Damit ergibt sich für die Autokorrela-

tionsfunktion von  $K(x)|_\lambda$ :

$$\begin{aligned} \overline{k(x)|_\lambda k(x')|_\lambda} &= \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int e^{iq \cdot x + iq' \cdot x'} \overline{P_{\lambda,q}^-(\hat{k}(q)) P_{\lambda,q'}^-(\hat{k}(q'))} d^d q' d^d q \\ &= \frac{K_g^2}{(2\pi)^{2d}} \int e^{iq \cdot x + iq' \cdot x'} P_{\lambda,q,q'}^-(\hat{w}(q, q')) d^d q' d^d q. \end{aligned} \quad (4.74)$$

Für die Varianz des hochskalierten Permeabilitätsfeldes  $K(x)|_\lambda$  erhält man so mit  $\hat{w}(q, q')$  aus (4.1) in der Ordnung  $O(\sigma_f^2)$ :

$$\begin{aligned} \sigma_K^2(\lambda) &= \overline{k(x)|_\lambda k(x)|_\lambda} \\ &= K_g^2 \sigma_f^2 \int P_{\lambda,q}^- \left( \prod_{i=1}^d \frac{\sqrt{2\pi} l_i^2}{2\pi} \exp\left(-q_i^2 l_i^2 / 2\right) \right) d^d q \\ &= K_g^2 \sigma_f^2 \prod_{i=1}^d \operatorname{erf}\left(\frac{l_i a_s}{\sqrt{2} \lambda}\right). \end{aligned} \quad (4.75)$$

*Bemerkung 4.12.* Die skalenabhängige Varianz  $\sigma_K^2(\lambda)$  geht für  $\lambda = 0$ , wenn alle Fluktuationen aufgelöst werden, in die Varianz des feinskaligen Feldes in der Ordnung  $O(\sigma_f^2)$  über. Werden alle Fluktuationen ausgemittelt und vollständig durch den effektiven Permeabilitätstensor ersetzt ( $\lambda \rightarrow \infty$ ), so geht  $\sigma_K^2$  gegen null. Dieses Resultat stimmt mit statistischen Auswertungen von Feldexperimenten z.B. in [Gel93] überein.

### 4.3.2 Fluktuationen der hochskalierten Permeabilität von Realisierung zu Realisierung

Mit der Varianz des hochskalierten Permeabilitätsfeldes  $K(x)|_\lambda$  betrachtet man, wie sehr die Permeabilität des hochskalierten Feldes um den Mittelwert, d.h. den effektiven Permeabilitätskoeffizienten, schwankt.

Wir untersuchen in diesem Abschnitt nun, wie sehr die hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten der Felder, die im Mittel den effektiven Permeabilitätskoeffizienten bilden, um diesen schwanken. Dazu berechnen wir die mittlere quadratische Abweichung des hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten für eine Realisierung vom effektiven Permeabilitätskoeffizienten  $K^{\text{eff}}(\lambda)$ , der das Ensemblemittel der hochskalierten Werte ist. Die Abweichung ist ein Maß für die Fluktuation des hochskalierten Wertes von Realisierung zu Realisierung.

Den hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten für eine Realisierung  $K_{ij}(x)$  mit skalaren Fluktuationen  $k(x)$  definieren wir aus  $Q_2(q)$  von Gl. (4.38) bzw. (4.42) durch:

$$K_{ij}^{\text{real}}(q, \lambda) := \overline{K}_{ij} + \delta K_{ij}^{\text{real}}(q, \lambda) \quad (4.76)$$

mit

$$\delta K_{ij}^{\text{real}}(q, \lambda) := \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int P_{\lambda,q}^-(\hat{k}(q - q')) i q'_i P_{\lambda,q'}^+(P_{\lambda,q''}^+(\hat{G}(q', -q''))) i q''_j \hat{k}(q'' - q''') d^d q''' d^d q'' d^d q',$$

wobei man die Lokalisierung  $q = 0$  wie in  $\delta K^{\text{eff}}(q, \lambda)$  noch nicht vornimmt. Für die mittlere quadratische Abweichung erhält man:

$$\overline{(K_{ij}^{\text{real}}(\lambda) - K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda))^2}(q) = \int \overline{\delta K_{ij}^{\text{real}}(q', \lambda) \delta K_{ij}^{\text{real}}(q - q', \lambda)} d^d q' - (\delta K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda))^2, \quad (4.77)$$

wobei die Indizes  $i, j$  fest sind und  $q = 0$  erst nach der Ensemblemittelung zu setzen ist. Insgesamt

erhält man dann mit dem ersten Term  $g(q)\delta(q+q')$  aus der Reihenentwicklung von  $\hat{G}(q, q')$  in (4.14):

$$\begin{aligned} \overline{(K_{ij}^{\text{real}}(\lambda) - K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda))^2} &:= \overline{(K_{ij}^{\text{real}}(\lambda) - K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda))^2}(q=0) = \\ &\frac{K_g^4}{(2\pi)^{2d}} \int P_{\lambda, q'}^- \left( P_{\lambda, q''}^+ \left( q_i'' g(q'') q_j'' q_i'' g(-q'') q_j'' \omega(q'') \omega(q' - q'') \right) \right) d^d q'' d^d q' + \\ &\frac{K_g^4}{(2\pi)^{2d}} \int P_{\lambda, q'}^- \left( P_{\lambda, q'', q''-q'}^+ \left( q_i'' g(q'') q_j'' (q_i'' - q_i') g(q'' - q') (q_j'' - q_j') \omega(q' - q'') \omega(q'') \right) \right) d^d q'' d^d q' \end{aligned} \quad (4.78)$$

in niedrigster Ordnung  $O(\sigma_f^4)$ , wie im Anhang A.3.3 gezeigt wird.

Wir betrachten nur die Diagonalterme von  $\overline{(K_{ij}^{\text{real}}(\lambda) - K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda))^2}$ . Diese sind aus Symmetriegründen für  $i = j = 1, \dots, d$  gleich. Für den ersten Term in (4.78) erhält man für die isotrope Korrelationsfunktion mit  $g(q) = (\overline{K}q^2)^{-1}$

$$\begin{aligned} \frac{K_g^2}{(2\pi)^{2d}} \int P_{\lambda, q'}^- \left( P_{\lambda, q''}^+ \left( \frac{q_i''^2 q_j''^2}{q''^2 q''^2} \omega(q'') \omega(q' - q'') \right) \right) d^d q'' d^d q' \\ = K_g^2 \sigma_f^4 S(d) \left( F(\lambda/(l_0 a_w), 2, 0) - F(\lambda/(l_0 a_w), 3, 1) \right) \end{aligned} \quad (4.79)$$

mit der weichen Abschneidefunktion aus (4.67). Dabei lauten die Funktionen

$$F(x, a, b) := \frac{1}{(1 + ax^2 + bx^4)^{d/2}}$$

und

$$S(d) := \begin{cases} 1/2 & \text{für } d = 1 \\ 3/8 & \text{für } d = 2 \\ 1/5 & \text{für } d = 3. \end{cases}$$

Für den zweiten Term in (4.78) erhält man

$$\begin{aligned} \frac{K_g^4}{(2\pi)^{2d}} \int P_{\lambda, q'+q''}^- \left( P_{\lambda, q', q''}^+ \left( q_i'' g(q'') q_j'' q_i' g(-q') q_j' \omega(q') \omega(q'') \right) \right) d^d q'' d^d q' \\ = \frac{K_g^2 \sigma_f^4}{d^2} \left( F(\lambda/(l_0 a_w), 2, 0) - 2F(\lambda/(l_0 a_w), 3, 1) + F(\lambda/(l_0 a_w), 4, 3) \right) \end{aligned} \quad (4.80)$$

für  $i = j$ . Die detaillierten Berechnungen befinden sich ebenfalls im Anhang A.3.3. Aus (4.79) und (4.80) erhält man für die mittlere quadratische Abweichung  $\overline{(K_{ii}^{\text{real}}(\lambda) - K_{ii}^{\text{eff}}(\lambda))^2}$  in  $d$  Raumdimensionen:

$$\begin{aligned} \overline{(K_{ii}^{\text{real}}(\lambda) - K_{ii}^{\text{eff}}(\lambda))^2} &= K_g^2 \sigma_f^4 (S(d) + 1/d^2) F(\lambda/(l_0 a_w), 2, 0) - \\ &K_g^2 \sigma_f^4 (S(d) + 2/d^2) F(\lambda/(l_0 a_w), 3, 1) + \frac{K_g^2 \sigma_f^4}{d^2} F(\lambda/(l_0 a_w), 4, 3), \end{aligned} \quad (4.81)$$

das für  $\sigma_f^2 = 0.1$  in Abb. 4.4 dargestellt ist. Die Größe in der Abbildung ist konsistent durch den nullten Ordnungsterm von  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  normiert. Im Bereich  $\lambda/l_0 \approx 1$  ist die Abweichung des hochskalierten Permeabilitätswertes vom effektiven Wert am größten. Sowohl für  $\lambda/l_0 \ll 1$  als auch  $\lambda/l_0 \gg 1$  ist sie jedoch sehr klein.



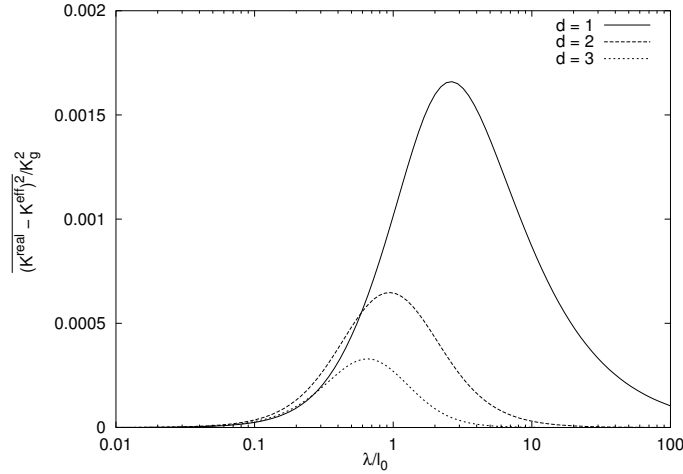


Abbildung 4.4: Die mittlere quadratische Abweichung des hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten vom effektiven Permeabilitätswert  $(K_{ii}^{\text{real}}(\lambda) - K_{ii}^{\text{eff}}(\lambda))^2 / K_g^2$  im isotropen Fall in Ordnung  $O(\sigma_f^4)$  für  $\sigma_f^2 = 0.1$  ( $a_w = 1$ ).

#### 4.4 Fehlerberechnung für die hochskalierte Lösung

Zur Definition einer Fehlergröße für die Lösung  $u_\lambda(x)$  der hochskalierten Strömungsgleichung betrachten wir die Differenz

$$\delta u(x)|_\lambda := u(x) - u_\lambda(x) \quad (4.82)$$

im Ortsraum, die nur Anteile enthält, die auf Längenskalen kleiner als  $\lambda$  variieren.  $u(x)$  ist die Lösung der Strömungsgleichung auf der feinsten Skala. Im Fourier-Raum entspricht  $\delta u(x)|_\lambda$  der Lösung projiziert auf große Wellenvektoren  $q$ , d.h. den Werten der Lösung für große Vektoren  $|q_i| > a_s/\lambda$ :  $P_{\lambda,q}^+(\hat{u}(q))$ .

*Bemerkung 4.13.* Die Größe  $\overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2}$  gibt an, wie groß die mittlere quadratische Abweichung der Lösung der hochskalierten Strömungsgleichung von der feinskaligen Lösung ist. Wegen der Ergodizität des Zufallsfeldes gilt außerdem:

$$\overline{(u(x) - u_\lambda(x))^2} = \int (u(x) - u_\lambda(x))^2 d^d x = \|u(x) - u_\lambda(x)\|_{L^2}^2. \quad (4.83)$$

In niedrigster Ordnung Störungstheorie ergibt sich aus Gl. (4.27) mit einer isotropen Korrelationsfunktion

$$\overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2} = \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int e^{iq \cdot x} \int P_{\lambda,q-q',q'}^+ \overline{(\hat{u}(q-q') \hat{u}(q'))} d^d q' d^d q \quad (4.84)$$

mit

$$\begin{aligned} P_{\lambda,q,q'}^+ \overline{(\hat{u}(q) \hat{u}(q'))} &= P_{\lambda,q,q'}^+ \left( g(q) q_i g(q') q'_j \int \overline{\hat{k}(q-q'') \hat{k}(q'-q''')} \times \right. \\ &\quad \left. P_{\lambda,q'',q'''}^- \left( q''_i g(q'') \hat{f}(q'') q''_j g(q''') \hat{f}(q''') \right) d^d q'' d^d q''' \right). \end{aligned} \quad (4.85)$$

Unter der Annahme, daß ein makroskopisch uniformes Strömungsfeld in 1-Richtung,  $v = v_0 e_1$ , vorliegt, findet man:

$$P_{\lambda,q}^- (iq_i g(q) \hat{f}(q)) = -\frac{v_0}{K_g} \delta_{1i} \delta(q), \quad (4.86)$$

da im Fourier-Raum  $\hat{u}(q) = \frac{g(q)f(q)}{K_g}$  und  $i q_i \hat{u}(q) = -v_0 \delta_{1i} \delta(q)/K_g$  für den homogenen Fall gilt. Die folgende Herleitung von  $\overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2}$  ist für diese Annahme gültig. Es ergibt sich damit:

$$\overline{P_{\lambda,q,q'}^+(\hat{u}(q)\hat{u}(q')))} = -P_{\lambda,q,q'}^+(g(q)q_1 g(q')q'_1 v_0^2 \hat{w}(q,q')) . \quad (4.87)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int \overline{P_{\lambda,q-q',q'}^+(\hat{u}(q-q')\hat{u}(q'))} d^d q' \\ = -v_0^2 \int P_{\lambda,q-q',q'}^+(g(q-q')(q_1 - q'_1) g(q')q'_1 \hat{w}(q-q',q')) d^d q' . \end{aligned} \quad (4.88)$$

Mit  $\hat{w}(q,q')$  aus (4.1) erhält man damit:

$$\begin{aligned} \overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2} &= \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int e^{iq \cdot x} \int \overline{P_{\lambda,q-q',q'}^+(\hat{u}(q-q')\hat{u}(q'))} d^d q' d^d q \\ &= v_0^2 \sigma_f^2 \frac{(2\pi l_0^2)^{d/2}}{(2\pi)^d} \int P_{\lambda,q'}^+(g(-q')q'_1 g(q')q'_1 \exp(-q'^2 l_0^2/2)) d^d q' \\ &= \frac{v_0^2 \sigma_f^2 (2\pi l_0^2)^{d/2}}{K_g^2 (2\pi)^d} \int P_{\lambda,q}^+ \left( \frac{q_1^2}{q^4} \exp(-q^2 l_0^2/2) \right) d^d q \\ &= \frac{v_0^2 \sigma_f^2 (2\pi l_0^2)^{d/2}}{d K_g^2 (2\pi)^d} \int P_{\lambda,q}^+ \left( \frac{1}{q^2} \exp(-q^2 l_0^2/2) \right) d^d q . \end{aligned} \quad (4.89)$$

Für  $d = 3$  ergibt sich daraus

$$\overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2} = \frac{v_0^2 \sigma_f^2 l_0^2}{3 K_g^2} \left( 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \lambda^2/(l_0^2 a_w^2)}} \right) \quad (4.90)$$

und für  $d = 2$ :

$$\begin{aligned} \overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2} &= \frac{v_0^2 \sigma_f^2 l_0^2}{4 K_g^2} \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\nu+1}}{\nu} \left( \frac{\lambda^2}{l_0^2 a_w^2} \right)^\nu \\ &= \frac{v_0^2 \sigma_f^2 l_0^2}{4 K_g^2} \ln \left( 1 + \frac{\lambda^2}{l_0^2 a_w^2} \right) \quad \text{für } \lambda/l_0 \leq a_w . \end{aligned} \quad (4.91)$$

Wie im Anhang A.3.4 gezeigt, ergibt sich insgesamt für den relativen Fehler für  $\lambda/l_0 < 1$  in  $d$  Dimensionen, wenn man  $Ll_0$  als makroskopische Skala annimmt:

$$\frac{\overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2}}{\overline{(u(x))^2}} = \frac{\sigma_f^2}{2d L^2 a_w^2} \left( \frac{\lambda}{l_0} \right)^2 + O((\lambda/l_0)^4) . \quad (4.92)$$

Umso kleiner das Verhältnis  $\lambda/l_0$  ist, umso besser ist im Mittel die Approximation  $u_\lambda(x)$  auf der Skala  $\lambda$  für die feinskaligen Lösung  $u(x)$ . Umgekehrt erhält man auch für  $l_0 \ll \lambda$  in drei Dimensionen mit makroskopischer Längenskala  $Ll_0$ :

$$\frac{\overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2}}{\overline{(u(x))^2}} = \frac{\sigma_f^2}{3} \frac{1}{L^2} + O(l_0/\lambda) . \quad (4.93)$$

In  $d \leq 2$  Raumdimensionen divergiert  $\overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2}$  für  $\lambda/l_0 \rightarrow \infty$ .

## 4.5 Renormierungsgruppen-Analysis

### Einleitung

Die Resultate, die wir für den effektiven Permeabilitätstensor mithilfe der störungstheoretischen Berechnung im Abschnitt 4.2 gewonnen haben, sind nur für kleine Varianzen  $\sigma_f^2$  des Logarithmus der Permeabilität gültig. Durch eine Renormierungsgruppen-Analyse erweitern wir die Gültigkeit von  $K^{\text{eff}}$  zu höheren Ordnungen in der Varianz, indem wir die Coarse Graining Methode sukzessive über kleine Wellenvektorbänder iterieren.

Allgemein beschreibt eine Renormierungsgruppen-Analyse die Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion einer lokalen Größe, wie z.B. der Permeabilität, unter einer Folge von Transformationen, die sukzessive die heterogenen Fluktuationen eliminiert. Dabei startet sie bei sehr kleinen Skalen und schreitet zu immer größeren Skalen fort. Zur gleichen Zeit werden die Eigenschaften des resultierenden, hochskalierten Mediums renormiert bzw. reskaliert und die Beiträge, die durch die Elimination der subskaligen Fluktuationen entstanden sind, summiert. Dazu benutzt man gewöhnlich eine Näherung in der sogenannten führenden Ordnung, um die inkrementellen Beiträge zu berechnen. Betrachtet man die Renormierungsgruppen-Analyse im Fourier-Raum, so wird bei jedem Schritt die Auflösung der Fluktuationen reduziert, indem die hochfrequenten Moden eliminiert werden.

Ein ähnliches Vorgehen zur hier geschilderten Herleitung findet man in den Arbeiten [BG90, DDH94, DDH95, JV97].

*Bemerkung 4.14.* Aus Abschnitt 2.6 kennen wir das exakte Resultat für den effektiven Permeabilitätswert im Grenzfall eines globalen Hochskalierens, d.h. für ein Upscaling zu sehr großen Längenskalen  $\lambda \rightarrow \infty$ , für zwei Dimensionen. Dieses Ergebnis können wir benutzen, um das Resultat für  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  aus der Renormierungsgruppen-Analyse zu überprüfen.

### Berechnung von $K^{\text{eff}}(\lambda)$

Ausgehend von der Strömungsgleichung für das feinskalige Permeabilitätsfeld führt ein Schritt der Coarse Graining Methode auf den effektiven Permeabilitätstensor (4.49) auf der Längenskala  $\lambda$ :

$$K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) = \overline{K}_{ij} + \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int \overline{P_{\lambda,q,q'}^+ (\hat{k}_{il}(-q)iq_l \hat{G}(q, -q')iq'_m \hat{k}_{mj}(q'))} d^d q' d^d q. \quad (4.94)$$

Wiederholt man dieses Vorgehen ausgehend von der Skala  $\lambda$  über ein kleines Wellenzahlvektorband, erhält man:

$$K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda(1 + \delta\lambda)) = K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) + \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int \overline{[P_{\lambda(1+\delta\lambda),q,q'}^+ - P_{\lambda,q,q'}^+] (\hat{k}_{il}(-q, \lambda)iq_l \hat{G}(q, -q', \lambda)iq'_m \hat{k}_{mj}(q', \lambda))} d^d q' d^d q, \quad (4.95)$$

mit  $\delta\lambda > 0$ . Die Projektion in (4.95) ist definiert zu  $[P_{\Lambda,q,q'}^+ - P_{\lambda,q,q'}^+](u(q, q')) = u(q, q')$ , falls  $q$  und  $q'$  in der  $d$ -dimensionalen Würfelschale um den Ursprung mit der äußeren bzw. inneren Kantenlänge  $2/\lambda$  bzw.  $2/\Lambda$  liegen, und sonst zu null.

Die Funktion  $\hat{G}(q, q', \lambda)$  ist die Greensche Funktion der fouriertransformierten Strömungsgleichung (4.48) auf der Skala  $\lambda$ , die aus dem vorherigen Coarse Graining Schritt resultiert.  $\hat{k}(q, \lambda)$  bezeichnet die Fluktuationen bezüglich der Skala  $\lambda$ . Gleichung (4.95) stellt einen impliziten Ausdruck für  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  dar, der zur analytischen Untersuchung mithilfe von Vereinfachungen in einen geschlossenen Ausdruck umgewandelt werden muß. Die Vorgehensweise wie in der störungstheoretischen Berechnung von  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  stellt eine Möglichkeit dafür dar.

Analog zur störungstheoretischen Berechnung von  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  approximieren wir die Greensche Funktion  $\hat{G}(q, q', \lambda)$  durch die Greensche Funktion des entsprechenden homogenen Problems auf der Skala  $\lambda$  mit verschwindenden Fluktuationen  $\hat{k}(q, \lambda) \equiv 0$ , was für kleines  $\delta\lambda < 1$  sinnvoll ist:

$$\hat{G}(q, q', \lambda) = g(q, \lambda)\delta(q + q') \quad (4.96)$$

mit

$$g(q, \lambda) := \left( \sum_{i,j=1}^d q_i K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) q_j \right)^{-1}. \quad (4.97)$$

Dies stellt die einfachste Möglichkeit einer Ersetzung von  $\hat{G}(q, q', \lambda)$  dar und wird in der Literatur als Renormierung der Greenschen Funktion bezeichnet [DDH94]. Man erhält damit eine skalenabhängige Greensche Funktion.

*Bemerkung 4.15.* Die Näherung der kompletten Störungsreihe von  $\hat{G}(q, q', \lambda)$  in (4.95) durch niedrige Ordnungsterme ist geeigneter als in der rein störungstheoretischen Berechnung von  $K^{\text{eff}}(\lambda)$ . Die Näherung durch niedrige Ordnungsterme liefert sehr gute Approximationen der kleinen inkrementellen Änderung in (4.95), weil das Integral über die hochfrequenten Moden nur über ein sehr kleines, nahes Wellenvektorband berechnet wird. Daher ist die Näherung von  $\hat{G}(q, q', \lambda)$  durch die führende Ordnung in der Renormierungsgruppen-Analyse wesentlich exakter als eine direkte Entwicklung in den führenden Ordnungsterm.

Um den Ausdruck (4.95) in einen geschlossenen Ausdruck zu überführen, benötigen wir auch die skalenabhängigen Fluktuationen  $\hat{k}(q, \lambda)$  im Fourier-Raum, insbesondere die skalenabhängige Korrelationsfunktion. Wir führen dazu neben der Renormierung der Greenschen Funktion eine sogenannte Vertex-Renormierung durch, wie sie in [DDH94, DDH95] beschrieben ist. In dieser Näherung werden die Fluktuationen des Permeabilitätsfeldes in niedrigster Ordnung ebenfalls mittels des effektiven Permeabilitätstensors renormiert:

$$\overline{K} \tilde{f} \rightarrow \frac{sp(K^{\text{eff}}(\lambda))}{sp(\overline{K})} \tilde{f} \quad \text{in Ordnung } O(\sigma_f^2), \quad (4.98)$$

wobei  $\tilde{f}$  die Fluktuationen des Logarithmus von  $K$  sind und  $sp(\cdot)$  die Spur bezeichnet. Dies hat zur Folge, daß für die Korrelationsfunktion der Permeabilität in Ordnung  $O(\sigma_f^2)$

$$\overline{\hat{k}_{il}(q, \lambda) \hat{k}_{mj}(q', \lambda)} = \left( \frac{sp(K^{\text{eff}}(\lambda))}{sp(\overline{K})} \right)^2 \overline{\hat{k}_{il}(q) \hat{k}_{mj}(q')} \quad (4.99)$$

mit  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  und  $\overline{K}$  in Ordnung  $O(\sigma_f^2)$  gilt.

*Bemerkung 4.16.* Durch Gl. (4.98) bzw. (4.99) werden die langskaligen Fluktuationen reskaliert. Ein analoges Vorgehen ist auch in [HC99] zu finden. Die physikalische Bedeutung von (4.99) ist, daß sich beim Iterieren der Coarse Graining Methode die Korrelationsfunktion nur in der Skala, nicht aber in der Form ändert.

Aus der Vertex-Renormierung folgt für die Varianz des hochskalierten Permeabilitätsfeldes nicht das Ergebnis für  $\sigma_K^2$  aus (4.75). Sie darf nur im Rahmen der Renormierungsgruppen-Analyse für kleine  $\delta\lambda < 1$  benutzt werden.

Führt man beide Renormierungsapproximationen an der effektiven Permeabilität (4.95) aus, erhält man:

$$K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda(1 + \delta\lambda)) = K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) + \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int \left[ P_{\lambda(1+\delta\lambda),q}^+ - P_{\lambda,q}^+ \right] \overline{\left( \frac{\hat{k}_{il}(-q) i q_l i q_m \hat{k}_{mj}(q)}{\sum_{n,p=1}^d q_n K_{np}^{\text{eff}}(\lambda) q_p} \right)} \left( \frac{sp(K^{\text{eff}}(\lambda))}{sp(\overline{K})} \right)^2 d^d q + O(\delta\lambda^2 \sigma_f^4). \quad (4.100)$$

Für skalare feinskalige Fluktuationen  $\hat{k}(q)$  erhält man damit

$$K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda(1 + \delta\lambda)) = K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) - \frac{K_g^2}{(2\pi)^d} \int \left[ P_{\lambda(1+\delta\lambda),q}^+ - P_{\lambda,q}^+ \right] \left( \frac{\omega(q) q_i q_j}{\sum_{l,m=1}^d q_l K_{lm}^{\text{eff}}(\lambda) q_m} \right) \left( \frac{sp(K^{\text{eff}}(\lambda))}{sp(\overline{K})} \right)^2 d^d q + O(\delta\lambda^2 \sigma_f^4). \quad (4.101)$$

Mit der Taylorentwicklung

$$K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda(1 + \delta\lambda)) = K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) + \lambda \delta\lambda \frac{d}{d\lambda} K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) + O(\delta\lambda^2) \quad (4.102)$$

kann Gl. (4.101) im Limes  $\delta\lambda \rightarrow 0$  als Differentialgleichung wiedergegeben werden:

$$-\frac{d}{d\lambda} K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) = \lim_{\delta\lambda \rightarrow 0} \frac{K_g^2}{(2\pi)^d \lambda \delta\lambda} \int \left[ P_{\lambda(1+\delta\lambda),q}^+ - P_{\lambda,q}^+ \right] \left( \frac{\omega(q) q_i q_j}{\sum_{l,m=1}^d q_l K_{lm}^{\text{eff}}(\lambda) q_m} \right) \left( \frac{\text{sp}(K^{\text{eff}}(\lambda))}{\text{sp}(\overline{K})} \right)^2 d^d q. \quad (4.103)$$

Dies bezeichnet man als Renormierungsgruppen-Gleichung.

*Bemerkung 4.17.* Im allgemeinen, d.h. im anisotrop korrelierten Fall, ist  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  ein Tensor, und man erhält aus der Renormierungsgruppen-Gleichung ein System von gekoppelten Integro-Differential-Gleichungen. Diese wurden in vereinfachter Form auch schon in [DDH95] hergeleitet. Wir beschränken uns hier auf ein isotropes Medium.

Im isotrop korrelierten Fall reduziert sich der effektive Permeabilitätstensor auf einen skalaren Wert,  $K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) = K^{\text{eff}}(\lambda) \delta_{ij}$ , für den aus (4.103)

$$-\frac{d}{d\lambda} K^{\text{eff}}(\lambda) = \lim_{\delta\lambda \rightarrow 0} \frac{K_g^2}{(2\pi)^d \lambda \delta\lambda} \int \left[ P_{\lambda(1+\delta\lambda),q}^+ - P_{\lambda,q}^+ \right] \left( \frac{\omega(q) q_1^2}{q^2 K^{\text{eff}}(\lambda)} \right) \left( \frac{K^{\text{eff}}(\lambda)}{K_g} \right)^2 d^d q \quad (4.104)$$

folgt. Mit

$$\begin{aligned} \int P_{\Lambda,q}^+(\omega(q)) d^d q &= \\ &= \sigma_f^2 (2\pi l_0^2)^{d/2} \left( \int \exp(-q^2 l_0^2/2) d^d q - \int P_{\Lambda,q}^-(\exp(-q^2 l_0^2/2)) d^d q \right) \\ &= \sigma_f^2 (2\pi)^d \left( 1 - \left( \text{erf} \left( \frac{l_0 a_s}{\sqrt{2} \Lambda} \right) \right)^d \right) \end{aligned} \quad (4.105)$$

ergibt sich für den Integralterm in (4.104)

$$\begin{aligned} &\frac{K_g^2}{(2\pi)^d} \int \left[ P_{\lambda(1+\delta\lambda),q}^+ - P_{\lambda,q}^+ \right] \left( \frac{\omega(q) q_1^2}{q^2 K^{\text{eff}}(\lambda)} \right) \left( \frac{K^{\text{eff}}(\lambda)}{K_g} \right)^2 d^d q \\ &= \frac{\sigma_f^2}{d} K^{\text{eff}}(\lambda) \left( 1 - \left( \text{erf} \left( \frac{l_0 a_s}{\sqrt{2} \lambda (1 + \delta\lambda)} \right) \right)^d \right) - \frac{\sigma_f^2}{d} K^{\text{eff}}(\lambda) \left( 1 - \left( \text{erf} \left( \frac{l_0 a_s}{\sqrt{2} \lambda} \right) \right)^d \right) \\ &= \frac{\sigma_f^2}{d} K^{\text{eff}}(\lambda) \lambda \frac{d}{d\lambda} \left( 1 - \left( \text{erf} \left( \frac{l_0 a_s}{\sqrt{2} \lambda} \right) \right)^d \right) \delta\lambda + O(\delta\lambda^2). \end{aligned} \quad (4.106)$$

Damit erhält man für  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  die Differentialgleichung:

$$\frac{d}{d\lambda} K^{\text{eff}}(\lambda) = -\frac{\sigma_f^2}{d} K^{\text{eff}}(\lambda) \frac{d}{d\lambda} \left( 1 - \left( \text{erf} \left( \frac{l_0 a_s}{\sqrt{2} \lambda} \right) \right)^d \right) \quad (4.107)$$

bzw.

$$\frac{d}{d\lambda} \ln K^{\text{eff}}(\lambda) = -\frac{\sigma_f^2}{d} \frac{d}{d\lambda} \left( 1 - \left( \text{erf} \left( \frac{l_0 a_s}{\sqrt{2} \lambda} \right) \right)^d \right), \quad (4.108)$$

woraus man mit der Bedingung  $K^{\text{eff}}(\lambda = 0) = \overline{K}$  sofort die Lösung

$$K^{\text{eff}}(\lambda) = \overline{K} \exp \left( -\frac{\sigma_f^2}{d} \left( 1 - \left( \text{erf} \left( \frac{l_0 a_s}{\sqrt{2} \lambda} \right) \right)^d \right) \right) \quad (4.109)$$

erhält.

*Bemerkung 4.18.* Entwickelt man das Resultat (4.109) in der Varianz  $\sigma_f^2$ , so ist das Ergebnis einschließlich der Ordnung  $O(\sigma_f^2)$  äquivalent mit dem Resultat aus der störungstheoretischen Berechnung für  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  in Abschnitt 4.2.

*Bemerkung 4.19.* Für zwei Raumdimensionen liefert das Resultat aus der Renormierungsgruppen-Analyse für  $\lambda \rightarrow \infty$  das geometrische Mittel. Dies ist der exakte effektive Permeabilitätswert für ein isotropes Medium. Diese Übereinstimmung kann als Rechtfertigung für die benutzten Vereinfachungen in der Renormierungsgruppen-Analyse, um  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  herzuleiten, angesehen werden. In der störungstheoretischen Berechnung von  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  in Abschnitt 4.2 ergibt sich die Übereinstimmung bereits bis zur betrachteten Ordnung.

*Bemerkung 4.20.* Im isotropen Fall ist die Approximation durch den führenden Ordnungsterm in der Renormierungsgruppen-Analyse für  $\lambda \rightarrow \infty$  nicht nur für zwei, sondern für  $d$  Dimensionen exakt. Der Grund ist, daß alle Beiträge höherer Ordnung der Störungsreihe von  $\hat{G}$  in der Änderung von  $K^{\text{eff}}$ , die in  $O(\delta\lambda^2\sigma_f^4)$  enthalten sind (Gl. (4.101)), in (4.103) aufgrund des Limes  $\delta\lambda \rightarrow 0$  nicht beitragen (siehe auch [HC99]).

*Bemerkung 4.21.* Für die weiche Abschneidefunktion aus (4.67) erhält man:

$$\int P_{\lambda,q}^+(\omega(q)) = (2\pi)^d \sigma_f^2 \left( 1 - \left( \frac{1}{1 + \Lambda^2/(l_0^2 a_w^2)} \right)^{d/2} \right) \quad (4.110)$$

und damit die Differentialgleichung

$$\frac{d}{d\lambda} K^{\text{eff}}(\lambda) = -\frac{\sigma_f^2}{d} K^{\text{eff}}(\lambda) \frac{d}{d\lambda} \left( 1 - \left( \frac{1}{1 + \lambda^2/(l_0^2 a_w^2)} \right)^{d/2} \right) \quad (4.111)$$

mit der Lösung

$$K^{\text{eff}}(\lambda) = \bar{K} \exp\left(-\frac{\sigma_f^2}{d} \left( 1 - \left( \frac{1}{1 + \lambda^2/(l_0^2 a_w^2)} \right)^{d/2} \right)\right) \quad (4.112)$$

im isotropen Fall (vgl. [Att02, AEN02]). Die Entwicklung von  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  in  $\sigma_f^2$  ergibt wieder eine Übereinstimmung mit dem störungstheoretischen Resultat (4.68), das mit der weichen Abschneidefunktion berechnet wird.

### Das Resultat für $K^{\text{eff}}(\lambda)$ aus der Renormierungsgruppen-Analyse

In zwei Raumdimensionen lautet der effektive Permeabilitätswert für ein isotropes Medium aus (4.109):

$$K^{\text{eff}}(\lambda) = K_g \exp\left(\frac{\sigma_f^2}{2} \left( \text{erf}\left(\frac{l_0 a_s}{\sqrt{2}\lambda}\right) \right)^2\right). \quad (4.113)$$

$K^{\text{eff}}(\lambda)$  modelliert den skalenabhängigen Übergang vom arithmetischen Mittelwert  $K_a = \bar{K} = K_g \exp(\sigma_f^2/2)$  im Fall  $\lambda = 0$ , das heißt ohne Hochskalierung, zum geometrischen Mittel  $K_g$  für ein globales Upscaling.

In drei Dimensionen erhält man:

$$K^{\text{eff}}(\lambda) = K_g \exp\left(\frac{\sigma_f^2}{6} + \frac{\sigma_f^2}{3} \left( \text{erf}\left(\frac{l_0 a_s}{\sqrt{2}\lambda}\right) \right)^3\right), \quad (4.114)$$

was den skalenabhängigen Übergang vom arithmetischen Mittel zu  $K_g \exp(\sigma_f^2/6)$  für das globale Upscaling beschreibt. In Abb. 4.5 sind die Ergebnissen für zwei und drei Dimensionen für die Varianzen  $\sigma_f^2 = 1/2$  und  $\sigma_f^2 = 1$  dargestellt.

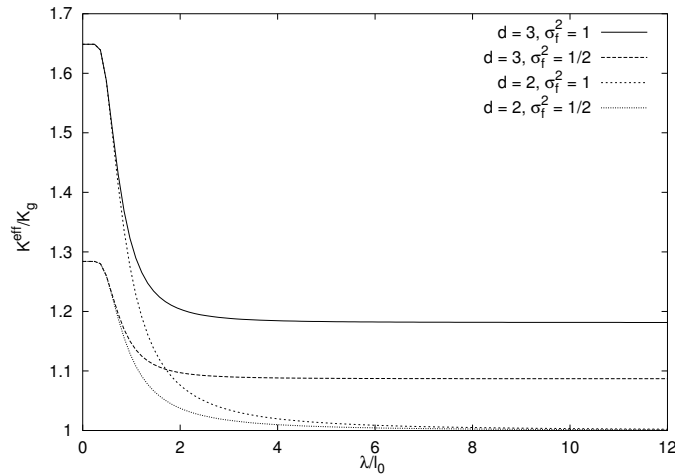


Abbildung 4.5:  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  aus Gl. (4.109) für  $d$  Raumdimensionen mit  $\sigma_f^2 = 1/2$  und  $\sigma_f^2 = 1$  ( $a_s = 1$ ).

### Vergleich mit Ergebnissen aus der Literatur

Die theoretischen Resultate aus der Renormierungsgruppen-Analyse sind mit den Ergebnissen vergleichbar, die Dykaar und Kitanidis numerisch gefunden haben [DK92a, DK92b]. Sie leiten den effektiven Permeabilitätswert mithilfe eines numerischen Spektralansatzes her. Darin werden die effektiven Werte durch ein Volumenmittel von Hilfgleichungen bestimmt, die als Lösungen von zusätzlichen Differentialgleichungen wie in der Homogenisierungstheorie definiert sind. Ihr Resultat entspricht im Fourier-Raum Gl. (4.42). Dykaar und Kitanidis berechnen aber den effektiven Permeabilitätswert nur numerisch. Ihre Resultate für eine gaußförmige Korrelationsfunktion können mit den von uns theoretisch hergeleiteten Ergebnissen verglichen werden, was in der Abb. 4.6 für  $\sigma_f^2 = 0.75$  und  $\sigma_f^2 = 0.8$  geschehen ist.

Dykaar und Kitanidis haben für den asymptotischen effektiven Permeabilitätswert in drei Raumdimensionen ebenfalls numerisch  $K_g \exp(\sigma_f^2/6)$  für ein isotropes Medium gefunden.

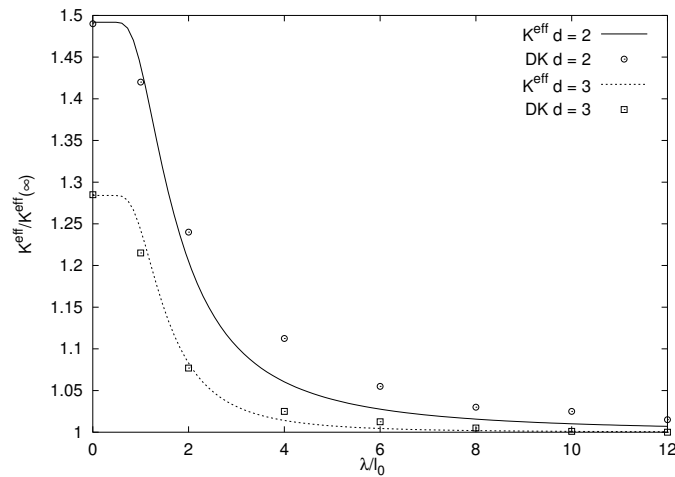


Abbildung 4.6:  $K^{\text{eff}}(\lambda)/K^{\text{eff}}(\lambda \rightarrow \infty)$  aus der Renormierungsgruppen-Analyse für zwei bzw. drei Dimensionen im Vergleich mit den numerischen Ergebnissen (DK) aus [DK92a, DK92b] für  $\sigma_f^2 = 0.8$  ( $d = 2$ ) bzw.  $\sigma_f^2 = 0.75$  ( $d = 3$ ) ( $a_s = 2$ ).





## Kapitel 5

# Numerisches Coarse Graining und Mehrgitter

Das hochskalierte Permeabilitätsfeld und die hochskalierte Strömungsgleichung aus der Methode des Coarse Grainings stellen die Grundlage für ein numerisches Upscaling eines gegebenen feinskaligen Permeabilitätsfeldes und die Berechnung der Lösung auf einer gegebenen Längenskala dar. Das Upscaling aus dem Coarse Graining ist, wie wir sehen werden, in vielen Fällen einem einfachen Hochskalieren des Permeabilitätsfeldes, etwa durch lokale Mittelung mithilfe des geometrischen oder arithmetischen Mittelwertes, überlegen.

Wir stellen in diesem Kapitel zusammen, wie die im Fourier-Raum vorgestellte Methode des Coarse Grainings numerisch benutzt werden kann, um den effektiven Permeabilitätstensor zu berechnen. Dazu legen wir unser Augenmerk besonders auf die Konstruktion des hochskalierten Feldes, indem wir lokal effektive Koeffizienten bestimmen. Dadurch erhalten wir ein ortsabhängiges effektives Permeabilitätsfeld, wie es auch in [AEN02] vorgeschlagen wird.

Wir unterscheiden deswegen zwischen dem effektiven Permeabilitätskoeffizienten, einem für eine Realisierung hochskalierten, ortsunabhängigen Koeffizienten  $K^{\text{real}}(\lambda)$  und einem numerisch hochskalierten, ortsabhängigen Koeffizienten  $K^{\text{num}}(x, \lambda)$ .

Die numerische Berechnung des effektiven Permeabilitätstensors erlaubt uns, die theoretischen Vorhersagen aus der Theorie des Coarse Grainings nachzuprüfen. Außerdem sind wir imstande, aus einem gegebenen feinskaligen Feld durch Iteration des Coarse Grainings eine Hierarchie von Permeabilitätsfeldern zu erzeugen, die sukzessive größeren Längenskalen entsprechen. Wir betrachten den Fluß und den Fehler aus Berechnungen für diese Felder und vergleichen die Ergebnisse mit Resultaten für einfache Upscalingsverfahren.

Die Hierarchie von sukzessiv größeren Feldern verwenden wir dann im Rahmen einer Mehrgittermethode, um ein algebraisches Mehrgitterverfahren zu definieren. Darauf gehen wir am Ende des Kapitels ein.

Wir verwenden im folgenden wieder die Einsteinsche Summenkonvention und  $\int \dots \equiv \int_{\mathbb{R}^d} \dots$

### 5.1 Numerisches Coarse Graining

Aus der Methode des Coarse Grainings erhält man für  $\lambda \rightarrow \infty$ , wenn also alle Fluktuationen eliminiert werden,

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) = \bar{K}_{ij} + \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int \overline{\hat{k}_{il}(-q) i q_l \hat{G}(q, -q') i q'_m \hat{k}_{mj}(q')} d^d q' d^d q \quad (5.1)$$

als effektiven Permeabilitätswert, Gl. (4.49). Durch Substitution der fouriertransformierten Größen ergibt sich daraus

$$\begin{aligned}
\lim_{\lambda \rightarrow \infty} K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) &= \overline{K}_{ij} - \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int \overline{k_{il}(x) \partial_{x'_i} \partial_{x''_m} G(x', x'') k_{mj}(x''')} \times \\
&\quad \exp(iq \cdot (x - x') + iq' \cdot (x'' - x''')) d^d q' d^d q d^d x'' \dots d^d x \\
&= \overline{K}_{ij} - \int \overline{k_{il}(x) \partial_{x'_i} \partial_{x''_m} G(x', x'') k_{mj}(x''')} \delta(x - x') \delta(x'' - x''') d^d x'' \dots d^d x \quad (5.2) \\
&= \overline{K}_{ij} - \int \overline{k_{il}(x) \partial_{x_i} \partial_{x''_m} G(x, x'') k_{mj}(x'')} d^d x'' d^d x \\
&= \overline{K}_{ij} + \int \overline{k_{il}(x) \partial_{x_i} G(x, x') \partial_{x'_m} k_{mj}(x')} d^d x' d^d x
\end{aligned}$$

mit den entsprechenden Funktionen im Ortsraum. Damit erhält man:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) = \overline{K}_{ij} + \int \overline{k_{il}(x) \partial_{x_i} G(x, x') \partial_{x'_m} k_{mj}(x')} d^d x' d^d x \quad (5.3)$$

mit der Greenschen Funktion, die die Strömungsgleichung

$$-\text{div}(\overline{K} + k(x)) \nabla G(x, x') = \delta(x - x') \quad (5.4)$$

für das feinskalige Permeabilitätsfeld  $K(x)$  wie unter Definition 2.11 erfüllt. Ausdruck (5.3) stellt einen konstanten, effektiven Permeabilitätstensor für das Feld  $K(x)$  dar.

*Bemerkung 5.1.* Zur Berechnung von  $K^{\text{eff}}$  muß die Ensemblemittelung über alle Feldrealisierungen durchgeführt werden. Aufgrund der Ergodizität des Gaußschen Zufallsfeldes kann sie aber in  $K^{\text{eff}}(\lambda \rightarrow \infty)$  vernachlässigt werden: die Volumenintegration über  $\mathbb{R}^d$  entspricht der Ensemblemittelung. Dies gilt allerdings nur im global hochskalierten Fall  $\lambda \rightarrow \infty$ .

### Effektiver Permeabilitätstensor für $\lambda < \infty$

Für eine endliche Längenskala  $\lambda$  ergibt sich aufgrund der Darstellung der Projektoren im Ortsraum ein komplizierterer Ausdruck für die effektive Permeabilität als für  $\lambda \rightarrow \infty$ . Der Projektion  $P_{\lambda, q}^+$ , die  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  aus Gl. (4.49) enthält, entspricht im Ortsraum die Distribution

$$\begin{aligned}
S(x, \lambda) &:= \frac{1}{(2\pi)^d} \int \exp(iq \cdot x) P_{\lambda, q}^+ d^d q \\
&= \delta(x) - \prod_{i=1}^d \frac{\sin(x_i a_s / \lambda)}{\pi x_i} \quad (5.5)
\end{aligned}$$

als Fourier-Transformierte einer scharfen Abschneidefunktion (vgl. Beispiel 2.2). Damit leitet sich der effektive Permeabilitätstensor  $K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda)$  aus (4.49) analog zu (5.2) aus den fouriertransformierten Größen exakt zu

$$\begin{aligned}
K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) &= \overline{K}_{ij} - \int \overline{k_{il}(x) S(x - x', \lambda) \partial_{x'_i} \dots} \\
&\quad \left( \int \overline{S(x'' - x''', \lambda) \partial_{x''_m} G(x', x'') k_{mj}(x''')} d^d x'' d^d x'' \right) d^d x' d^d x \quad (5.6)
\end{aligned}$$

ab. Im Limes  $\lambda \rightarrow 0$  konvergiert  $\prod_{i=1}^d \frac{\sin(x_i a_s / \lambda)}{\pi x_i}$  im Distributionssinn gegen die Delta-Distribution, so daß man  $S(x, 0) \equiv 0$  erhält. Für  $\lambda \rightarrow \infty$  hingegen gilt:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} S(x, \lambda) = \delta(x). \quad (5.7)$$

Für  $\lambda \rightarrow 0$  geht (5.6) damit gegen den Mittelwert  $\overline{K}_{ij}$ . Der Ausdruck (5.6) für  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  ergibt sich als exakte Herleitung.

Da wir diesen Ausdruck numerisch nicht handhaben können, geben wir im folgenden eine Approximation für  $K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda)$  aus (5.6) an, die numerisch leicht berechenbar ist und zugleich eine Definition von ortsabhängigen Koeffizienten zuläßt. Für diesen Zweck bedarf es einer geeigneten Näherung von  $S$  in  $K^{\text{eff}}(\lambda)$ , die wir im folgenden motivieren.

Formal gesehen hat  $S(x-x', \lambda)$  in  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  offensichtlich zwei Funktionsweisen:  $S(x-x', \lambda)$  verknüpft durch die Delta-Funktion die Argumente  $x$  und  $x'$ . Durch die Faltung

$$(S * f(\cdot, x''))(x) = f(x, x'') - \int f(x + x', x'') \prod_{i=1}^d \frac{\sin(x'_i a_s / \lambda)}{\pi x'_i} d^d x' =: W_\lambda(x, x'') \quad (5.8)$$

mit einer Funktion  $f(x, x')$  mit kompaktem Träger wirkt  $S$  außerdem ähnlich einer lokalen Glättungsfunktion  $W_\lambda$ , wie sie am Anfang des Kapitels 4.1 erwähnt wird.

Aufgrund der Feststellung (5.7) dominiert für sehr große Längenskalen  $\lambda$  in  $S$  die Delta-Distribution, und wir können als Näherung

$$\int S(x - x', \lambda) f(x', x'') d^d x'' d^d x' d^d x \approx \int f(x, x') d^d x' d^d x \quad (5.9)$$

setzen. Für kleiner werdendes  $\lambda > 0$  hingegen kann man die Wirkung von  $S$  zusammen mit der Integration durch eine einfache Mittelung approximieren: Betrachtet man in einer Raumdimension, wie in der Abb. 5.1 gezeigt,  $|W_\lambda(x, x')|$  für abnehmendes  $\lambda$  und beispielsweise

$$f(x, x') = \begin{cases} \Theta(x - x') - \Theta(x' - x) & \text{für } |x - x'| \leq C \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

für  $x' = 0$ , erkennt man, daß sich die Funktionswerte, die deutlich von null verschieden sind, um den Ursprung konzentrieren. Die Heaviside-Funktion ist definiert durch

$$\Theta(x) := \begin{cases} 1 & \text{für } x \geq 0 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Im Fall kleiner Längenskalen  $\lambda$  entspricht die Wirkung von  $(S * f(\cdot, x'))$  damit näherungsweise einer lokalen Glättung am Ort  $x'$ .

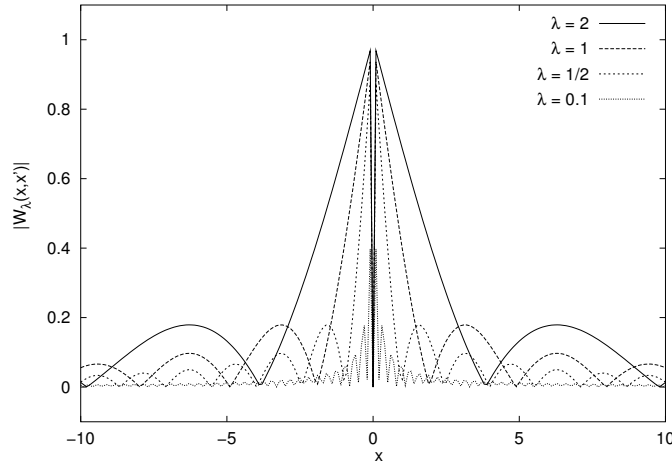


Abbildung 5.1:  $|W_\lambda(x, x')|$  in einer Dimension für  $f(x, x') = \Theta(x - x') - \Theta(x' - x)$  mit  $|x - x'| \leq 10$  und  $f(x, x') = 0$  sonst,  $x' = 0$ , und verschiedene Werte von  $\lambda$  ( $a_s = 1$ ).

Damit können wir für kleines  $\lambda$

$$\int S(x - x', \lambda) f(x', x'') d^d x'' d^d x' d^d x \approx \int \int_{E_\lambda^{(x)}} f(x, x') d^d x' d^d x \quad (5.10)$$

approximieren.  $E_\lambda^{(x)}$  definiert den  $d$ -dimensionalen Würfel  $E_\lambda^{(x)} := \prod_{i=1}^d [x_i - \lambda/a_s, x_i + \lambda/a_s]$  um den Punkt  $x$ . Mit der Näherung (5.9) und (5.10) approximieren wir nun für beliebiges  $\lambda \geq 0$ :

$$\int S(x - x', \lambda) f(x', x'') d^d x'' d^d x' d^d x \approx \int \int_{E_\lambda^{(x)}} f(x, x') d^d x' d^d x. \quad (5.11)$$

Mit dieser Approximation erhält man für den effektiven Permeabilitätskoeffizienten aus (5.6)

$$K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) \approx \overline{K}_{ij} + \int \overline{k_{il}(x) \partial_{x_l} \left( \int_{E_\lambda^{(x)}} G(x, x') \partial_{x'_m} k_{mj}(x') d^d x' \right) d^d x}, \quad (5.12)$$

wobei wir den zweiten Ausdruck von  $S$  in (5.6) zum Zweck der numerisch leichteren Handhabung allein durch die Delta-Funktion genähert haben.

*Bemerkung 5.2.* Oben eingeführte Näherungen sind offensichtlich eine sehr rudimentäre Approximation für die exakten Ausdrücke in  $K^{\text{eff}}(\lambda)$ . Für  $\lambda = 0$  bzw. für ein Hochskalieren zu sehr großen Längenskalen  $\lambda$  geht  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  aus (5.12) aber in den exakten Koeffizienten  $\overline{K}$  bzw. Gl. (5.3) über. Und durch die Approximationen ist eine numerische Behandlung möglich, die ein effizientes Berechnen von  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  und auch die Definition von ortsabhängigen Koeffizienten erlaubt.

### Hochskalierter Permeabilitätstensor für eine Realisierung

Bisher haben wir die effektive Permeabilität, die ein Ensemblemittel enthält, betrachtet. Wir sind insbesondere auch am hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten einer Realisierung für  $\lambda \rightarrow \infty$  und endliches  $\lambda$  interessiert, der sich allein aus der Kenntnis dieser Realisierung ableiten läßt.

Wir definieren formal für  $\lambda \rightarrow \infty$

$$K_{ij}^{\text{real}}(\lambda \rightarrow \infty) := \overline{K}_{ij} + \int k_{il}(x) \partial_{x_l} G(x, x') \partial_{x'_m} k_{mj}(x') d^d x' d^d x, \quad (5.13)$$

da  $K^{\text{real}}(\lambda \rightarrow \infty) = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} K^{\text{eff}}(\lambda)$ . Den hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten für eine Realisierung für eine endliche Längenskala  $\lambda$  definieren wir analog zu (5.12) ohne die Ensemblemittelung.

#### Definition 5.1.

$$K_{ij}^{\text{real}}(\lambda) := \overline{K}_{ij} + \delta K_{ij}^{\text{real}}(\lambda) := \overline{K}_{ij} + \int \delta K_{ij}^{\text{real}}(x, \lambda) d^d x \quad (5.14)$$

mit

$$\delta K_{ij}^{\text{real}}(x, \lambda) := k_{il}(x) \partial_{x_l} \int_{E_\lambda^{(x)}} G(x, x') \partial_{x'_m} k_{mj}(x') d^d x'. \quad (5.15)$$

Damit gilt:  $K^{\text{eff}}(\lambda) = \overline{K^{\text{real}}(\lambda)}$ . In Abschnitt 5.4.4 werden wir numerisch zeigen, wie gut die durch die Vernachlässigung der Ensemblemittelung gemachte Approximation für  $K^{\text{real}}$  im Vergleich zum effektiven Wert ist.

*Bemerkung 5.3.* Aus dem theoretischen Resultat für die mittlere quadratische Abweichung des hochskalierten Koeffizienten zum effektiven Wert  $(K^{\text{real}}(\lambda) - K^{\text{eff}}(\lambda))^2$ , das wir in störungstheoretischer Näherung im Abschnitt 4.3.2 hergeleitet haben, entnimmt man, daß für kleine Varianzen  $\sigma_f^2 < 1$  die Vernachlässigung der Mittelung nur einen sehr kleinen Fehler macht.

Die Funktion  $\delta K_{ij}^{\text{real}}(\lambda)$  ist numerisch zugänglich, wenn man  $G(x, x')$  kennt. Um aus ihr eine lokale, ortsabhängige Größe zu erhalten, ist es naheliegend, die Greensche Funktion  $G$  in  $\delta K^{\text{real}}$ , die die Strömungsgleichung (5.4) erfüllt, lokal durch die Greensche Funktion  $G^{(x)}$  für  $E_\lambda^{(x)}$  zu approximieren.<sup>1</sup> Analog wird auch in [AEN02] ein ortsabhängiger Permeabilitätskoeffizient definiert.

<sup>1</sup>Das hochgestellte  $x$  in  $G^{(x)}$  ist als Index zu verstehen.

*Bemerkung 5.4.* Die Ersetzung von  $G$  durch  $G^{(x)}$  in Gl. (5.15) vereinfacht die numerische Berechnung und ist durch folgendes motiviert:  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  bzw.  $K^{\text{real}}(\lambda)$  modelliert den Einfluß kleinskaliger Fluktuationen auf einer größeren Längenskala, die diese Fluktuationen nicht mehr auflöst. Grob-skalige Fluktuationen werden in der hochskalierten Strömungsgleichung weiterhin aufgelöst und direkt modelliert. Die Greensche Funktion muß daher die Beiträge enthalten, die von den subska-ligen Heterogenitäten stammen. Grob-skalige Beiträge können in ihr vernachlässigt werden. Dieses Kriterium wird durch die Reduktion des betrachteten Raumes auf ein Volumen proportional zu  $\lambda^d$  wie in  $E_\lambda^{(x)}$  weiterhin erfüllt.

**Definition 5.2.** Wir definieren die Greensche Funktion  $G^{(x)}$  durch:  $G^{(x)}(x', x'')$  erfülle die Strömungsgleichung<sup>2</sup>

$$-\text{div}(\overline{K} + k(x')) \nabla G^{(x)}(x', x'') = \delta(x' - x'') \quad (5.16)$$

in  $E_\lambda^{(x)}$ ,  $x \in \mathbb{R}^d$  fest, mit noch zu spezifizierenden Randbedingungen.  
Mit

$$\delta K_{ij}^{\text{num}}(x', \lambda) := k_{il}(x') \partial_{x'_l} \int_{E_\lambda^{(x)}} G^{(x)}(x', x'') \partial_{x''_m} k_{mj}(x'') d^d x'' \quad \text{für } x' \in E_\lambda^{(x)} \quad (5.17)$$

können wir einen lokalen hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten am Ort  $x$  durch

$$\overline{K}_{ij} + \int_{E_\lambda^{(x)}} \delta K_{ij}^{\text{num}}(x', \lambda) d^d x' \quad (5.18)$$

bestimmen. Die Funktion

$$\chi_j^{(x)}(x') := \int_{E_\lambda^{(x)}} G^{(x)}(x', x'') \partial_{x''_m} k_{mj}(x'') d^d x'' \quad \text{mit } x' \in E_\lambda^{(x)} \quad (5.19)$$

erfüllt dann für festes  $x$  die Differentialgleichung<sup>2</sup>

$$\begin{aligned} -\text{div} K(x') \nabla \chi_j^{(x)}(x') &= \partial_{x'_m} k_{mj}(x') \\ &= \text{div}(K(x') e_j) \quad \text{für } x' \in E_\lambda^{(x)}, x \text{ fest,} \end{aligned} \quad (5.20)$$

$$\Leftrightarrow -\text{div} K(x') \nabla (\chi_j^{(x)}(x') + x'_j) = 0 \quad \text{für } x' \in E_\lambda^{(x)}, x \text{ fest,} \quad (5.21)$$

mit geeigneten Randbedingungen und dem Einheitsvektor  $e_j$  in  $x_j$ -Richtung.  $\chi_j^{(x)}(x')$  variiert in  $x' \in E_\lambda^{(x)}$ ,  $x$  fest.

Den ortsabhängigen, numerisch hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten am Ort  $x$  von  $E_\lambda^{(x)}$  definieren wir nun durch:

**Definition 5.3 (Numerisch hochskaliertes Permeabilitätstensor).**

$$\begin{aligned} K_{ij}^{\text{num}}(x, \lambda) &:= \overline{K}_{ij} + \int_{E_\lambda^{(x)}} \delta K_{ij}^{\text{num}}(x', \lambda) d^d x' \\ &= \overline{K}_{ij} + \int_{E_\lambda^{(x)}} k_{il}(x') \partial_{x'_l} \chi_j^{(x)}(x') d^d x'. \end{aligned} \quad (5.22)$$

*Bemerkung 5.5.* Aus der Größe von  $E_\lambda$  ergibt sich für die Konstante  $a_s$  aus der Definition 4.1 für den Vergleich der Ergebnisse aus dem numerischen und theoretischen Coarse Graining  $a_s = 2$ . Die Konstante  $a_w$  aus Definition (4.67) setzen wir ebenfalls auf  $a_w = 2$ .

---

<sup>2</sup> $\text{div}$  und  $\nabla$  wirken auf  $x'$ .

**Satz 5.1.** *Das Permeabilitätsfeld  $K_{ij}(x)$  sei diagonal und positiv definit. Dann ist im Grenzfall  $\lambda \rightarrow \infty$   $K_{ij}^{\text{num}}$  symmetrisch und positiv definit. Mit der Ersetzung*

$$\overline{K}_{ij} \rightarrow \int_{E_\lambda^{(x)}} K_{ij}(x') d^d x'$$

erhält man auch für eine endliche Längenskala  $\lambda$ , daß

$$\int_{E_\lambda^{(x)}} K_{ij}(x') d^d x' + \int_{E_\lambda^{(x)}} k_{il}(x') \partial_{x'_l} \chi_j^{(x)}(x') d^d x' \quad (5.23)$$

symmetrisch, positiv definit ist, falls  $\chi_j^{(x)}$  eine der folgenden Randbedingungen auf  $\partial E_\lambda^{(x)}$  erfüllt:

- Dirichlet-Nullrandbedingungen,
- periodische Randbedingungen, falls  $K$  periodisch ist in jede Richtung mit Periode  $2\lambda/a_s$ ,
- unten definierte NZF-Randbedingungen und  $\int_{E_\lambda^{(x)}} \overline{K}_{il} \partial_{x'_l} \chi_j^{(x)}(x') d^d x' = 0$ .

*Beweis.* Für jede der drei genannten Bedingungen gilt

$$\int_{E_\lambda^{(x)}} \overline{K}_{il} \partial_{x'_l} \chi_j^{(x)}(x') d^d x' = 0$$

und somit

$$\begin{aligned} & \int_{E_\lambda^{(x)}} K_{ij}(x') d^d x' + \int_{E_\lambda^{(x)}} k_{il}(x') \partial_{x'_l} \chi_j^{(x)}(x') d^d x' \\ &= \int_{E_\lambda^{(x)}} K_{il}(x') \partial_{x'_l} (x'_j + \chi_j^{(x)}(x')) d^d x'. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Für  $\lambda \rightarrow \infty$  geht dieser Ausdruck in  $K_{ij}^{\text{num}}(\lambda \rightarrow \infty)$  über. Mit der Variationsformulierung für (5.21) und den Randbedingungen von  $\chi_j^{(x)}(x')$  erhält man

$$\begin{aligned} & - \int_{E_\lambda^{(x)}} \text{div}(K(x) \nabla(x'_j + \chi_j^{(x)}(x'))) \chi_i^{(x)}(x') d^d x' = \\ & \int_{E_\lambda^{(x)}} (K(x) \nabla(x'_j + \chi_j^{(x)}(x'))) \cdot \nabla \chi_i^{(x)}(x') d^d x' = 0, \end{aligned}$$

da das Integral über den Rand verschwindet. Damit gilt:

$$\begin{aligned} & \int_{E_\lambda^{(x)}} K_{il}(x') \partial_{x'_l} (x'_j + \chi_j^{(x)}(x')) d^d x' = \int_{E_\lambda^{(x)}} K_{ml}(x') \partial_{x'_l} (x'_j + \chi_j^{(x)}(x')) \partial_{x'_m} x'_i d^d x' \\ &= \int_{E_\lambda^{(x)}} K_{ml}(x') \partial_{x'_l} (x'_j + \chi_j^{(x)}(x')) \partial_{x'_m} (x'_i + \chi_i^{(x)}(x')) d^d x', \end{aligned} \quad (5.25)$$

woraus die Behauptung folgt.  $\square$

**Definition 5.4 (NZF-Randbedingungen).** Die NZF-Randbedingungen sind eine spezielle Wahl von gemischten Randbedingungen an  $\chi_j^{(x)}$  auf  $\partial E_\lambda^{(x)}$  wie in Abschnitt 2.7.1. Sie lauten für festes  $x$  und  $j = 1, \dots, d$  fest:

$$\begin{aligned} \chi_j^{(x)}(x') &= 0 & \text{falls } x'_j = x_j - \lambda/a_s \text{ oder } x'_j = x_j + \lambda/a_s, \\ n(x') \cdot (K(x') \nabla \chi_j^{(x)}(x')) &= 0 & \text{sonst,} \end{aligned} \quad (5.26)$$

mit  $x' \in \partial E_\lambda^{(x)}$ .  $n(x') \in \mathbb{R}^d$  ist der äußere Einheits-Normalenvektor von  $E_\lambda^{(x)}$  in  $x'$ .

*Bemerkung 5.6.* Die NZF-Randbedingung stellt physikalisch gesehen die Bedingungen abzüglich von Druckwerten dar, die in einem lokalen Pumpversuch vorherrschen. Wir werden in dieser Arbeit fast ausschließlich diese Randbedingung bei der Lösung der Differentialgleichung (5.21) verwenden.

### 5.1.1 Analogie zur Theorie der Homogenisierung

Die Hilfsgleichung (5.20) bzw. (5.21) entspricht in der Homogenisierungstheorie dem eingeführten Zellproblem mit der Lösung  $w$  als Zelllösung. Ist das Permeabilitätsfeld  $K(x)$  periodisch, so daß für eine Zerlegung in Periodizitätszellen der Permeabilitätstensor in jeder Zelle  $Y$  die gleiche Gestalt hat, ergibt sich mit periodischen Randbedingungen für das Zellproblem (5.21) und der Gleichheit von  $\overline{K}_{ij}$  mit

$$\int_{E_\lambda^{(x)}} K_{ij}(x') d^d x',$$

wobei  $E_\lambda^{(x)}$  identisch mit einer Periodizitätszelle  $Y$  sei, für den numerisch hochskalierten Permeabilitätstensor  $K_{ij}^{\text{num}}(x, \lambda)$  exakt der homogenisierte Koeffizient  $A_{ij}^{\text{hom}}$  aus der Theorie der Homogenisierung:

$$\begin{aligned} K_{ij}^{\text{num}}(x, \lambda) &= \int_{E_\lambda^{(x)}} K_{ij}(x') d^d x' + \int_{E_\lambda^{(x)}} k_{il}(x') \partial_{x'_l} \chi_j^{(x)}(x') d^d x' \\ &= \int_{E_\lambda^{(x)}} K_{il}(x') \partial_{x'_l} (x'_j + \chi_j^{(x)}(x')) d^d x'. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Wir verwenden daher öfters für Gl. (5.21) und  $\chi^{(x)}$  die Bezeichnungen Zellproblem und Zelllösung.

## 5.2 Vergleich von Mehrskalen-Theorie und numerischem Coarse Graining

Wir gehen im folgenden kurz auf die Multiskalen-Finite-Element-Methode (MS-FEM) von Hou et al. ein und zeigen, daß man aus der MS-FEM einen Permeabilitätskoeffizienten herleiten kann, der der Definition 5.3 für den numerischen Koeffizienten entspricht. Dazu erläutern wir kurz das Vorgehen in der MS-FEM (siehe z.B. [HW97, HWC99, CH00, EHW00]).

Die Mehrskalen-Finite-Element-Methode geht von der elliptischen Gleichung

$$-\text{div } K(x) \nabla u(x) = f(x) \quad (5.28)$$

in einem Gebiet  $\Omega$  aus.  $K(x)$  sei ein Tensor und variere auf mehreren Längenskalen.

Um die Darstellung der Finite-Elemente Formulierung zu vereinfachen, nimmt man  $u = 0$  auf dem Rand  $\partial\Omega$  und  $\Omega = [0, 1]^2$  an. Die Variationsformulierung von (5.28) lautet analog zu Problem 2.2: Suche  $u \in H_0^1(\Omega)$ , so daß

$$a(u, v) := \int_{\Omega} K_{ij}(x) \partial_{x_i} v(x) \partial_{x_j} u(x) d^2 x = \int_{\Omega} f(x) v(x) d^2 x =: f(v) \quad (5.29)$$

für alle  $v \in H_0^1(\Omega)$ .

Die Idee der MS-FEM ist, von den Standardbasisvektoren  $\psi^{(i)}(x)$  zu angepaßten Basisvektoren  $\phi_{T_j}^{(i)}(x)$ , mit  $i = 1, \dots, 4$  für zwei Dimensionen, überzugehen. Wesentlich dafür ist eine Zerlegung  $\tau = \{T_1, \dots, T_N\}$  von  $\Omega$ , wie in Abschnitt 2.7.2 eingeführt.

Die Basisvektoren  $\phi_{T_j}^{(i)}(x)$  sind an die Mikrostruktur des Mediums angepaßt, indem sie die kleinskaligen Informationen innerhalb jedes Elements enthalten: Zu einem Element  $T_j$  erfüllen die Basisvektoren

$$\text{div } K(x) \nabla \phi_{T_j}^{(i)}(x) = 0 \quad \text{für } x \in T_j, i = 1, \dots, 4, \quad (5.30)$$

und geeignete Randbedingungen abhängig vom Index  $i$ . Insbesondere gelte

$$\phi_{T_j}^{(i)}(p^{(k)}) = \delta_{ik} \quad (5.31)$$

mit den Eckpunkten  $p^{(k)}$  von  $T_j$ . Unter der Annahme, daß die so gewonnenen Basisfunktionen an den Elementrändern stetig sind, lösen Hou et al. dann das mikroskalige Variationsproblem (5.29) in dem endlich-dimensionalen Ansatzraum

$$V := \text{span}\{\phi_{T_j}^{(i)}(x), i = 1, \dots, 4, T_j \in \tau\} \subset H_0^1(\Omega). \quad (5.32)$$

*Bemerkung 5.7.* Im einfachsten Fall sind die Randbedingungen für  $\phi_{T_j}^{(i)}$  in [HW97] durch Dirichlet-Randbedingungen mit linearen Funktionen gegeben, die die Bedingung (5.31) wie die Standard-Knotenbasisfunktionen erfüllen. Auf eine differenziertere Wahl der Randbedingungen für  $\phi_{T_j}^{(i)}$  auf  $\partial T_j$  gehen wir nicht ein. Wir verweisen dazu auf die Bemerkung 3.10 und auf die genannten Arbeiten.

Für die lokale Steifigkeitsmatrix  $A^{lok}$ , die die Matrixeinträge in der Assemblierung für ein Element  $T_l$  angibt, erhält man damit in der MS-FEM:

$$A_{ij}^{lok} = \sum_{m,n=1}^2 \int_{T_l} K_{mn}(x) \partial_{x_m} \phi_{T_l}^{(i)}(x) \partial_{x_n} \phi_{T_l}^{(j)}(x) d^2x. \quad (5.33)$$

Um die Verbindung zum hochskalierten Permeabilitätstensor aus der Coarse Graining Methode herzustellen, dient nun folgende Fragestellung als Ansatz:

Wie lautet ein modifizierter Tensor  $\tilde{K}$ , der konstant anstelle des variablen  $K(x)$  im Element  $T_l$  sei, um mittels der Standard-Knotenbasis aus (2.109) gemäß

$$\tilde{A}_{ij}^{lok} = \sum_{m,n=1}^2 \int_{T_l} \tilde{K}_{mn} \partial_{x_m} \psi_i(x) \partial_{x_n} \psi_j(x) d^2x \quad (5.34)$$

eine lokale Steifigkeitsmatrix zu erhalten, so daß die Teilsummen von Matrixeinträgen  $\tilde{A}_{ij}^{lok}$ , die einen Eintrag von  $\tilde{K}$  ergeben, mit denen aus  $A^{lok}$  in (5.33) gleich sind? Eine Antwort darauf gibt die folgende Herleitung.

Für zwei Raumdimensionen führt Gl. (5.34) mit der Standard-Knotenbasis  $\{\psi_i\}$  zunächst auf die Beziehungen:

$$\tilde{K}_{11} = \tilde{A}_{11}^{lok} + \tilde{A}_{14}^{lok} + \tilde{A}_{41}^{lok} + \tilde{A}_{44}^{lok} \quad (5.35)$$

$$\tilde{K}_{12} = \tilde{A}_{11}^{lok} + \tilde{A}_{12}^{lok} + \tilde{A}_{41}^{lok} + \tilde{A}_{42}^{lok} \quad (5.36)$$

$$\tilde{K}_{21} = \tilde{A}_{11}^{lok} + \tilde{A}_{14}^{lok} + \tilde{A}_{21}^{lok} + \tilde{A}_{24}^{lok} \quad (5.37)$$

$$\tilde{K}_{22} = \tilde{A}_{11}^{lok} + \tilde{A}_{12}^{lok} + \tilde{A}_{21}^{lok} + \tilde{A}_{22}^{lok}. \quad (5.38)$$

Aus der geforderten Gleichheit der Summen ergibt sich damit z.B. für  $i = j = 1$  und  $A^{lok}$  aus (5.33):

$$\tilde{K}_{11} = \sum_{m,n=1}^2 \int_{T_l} K_{mn}(x) \partial_{x_m} (\phi_{T_l}^{(1)}(x) + \phi_{T_l}^{(4)}(x)) \partial_{x_n} (\phi_{T_l}^{(1)}(x) + \phi_{T_l}^{(4)}(x)) d^2x. \quad (5.39)$$

Die übrigen Komponenten von  $\tilde{K}$  ergeben sich aus (5.36-5.38) analog. Unter Ausnutzung der Definition der Funktion  $\chi_j^{(x)}(x')$  aus (5.20) folgert man mit (5.30) für die angepaßten Basisfunktionen die Äquivalenz

$$1 - \frac{\chi_1^{(x)}(x') + x'_1}{h} = \phi_{T_l}^{(1)}(x') + \phi_{T_l}^{(4)}(x') \quad (5.40)$$

mit der Identifizierung  $T_l = E_\lambda^{(x)}$ ,  $x = (\lambda/a_s, \lambda/a_s)$ , und  $\chi_1^{(x)}(x') = 0$  auf  $\partial T_l$ . Die Länge des Elements  $T_l$  sei  $h = 2\lambda/a_s$ , und die Numerierung der Eckpunkte  $p^{(k)}$  sei gegen den Uhrzeigersinn



beginnend mit  $p^{(0)} = (0, 0)$ . So erhält man

$$\begin{aligned}\tilde{K}_{11} &= \frac{1}{h^2} \sum_{m,n=1}^2 \int_{T_1} K_{mn}(x') \partial_{x'_m} (h - \chi_1^{(x)}(x') - x'_1) \partial_{x'_n} (h - \chi_1^{(x)}(x') - x'_1) d^2 x' \\ &= \frac{1}{h^2} \sum_{m,n=1}^2 \int_{T_1} K_{mn}(x') \partial_{x'_n} (\chi_1^{(x)}(x') + x'_1) \delta_{1m} d^2 x',\end{aligned}\quad (5.41)$$

wobei wir die schwache Formulierung von Gl. (5.21),

$$\int_{E_\lambda^{(x)}} (K(x') \nabla (\chi_j^{(x)}(x') + x'_j)) \cdot \nabla v(x') d^2 x' = 0 \quad \text{für alle } v \in H_0^1(E_\lambda^{(x)}), \quad (5.42)$$

mit  $v = \chi_1^{(x)}$  ausgenutzt haben. Damit erhalten wir für den hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten  $\tilde{K}_{11}$  für  $E_\lambda^{(x)}$  aus der MS-FEM:

$$\tilde{K}_{11} = \frac{1}{h^2} \int_{T_1} K_{11}(x') d^2 x' + \frac{1}{h^2} \int_{T_1} k_{1n}(x') \partial_{x'_n} \chi_1^{(x)}(x') d^2 x'. \quad (5.43)$$

Ersetzen wir den Ensemblemittelwert  $\overline{K}_{11}$  in  $K_{11}^{\text{num}}$  aus der Definition 5.3 durch das räumliche Mittel  $h^{-2} \int_{T_1} K_{11}(x) d^2 x$ , entspricht  $\tilde{K}_{11}$  aus der MS-FEM dem numerisch hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten aus der Coarse Graining Methode. Die Entsprechung erhält man ebenso für die weiteren Komponenten von  $\tilde{K}$ :

$$\tilde{K}_{ij} = \frac{1}{h^2} \int_{T_1} K_{ij}(x') d^2 x' + \frac{1}{h^2} \int_{T_1} k_{in}(x') \partial_{x'_n} \chi_j^{(x)}(x') d^2 x'. \quad (5.44)$$

Das implizite Hochskalieren in der Mehrskaligen-Finite-Element-Methode, indem angepaßte Basisvektoren für die Berechnung der (lokalen) Steifigkeitsmatrix verwendet werden, ist damit analog zum numerischen Coarse Graining, wenn man allein den hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten heranzieht.

*Bemerkung 5.8.* Prinzipiell stellt ein Upscaling, das auf der lokalen Steifigkeitsmatrix basiert, aufgrund der Anzahl ihrer Einträge mehr Informationen als ein hochskalierter Permeabilitätstensor zur Verfügung. Allerdings muß man zur Bestimmung von  $A^{\text{lok}}$   $2^d$  Hilfsgleichungen der Art (5.30) lösen, für die Berechnung des physikalisch relevanteren Permeabilitätstensors hingegen nur  $d$  Hilfsgleichungen.

### 5.3 Numerische Berechnung des hochskalierten Permeabilitätsfeldes

In den numerischen Berechnungen gehen wir stets vom Einheitsquadrat in zwei Raumdimensionen aus. Für  $\Omega := [0, 1]^2$  sei, wie in Abschnitt 2.7.2 erläutert, eine zulässige feinste Zerlegung  $\tau_0 := \tau_{h_0} = \{T_j^{(0)}\}_{1 \leq j \leq N}$  gegeben. Das Permeabilitätsfeld wird zunächst durch das beschriebene Verfahren in Abschnitt 2.4.3 als eine Realisierung eines logarithmisch normalverteilten Zufallsfeldes auf  $\Omega$  vorgegeben. Für die numerischen Simulationen setzen wir immer den Wert der Permeabilität innerhalb eines Elements  $T_j^{(0)}$  konstant auf den Wert des Elementmittelpunktes  $\tilde{x}(T_j^{(0)})$ . Auf dem uniformen Gitter von Vierecksgittern für  $\Omega$  gilt damit für das Permeabilitätsfeld  $K(x)$

$$K(x) := K(\tilde{x}(T_j^{(0)})) \quad \text{für alle } x \in T_j^{(0)}. \quad (5.45)$$

Durch geometrische Vergrößerung erhalten wir aus  $\tau_0$  eine Hierarchie  $\tau_i = \{T_j^{(i)}\}$ ,  $i > 0$ , von uniformen Vierecksgittern auf  $\Omega$ , deren Maschenweite  $h_i = 2^i h_0$  ist.

Um den numerisch hochskalierten Permeabilitätstensor für ein Element  $T_j^{(i)} \in \tau_i$ ,  $i > 0$ , zu berechnen, setzen wir

$$E_\lambda^{(x)} = T_j^{(i)} \quad \text{mit} \quad x = \tilde{x}(T_j^{(i)}). \quad (5.46)$$

Damit ergibt sich für  $K_{ij}^{\text{num}}$  aus Definition 5.3:

$$K_{lm}^{\text{num}}(x, \lambda) = \overline{K}_{lm} + \int_{T_j^{(i)}} k_{ln}(x') \partial_{x'_n} \chi_m^{(x)}(x') d^2 x' \quad (5.47)$$

für  $x = \tilde{x}(T_j^{(i)})$ ,  $\lambda = h_i$  und  $\overline{K}_{lm} = \int_\Omega K_{lm}(x) d^2 x$ . Diesen Koeffizienten definieren wir wieder als hochskalierte Permeabilität für alle  $x \in T_j^{(i)}$ :

$$K^{\text{num}}(x, \lambda) := K^{\text{num}}(\tilde{x}(T_j^{(i)}), \lambda) \quad \text{für alle } x \in T_j^{(i)}, \lambda = h_i. \quad (5.48)$$

Für das numerisch hochskalierte Permeabilitätsfeld auf der Skala  $\lambda = h_i$  gilt dann:

$$K(x)|_\lambda := K^{\text{num}}(\tilde{x}(T_j^{(i)}), \lambda) + k(x)|_\lambda \quad (5.49)$$

für alle  $x \in T_j^{(i)}$ , wobei die hochskalierten Fluktuationen  $k(x)|_\lambda$  durch

$$k_{lm}(x)|_\lambda := \frac{1}{\int_{T_j^{(i)}} d^2 x'} \int_{T_j^{(i)}} k_{lm}(x') d^2 x' \quad (5.50)$$

für  $x \in T_j^{(i)}$  berechnet werden.

Die Lösung für  $\chi_m^{(x)}(x')$  erhalten wir, indem wir die partielle Differentialgleichung (5.21) in  $E_\lambda^{(x)} = T_j^{(i)}$  mithilfe der Methoden aus Kapitel 2.7 diskretisieren und mit einem iterativen Lösungsverfahren oder einem geometrischen Mehrgitterverfahren berechnen. Als Abbruchkriterien für die Iterationsverfahren setzen wir die gleichen wie für das Modellproblem in Kapitel 6.2 ein.

Wir wählen dazu das Gitter  $\tau_T$  für die Diskretisierung von Gl. (5.21) auf  $T_j^{(i)}$  für alle  $j$  und  $i \geq 0$  stets so fein, daß auf jedem der Gitterelemente von  $\tau_T$  die Permeabilität wieder konstant ist. Die Integration in  $K^{\text{num}}(x, \lambda)$  wird dann mithilfe der Mittelpunktsregel numerisch exakt berechnet.

**Definition 5.5 (Numerisch hochskalierte Permeabilität für eine Realisierung).** Für eine gegebene Zerlegung  $\tau_i = \{T_j^{(i)}\}_{1 \leq j \leq N}$  des Gebiets  $\Omega$  approximieren wir in der Simulation  $K_{lm}^{\text{real}}(\lambda)$ ,  $\lambda = h_i$ , aus Definition 5.1 mithilfe von  $K_{lm}^{\text{num}}(x, \lambda)$  durch:

$$K_{lm}^{\text{real}}(\lambda) := \frac{\int_{T_j^{(i)}} d^2 x}{\sum_{j=1}^N \int_{T_j^{(i)}} d^2 x} \sum_{j=1}^N K_{lm}^{\text{num}}(\tilde{x}(T_j^{(i)}), \lambda) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N K_{lm}^{\text{num}}(\tilde{x}(T_j^{(i)}), \lambda) \quad (5.51)$$

und  $K_{lm}^{\text{eff}}(\lambda) = \overline{K_{lm}^{\text{real}}(\lambda)}$  durch:

$$K_{lm}^{\text{eff}}(\lambda) := \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \overline{K_{lm}^{\text{num}}(\tilde{x}(T_j^{(i)}), \lambda)}. \quad (5.52)$$

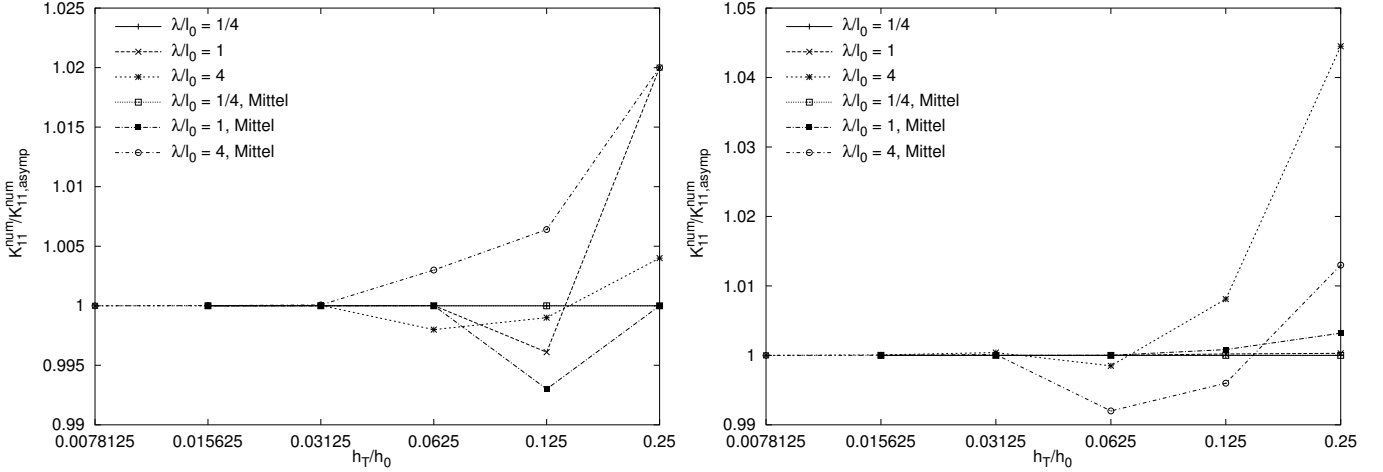
Dazu wird in  $K_{lm}^{\text{num}} E_\lambda^{(\tilde{x}(T_j^{(i)}))}$  mit  $T_j^{(i)}$  identifiziert.

### Gitterkonvergenz von $K^{\text{num}}(\lambda)$

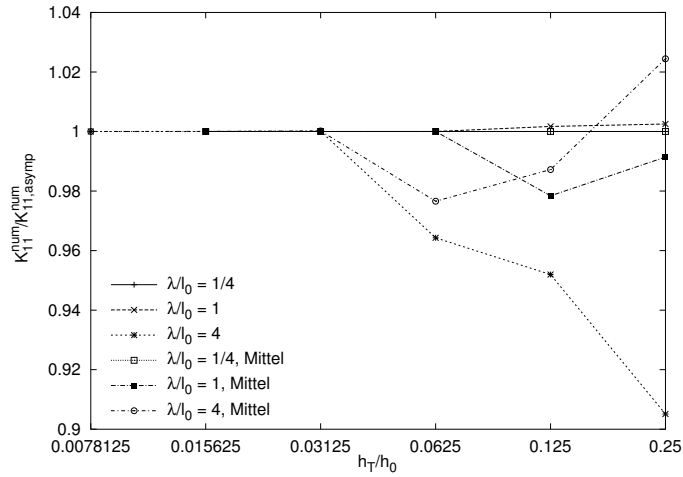
Das Ergebnis für  $\chi_m^{(x)}(x')$  und damit für  $K^{\text{num}}$  für ein Element  $T$  hängt von der Feinheit der Diskretisierung, d.h. von der Gitterweite  $h_T$  des gewählten Gitters  $\tau_T$  für  $T$ , und von den gewählten

Randbedingungen für  $\chi_m^{(x)}(x')$  ab.

In den Diagrammen zu Abb. 5.2 ist die Abhängigkeit von  $K_{11}^{\text{num}}$  und  $\overline{K_{11}^{\text{num}}}$  von der Gitterweite  $h_T/h_0$  für verschiedene Werte von  $\lambda$  gezeigt. Die Permeabilitätskoeffizienten sind darin durch ihren asymptotischen Wert für minimales  $h_T$  dividiert. Die Länge  $h_0$  der Elemente  $T$ , für die  $K^{\text{num}}$  berechnet wird, ist konstant. Den Berechnungen liegen isotrop korrelierte Permeabilitätsfelder mit unterschiedlichen Varianzen  $\sigma_f^2 = 1, 2, 3$  und Korrelationslänge  $l_0$  zugrunde, und die eingeführten NZF-Randbedingungen werden benutzt. Für die Ensemblemittelung haben wir jeweils über 20 Realisierungen gemittelt.



(a) Varianz:  $\sigma_f^2 = 1$  (links) und  $\sigma_f^2 = 2$  (rechts)



(b) Varianz:  $\sigma_f^2 = 3$

Abbildung 5.2:  $\frac{K_{11}^{\text{num}}}{K_{11, \text{asympt}}^{\text{num}}}$  bzw.  $\frac{\overline{K_{11}^{\text{num}}}}{\overline{K_{11, \text{asympt}}^{\text{num}}}}$  (Mittel) für verschiedene Werte von  $\lambda/l_0$  abhängig von der Feinheit  $h_T$  des Diskretisierungsgitters. Die Ergebnisse für  $h_T/h_0 \leq 1/32$  sind nicht exakt eins. Dies ist aufgrund des Wertebereichs der Diagramme nicht sichtbar.

Für zunehmendes  $\lambda$  erhält man einen hochskalierten Permeabilitätswert, der den Einfluß der subskaligen Fluktuationen für einen immer größeren Skalenbereich enthält. Daher muß auf dem Element für zunehmendes  $\lambda$  immer feiner diskretisiert werden. Für  $h_T/h_0 < 1/8$  konvergiert  $K_{11}^{\text{num}}$

und der Ensemblewert sehr schnell gegen den asymptotischen Wert.

Für die weiteren Komponenten des Tensors  $K^{\text{num}}$  erhält man ein genauso gutes Konvergenzverhalten.

*Bemerkung 5.9.* Die Diskretisierungsweite für die Elemente zur Berechnung von  $K^{\text{num}}$  wählen wir auf Grund dieser Ergebnisse  $\lambda$ -abhängig. Wenn nicht anders erwähnt, wählen wir  $h_T/h_0 \leq \frac{1}{32} \frac{l_0}{\lambda}$ .

### Iteratives Upscaling des Permeabilitätsfeldes

Bisher gehen wir zur Berechnung des hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten stets vom feinskaligen Permeabilitätsfeld  $K(x)$  aus. Da wir eine geschachtelte Hierarchie von Zerlegungen  $\tau_i$  betrachten, kann das Upscaling des Permeabilitätsfeldes auch iterativ geschehen, indem man stets vom hochskalierten Feld des vorherigen Coarse Graining Schritts ausgeht. Dies hat den Vorteil, daß man das Diskretisierungsgitter zur Berechnung von  $K^{\text{num}}$  bzw.  $\chi^{(x)}$  für  $\lambda/l_0 \geq 1/8$  nicht so fein zu wählen braucht.

Wir setzen  $K(x)|_{\lambda_0} := K(x)$ , und es seien die Skalen  $\lambda_0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_J$  mit  $\lambda_i = h_i$  gegeben. Angenommen das Permeabilitätsfeld  $K(x)|_{\lambda_i}$  auf der Skala  $\lambda_i$ ,  $i \geq 0$ , existiere, dann berechnen wir das Feld  $K(x)|_{\lambda_{i+1}}$  analog wie oben gezeigt durch

$$K(x)|_{\lambda_{i+1}} := K^{\text{num}}(\tilde{x}(T_j^{(i+1)}), \lambda_{i+1}) + k(x, \lambda_i)|_{\lambda_{i+1}}, \quad (5.53)$$

für  $x \in T_j^{(i+1)}$  und  $\lambda_{i+1} = h_{i+1} = 2\lambda_i$ , mit

$$K_{lm}^{\text{num}}(\tilde{x}(T_j^{(i+1)}), \lambda_{i+1}) = \overline{K_{lm}(x)|_{\lambda_i}} + \int_{T_j^{(i+1)}} k_{ln}(x')|_{\lambda_i} \partial_{x'_n} \chi_m^{(x)}(x') d^2 x' \quad (5.54)$$

und

$$k(x, \lambda_i) := K(x)|_{\lambda_i} - \overline{K(x)|_{\lambda_i}}. \quad (5.55)$$

$\chi_m^{(x)}(x')$  ist die Lösung von

$$-div K(x')|_{\lambda_i} \nabla (\chi_m^{(x)}(x') + x'_m) = 0 \quad \text{für } x' \in E_{\lambda_{i+1}}(\tilde{x}(T_j^{(i+1)})).$$

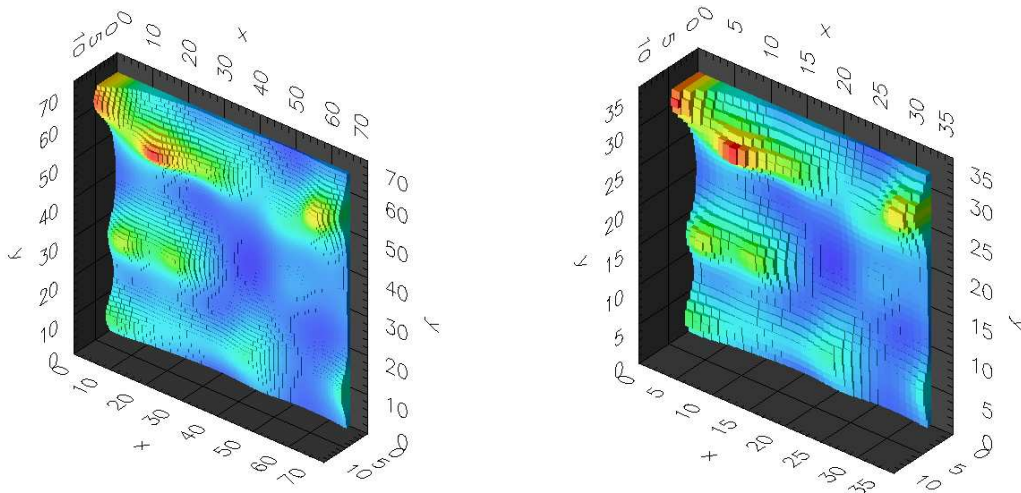
Zur Illustration des iterativen Hochskalierens eines Permeabilitätsfeldes sind in der Abb. 5.3 exemplarisch die resultierenden longitudinalen Komponenten  $K_{11}(x)|_{\lambda}/K_g$  für ein iteratives Upscaling eines isotropen feinskaligen Feldes mit 64 Elementen in beiden Koordinatenrichtungen dargestellt.

## 5.4 Vergleich von Theorie und Simulation

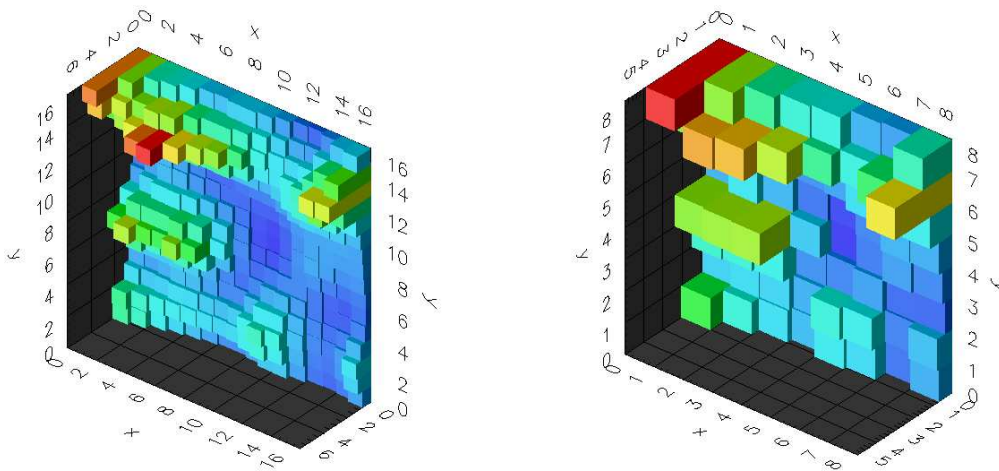
Nach der Beschreibung des numerischen Coarse Grainings wollen wir damit den skalenabhängigen effektiven Permeabilitätskoeffizienten wie auch die weiteren in Kapitel 4 theoretisch hergeleiteten Größen berechnen. Neben dem Vergleich der theoretischen und numerischen Größen können wir das numerische Coarse Graining auch zur Berechnung der Größen für den Fall hoher Varianzen  $\sigma_f^2$  benutzen. Die in Kapitel 4 störungstheoretisch hergeleiteten Größen sind nur für kleine Varianzen gültig.

Außerdem überprüfen wir die Qualität der Coarse Graining Methode, indem wir die Strömungsgleichung auf den hochskalierten Permeabilitätsfeldern lösen und daraus die Lösung selbst wie auch den Fluß mit den entsprechenden Observablen vergleichen, die sich für das feinskalige Feld ergeben.

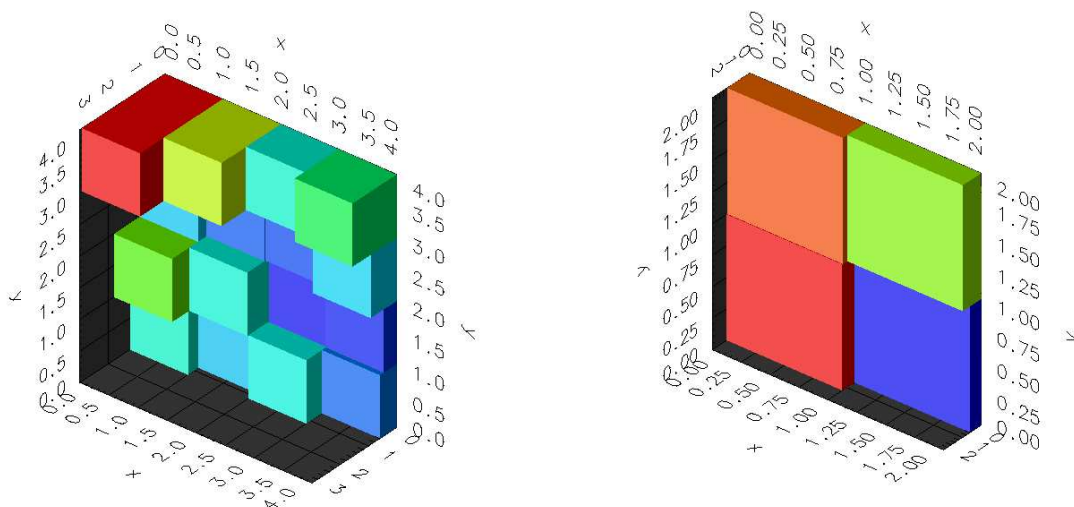
*Bemerkung 5.10.* Alle numerischen Ergebnisse sind mit den eingeführten NZF-Randbedingungen für die Berechnung des Permeabilitätskoeffizienten ausgeführt. Für die Berechnungen mit Dirichlet-Nullrandbedingungen ergeben sich numerische Resultate, die mit den theoretischen schlechter übereinstimmen. Dies illustrieren wir im Anhang A.4.



(a) 4096 Elemente und 1024 Elemente



(b) 256 Elemente und 64 Elemente



(c) 16 Elemente und 4 Elemente

Abbildung 5.3: Darstellung der hochskalierten Felder  $K_{11}(x)|_{\lambda}/K_g$  aus dem iterativen Hochskalieren. Die Varianz des feinsten Feldes beträgt  $\sigma_f^2 = 1/2$  und die Korrelationslänge  $l_0$  beträgt 8 Elemente,  $l_0 = 8h_0$ . Die Farben sind jeweils auf das Maximum und Minimum reskaliert.

### 5.4.1 Effektiver Permeabilitätstensor

#### Isotrope Korrelation

Wir berechnen numerisch den effektiven Permeabilitätstensor, wie im vorherigen Abschnitt beschrieben, zunächst für ein isotrop korreliertes Medium. Aus der Renormierungsgruppen-Analyse ergibt sich theoretisch dafür ein skalarer Permeabilitätswert (4.109),

$$K^{\text{eff}}(\lambda) = \bar{K} \exp \left( -\frac{\sigma_f^2}{2} + \frac{\sigma_f^2}{2} \left( \text{erf} \left( \frac{a_s l_0}{\sqrt{2} \lambda} \right) \right)^2 \right) \quad \text{für } d = 2. \quad (5.56)$$

In Abb. 5.4 ist  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  numerisch durch Mittelung über 100 Realisierungen berechnet und im Vergleich zum theoretischen Ergebnis dargestellt. Es ergibt sich daraus eine gute Übereinstimmung

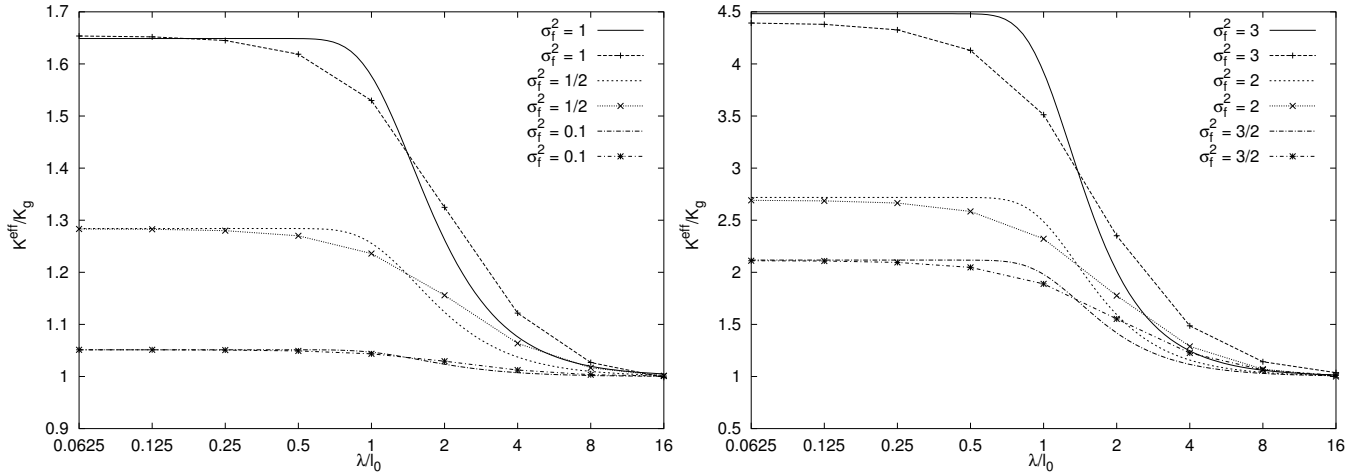


Abbildung 5.4: Die skalenabhängige effektive Permeabilität  $K^{\text{eff}}(\lambda)/K_g$  für ein isotropes Medium aus der Renormierungsgruppen-Analyse und dem numerischen Coarse Graining für verschiedene Varianzen  $\sigma_f^2$  ( $a_s = 2$ ).

zwischen der simulierten und der theoretischen Größe auch für hohe Varianzen  $\sigma_f^2$ . Man erkennt allerdings eine systematische Abweichung zwischen beiden Größen im Bereich  $\lambda/l_0 \approx 1$ .

Eine deutlich bessere Übereinstimmung mit dem numerisch ermittelten effektiven Permeabilitätswert findet man für das Resultat für  $K^{\text{eff}}(\lambda)$ , das mithilfe der weichen Abschneidefunktion in Abschnitt 5.5 berechnet wird. In Abb. 5.5 ist der Vergleich der beiden Größen für unterschiedliche Werte der Varianz dargestellt. Dies zeigt, daß das numerische Coarse Graining mit den verwendeten Approximationen im Ortsraum eher einem weichen Ausmitteln als dem exakten Wirken der Projektoren im Fourier-Raum entspricht.

*Bemerkung 5.11.* Die Ergebnisse zeigen, daß für große Varianzen die Methode der Renormierungsgruppen-Analyse für die Herleitung der effektiven Permeabilität sehr gut ist.

#### Anisotrope Korrelation

In Abb. 5.6 ist der effektive Permeabilitätskoeffizient für ein anisotrop korreliertes Medium in Abhängigkeit von der Längenskala dargestellt. Gemittelt wurde dafür wieder über 100 Realisierungen und die Korrelationslängen lauten  $(l_1, l_2) = (2l_0, l_0/2)$  bzw.  $(l_1, l_2) = (8l_0, l_0/2)$  mit festem  $l_0$ . In Diagramm 5.6 (rechts) ist das numerische  $K_{ii}^{\text{eff}}(\lambda)$  für die Varianz  $\sigma_f^2 = 1$  und  $\sigma_f^2 = 2$  gezeigt. Für  $\sigma_f^2 = 0.1$  stimmen die numerischen Werte mit den theoretischen Größen aus der Störungstheorie gut überein. Für die höheren Varianzen ist das störungstheoretisch errechnete Resultat (4.66) für  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  nicht mehr brauchbar, vgl. Abb. 5.6 (rechts).

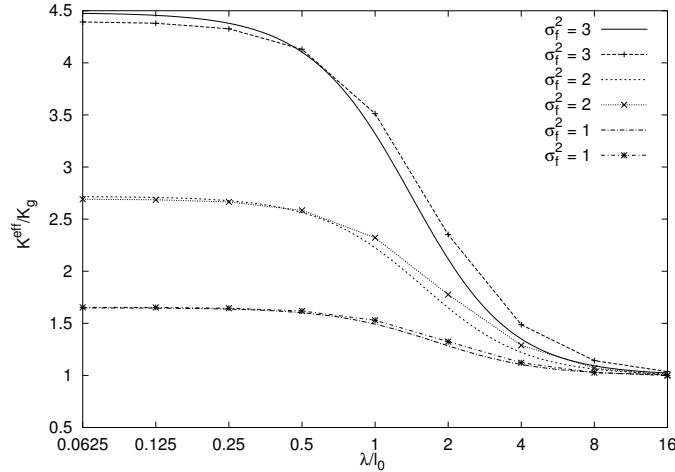


Abbildung 5.5: Vergleich der effektiven Permeabilität  $K^{\text{eff}}(\lambda)/K_g$  und der Größe aus der Simulation für ein isotropes Medium mit verschiedenen Varianzen  $\sigma_f^2$ .  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  ist mit der weichen Abschneidefunktion (4.67) aus der Renormierungsgruppen-Analyse berechnet ( $a_w = 2$ ).

Man entnimmt aus den Abbildungen, daß für zunehmendes  $\sigma_f^2$  die Differenz von  $K_{11}^{\text{eff}}$  und  $K_{22}^{\text{eff}}$  größer wird und damit die Richtungsanisotropie im hochskalierten Medium immer deutlicher auftritt.

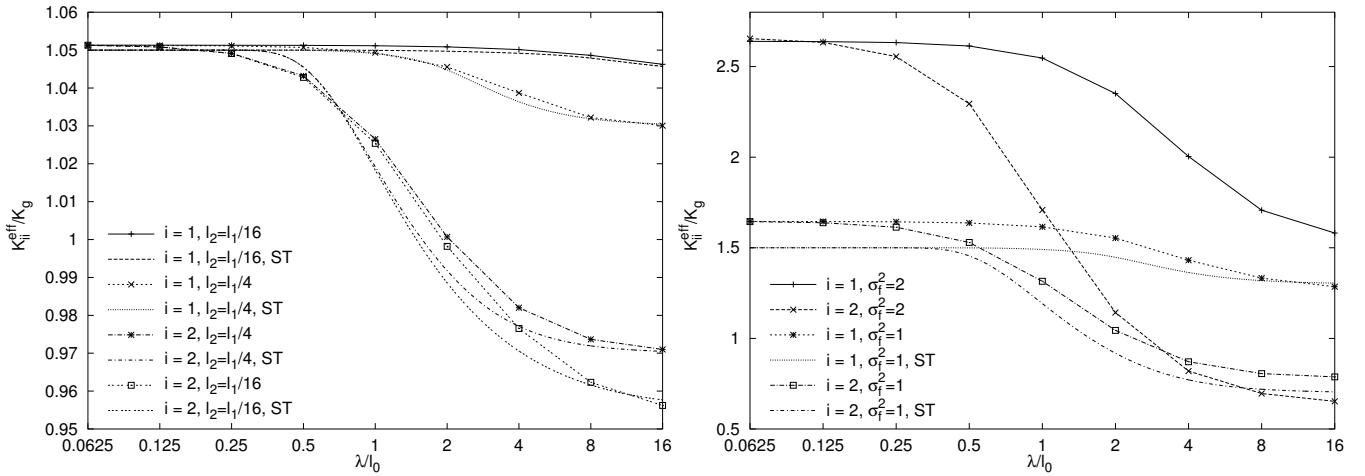


Abbildung 5.6: Die Werte des skalensabhängigen effektiven Permeabilitätskoeffizienten  $K_{ii}^{\text{eff}}(\lambda)/K_g$  für ein anisotrop korreliertes Medium aus dem numerischen Coarse Graining für verschiedene Varianzen  $\sigma_f^2$  ( $a_s = 2$ ). Für  $\sigma_f^2 = 0.1$  (links) und  $\sigma_f^2 = 1$  ist auch die störungstheoretische Größe (4.66), mit ST gekennzeichnet, dargestellt. Die Korrelationslängen sind links  $(l_1, l_2) = (2l_0, l_0/2)$  bzw.  $(l_1, l_2) = (8l_0, l_0/2)$  und rechts  $(l_1, l_2) = (2l_0, l_0/2)$ .

### 5.4.2 Berechnung der statistischen Eigenschaften

Wir berechnen in Abschnitt 5.4.3–5.4.4 numerisch die statistischen Eigenschaften des hochskalierten Permeabilitätsfeldes. Diese vergleichen wir mit den theoretisch hergeleiteten Resultaten aus der Coarse Graining Methode. Da wir in der theoretischen Herleitung die statistischen Größen nur in niedrigster Ordnung Störungstheorie, das heißt in Ordnung  $O(\sigma_f^2)$ , berechnet haben, dürfen wir

eine Übereinstimmung zwischen Theorie und Simulation nur für kleine Varianzen  $\sigma_f^2 < 1$  erwarten.

### 5.4.3 Varianz des hochskalierten Permeabilitätsfeldes

Die skalenabhängige Varianz  $\sigma_K^2(\lambda)$  des hochskalierten Permeabilitätsfeldes berechnen wir, indem wir die Permeabilitätsfelder stets vom feinskaligen Feld  $K(x)$  ausgehend hochskalieren. Vom Feld  $K(x)$  errechnen wir zunächst numerisch das Permeabilitätsfeld für verschiedene Längenskalen  $\lambda$

$$K(x)|_\lambda = K^{\text{num}}(x, \lambda) + k(x)|_\lambda \quad (5.57)$$

und erhalten daraus durch Mittelung die Varianz

$$\sigma_K^2(\lambda) = \overline{K(x)|_\lambda K(x)|_\lambda}. \quad (5.58)$$

Diese vergleichen wir mit dem theoretischen Ergebnis aus Abschnitt 4.3.1,

$$\sigma_K^2(\lambda) = K_g^2 \sigma_f^2 \left( \text{erf} \left( \frac{a_s l_0}{\sqrt{2} \lambda} \right) \right)^2, \quad (5.59)$$

für eine isotrope Korrelationsfunktion. Die Diskretisierung zur Berechnung von  $K^{\text{num}}(x, \lambda)$  in (5.57) wählen wir, entsprechend den Ergebnissen zur Gitterkonvergenz für  $K^{\text{num}}$  aus Abb. 5.2,  $\lambda$ -abhängig mit  $h_T/h_0 \leq \frac{1}{32} \frac{l_0}{\lambda}$ . Die Mittelung in (5.58) führen wir über 1000 Realisierungen aus.

In Abb. 5.7 ist das numerische Ergebnis für  $\sigma_K^2$  im Vergleich zum theoretischen für unterschiedliche Varianzen  $\sigma_f^2$  dargestellt. Für kleine Varianzen  $\sigma_f^2 \leq 0.2$  ergibt sich eine befriedigende Übereinstim-

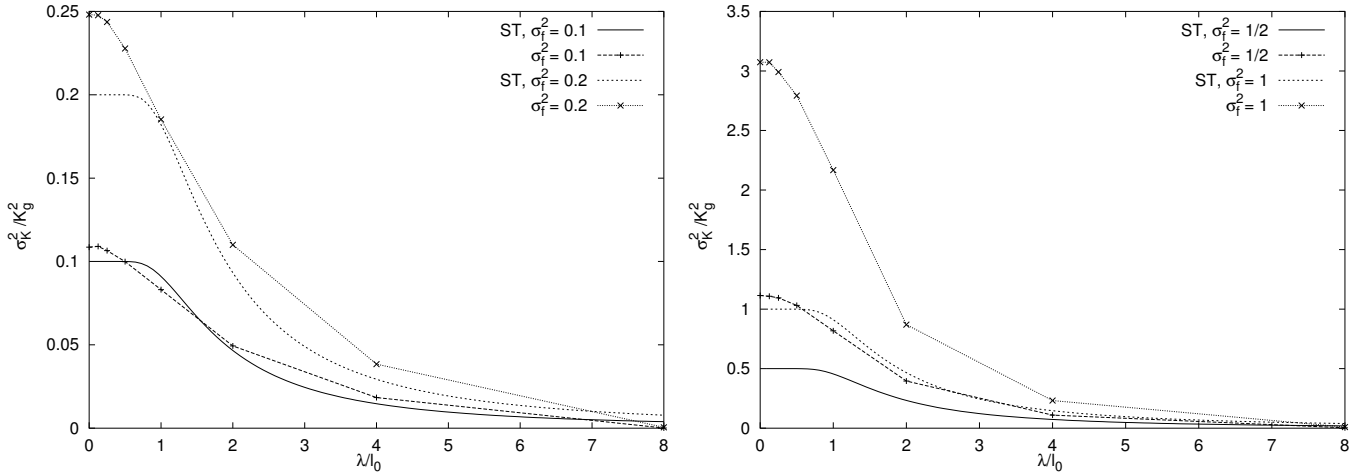


Abbildung 5.7: Varianz  $\sigma_K^2(\lambda)/K_g^2$  für das hochskalierte Permeabilitätsfeld mit isotroper Korrelation und verschiedenen Varianzen  $\sigma_f^2$  ( $a_s = 2$ ). ST bezeichnet das störungstheoretische Ergebnis.

mung der beiden Größen. Für höhere Varianzen unterschätzt hingegen das theoretische Resultat aus der ersten Ordnung Störungstheorie die Varianz des Feldes sehr. Qualitativ hat das numerische  $\sigma_K^2(\lambda)$  aber für die betrachteten Varianzen 1/2 und 1 den gleichen Verlauf wie die störungstheoretische Größe.

### 5.4.4 Abweichung der hochskalierten Permeabilität

Wir überprüfen das Resultat für die mittlere quadratische Abweichung des hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten zum effektiven Koeffizienten durch den Vergleich mit der numerisch errechneten Abweichung. Wir betrachten dazu wieder isotrop korrelierte, feinskalige Permeabilitätsfelder



und skalieren sie zu vorgegebenen Längenskalen  $\lambda$  hoch. Aus den numerisch errechneten Größen erhalten wir insbesondere auch die Abweichung für höhere Varianzen  $\sigma_f^2$ , für die das störungstheoretische Resultat aus Gl. (4.81) nicht mehr gültig ist.

Die mittlere quadratische Abweichung

$$\overline{(K_{ij}^{\text{real}}(\lambda) - K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda))^2} \quad (5.60)$$

gibt an, wie sehr der hochskalierte Wert von Realisierung zu Realisierung fluktuiert. Sie ist, wie in Abschnitt 4.3.2 gezeigt, für  $i = j = 1$  oder  $2$  gleich.

Den hochskalierten Permeabilitätswert für eine Realisierung in (5.60) berechnen wir, wie in der Definition 5.5 erwähnt, durch:

$$K^{\text{real}}(\lambda) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N K^{\text{num}}(\tilde{x}(T_j^{(i)}), \lambda)$$

mit  $T_j^{(i)} = E_{\lambda_i}(\tilde{x}(T_j^{(i)}))$  für eine Zerlegung  $\{T_j^{(i)}\}$ . In Abb. 5.8 ist das numerische Ergebnis für die mittlere quadratische Abweichung gemittelt über 100 Realisierungen für verschiedene Varianzen gezeigt.

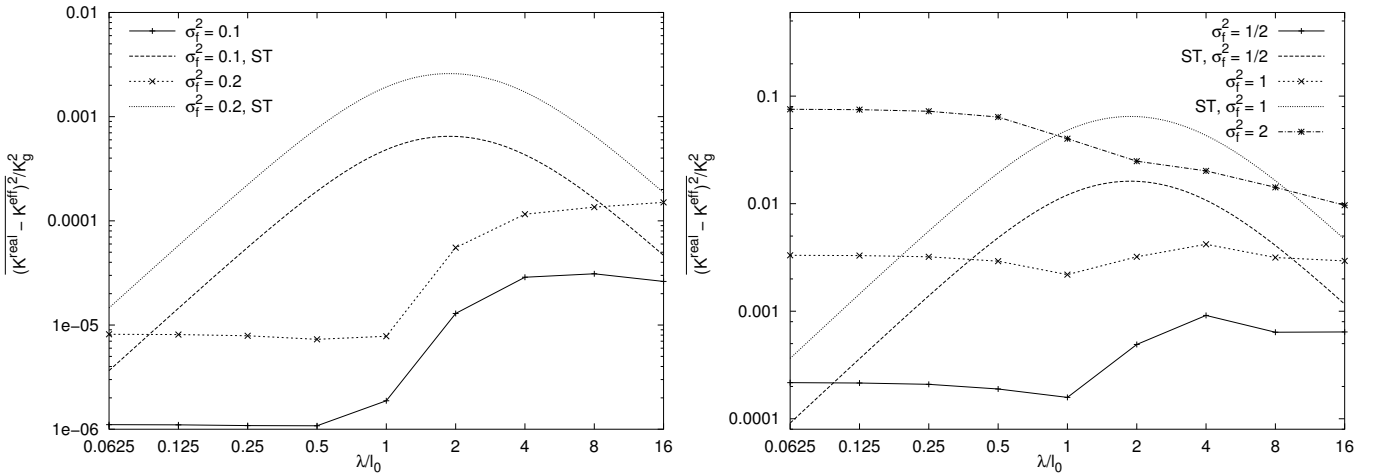


Abbildung 5.8: Die mittlere quadratische Abweichung des hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten  $\overline{(K^{\text{real}}(\lambda) - K^{\text{eff}}(\lambda))^2}$  für zunehmende Varianzen  $\sigma_f^2$  im Vergleich zum störungstheoretischen Ergebnis (ST) aus Abschnitt 4.3.2 ( $a_w = 2$ ).

Wir erhalten für  $\overline{(K^{\text{real}}(\lambda) - K^{\text{eff}}(\lambda))^2}$  auch für kleine Varianzen  $\sigma_f^2$  keine Übereinstimmung mit dem störungstheoretischen Ergebnis (4.81). Der Grund dafür ist nicht offensichtlich. Die numerischen Resultate zeigen aber deutlich, daß die Abweichung des hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten zum effektiven Permeabilitätskoeffizienten für  $\lambda/l_0 < 1$  sehr klein ist und in diesem Bereich für zunehmendes  $\lambda$  sogar für  $\sigma_f^2 \geq 1/2$  abfällt.

Den numerischen Ergebnissen zufolge ist der Fehler, der entsteht, indem man den effektiven Permeabilitätstensor für eine Realisierung durch den hochskalierten Tensor  $K^{\text{real}}(\lambda)$  der entsprechenden Realisierung ersetzt, damit auch für große Varianzen klein (siehe Bemerkung 5.3).

*Bemerkung 5.12.* Die numerischen Resultate sind aus der Komponente  $K_{11}^{\text{real}}$  errechnet. Für eine Berechnung mittels  $K_{22}^{\text{real}}$  ergeben sich bis auf eine Änderung von weniger als einem Prozent die gleichen numerischen Resultate.

## 5.5 Numerische Fluß- und Fehlerberechnung

Wir vergleichen im folgenden die Flüsse und die Lösungen, die sich aus der Strömungsgleichung für die numerisch hochskalierten Permeabilitätsfelder ergeben.

### 5.5.1 Berechnung und Vergleich der Flüsse

Wir überprüfen quantitativ, wie sehr der Fluß durch ein vorgegebenes Gebiet längs einer Linie durch das Hochskalieren der Felder beeinflusst wird. Als Fluß bezeichnen wir das durchströmende Flüssigkeitsvolumen durch eine gegebene Fläche bzw. Linie in zwei Raumdimensionen. Aus dem Vergleich mit dem Fluß für das ursprüngliche, feinskalige Feld erhalten wir ein Merkmal, wie gut das Upscaling durch die Coarse Graining Methode ist. Dazu betrachten wir außerdem den Vergleich mit den Ergebnissen für ein einfaches Upscaling durch das arithmetische, geometrische oder harmonische Mittel, vgl. Abschnitt 2.6.

Wir skalieren die Permeabilitätsfelder zum einen entweder stets vom feinskaligen Feld ausgehend oder zum anderen durch das iterative Upscaling hoch. Auf den entstandenen Feldern  $K(x)|_\lambda$  für verschiedene Längenskalen  $\lambda$  berechnen wir die Strömungsgleichung, wie in Abschnitt 6.2 erläutert wird,

$$-div K(x)|_\lambda \nabla u_\lambda(x) = 0 \quad \text{für } x \in \Omega = [0, 1]^2 \quad (5.61)$$

mit den Randbedingungen

$$u_\lambda(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x_1 = 0, x_2 \in [0, 1] \\ 0 & \text{für } x_1 = 1, x_2 \in [0, 1] \end{cases} \\ n(x) \cdot (K(x)|_\lambda \nabla u_\lambda(x)) = 0 \quad \text{für } x_2 = 0 \text{ oder } x_2 = 1, x_1 \in ]0, 1[ \quad (5.62)$$

auf  $\partial\Omega$  und ermitteln mit der Lösung  $u_\lambda(x)$  die durchströmende Flüssigkeitsmenge

$$Q_\lambda(x_1) := \int_{[x_1, 0]}^{[x_1, 1]} e_1 \cdot (K(x)|_\lambda \nabla u_\lambda(x)) dx_2 \quad (5.63)$$

entlang einer Strecke in  $x_2$ -Richtung.  $n(x)$  ist der äußere Einheits-Normalenvektor an  $\partial\Omega$ . Aufgrund der gewählten Randbedingungen für  $u_\lambda(x)$  ist  $Q_\lambda$  unabhängig von  $x_1$ .

Den skalenabhängigen Fluß  $Q_\lambda$  vergleichen wir mit dem Fluß  $Q_0 := Q_{\lambda_0}$  im feinskaligen Permeabilitätsfeld  $K(x)$  und bilden dazu die relative quadratische Abweichung:

$$\Delta Q_\lambda^2 := \frac{(Q_\lambda - Q_0)^2}{Q_0^2}. \quad (5.64)$$

In den vorliegenden Ergebnissen in Tabelle 5.1 und 5.2 haben wir  $\Delta Q_\lambda^2$  für jede von insgesamt 10 Realisierungen berechnet und das arithmetische Mittel  $\overline{\Delta Q_\lambda^2}$  gebildet. Für die einzelnen Upscalingmethoden haben wir jeweils dieselben 10 Realisierungen genommen. Außer dem Upscaling durch die Coarse Graining Methode (CN-Upscaling) betrachten wir auch die Flüsse in den entsprechenden einfach hochskalierten Feldern, die sich aus iterativem Hochskalieren mit dem arithmetischen, geometrischen oder harmonischen Mittel ergeben, wie in Unterkapitel 2.6 beschrieben. Für die einfachen Upscalingverfahren werden die Komponenten des Tensorfeldes iterativ über je vier Nachbarelemente arithmetisch, geometrisch oder harmonisch gemittelt (vgl. Abschnitt 6.4).

Die Resultate aus den Tabellen 5.1 und 5.2 zeigen, daß das Upscaling der Felder durch die Coarse Graining Methode – sowohl vom feinen Feld wie auch iterativ – im Mittel zu einem Fluß  $Q_\lambda$  führt, der eine sehr gute Approximation für den Fluß im feinskaligen Feld  $Q_0$  ist. Nur im isotropen Fall liefert das iterative Hochskalieren mit dem geometrischen Mittel gleichermaßen gute Resultate. In allen anderen Fällen liefern die einfachen Upscalingverfahren aber deutlich schlechtere Resultate als die für das Hochskalieren mit der Coarse Graining Methode.

$\lambda/l_0$	CN-Upscaling vom feinen Feld	Iteratives CN-Upscaling	Arithmetisches Upscaling	Geometrisches Upscaling	Harmonisches Upscaling
1/4	$9.3 \cdot 10^{-8}$	$9.3 \cdot 10^{-8}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$	$1.3 \cdot 10^{-7}$	$1.8 \cdot 10^{-5}$
1	$1.2 \cdot 10^{-4}$	$9.6 \cdot 10^{-6}$	$5.0 \cdot 10^{-3}$	$3.2 \cdot 10^{-5}$	$4.4 \cdot 10^{-3}$
4	$4.6 \cdot 10^{-4}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$	$2.1 \cdot 10^{-1}$	$5.5 \cdot 10^{-4}$	$9.2 \cdot 10^{-2}$
16	$6.5 \cdot 10^{-6}$	$1.8 \cdot 10^{-3}$	$4.7 \cdot 10^{-1}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$	$1.4 \cdot 10^{-1}$

Tabelle 5.1: Die relative Abweichung des Flusses  $\overline{\Delta Q_\lambda^2}$  gemittelt über jeweils die gleichen 10 Realisierungen mit isotroper Korrelationsfunktion,  $\sigma_f^2 = 1$ , in Abhängigkeit vom Hochskalieren  $\lambda/l_0$  für verschiedene Upscalingsverfahren,  $l_0 = 1/16$ .

$\lambda/l_0$	CN-Upscaling vom feinen Feld	Iteratives CN-Upscaling	Arithmetisches Upscaling	Geometrisches Upscaling	Harmonisches Upscaling
1/4	$6.7 \cdot 10^{-8}$	$6.7 \cdot 10^{-8}$	$4.7 \cdot 10^{-6}$	$5.3 \cdot 10^{-5}$	$2.7 \cdot 10^{-4}$
1	$2.7 \cdot 10^{-5}$	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$9.5 \cdot 10^{-4}$	$7.6 \cdot 10^{-3}$	$3.8 \cdot 10^{-2}$
4	$1.5 \cdot 10^{-4}$	$5.2 \cdot 10^{-4}$	$3.0 \cdot 10^{-2}$	$4.8 \cdot 10^{-2}$	$2.2 \cdot 10^{-1}$
16	$4.4 \cdot 10^{-7}$	$7.3 \cdot 10^{-4}$	$8.0 \cdot 10^{-2}$	$5.6 \cdot 10^{-2}$	$2.8 \cdot 10^{-1}$

Tabelle 5.2: Die relative Abweichung des Flusses  $\overline{\Delta Q_\lambda^2}$  gemittelt über die gleichen 10 Realisierungen mit anisotroper Korrelationsfunktion,  $(l_1, l_2) = (2l_0, l_0/2)$ ,  $\sigma_f^2 = 1$ , für verschiedene Upscalingsverfahren,  $l_0 = 1/16$ .

### 5.5.2 Berechnung und Vergleich der Lösung aus der numerisch hochskalierten Strömungsgleichung

Es liegt nahe, außer dem Vergleich der Flüsse im feinskaligen und hochskalierten Feld auch die entsprechenden Lösungen, d.h. die Piezometerhöhen, zu vergleichen. Wir betrachten dazu die Lösung  $u_\lambda(x)$ , die sich aus der Strömungsgleichung mit dem hochskalierten Feld ergibt, und vergleichen sie mit der feinskaligen Lösung  $u(x)$  für das Feld  $K(x)$ . Dafür kann man die  $L^2$ -Norm

$$\|u_\lambda(x) - u(x)\|_{L^2} \quad (5.65)$$

bzw. die relative Größe  $\|u_\lambda(x) - u(x)\|_{L^2} / \|u(x)\|_{L^2}$  berechnen. Wegen der feinskaligen Fluktuationen von  $u(x)$  ist aber selbst für die bestmögliche Approximation  $u_\lambda(x)$  auf der Skala  $\lambda$  die  $L^2$ -Norm der Differenz stets ungleich null. Für eine geeignete Größe betrachten wir deswegen die Interpolierende  $\Pi_\lambda(u(x))$  von  $u(x)$  auf der Skala  $\lambda = h$  für die Zerlegung  $\tau_h$  aus Definition 2.18 und benutzen die  $L^2$ -Norm der Differenz  $u_\lambda(x) - \Pi_\lambda(u(x))$  als passende Vergleichsgröße.

Wie im vorherigen Abschnitt lösen wir die Strömungsgleichung mit den Permeabilitätsfeldern  $K(x)|_\lambda$  für unterschiedliche Längenskalen und berechnen

$$\Delta u_\lambda := \frac{\|u_\lambda(x) - \Pi_\lambda(u(x))\|_{L^2}}{\|u(x)\|_{L^2}} \quad (5.66)$$

für je 10 Realisierungen für verschiedene Upscalingsverfahren. Wir benutzen dazu dieselben Realisierungen wie im letzten Abschnitt. Als Randbedingungen für die Strömungsgleichung verwenden wir wieder die in (5.62) genannten Bedingungen.

In den Ergebnissen in Tabelle 5.3 und 5.4 ist das arithmetische Mittel  $\overline{\Delta u_\lambda}$  über die Resultate der 10 Realisierungen für den isotrop und anisotrop korrelierten Fall angegeben. Vergleicht man die Ergebnisse, findet man, daß die Abweichungen für das Upscaling mit der Coarse Graining Methode wieder kleiner sind als für die einfachen Upscalingsverfahren, allerdings nicht so deutlich wie im letzten Abschnitt für die Flüsse.

$\lambda/l_0$	CN-Upscaling vom feinen Feld	Iteratives CN-Upscaling	Arithmetisches Upscaling	Geometrisches Upscaling	Harmonisches Upscaling
1/4	$5.5 \cdot 10^{-4}$	$5.5 \cdot 10^{-4}$	$7.3 \cdot 10^{-4}$	$6.8 \cdot 10^{-4}$	$7.9 \cdot 10^{-4}$
1	$7.7 \cdot 10^{-3}$	$7.8 \cdot 10^{-3}$	$1.2 \cdot 10^{-2}$	$1.0 \cdot 10^{-2}$	$1.2 \cdot 10^{-2}$
4	$4.1 \cdot 10^{-2}$	$4.3 \cdot 10^{-2}$	$7.1 \cdot 10^{-2}$	$5.3 \cdot 10^{-2}$	$6.1 \cdot 10^{-2}$
16	$6.0 \cdot 10^{-2}$	$6.3 \cdot 10^{-2}$	$6.6 \cdot 10^{-2}$	$6.6 \cdot 10^{-2}$	$6.6 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 5.3: Die relative Abweichung der Lösung  $\overline{\Delta u_\lambda}$  gemittelt über jeweils die gleichen 10 Realisierungen mit isotroper Korrelationsfunktion,  $\sigma_f^2 = 1$ , für verschiedene Upscalingsverfahren,  $l_0 = 1/16$ .

$\lambda/l_0$	CN-Upscaling vom feinen Feld	Iteratives CN-Upscaling	Arithmetisches Upscaling	Geometrisches Upscaling	Harmonisches Upscaling
1/4	$4.5 \cdot 10^{-4}$	$4.5 \cdot 10^{-4}$	$8.7 \cdot 10^{-4}$	$1.2 \cdot 10^{-3}$	$2.0 \cdot 10^{-3}$
1	$6.0 \cdot 10^{-3}$	$6.3 \cdot 10^{-3}$	$1.1 \cdot 10^{-2}$	$1.6 \cdot 10^{-2}$	$3.0 \cdot 10^{-2}$
4	$3.7 \cdot 10^{-2}$	$3.7 \cdot 10^{-2}$	$4.3 \cdot 10^{-2}$	$5.4 \cdot 10^{-2}$	$7.7 \cdot 10^{-2}$
16	$6.3 \cdot 10^{-2}$	$6.4 \cdot 10^{-2}$	$6.4 \cdot 10^{-2}$	$6.4 \cdot 10^{-2}$	$6.4 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 5.4: Die relative Abweichung der Lösung  $\overline{\Delta u_\lambda}$  gemittelt über die gleichen 10 Realisierungen mit anisotroper Korrelationsfunktion,  $(l_1, l_2) = (2l_0, l_0/2)$ ,  $\sigma_f^2 = 1$ , für verschiedene Upscalingsverfahren,  $l_0 = 1/16$ .

Für die Ergebnisse aus dem Upscaling vom feinen Feld mit der Coarse Graining Methode ist in Abbildung 5.9 auch der Vergleich mit der theoretisch berechneten Größe

$$\frac{\overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2}}{\overline{(u(x))^2}} = \frac{\sigma_f^2}{4L^2 a_w^2} \left(\frac{\lambda}{l_0}\right)^2 \quad (5.67)$$

aus Abschnitt 4.4 gezeigt. Diese Größe ist für den Bereich  $\lambda/l_0 < 1$  und kleine Varianzen gültig. Das numerisch ermittelte  $\overline{\Delta u_\lambda^2}$  unterscheidet sich für die zwei betrachteten Varianzwerte nur wenig und zeigt für kleine  $\lambda/l_0$  auch eine geringere Abweichung als die störungstheoretische Größe.

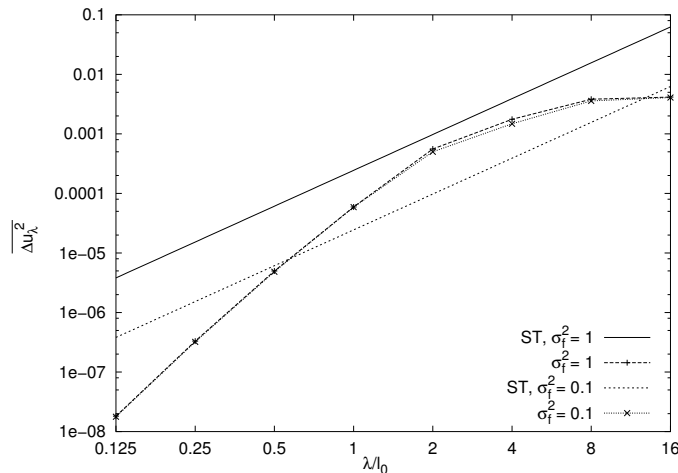


Abbildung 5.9: Die relative Abweichung  $\overline{\Delta u_\lambda^2}$  gemittelt über 10 Realisierungen für  $\sigma_f^2 = 0.1$  und  $\sigma_f^2 = 1$  im Vergleich zur störungstheoretischen Größe  $\frac{\overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2}}{\overline{(u(x))^2}}$  (ST) aus der Coarse Graining Methode, Gl. (5.67) ( $L = 16$ ,  $a_w = 2$ ).

## 5.6 Das Coarsening-Mehrgitterverfahren

Bereits im Abschnitt über algebraische Mehrgitterverfahren haben wir erläutert, daß Mehrgitterverfahren in einigen Fällen nur effizient arbeiten, wenn ihre Komponenten oder Teile davon an das Problem angepaßt sind.

In den folgenden Abschnitten entwickeln wir ein problemangepaßtes Mehrgitterverfahren zur Lösung der Strömungsgleichung mithilfe des numerischen Coarse Grainings. Der Ausgangspunkt dafür ist die Strömungsgleichung in zwei Dimensionen

$$-\operatorname{div} K(x) \nabla u(x) = f(x) \quad \text{mit } x \in \Omega = [0, 1]^2 \quad (5.68)$$

und Randbedingungen auf  $\partial\Omega$  wie in (5.62).  $K(x)$  sei zunächst eine Realisierung eines skalaren, logarithmisch normalverteilten Zufallsfeldes. Zur Diskretisierung von Gl. (5.68) benutzen wir die Galerkin-Diskretisierung mit der Finite-Element-Methode. Für eine gegebene Zerlegung  $\tau_0$  von  $\Omega$  definieren wir das Permeabilitätsfeld  $K(x)$  wie in Gl. (5.45), so daß  $K(x)$  auf jedem Element  $T_j^{(0)}$  von  $\tau_0$  konstant sei.

Mit den Einträgen der Steifigkeitsmatrix

$$A_{ij} = \sum_{m,n=1}^2 \int_{\Omega} K_{mn}(x) \partial_{x_n} \psi_j^{(0)}(x) \partial_{x_m} \psi_i^{(0)}(x) d^2x \quad (5.69)$$

für die Standard-Knotenbasis  $\{\psi_i^{(0)}\}$  auf  $\tau_0$  ergibt sich das zu lösende lineare Gleichungssystem

$$A u = b \quad (5.70)$$

mit rechter Seite  $b$  aus (2.114-2.115). Benutzt man zum Lösen des Gleichungssystems das geometrische Mehrgitterverfahren aus Kapitel 3, so verwendet man für eine Hierarchie von Zerlegungen  $\tau_l$  als Grobgitteroperatoren bzw. Transferoperatoren in Matrix- bzw. Sterndarstellung:

$$A_{ij}^{(l)} = \sum_{m,n=1}^2 \int_{\Omega} K_{mn}(x) \partial_{x_n} \psi_j^{(l)}(x) \partial_{x_m} \psi_i^{(l)}(x) d^2x \quad (5.71)$$

bzw.

$$p_l^{l-1} = \begin{pmatrix} 1/4 & 1/2 & 1/4 \\ 1/2 & 1 & 1/2 \\ 1/4 & 1/2 & 1/4 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad r_{l-1}^l = (p_l^{l-1})^t \quad (5.72)$$

mit der Knotenbasis  $\{\psi_i^{(l)}\}$  auf  $\tau_l$  aus Abschnitt 2.7.

### Idee des Coarsening-Mehrgitterverfahrens

Die Idee für das neue Mehrgitterverfahren ist, das Vergrößern der Gitter mit einer für die Mehrgitter-Idee sinnvollen „Vergrößerung“ des Permeabilitätsfeldes zu verbinden, um einen besseren, problemangepaßten Grobgitteroperator zu erhalten. Wie in Abschnitt 3.4.1 erläutert, ist es dafür notwendig, daß die Grobgitterkorrektur die niederfrequenten Fehleranteile effizient reduziert.

Durch das iterative Upscaling mit der Coarse Graining Methode können wir ein Permeabilitätsfeld berechnen, das nur noch langwellige Fluktuationen enthält, die auf Skalen größer als eine vorgegebene Skala variieren. Wir verwenden daher zur Bestimmung des Grobgitteroperators diese hochskalierten Permeabilitätsfelder  $K(x)|_{\lambda_l}$ ,  $\lambda_l = h_l$ ,  $l \geq 0$ , die sich aus dem iterativen Upscaling von  $K(x)$  ergeben.

Den Grobgitteroperator auf dem Gitterlevel  $l$  definieren wir durch die Einträge der Steifigkeitsmatrix zu

$$A_{ij}^{(l)} := \sum_{m,n=1}^2 \int_{\Omega} K_{mn}(x)|_{\lambda_l} \partial_{x_n} \psi_j^{(l)}(x) \partial_{x_m} \psi_i^{(l)}(x) d^2x \quad (5.73)$$

mit  $\lambda_l = h_l$ . Er reduziert die niederfrequenten Fehleranteile in der Näherung von  $u$ , weil das hochskalierte Permeabilitätsfeld  $K(x)|_{\lambda_l}$  nur noch Beiträge enthält, die auf Längenskalen größer als  $\lambda_l$  variieren.

*Bemerkung 5.13.* Der so definierte Grobgitteroperator entspricht dem Operator aus der Diskretisierung der Strömungsgleichung mit dem Feld  $K(x)|_{\lambda_l}$  auf der Zerlegung  $\tau_l$ .

Als passende Transferoperatoren wählen wir lokale Operatoren, die sich ebenfalls ähnlich zum Hochskalieren ergeben. Auf diese Transferabbildungen gehen wir im nächsten Abschnitt ein. Insgesamt erhalten wir damit ein problemangepaßtes Mehrgitterverfahren.

**Definition 5.6.** Wir bezeichnen im folgenden dieses resultierende Mehrgitterverfahren als Coarsening-Mehrgitterverfahren (CN-MG).

*Bemerkung 5.14.* Das Coarsening-Mehrgitterverfahren benutzt wie das geometrische Mehrgitterverfahren die geometrische Vergrößerung, um die nötige Gitterhierarchie aufzubauen. Eine Verallgemeinerung auf unstrukturierte Gitter zusammen mit einem Agglomeration-Algorithmus zum Vergrößern, wie er z.B. in [HED02] oder [JV01] enthalten ist, ist möglich. Der numerisch hochskalierte Permeabilitätskoeffizient wird dann für jedes Element des unstrukturierten Gitters berechnet, wobei man geeignete Randbedingungen, etwa Nullrandbedingungen, zu wählen hat.

### Felder für das Coarsening-Mehrgitterverfahren

Aus physikalischer Sicht darf das Permeabilitätsfeld nicht negativ definit sein. Auch für die Konvergenz des Mehrgitterverfahrens ist es wesentlich, daß das Permeabilitätsfeld positiv definit ist. Für hohe Varianzen  $\sigma_f^2 \geq 1$  ist es aber möglich, daß das numerisch hochskalierte Permeabilitätsfeld  $K(x)|_\lambda = K^{\text{num}}(x, \lambda) + k(x)|_\lambda$  aus dem iterativen Upscaling nicht mehr an jedem Ort positiv definit ist. Der numerisch hochskalierte Permeabilitätskoeffizient  $K^{\text{num}}(x, \lambda)$  ist unter den in Satz 5.1 genannten Voraussetzungen stets positiv definit. Die Verletzung der Forderung an  $K(x)|_\lambda$  hat ihre Ursache in den hochskalierten Fluktuationen  $k(x)|_\lambda$ , die negativ sein können und für hohe Varianzen insbesondere für  $\lambda/l_0 < 1$  sehr stark variieren, so daß  $K^{\text{num}}(x, \lambda) + k(x)|_\lambda$  negativ werden kann.

Aus diesem Grund führen wir im Coarsening-Mehrgitterverfahren einen Parameter  $\theta$  ein, der von der Varianz  $\sigma_f^2$  abhängt und dessen geeignete Wahl die positive Definitheit von  $K(x)|_\lambda$  garantieren soll.

Als hochskaliertes Permeabilitätsfeld verwenden wir in CN-MG das modifizierte, iterativ hochskalierte Feld

$$K^{\text{CN}}(x)|_{\lambda_{l+1}} := \begin{cases} K(x)|_{\lambda_{l+1}} + \overline{(K(x)|_{\lambda_{l+1}} - K^{\text{num}}(x, \lambda_{l+1}))}|_{\lambda_{l+1}} & \text{für } \lambda/l_0 < \theta \\ K(x)|_{\lambda_{l+1}} & \text{sonst,} \end{cases} \quad (5.74)$$

wobei das Korrekturfeld  $\overline{(K(x)|_{\lambda_l} - K^{\text{num}}(x, \lambda_l))}|_{\lambda_{l+1}}$  wie die geglätteten Fluktuationen  $k(x, \lambda_l)|_{\lambda_{l+1}}$  in Gl. (5.53) bzw. (5.50) aus einer einfachen arithmetischen Mittelung hervorgeht. Wenn die Werte von  $\theta$  nicht ausdrücklich erwähnt werden, wählen wir

$$\theta(\sigma_f^2) = \begin{cases} 1/8 & \text{für } \sigma_f^2 \geq 1 \\ 0 & \text{für } \sigma_f^2 < 1. \end{cases} \quad (5.75)$$

In Testläufen für das CN-MG zeigte es sich, daß man grundsätzlich den Parameter  $\theta(\sigma_f^2)$  adaptiv oder sogar ortsabhängig wählen müßte, um stets zu garantieren, daß das verwendete Feld  $K^{\text{CN}}(x)|_\lambda$  im CN-MG überall positiv definit ist. Um aber den Aufwand für die Generierung der Felder im Mehrgitterverfahren nicht zu erhöhen, gehen wir folgendermaßen vor:

Falls das in (5.74) definierte hochskalierte Permeabilitätsfeld an einem Ort die Bedingung der Positivität verletze, ersetzen wir in CN-MG  $K^{\text{CN}}(x)|_{\lambda_{l+1}}$  an diesem Ort mit  $x \in T_j^{(l+1)}$  durch

$$\frac{1}{h_{l+1}^2} \int_{T_j^{(l+1)}} K^{\text{CN}}(x)|_{\lambda_l} d^2x. \quad (5.76)$$

Dies entspricht einer arithmetischen Mittelung der Koeffizienten im Element  $T_j^{(l+1)}$  des nächst feineren Gitters.

*Bemerkung 5.15.* Im Fall, daß wir das Coarsening-Mehrgitterverfahren auf Problemfälle anwenden, denen keine Realierung des logarithmisch normalverteilten Zufallsfeldes für  $K(x)$  zugrundeliegt, setzen wir  $\theta = 0$ .

### Setup-Phase und Algorithmus des Coarsening-Mehrgitterverfahrens

Die Setup-Phase des CN-MG zum Lösen der Strömungsgleichung mit einem feinskaligen Permeabilitätsfeld  $K(x)$ , definiert wie in (5.45) auf der feinsten Zerlegung  $\tau_0$ , lautet wie folgt:

1. Iteratives Hochskalieren der Permeabilitätsfelder beginnend mit  $K(x)|_{\lambda_0} = K(x)$  unter Verwenden des geometrischen Vergrößerns der Gitter, um eine Hierarchie  $\tau_l := \tau_{h_l}$ ,  $l > 0$ , zu erhalten.

- Dafür wird das Zellproblem aus (5.21)

$$-div K(x')|_{\lambda_l} \nabla (\chi_i^{(x)}(x') + x'_i) = 0$$

auf jedem Element  $T_j^{(l)} \in \tau_l$  mit Randbedingungen aus Satz 5.1 gelöst. Aus  $\chi_i^{(x)}$  berechnet man  $K^{\text{num}}(x, \lambda_l)$  für  $T_j^{(l)}$  nach Gl. (5.47),  $\lambda_l = h_l$ .

- Symmetrisieren von  $K^{\text{num}}(x, \lambda_l)$  für jedes  $T_j^{(l)}$ :

$$K_{mn}^{\text{num}}(x, \lambda_l) := \frac{1}{2} (K_{12}^{\text{num}}(x, \lambda_l) + K_{21}^{\text{num}}(x, \lambda_l)), \quad m \neq n.$$

- Aus  $K^{\text{num}}(x, \lambda_l)$  und  $K^{\text{num}}(x, \lambda_{l-1})$  für jedes  $T_j^{(l)}$  und dem geglätteten Fluktuationenfeld  $k(x, \lambda_{l-1})|_{\lambda_l}$  erhält man  $K(x)|_{\lambda_l}$  und mit der oben beschriebenen Modifikation das Feld  $K^{\text{CN}}(x)|_{\lambda_l}$  nach Gl. (5.74) bzw. (5.76).

2. Diskretisieren der linken Seite der Strömungsgleichung für das Feld  $K^{\text{CN}}(x)|_{\lambda_l}$ :

$$-div K^{\text{CN}}(x)|_{\lambda_l} \nabla u(x) = 0.$$

Man verwendet dazu dieselben Randbedingungen wie für die ursprüngliche Strömungsgleichung. Entsprechend Gl. (5.73) ergibt sich daraus der Grobgitteroperator  $A^{(l)}$  auf dem Level  $l$ .

3. Benutzen eines herkömmlichen Mehrgitterzyklus mit den Grobgitteroperatoren  $A^{(l)}$ , eines Glätters  $S$  und geeigneten Transferoperatoren analog zum Mehrgitter-Algorithmus 3.1.

*Bemerkung 5.16.* Die Transferoperatoren können die in Kapitel 3 definierten Standard-Transferoperatoren, matrixabhängige Transferoperatoren oder die im nächsten Abschnitt definierten Operatoren sein.

Als „äußerer“ Parameter des CN-MG ist die Wahl der Randbedingungen zu setzen, für die die Zellprobleme gelöst werden.

*Bemerkung 5.17.* Im Rahmen von periodischen Medien, für die die Aussagen aus der Homogenisierungstheorie gültig sind, wird in den Arbeiten [Neu95, NJW01] ein analoges Mehrgitterverfahren zum CN-MG entwickelt. Der Vorteil von periodischen Feldern ist, daß das entsprechende Zellproblem aus der Homogenisierung nur einmal gelöst werden muß, um damit einen angepaßten Grobgitteroperator wie im CN-MG zu konstruieren, und daß man die Konvergenz des Mehrgitterverfahrens beweisen kann.

Aufgrund der in Abschnitt 5.1 beschriebenen Analogie zwischen der Homogenisierungstheorie und dem numerischen Coarse Graining für den Fall von periodischen Medien kann man das beschriebene Coarsening-Mehrgitterverfahren auf das Verfahren in [Neu95, NJW01] für periodische Felder reduzieren, wenn der Koeffizient für die Periodizitätszelle achsensymmetrisch ist.

### 5.6.1 Transferoperatoren für das Coarsening-Mehrgitterverfahren

Zur Bestimmung der Transferoperatoren nutzen wir die Ähnlichkeit der Coarse Graining Methode zur Theorie der Homogenisierung aus. Als Prolongationsabbildung für das Coarsening-Mehrgitterverfahren schlagen wir neben der Standard-Prolongation und der matrixabhängigen Prolongation eine Abbildung vor, die sich an die Darstellung der feinskaligen Lösung durch die homogenisierte Lösung in der Homogenisierungstheorie anlehnt. Eine sehr ähnliche Prolongationsabbildung wird von Neuß in [Neu95, NJW01] benutzt, um geeignete Transferoperatoren für das zitierte Mehrgitterverfahren für periodische Medien zu konstruieren.

Aus Gl. (2.90) in Abschnitt 2.5 geht für die Lösung des feinskaligen Problems  $u^\epsilon$  in der Homogenisierungstheorie

$$u^\epsilon(x) \approx u^0(x) + \epsilon \sum_{i=1}^d w_i(x) \partial_{x_i} u^0(x) \quad (5.77)$$

mit der Lösung  $u^0$  des homogenisierten Problems hervor. Die Funktionen  $w_i$  sind die Lösungen des Zellproblems (2.88).

Für den hochskalierten Koeffizienten  $K^{\text{num}}(x, \lambda)$  berechnen wir im CN-MG ein analoges Zellproblem (5.21), allerdings auf jedem Element  $T_j^{(l)}$  einer Zerlegung  $\tau_l$ . Die resultierenden Zelllösungen  $\chi_i^{(x)}$  können wir zur Definition einer Prolongation  $p$  in Anlehnung an (5.77) mit

$$e_{l-1}(x) = (p_l^{l-1} e_l)(x) := e_l(x) + \frac{h_{l-1}}{h_l} \sum_{i=1}^2 \chi_i^{(\tilde{x}(T_j^{(l)}))}(x) \partial_{x_i} e_l(x) \quad \text{für } x \in T_j^{(l)} \cap (\Omega_{l-1} \setminus \Omega_l)$$

im Mehrgitterverfahren benutzen. In den Gitterpunkten von  $\Omega_{l-1}^{10} \cup \Omega_{l-1}^{01}$ , die nicht auf dem Rand  $\partial\Omega$  liegen, ist diese Prolongation aber nicht eindeutig, da für benachbarte Elemente  $T_{j_1}$  und  $T_{j_2}$  die Werte der Zelllösungen  $\chi^{(\tilde{x}(T_{j_1}))}$  und  $\chi^{(\tilde{x}(T_{j_2}))}$  im allgemeinen an solchen Gitterpunkten unterschiedlich sind. Wir definieren daher folgende Prolongationsabbildung:

**Definition 5.7 (CN-Prolongation).** In den Feingitterpunkten  $\Omega_{l-1}^{00} = \Omega_l$  ist die Prolongation die Identität:

$$e_{l-1}(x) = (p_l^{l-1} e_l)(x) := e_l(x) \quad \text{für } x \in \Omega_{l-1}^{00}. \quad (5.78)$$

In den Gitterpunkten  $\Omega_{l-1} \setminus \Omega_{l-1}^{00}$  definieren wir die Prolongation durch:

$$e_{l-1}(x) = (p_l^{l-1} e_l)(x) := e_l(x) + \frac{h_{l-1}}{h_l \sum_{T^{(l)} \text{ mit } x \in T^{(l)}} 1} \sum_{i=1}^2 \left( \sum_{T^{(l)} \text{ mit } x \in T^{(l)}} \chi_i^{(\tilde{x}(T^{(l)}))}(x) \partial_{x_i} e_l(x) \right). \quad (5.79)$$

*Bemerkung 5.18.* Benutzt man zur Berechnung der Funktionen  $\chi^{(x)}$  für die Elemente  $T_j^{(l)}$  die NZF-Randbedingungen, so vereinfacht sich die CN-Prolongation für die Gitterpunkte  $\Omega_{l-1}^{10}$  bzw.  $\Omega_{l-1}^{01}$  zu:

$$e_{l-1}(x) = e_l(x) + \frac{h_{l-1}}{h_l \sum_{T^{(l)} \text{ mit } x \in T^{(l)}} 1} \sum_{T^{(l)} \text{ mit } x \in T^{(l)}} \chi_1^{(\tilde{x}(T^{(l)}))}(x) \partial_{x_1} e_l(x) \quad (5.80)$$

bzw.

$$e_{l-1}(x) = e_l(x) + \frac{h_{l-1}}{h_l \sum_{T^{(l)} \text{ mit } x \in T^{(l)}} 1} \sum_{T^{(l)} \text{ mit } x \in T^{(l)}} \chi_2^{(\tilde{x}(T^{(l)}))}(x) \partial_{x_2} e_l(x). \quad (5.81)$$

*Bemerkung 5.19.* Benutzt man zur Berechnung der  $\chi^{(x)}$  Dirichlet-Nullrandbedingungen, unterscheidet sich die CN-Prolongation von der Standard-Prolongation nur in den Gitterpunkten  $\Omega_{l-1}^{11}$ .

#### Restriktion

Als Restriktion für das Coarsening-Verfahren wählen wir die adjungierte Abbildung der CN-Prolongation.



## Kapitel 6

# Numerische Experimente und Ergebnisse

In diesem Kapitel stellen wir unsere numerischen Ergebnisse zu den Mehrgitterverfahren vor. Wir vergleichen in einer systematischen Untersuchung das von uns entwickelte Mehrgitterverfahren mit den in Kapitel 3 besprochenen Verfahren. Dazu betrachten wir ein Modellproblem und konzentrieren uns auf die Untersuchung der Effizienz der vorgestellten Mehrgitterverfahren zum Lösen. Neben einer Auswahl von logarithmisch normalverteilten Permeabilitätsfeldern betrachten wir auch speziell konstruierte Felder, die Vor- und Nachteile der verschiedenen Mehrgitterverfahren aufdecken sollen.

Wir interessieren uns außerdem für den quantitativen Vergleich der Grobgitteroperatoren, die die numerischen Verfahren benutzen. Wir überprüfen daher in einigen Testfällen außer der Mehrgitterkonvergenz auch die Güte der Grobgitteroperatoren. Dies wurde zum ersten Mal systematisch in den Arbeiten [Kna95, MDH98] allerdings nur für das Mehrgitterverfahren aus [Den82a] getan. Wir berechnen für die einzelnen Verfahren einen sogenannten MG-effektiven Koeffizienten, der ein numerisch ermittelter, konstanter Permeabilitätskoeffizient auf dem größten Gitterlevel im Mehrgitterverfahren ist. Besteht das größte Gitter nur aus einem inneren Gitterpunkt, so entspricht der MG-effektive Koeffizient einem effektiven Permeabilitätskoeffizienten für das betrachtete feinskalige Permeabilitätsfeld.

Der MG-effektive Koeffizient ist mit der Modellgüte gekoppelt, mit der das Problem im Mehrgitterverfahren implizit behandelt wird. Damit können wir untersuchen, ob ein Zusammenhang zwischen den numerisch ermittelten Konvergenzraten der einzelnen Verfahren und der impliziten Modellgüte besteht.

### 6.1 MG-effektiver Koeffizient

Die Möglichkeit, eine numerisch homogenisierte Permeabilität mithilfe von robusten Multilevel-Lösungsverfahren zu berechnen, wird zuerst in [Kna95, MDH98] benutzt. Sie verwenden aber einzig das geometrische Mehrgitterverfahren mit den matrixabhängigen Transferabbildungen nach Alcouffe und Dendy [ABDP81, Den82a] dazu. In [MDH98] wird durch den Grobgitteroperator, der den Einfluß der feinskaligen Struktur des Mediums verschieden gut beinhalten kann, ein effektiver Permeabilitätstensor als lokale Größe je nach Gitterlevel elementweise hergeleitet. Wir betrachten hier den Grobgitteroperator nur auf dem größten Gitter. Wir leiten einen effektiven Koeffizienten aus dem Mehrgitterverfahren her, indem wir einen Permeabilitätstensor aus dem Diskretisierungstern auf dem größten Gitterlevel ableiten.

Wir gehen von einem Mehrgitterverfahren mit Galerkinprodukt und geeigneten Transferoperatoren zur Bestimmung des MG-effektiven Koeffizienten aus. Wir nehmen an, daß der Diskretisierungstern im Grenzfall eines maximalen Vergrößerns gegen den Differenzstern des Laplace-Operators

geht. Für den Differenzenstern aus Gl. (2.116) im Abschnitt über die Finite-Element-Methode erhält man für einen konstanten, symmetrischen Tensor  $K_{ij}$  im Gebiet  $\Omega$  dann:

$$A^* = \begin{bmatrix} -l_1 & -l_2 & -l_3 \\ -l_4 & 4(l_2 + l_4) & -l_4 \\ -l_3 & -l_2 & -l_1 \end{bmatrix}. \quad (6.1)$$

Für dessen Einträge ergibt sich, wie man leicht nachrechnet:

$$l_1 = \frac{1}{6}(K_{11} + K_{22}) - \frac{1}{2}K_{12} \quad (6.2)$$

$$l_2 = \frac{2}{3}K_{22} - \frac{1}{3}K_{11} \quad (6.3)$$

$$l_3 = \frac{1}{6}(K_{11} + K_{22}) + \frac{1}{2}K_{12} \quad (6.4)$$

$$l_4 = \frac{2}{3}K_{11} - \frac{1}{3}K_{22}. \quad (6.5)$$

Durch Auflösen erhält man daraus für den MG-effektiven Permeabilitätstensor  $K^{\text{MG}}$  den symmetrischen Tensor:

$$K^{\text{MG}} := \begin{pmatrix} l_2 + 2l_4 & l_3 - l_1 \\ l_3 - l_1 & l_4 + 2l_2 \end{pmatrix}. \quad (6.6)$$

*Bemerkung 6.1.* Eine ähnliche Herleitung von  $K^{\text{MG}}$  findet man in der genannten Arbeit [Kna95].  $K^{\text{MG}}$  wird darin als MG-homogenisierter Koeffizient bezeichnet.

*Bemerkung 6.2.* Benutzt man zur Berechnung des Grobgitteroperators die Diskretisierung auf einem explizit hochskalierten Feld, wie etwa durch einfache Upscalingsverfahren oder iteratives Upscaling durch die Coarse Graining Methode, so ist der MG-effektive Koeffizient gleich dem Tensor des konstanten, iterativ hochskalierten Permeabilitätsfeldes, wenn die Zerlegung auf dem größten Gitterlevel nur aus einem Element besteht.

Verwendet man das Galerkinprodukt zur Berechnung des Grobgitteroperators, muß man den MG-effektiven Koeffizienten direkt aus dem Verfahren ermitteln.

Zur Berechnung von  $K^{\text{MG}}$  nehmen wir stets mindestens sechs Grobgitterlevel im jeweiligen Mehrgitterverfahren an.

*Bemerkung 6.3.* Beim Ruge-Stüben-Mehrgitterverfahren sind die Gitter für die Mehrgitterhierarchie problemangepaßt. Das heißt, daß im allgemeinen die Gitterpunkte auf den höheren Mehrgitterleveln aufgrund des verwendeten Vergrößerungsalgorithmus keine regelmäßige Anordnung wie bei geometrisch vergrößerten Gittern haben. Wir vergrößern daher im Ruge-Stüben-Verfahren soweit, bis auf dem höchsten Gitterlevel weniger oder gleich neun Gitterpunkte, einschließlich vorhandener Gitterrandpunkte, vorhanden sind. Aus dem Differenzenstern des Gitterpunktes, der am nächsten zum Mittelpunkt vom Gebiet  $[0, 1]^2$  liegt, berechnen wir den MG-effektiven Koeffizienten  $K^{\text{MG}}$ .

## 6.2 Das Modellproblem

Als Modellproblem untersuchen wir das Modell einer Strömung in einem heterogenen Medium. Wir lösen die Strömungsgleichung

$$-\text{div } K(x)\nabla u(x) = f(x) \quad \text{für } x \in \Omega := [0, 1]^2 \quad (6.7)$$

mit einem vorgegebenen Permeabilitätsfeld  $K(x)$  und Quellenterm  $f(x)$ , den wir in allen numerischen Experimenten null setzen. Analog zu Abschnitt 2.7.1 wählen wir als Randbedingungen stets:

$$\begin{aligned} u(x) &= 1 && \text{für } x_1 = 0, x_2 \in [0, 1], \\ u(x) &= 0 && \text{für } x_1 = 1, x_2 \in [0, 1], \\ n(x) \cdot (K(x)\nabla u(x)) &= 0 && \text{sonst,} \end{aligned} \quad (6.8)$$

mit  $x \in \partial\Omega$  und  $n(x)$  dem äußeren Normalen-Einheitsvektor von  $\partial\Omega$ .

Das Permeabilitätsfeld  $K(x)$  sei, wie bereits im letzten Kapitel angenommen, auf jedem Element der feinsten Zerlegung  $\tau_0$  von  $\Omega$  konstant. Das heißt, ist  $K(x)$  in  $\Omega$  oder Teilen von  $\Omega$  eine Realisierung des logarithmisch normalverteilten Zufallsfeldes, nehmen wir für das in der numerischen Berechnung verwendete  $K(x)$  wieder

$$K(x) := K(\tilde{x}(T_j^{(0)})) \quad \text{für alle } x \in T_j^{(0)} \quad (6.9)$$

an. Die Strömungsgleichung diskretisieren wir mithilfe der Galerkin- und Finite-Element-Methode aus Abschnitt 2.7. Das daraus resultierende Gleichungssystem mit der Steifigkeitsmatrix aus (2.114) bzw. (2.116) lösen wir mit einem der vorgestellten Mehrgitterverfahren.

Die Anzahl der Gitterpunkte auf dem Gitterlevel  $l$  ist  $(h_l^{-1} + 1)^2$  mit der Maschenweite  $h_l$  von  $\tau_l$ . In Abschnitt 6.3 und 6.4 arbeiten wir mit Ausnahme der Berechnungen zur  $h$ -Abhängigkeit mit  $h_0 = 2^{-8}$  und in Abschnitt 6.5–6.6 mit  $h_0 = 2^{-7}$ .

Die Korrelationsfunktion für den Logarithmus der Realisierungen des Zufallsfeldes lautet wie in den vorherigen Kapiteln

$$w(x - x') = \sigma_f^2 \exp\left(-\sum_{i=1}^2 \frac{(x_i - x'_i)^2}{2l_i^2}\right) \quad (6.10)$$

mit den Korrelationslängen  $l_1$  und  $l_2$ .

Als Parameter für die Mehrgitterverfahren wählen wir einheitlich in allen numerischen Simulationen einen V-Zyklus mit symmetrischen Gauß-Seidel-Verfahren als Glätter und einen Vor- und Nachglättungsschritt. Der Startvektor für die Mehrgitterverfahren ist der Nullvektor, und auf dem größten Gitter lösen wir das Gleichungssystem ebenfalls mit einem symmetrischen Gauß-Seidel-Verfahren.

Die Konvergenzraten der Mehrgitterverfahren geben wir durch die mittlere Konvergenzrate  $\bar{\rho}$  an. Sie mißt den mittleren Faktor mit dem der Anfangsdefekt  $d^{(0)}$  in jedem Iterationsschritt reduziert wird.  $\bar{\rho}$  ergibt sich zu

$$\bar{\rho} = \left(\frac{\|d^{(m)}\|_2}{\|d^{(0)}\|_2}\right)^{1/m}, \quad (6.11)$$

wenn man  $m$  Iterationsschritte benötigt, um die Defektnorm  $\|d^{(0)}\|_2$  etwa um 10 Größenordnungen zu reduzieren. Als Abbruchkriterium setzen wir eine relative Reduktion von  $10^{-10}$  oder maximal 80 Mehrgitteriterationen.

Als Löser für die Zellprobleme im Coarsening-Mehrgitterverfahren setzen wir ebenfalls ein symmetrisches Gauß-Seidel-Verfahren ein. Als Abbruchkriterium verwenden wir eine relative Reduktion der Defektnorm von  $10^{-10}$ , eine absolute Reduktion der Defektnorm von  $10^{-15}$  oder maximal 60 Iterationsschritte.

*Bemerkung 6.4.* Für sehr große Koeffizientensprünge von  $K(x)$  ist der Fehler durch die Diskretisierung des Modellproblems mit der Finite-Element-Methode nach Abschnitt 2.7 groß. Eine andere Wahl der Diskretisierungsmethode z.B. durch gemischte Finite-Element-Methoden oder „Discontinuous Galerkin“-Finite-Element-Verfahren wäre hier geeigneter, siehe [AWY97, Bra97, BR97, ABCM02].

### 6.3 Varianten des Coarsening-Mehrgitterverfahrens

Wir untersuchen zunächst einige Eigenschaften des Coarsening-Mehrgitterverfahrens (CN-MG), indem wir es zur Lösung des eingeführten Modellproblems verwenden. Wir legen unser Augenmerk auf die möglichen Varianten des CN-MG, die sich ergeben, indem man zum einen verschiedene Transferabbildungen und zum anderen verschiedene Randbedingungen für die Zellprobleme im CN-MG wählt.

Wir berechnen dazu die mittlere Konvergenzrate für eine Realisierung und für ein Ensemble von 10 Realisierungen des lognormalverteilten Zufallsfeldes. Im letztgenannten Fall ermitteln wir das arithmetische Mittel der Konvergenzraten für die Realisierungen. Die Felder sind isotrop korreliert und die Varianz beträgt  $\sigma_f^2 = 1$  bzw.  $\sigma_f^2 = 2$ .

Zusätzlich variieren wir für die verschiedenen Fälle die Feinheit  $h_T/h_{l+1}$  des Diskretisierungsgitters  $\tau_T$  zur Berechnung der Zellprobleme für den Grobgitteroperator auf dem Gitterlevel  $l+1$  innerhalb des CN-MG.  $h_{l+1}$  bezeichnet die Gitterweite der Zerlegung  $\tau_{l+1}$  von  $\Omega$  auf dem Level  $l+1$ .

*Bemerkung 6.5.* Wir wählen das Verhältnis  $h_T/h_{l+1}$  unabhängig vom Gitterlevel. Damit wächst die Gitterweite  $h_T$  für das Zellproblem proportional zu  $h_{l+1}$  mit dem Gitterlevel im Mehrgitterverfahren an. Wir bezeichnen das Verhältnis  $h_T/h_{l+1}$  im folgenden einfach mit  $h_T/h_0$ .

Wir legen folgende Bezeichnungen für die Varianten fest:

- CN-ST: Coarsening-Mehrgitterverfahren mit Standard-Transferoperatoren.
- CN-M1: Coarsening-Mehrgitterverfahren mit den matrixabhängigen Transferoperatoren nach Alcouffe et al., Gl. (3.93) (blockweise Prolongation).
- CN-CP: Coarsening-Mehrgitterverfahren mit der CN-Prolongation.

$h_T/h_0$	CN-ST	CN-M1	CN-CP	CN-ST (Mittel)	CN-M1 (Mittel)	CN-CP (Mittel)
1/2	0.188	0.131	0.188	0.182	0.134	0.180
1/4	0.165	0.114	0.165	0.164	0.118	0.163
1/8	0.159	0.110	0.159	0.159	0.113	0.159
1/16	0.158	0.109	0.158	0.157	0.112	0.156

Tabelle 6.1: Für Varianz  $\sigma_f^2 = 1$ : Konvergenzraten für das Modellproblem für verschiedene Varianten des Coarsening-Mehrgitterverfahrens für eine Realisierung und 10 Realisierungen (Mittel) in Abhängigkeit von der Gitterfeinheit  $h_T/h_0$  für die Zellprobleme. Die Zellprobleme im CN-MG werden mit Nullrandbedingungen gelöst. Die Felder sind isotrop korreliert, und die Korrelationslänge ist  $l_0 = 1/16$ .

$h_T/h_0$	CN-ST	CN-M1	CN-CP	CN-ST (Mittel)	CN-M1 (Mittel)	CN-CP (Mittel)
1/2	0.070	0.108	0.054	0.090	0.068	0.063
1/4	0.070	0.186	0.074	0.088	0.074	0.066
1/8	0.070	0.192	0.075	0.089	0.083	0.071
1/16	0.072	0.170	0.064	0.094	0.119	0.080

Tabelle 6.2: Konvergenzraten für CN-MG wie in Tabelle 6.1, wobei die Zellprobleme im CN-MG mit NZF-Randbedingungen gelöst werden.

In den Tabellen 6.1–6.4 sind die Konvergenzraten für jeweils Nullrandbedingungen und NZF-Randbedingungen für das Zellproblem im CN-MG und Varianz  $\sigma_f^2 = 1$  und  $\sigma_f^2 = 2$  für die Felder dargestellt.

Die Konvergenzraten für das Coarsening-Mehrgitterverfahren mit Standard-Transferoperatoren CN-ST und das Coarsening-Mehrgitterverfahren mit der CN-Prolongation CN-CP unterscheiden sich im Fall von Nullrandbedingungen für die Zellprobleme nur sehr wenig. Dies liegt daran, daß sich die CN-Prolongation für Nullrandbedingungen nur in den Gitterpunkten  $\Omega_l^{11} \subset \Omega_l$  von der Standard-Prolongation unterscheidet. Der Unterschied in der Prolongation hat keinen merklichen

$h_T/h_0$	CN-ST	CN-M1	CN-CP	CN-ST (Mittel)	CN-M1 (Mittel)	CN-CP (Mittel)
1/2	0.328	0.271	0.315	0.415	0.304	0.413
1/4	0.315	0.234	0.324	0.388	0.264	0.389
1/8	0.316	0.226	0.324	0.377	0.251	0.378
1/16	0.315	0.223	0.323	0.374	0.247	0.375

Tabelle 6.3: Für Varianz  $\sigma_f^2 = 2$ : Konvergenzraten für verschiedene Varianten des Coarsening-Mehrgitterverfahrens für eine Realisierung und 10 Realisierungen (Mittel) in Abhängigkeit von der Gitterfeinheit  $h_T/h_0$  für die Zellprobleme. Die Zellprobleme im CN-MG werden mit Nullrandbedingungen gelöst. Die Felder sind isotrop korreliert,  $l_0 = 1/16$ .

$h_T/h_0$	CN-ST	CN-M1	CN-CP	CN-ST (Mittel)	CN-M1 (Mittel)	CN-CP (Mittel)
1/2	0.161	0.153	0.120	0.207	0.262	0.183
1/4	0.138	0.273	0.122	0.177	0.322	0.143
1/8	0.145	0.289	0.115	0.161	0.318	0.123
1/16	0.137	0.234	0.111	0.170	0.271	0.130

Tabelle 6.4: Konvergenzraten für CN-MG wie in Tabelle 6.3, wobei die Zellprobleme im CN-MG mit NZF-Randbedingungen gelöst werden.

Einfluß auf das Mehrgitterverfahren, wie man Tabelle 6.1 und 6.3 entnimmt. Für den Fall mit Nullrandbedingungen werden die Konvergenzraten mit zunehmender Gitterfeinheit  $h_T/h_0$  des Zellproblems besser. Eine Ausnahme bildet nur das CN-CP-Verfahren für  $\sigma_f^2 = 2$ . Das Coarsening-Mehrgitterverfahren mit den matrixabhängigen Transferoperatoren nach Alcouffe et al., CN-M1, ist im Fall von Nullrandbedingungen das beste.

Für den Fall, daß die Zellprobleme mit NZF-Randbedingungen im CN-MG gelöst werden, ist das Coarsening-Mehrgitterverfahren mit der CN-Prolongation, CN-CP, in allen Testfällen bis auf die Werte für die Einzelrealisierung mit  $h_T/h_0 = 1/4$  und  $h_T/h_0 = 1/8$  ( $\sigma_f^2 = 1$ ) das effizienteste. Es ist insbesondere im Vergleich für die höhere Varianz  $\sigma_f^2 = 2$  deutlich besser als CN-ST und CN-M1. Betrachtet man die Konvergenzraten für die verschiedenen Werte von  $h_T/h_0$  für die NZF-Randbedingungen, ergibt sich für  $\sigma_f^2 = 1$  in mehreren Fällen eine geringe Verschlechterung der Raten mit zunehmender Gitterfeinheit des Zellproblems. Auch für  $\sigma_f^2 = 2$  zeigen die Konvergenzraten eine Abhängigkeit von  $h_T/h_0$ . Für die Werte aus dem Mittel der 10 Realisierungen verbessern sich aber die Raten für CN-ST und CN-CP für kleiner werdendes  $h_T$  im Bereich  $h_T/h_0 \geq 1/8$ .

### Parameterwahl für CN-MG für die weiteren Simulationen

Als Folge obiger Resultate und zur Einschränkung des Rechenaufwandes, der mit zunehmender Gitterfeinheit  $h_T/h_0$  steigt, wählen wir für die weiteren numerischen Experimente in diesem Kapitel für die Feinheit des Diskretisierungsgitters für die Zellprobleme in den Coarsening-Mehrgitterverfahren  $h_T/h_0 = 1/8$ .

Wir betrachten im folgenden sowohl das Coarsening-Mehrgitterverfahren mit matrixabhängigen Transferoperatoren nach Alcouffe und Nullrandbedingungen für die Zellprobleme als auch das Coarsening-Mehrgitterverfahren mit CN-Prolongation und NZF-Randbedingungen für die Zellprobleme. Wir bezeichnen im folgenden die Varianten mit diesen Randbedingungen mit CN-M1 bzw. CN-CP.

*Bemerkung 6.6.* Die Wahl  $h_T/h_0 = 1/8$  für die Feinheit des Diskretisierungsgitters für die Zellprobleme ist im Einklang mit den Ergebnissen zur Gitterkonvergenz für den numerisch hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten. Im Abschnitt 5.3 untersuchen wir die Gitterkonvergenz für verschiedene Werte von  $\lambda/l_0$ . Da wir im CN-MG ein iteratives Upscaling benutzen, sind die Ergebnisse aus Abbildung 5.2 für  $\lambda/l_0 = 1/4$  heranzuziehen. Diese ergeben eine Gitterkonvergenz für  $h_T/h_0 \leq 1/8$ .

### 6.3.1 $h$ -Abhängigkeit des CN-MG

Wir untersuchen in diesem Abschnitt, wie sich die Konvergenzrate des Coarsening-Mehrgitterverfahrens verhält, wenn man die Anzahl der Gitterpunkte zur Diskretisierung des Modellproblems mit einer einzelnen lognormalverteilten Realisierung für  $K(x)$  variiert. Wir betrachten die Varianten CN-M1 und CN-CP, wie wir sie am Ende des letzten Abschnitts bezeichnet haben. In Tabelle 6.5 sind die Konvergenzraten für diese Verfahren für drei isotrop korrelierte Realisierungen mit zunehmender Varianz angegeben.

Mit zunehmender Anzahl der Gitterpunkte der feinsten Zerlegung des Gebiets  $\Omega$  werden die Heterogenitäten des feinskaligen Permeabilitätsfeldes immer besser aufgelöst. Die Verbesserung der Mehrgitter-Konvergenzrate mit kleiner werdender Gitterweite  $h_0$  zeigt damit, daß die Mehrgitterverfahren mit zunehmender Auflösung der Fluktuationen des Feldes effizienter arbeiten. Für den Wert  $\sigma_f^2 = 3$  erhält man allerdings für das CN-CP-Verfahren zunächst eine Verschlechterung der Konvergenzrate mit abnehmendem  $h_0$ .

Anzahl der Gitterpunkte	$h_0$	Varianz $\sigma_f^2 = 1$		Varianz $\sigma_f^2 = 2$		Varianz $\sigma_f^2 = 3$	
		CN-M1	CN-CP	CN-M1	CN-CP	CN-M1	CN-CP
1089	$2^{-5}$	0.169	0.107	0.243	0.130	0.533	0.272
4225	$2^{-6}$	0.158	0.093	0.229	0.119	0.512	0.457
16641	$2^{-7}$	0.141	0.084	0.212	0.077	0.490	0.229
66049	$2^{-8}$	0.130	0.071	0.192	0.116	0.468	0.231
263169	$2^{-9}$	0.112	0.064	0.179	0.099	0.444	0.203
1050625	$2^{-10}$	0.094	0.052	0.158	0.089	0.418	0.184

Tabelle 6.5: Konvergenzraten für CN-M1 und CN-CP in Abhängigkeit von der Anzahl der Gitterpunkte bzw.  $h_0$  für drei Realisierungen mit verschiedenen Varianzen.

### Abhängigkeit von der Anzahl der Glättungsschritte

Weiter untersuchen wir das Verhalten der CN-MG-Verfahren bei Erhöhung der Glättungsschritte im Mehrgitter-Algorithmus mit V-Zyklus. Für eine isotrope Realisierung mit Varianz  $\sigma_f^2 = 1$  enthält die Tabelle 6.6 die Konvergenzraten für die zwei Varianten CN-M1 und CN-CP des Coarsening-Mehrgitterverfahrens in Abhängigkeit der Glättungsschritte. Die Anzahl der Vor- und Nachglättungsschritte ist gleich:  $\nu = \nu_1 = \nu_2$ .

Nur für  $\nu = 2$  zeigen die Coarsening-Mehrgitterverfahren eine dem Aufwand entsprechend deutliche Verbesserung der Konvergenz im Vergleich zu  $\nu = 1$ .

$\nu$	1	2	3	4	5
CN-M1	0.130	0.091	0.072	0.064	0.053
CN-CP	0.071	0.036	0.027	0.018	0.015

Tabelle 6.6: Die Konvergenzraten für CN-M1 und CN-CP in Abhängigkeit von der Anzahl der Glättungsschritte  $\nu$  für das Modellproblem mit einer Realisierung mit Varianz  $\sigma_f^2 = 1$  als  $K(x)$ .

## 6.4 Vergleich der Mehrgitterverfahren

Im folgenden vergleichen wir die in der Arbeit eingeführten Mehrgitterverfahren für das Modellproblem mit Permeabilitätsfeldern  $K(x)$ , die Realisierungen eines logarithmisch normalverteilten Zufallsfeldes sind. Wir betrachten insgesamt 15 verschiedene Mehrgitterverfahren, die sich zum Teil aus den verschiedenen Kombinationen zur Berechnung des Grobgitteroperators und der Transferoperatoren ergeben.

Neben den algebraischen Verfahren untersuchen wir Verfahren, bei denen sich der Grobgitteroperator entweder aus dem Galerkinprodukt oder aus der Diskretisierung auf hochskalierten Permeabilitätsfeldern durch Mittelungsroutinen ergibt, wie wir sie in Abschnitt 2.6 vorgestellt haben: Der Grobgitteroperator für diese Verfahren ist wie beim Coarsening-Mehrgitterverfahren auf dem Gitterlevel  $l$  durch

$$A_{ij}^{(l)} := \sum_{m,n=1}^2 \int_{\Omega} K_{mn}^{ups}(x)|_l \partial_{x_n} \psi_j^{(l)}(x) \partial_{x_m} \psi_i^{(l)}(x) d^2x \quad (6.12)$$

definiert, vgl. (5.73). Das Feld  $K_{mn}^{ups}(x)|_l$  geht durch iteratives Hochskalieren von  $K^{ups}(x)|_{l-1}$  mit einer Upscalingsroutine aus Abschnitt 2.6 hervor. Für  $l = 0$  ist  $K^{ups}(x)|_0 \equiv K(x)$ .

Für die unterschiedlichen Arten der Berechnung des Grobgitteroperators nach (6.12) führen wir folgende Bezeichnungen ein:

- MGA: Berechnung des Grobgitteroperators nach (6.12), wobei  $K^{ups}(x)|_l$  durch arithmetische Mittelung entsteht.
- MGG: Berechnung des Grobgitteroperators nach (6.12), wobei  $K^{ups}(x)|_l$  durch geometrische Mittelung entsteht.
- MGK: Berechnung des Grobgitteroperators nach (6.12), wobei  $K^{ups}(x)|_l$  durch das Upscaling mit dem King-Wert entsteht.
- MGM: Berechnung des Grobgitteroperators nach (6.12), wobei  $K^{ups}(x)|_l$  durch das Upscaling mit dem Migdal-Kadanoff-Wert entsteht.
- GAP: Berechnung des Grobgitteroperators durch das Galerkinprodukt.

Weiterhin benutzen wir die Abkürzungen MG-RS bzw. MG-SC für das eingeführte Ruge-Stüben- bzw. das Schurkomplement-Mehrgitterverfahren. Die Varianten des Coarsening-Mehrgitterverfahrens tragen CN als Kennung.

Für die möglichen Transferoperatoren verwenden wir folgende Bezeichnungen:

- ST: Standard-Transferoperatoren.
- M1: Matrixabhängige Transferoperatoren nach Alcouffe et al.
- M2: Matrixabhängige Transferoperatoren nach de Zeeuw.
- CP: CN-Prolongation mit entsprechender Restriktion.

Für das MG-RS- und MG-SC-Verfahren verwenden wir ausschließlich die zugehörigen Transferabbildungen, wie sie im Unterkapitel 3.4.8 und 3.4.9 vorgestellt werden. Insbesondere verwenden wir Algorithmus 3.3 für deren Konstruktion beim MG-SC-Verfahren. Die matrixabhängige Transferoperatoren nach Alcouffe beziehen sich stets auf die blockweise Prolongation nach Alcouffe et al. Die Verfahren GAP-M1 und GAP-M2 bezeichnen wir öfters als Galerkinprodukt-Verfahren mit matrixabhängiger Prolongation.

Für die Coarsening-Mehrgitterverfahren setzen wir den Parameter  $\theta(\sigma_f^2)$  auf:

$$\theta(\sigma_f^2) = \begin{cases} 1/2 & \text{für } \sigma_f^2 \geq 2 \\ 1/8 & \text{für } 1 \leq \sigma_f^2 < 2 \\ 0 & \text{für } \sigma_f^2 < 1 \end{cases} .$$

### 6.4.1 Vergleich für ein Ensemble von skalaren Feldern

Die nachfolgenden Tabellen enthalten die arithmetisch gemittelten Konvergenzraten für jeweils 10 Realisierungen für verschiedene Werte der Varianz und der Korrelationslängen. Tabelle 6.7 und 6.8 zeigt die Werte für isotrop korrelierte Felder. In den Tabellen 6.9–6.10 bzw. 6.11–6.12 sind die Konvergenzraten für 10 Realisierungen mit anisotroper Korrelationsfunktion mit  $(l_1, l_2) = (2l_0, l_0/2)$  bzw.  $(l_1, l_2) = (8l_0, l_0/2)$ ,  $l_0 = 1/16$ , notiert.

Varianz $\sigma_f^2$	MGA-ST	MGA-M1	MGG-ST	MGG-M1	GAP-ST	GAP-M1	GAP-M2
0.1	0.057	0.051	0.051	0.049	0.056	0.050	0.053
1	0.261	0.202	0.108	0.064	0.259	0.064	0.072
2	0.503	0.433	0.201	0.208	0.508	0.124	0.110
3	0.658	0.576	0.300	0.284	0.657	0.121	0.134
4	0.759	0.710	0.379 [1]	0.376 [2]	0.765	0.198	0.216
5	0.781	0.737	0.439	0.617 [4]	0.781	0.193	0.177

Tabelle 6.7: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für 10 Realisierungen mit isotroper Korrelation.

$\sigma_f^2$	CN-M1	CN-CP	MGK-ST	MGK-M1	MGM-ST	MGM-M1	MG-SC	MG-RS
0.1	0.050	0.050	0.052	0.050	0.051	0.049	0.075	0.119
1	0.114	0.070	0.132	0.099	0.107	0.085	0.130	0.137
2	0.260	0.122	0.256	0.345	0.216	0.252	0.228	0.177
3	0.380	0.188	0.417	0.538 [1]	0.331	0.292	0.352	0.213
4	0.527	0.352	0.546 [2]	0.378 [7]	0.433 [2]	0.528 [1]	0.514	0.174
5	0.553	0.361	0.764 [2]	0.699 [6]	0.493 [2]	0.454 [4]	0.471	0.200

Tabelle 6.8: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für 10 Realisierungen mit isotroper Korrelation wie in Tabelle 6.7.

Varianz $\sigma_f^2$	MGA-ST	MGA-M1	MGG-ST	MGG-M1	GAP-ST	GAP-M1	GAP-M2
0.1	0.055	0.052	0.051	0.049	0.053	0.049	0.051
1	0.270	0.189	0.303	0.373	0.267	0.053	0.056
2	0.495	0.419	0.594 [1]	0.652 [2]	0.488	0.076	0.082
3	0.606	0.519	– [10]	– [10]	0.608	0.127	0.129
4	0.670	0.615	–	–	0.659	0.149	0.152
5	0.781	0.736	–	–	0.788	0.211	0.202

Tabelle 6.9: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für 10 Realisierungen mit anisotroper Korrelation,  $(l_1, l_2) = (2l_0, l_0/2)$ .

*Bemerkung 6.7.* Die Tabellen enthalten in den eckigen Klammern die Anzahl der Realisierungen für die das entsprechende Mehrgitterverfahren nicht konvergiert. Die angegebene Konvergenzrate ist dann das arithmetische Mittel der Raten, für die das Verfahren nicht divergiert.

Die Ergebnisse in Tabelle 6.7 und 6.8 zeigen, daß im isotrop korrelierten Fall die Verfahren GAP-M1 und GAP-M2, die mit dem Galerkinprodukt arbeiten, am besten sind. Das Coarsening-Mehrgitterverfahren CN-CP zeigt ebenfalls sehr gute Konvergenzraten, ist aber für hohe Varianzen  $\sigma_f^2 \geq 3$  schlechter als GAP-M1 und GAP-M2. Für hohe Varianzen sind die Konvergenzraten des Ruge-Stüben-Mehrgitterverfahrens ebenfalls sehr gut. Für  $\sigma_f^2 \leq 2$  arbeitet dieses Verfahren im Vergleich zu GAP-M1, GAP-M2 und CN-CP allerdings weniger effizient. Die anderen Verfahren



$\sigma_f^2$	CN-M1	CN-CP	MGK-ST	MGK-M1	MGM-ST	MGM-M1	MG-SC	MG-RS
0.1	0.051	0.051	0.050	0.049	0.054	0.051	0.069	0.123
1	0.107	0.099	0.609 [4]	0.738 [4]	0.240	0.166	0.153	0.160
2	0.268	0.135	– [10]	– [10]	0.449	0.370	0.251	0.170
3	0.350	0.237	– [10]	– [10]	0.553	0.453	0.320	0.178
4	0.444	0.331	–	–	0.593	0.520	0.411	0.205
5	0.586	0.403	–	–	0.726	0.677	0.536	0.190

Tabelle 6.10: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für 10 Realisierungen mit anisotroper Korrelation,  $(l_1, l_2) = (2l_0, l_0/2)$ , wie in Tabelle 6.9.

Varianz $\sigma_f^2$	MGA-ST	MGA-M1	MGG-ST	MGG-M1	GAP-ST	GAP-M1	GAP-M2
0.1	0.053	0.050	0.050	0.049	0.052	0.049	0.051
1	0.258	0.221	0.272	0.318	0.256	0.050	0.051
2	0.383	0.348	0.755 [3]	0.760 [6]	0.395	0.050	0.051
3	0.531	0.477	– [10]	– [10]	0.539	0.058	0.060
4	0.633	0.592	–	–	0.635	0.097	0.104
5	0.668	0.622	–	–	0.670	0.110	0.113

Tabelle 6.11: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für 10 Realisierungen mit anisotroper Korrelation,  $(l_1, l_2) = (8l_0, l_0/2)$ .

zeigen nur für  $\sigma_f^2 \leq 1$  vergleichsweise gute Konvergenzraten, ansonsten sind sie deutlich schlechter.

Im anisotropen Fall ergibt sich ein ähnliches Bild: Die beiden Mehrgitterverfahren GAP-M1 und GAP-M2 dominieren deutlich die anderen Verfahren. Für große Varianzen zeigt nur das Ruge-Stüben-Verfahren ähnlich gute Konvergenzraten. Das CN-CP-Verfahren fällt im Vergleich zu diesen drei Verfahren für große Varianzen zurück. Für den Fall sehr starker Anisotropie in Tabelle 6.11 und 6.12 ist auch das Schurkomplement-Mehrgitterverfahren für  $\sigma_f^2 \geq 2$  besser als das CN-CP-Verfahren. Die übrigen Verfahren zeigen wiederum schlechtere Konvergenzraten, insbesondere sind die Verfahren, die das geometrische Mittel und den effektiven Permeabilitätswert nach King zum einfachen Upscaling benutzen, für  $\sigma_f^2 \geq 3$  divergent.

Die Zunahme der Konvergenzrate mit wachsender Varianz  $\sigma_f^2$  ist in allen Fällen beim Ruge-Stüben-Verfahren und den Verfahren GAP-M1 und GAP-M2 am geringsten. Bemerkenswert ist hier der stark anisotrop korrelierte Fall in Tabelle 6.11, bei dem die Konvergenzraten von GAP-M1 und GAP-M2 für den gesamten betrachteten Varianzbereich nur zwischen 0.049 und 0.113 variieren.

*Bemerkung 6.8.* Vergleicht man die Mehrgitterverfahren untereinander, die ein iteratives Hochskalieren zur Berechnung des Grobgitteroperators verwenden, findet man, daß die Varianten des Coarsening-Mehrgitterverfahrens besser als die Mehrgitterverfahren sind, die einfache Upscalingsverfahren benutzen. Einfache Mittelungsroutinen eignen sich, wie die Ergebnisse zeigen, zum Hoch-

$\sigma_f^2$	CN-M1	CN-CP	MGK-ST	MGK-M1	MGM-ST	MGM-M1	MG-SC	MG-RS
0.1	0.050	0.050	0.049	0.050	0.053	0.050	0.068	0.116
1	0.135	0.073	0.775 [3]	0.777 [6]	0.256	0.218	0.081	0.156
2	0.242	0.151	– [10]	– [10]	0.375	0.343	0.122	0.181
3	0.341	0.403	–	–	0.529	0.474	0.163	0.178
4	0.427	0.475	–	–	0.627	0.583	0.258	0.208
5	0.491	0.437	–	–	0.664	0.618	0.269	0.190

Tabelle 6.12: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für 10 Realisierungen mit anisotroper Korrelation,  $(l_1, l_2) = (8l_0, l_0/2)$ , wie in Tabelle 6.11.

skalieren der Permeabilitätsfelder im Mehrgitterverfahren für höhere Varianzen  $\sigma_f^2 \geq 3$  im isotrop und anisotrop korrelierten Fall nicht. Für die entsprechenden Mehrgitterverfahren ergeben sich vergleichsweise schlechte Konvergenzraten, und in einigen Fällen nimmt die Anzahl der divergenten Fälle mit der Varianz zu.

### 6.4.2 Vergleich für richtungsanisotrope Felder

Wir vergleichen kurz die Mehrgitterverfahren für das Modellproblem mit richtungsanisotropen Permeabilitätsfeldern  $K(x)$ , deren zwei Diagonalkomponenten durch zwei unabhängige, isotrop korrelierte Realisierungen gegeben sind.

Varianz $\sigma_f^2$	MGA-ST	MGA-M1	MGG-ST	MGG-M1	GAP-ST	GAP-M1	GAP-M2
0.1	0.060	0.062	0.057	0.058	0.059	0.057	0.062
0.5	0.424	0.414	0.419	0.413	0.424	0.411	0.435
1	0.660	0.670	0.658	0.669	0.659	0.665	0.685

Tabelle 6.13: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für 10 Realisierungen mit Richtungsanisotropie. Die Korrelation der Komponenten des Feldes  $K_{11}(x)$  und  $K_{22}(x)$  ist isotrop.

$\sigma_f^2$	CN-M1	CN-CP	MGK-ST	MGK-M1	MGM-ST	MGM-M1	MG-SC	MG-RS
0.1	0.060	0.057	0.057	0.059	0.057	0.058	0.221	0.210
0.5	0.413	0.408	0.419	0.413	0.419	0.412	0.567	0.374
1	0.669	0.655	0.657	0.669	0.658	0.668	0.675 [6]	0.534

Tabelle 6.14: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren wie in Tabelle 6.13. Für das Schurkomplement-Verfahren MG-SC ist  $\epsilon = 0.01$  gesetzt.

Im Vergleich zu den Werten aus Tabelle 6.7–6.8 sieht man: Die Konvergenzraten in Tabelle 6.13–6.14 sind schon für die betrachteten kleinen Varianzen wesentlich schlechter als die Raten für den richtungsisotropen Fall mit skalarem feinskaligen  $K(x)$ .

Die Konvergenzraten der einzelnen Verfahren unterscheiden sich nur wenig. Für das Schurkomplement-Verfahren und das Ruge-Stüben-Verfahren sind sie für  $\sigma_f^2 = 0.1$  aber deutlich größer. Für  $\sigma_f^2 = 0.5$  und  $\sigma_f^2 = 1$  erhält man hingegen mit dem Ruge-Stüben-Verfahren die besten Konvergenzraten.

*Bemerkung 6.9.* Durch die Verwendung der matrixabhängigen Transferoperatoren erhält man für das GAP-Verfahren im Gegensatz zur Verwendung der Standard-Transferoperatoren keine Verbesserung der Konvergenz. Im isotropen Fall erhält man dadurch eine deutliche Verbesserung. Für das MG-SC-Verfahren wird der Parameter  $\epsilon = 0.01$  benutzt, da man für kleinere Werte schlechtere Konvergenzraten erhält.

*Bemerkung 6.10.* Eine Möglichkeit, für richtungsanisotrope Medien besser konvergierende Mehrgitterverfahren zu erhalten, ist z.B. die Verwendung eines Block-Gauß-Seidel-Verfahrens als Glätter im Mehrgitter-Algorithmus. Bei diesem Verfahren werden jeweils mehrere Gitterpunkte zusammengefaßt und diese als Einheit relaxiert. Da die Anisotropie in den verwendeten Feldern zufällig ist, kann aber nur durch einen Block-Gauß-Seidel-Löser mit adaptiver Wahl der Blöcke eine Verbesserung der Konvergenz erreicht werden.

### 6.4.3 Vergleich für eine isotrope Einzelrealisierung

Wir untersuchen noch das Konvergenzverhalten und den MG-effektiven Koeffizienten einiger Mehrgitterverfahren für eine isotrope Einzelrealisierung. Für jeden Wert der Varianz betrachten wir dazu eine feste Realisierung. Für sehr kleine Varianzen  $\sigma_f^2 \leq 1$  liefern dafür alle Verfahren gute Kon-

Varianz $\sigma_f^2$	MGA-ST	MGG-ST	GAP-M1	CN-CP	MGM-ST	MG-SC	MG-RS
0.1	0.051	0.049	0.050	0.049	0.049	0.089	0.137
1	0.224	0.091	0.052	0.051	0.120	0.093	0.121
2	0.525	0.192	0.092	0.117	0.249	0.230	0.154
3	0.624	0.376	0.142	0.121	0.248	0.309	0.188
4	0.667	0.228	0.155	0.210	0.550	0.341	0.169
5	0.788	0.930	0.321	0.344	0.343	0.574	0.158

Tabelle 6.15: Mittlere Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für eine Realisierung mit isotroper Korrelation.

$\sigma_f^2$	MGA-ST	MGG-ST	GAP-M1	CN-CP	MGM-ST	MG-SC	MG-RS
0.1	$\begin{pmatrix} 1.06 & -0.06 \\ -0.06 & 1.06 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.01 & -0.05 \\ -0.05 & 1.01 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.64 & 0 \\ 0 & 0.92 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.01 & -0.05 \\ -0.05 & 1.02 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.01 & -0.05 \\ -0.05 & 1.0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.80 & -0.03 \\ -0.03 & 0.79 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.89 & -0.21 \\ -0.21 & 1.14 \end{pmatrix}$
1	$\begin{pmatrix} 1.69 & -0.05 \\ -0.05 & 1.51 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.14 & -0.08 \\ -0.08 & 0.98 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.48 & 0 \\ 0 & 0.62 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.07 & -0.11 \\ -0.11 & 0.90 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.18 & -0.06 \\ -0.06 & 1.03 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.44 & -0.02 \\ -0.02 & 0.35 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.80 & -0.15 \\ -0.15 & 0.82 \end{pmatrix}$
2	$\begin{pmatrix} 2.64 & -0.51 \\ -0.51 & 2.83 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.02 & -0.07 \\ -0.07 & 1.08 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.08 & 0 \\ 0 & 1.78 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.07 & 0.04 \\ 0.04 & 0.89 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.39 & -0.35 \\ -0.35 & 1.52 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.43 & -0.27 \\ -0.27 & 1.64 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.40 & -0.17 \\ -0.17 & 1.45 \end{pmatrix}$
3	$\begin{pmatrix} 4.85 & -1.05 \\ -1.05 & 4.17 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.09 & -0.24 \\ -0.24 & 1.03 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.94 & -0.01 \\ -0.01 & 1.17 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.09 & 0.12 \\ 0.12 & 1.07 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.45 & -0.36 \\ -0.36 & 1.23 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.50 & -0.35 \\ -0.35 & 1.26 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.16 & -0.14 \\ -0.14 & 1.24 \end{pmatrix}$
4	$\begin{pmatrix} 7.97 & -1.78 \\ -1.78 & 9.28 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.11 & 0.33 \\ 0.33 & 1.44 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.67 & 0.01 \\ 0.01 & 5.11 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.22 & 0.24 \\ 0.24 & 1.93 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.28 & -0.18 \\ -0.18 & 1.45 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.51 & -0.07 \\ -0.07 & 1.13 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.91 & -0.11 \\ -0.11 & 0.96 \end{pmatrix}$
5	$\begin{pmatrix} 6.39 & -1.30 \\ -1.30 & 6.13 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.17 & -0.40 \\ -0.40 & 1.10 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 2.06 & -0.06 \\ -0.06 & 3.67 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.29 & -0.71 \\ -0.71 & 1.09 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.56 & -0.91 \\ -0.91 & 1.49 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.76 & -0.21 \\ -0.21 & 1.85 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.52 & -0.63 \\ -0.63 & 1.56 \end{pmatrix}$

Tabelle 6.16: MG-effektiver Koeffizient  $K^{\text{MG}}$  für verschiedene Mehrgitterverfahren für eine isotrop korrelierte Realisierung mit Konvergenzraten aus Tabelle 6.15.

vergenzwerte, die die Tabelle 6.15 enthält. Die Mehrgitterverfahren GAP-M1, CN-CP und MG-RS zeigen die besten Konvergenzraten. Für zunehmende Varianz werden die Raten zwar bei GAP-M1 und CN-CP schlechter, für den sehr hohen Wert  $\sigma_f^2 = 5$  sind sie aber immer noch akzeptabel. Die Konvergenzraten vom Ruge-Stüben-Verfahren zeigen keine Abhängigkeit von der Varianz.

Der exakte Wert für den effektiven Koeffizienten zum Vergleich mit dem im Abschnitt 6.1 definierten MG-effektiven Koeffizienten für die Untersuchung der isotrop korrelierten Realisierungen in Tabelle 6.16 ist das geometrische Mittel  $K_g I$  mit  $K_g = 1$ . Mit Ausnahme für das Verfahren MGA-ST mit einfachem arithmetischem Upscaling und Standard-Prolongation stimmen die MG-effektiven Koeffizienten der Verfahren in guter Näherung mit dem exakten Wert überein. Die Konvergenzraten dieser Verfahren sind mit Ausnahme des Verfahrens MGM-ST für  $\sigma_f^2 = 4$  und MG-SC und MGG-ST für  $\sigma_f^2 = 5$  auch deutlich besser als die von MGA-ST.

## 6.5 Vergleich für periodische Medien

Wir untersuchen das Konvergenzverhalten der verschiedenen Mehrgitterverfahren für das Modellproblem mit periodischen Permeabilitätsfeldern  $K(x)$ . Wir betrachten je nach Wahl des Permeabilitätsfeldes nicht mehr alle Mehrgitterverfahren wie im vorherigen Abschnitt, sondern nur noch eine geeignete Auswahl.

In allen nachfolgenden Beispielen bezeichnen wir wieder mit  $h_0$  die Gitterweite der feinsten Zerlegung  $\tau_0$  des Rechengebiets  $\Omega = [0, 1]^2$ .

### 6.5.1 Periodisch geschichtetes Medium (Laminat)

Wir lösen die Strömungsgleichung (6.7) mit den in (6.8) angegebenen Randbedingungen. Zunächst betrachten wir für  $K(x)$  ein periodisch geschichtetes Medium mit zwei Schichten, wie in der Abbildung 6.1 gezeigt. Schichtungen in heterogenen Medien treten, wie das Schema in Abb. 2.2 zeigt, in der Praxis häufig auf.

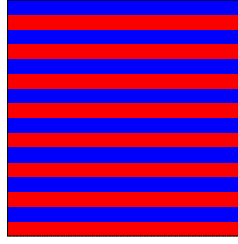


Abbildung 6.1: Periodisch geschichtetes Medium

$v_2/v_1$	MGA-M1	MGG-M1	GAP-ST	GAP-M1	GAP-M2	CN-M1	CN-CP	MGM-M1	MG-SC	MG-RS
$10^{-4}$	0.734	–	0.755	0.093	0.076	0.681	0.481	0.734	0.367	0.223
$10^{-3}$	0.719	–	0.749	0.146	0.143	0.665	0.460	0.719	0.346	0.214
$10^{-2}$	0.609	div	0.645	0.118	0.116	0.533	0.334	0.609	0.211	0.190
$10^{-1}$	0.270	0.505	0.290	0.050	0.050	0.192	0.119	0.270	0.074	0.214
1	0.051	0.051	0.051	0.051	0.053	0.051	0.051	0.051	0.065	0.107
$10^1$	0.315	0.560	0.310	0.066	0.064	0.229	0.175	0.315	0.073	0.179
$10^2$	0.692	div	0.696	0.215	0.211	0.623	0.728	0.692	0.243	0.190
$10^3$	0.799	–	0.798	0.375	0.374	0.767	0.905	0.799	0.407	0.192
$10^4$	0.831	–	0.830	0.395	0.394	0.801	0.950	0.831	0.470	0.192

Tabelle 6.17: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für das periodisch geschichtete Medium  $K(x)$  aus Abb. 6.1.

Die Schichtbreite betrage  $1/16$ , und die Werte des Permeabilitätsfeldes lauten:

$$K(x) = \begin{cases} v_1 I & \text{für } x \in \Omega_1 \\ v_2 I & \text{für } x \in \Omega_2, \end{cases} \quad (6.13)$$

mit dem hell schattierten Bereich  $\Omega_1$  und dem dunkel schattierten Bereich  $\Omega_2$  in Abb. 6.1,  $v_1 = 1$  und der Einheitsmatrix  $I$ . Die Schichtbreite entspricht  $8h_0$ .

In der Tabelle 6.17 sind die Konvergenzraten für eine Auswahl von Mehrgitterverfahren für unterschiedliches Verhältnis  $v_2/v_1$  angegeben. Die Bezeichnung div steht für divergent.

Aus den Konvergenzraten ergibt sich folgendes Ergebnis: Die Galerkinprodukt-Verfahren mit matrixabhängiger Prolongation, GAP-M1 und GAP-M2, und die algebraischen Verfahren MG-SC und MG-RS sowie das CN-CP-Verfahren zeigen die besten Konvergenzraten. Für Werte  $v_2 \geq 10^2$  sind die Raten vom CN-CP-Verfahren im Vergleich zu den anderen vier Verfahren allerdings schlechter. In diesem Wertebereich ist das Ruge-Stüben-Verfahren am besten, für kleine Werte  $v_2 < 1$  ist das GAP-M2-Verfahren am besten.

In der Tabelle 6.18 sind für die Berechnung mit dem Laminat die MG-effektiven Permeabilitätskoeffizienten  $K^{\text{MG}}$  für vier verschiedene Werte von  $v_2$  notiert. Wie im Abschnitt 6.1 erklärt, erhalten wir  $K^{\text{MG}}$  aus dem Grobgitteroperator der jeweiligen Mehrgitterverfahren.

Aus der Theorie der Homogenisierung erhält man für den homogenisierten Koeffizienten eines Laminats, vgl. (2.89):

$$A^{\text{hom}} = \begin{pmatrix} \frac{v_1+v_2}{2} & 0 \\ 0 & \frac{2v_1v_2}{v_1+v_2} \end{pmatrix}. \quad (6.14)$$

Aus dem iterativen Upscaling mit der Coarse Graining Methode im CN-CP-Verfahren erhält man für  $K^{\text{MG}}$  den exakten homogenisierten Koeffizienten  $A^{\text{hom}}$ . Aus den Mehrgitterverfahren, die einfache Upscalingsverfahren benutzen, erhält man für  $K^{\text{MG}}$  das arithmetische bzw. geometrische Mittel der Werte von  $v_1$  und  $v_2$ . Für die Verfahren, die mit dem Galerkinprodukt und der matrixabhängigen Prolongation arbeiten, insbesondere für das Schurkomplement- und Ruge-Stüben-

$v_2/v_1$	MGA-M1	MGG-M1	GAP-ST	GAP-M1	GAP-M2
$10^{-2}$	$0.51I$	$0.1I$	$0.51I$	$\begin{pmatrix} 0.19 & 0 \\ 0 & 0.03 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.19 & 0 \\ 0 & 0.04 \end{pmatrix}$
$10^{-1}$	$0.55I$	$0.32I$	$0.55I$	$\begin{pmatrix} 0.25 & 0 \\ 0 & 0.19 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.25 & 0 \\ 0 & 0.18 \end{pmatrix}$
$10^1$	$5.5I$	$3.16I$	$5.5I$	$\begin{pmatrix} 2.54 & 0 \\ 0 & 1.93 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 2.50 & 0 \\ 0 & 1.88 \end{pmatrix}$
$10^2$	$50.5I$	$10.0I$	$50.5I$	$\begin{pmatrix} 18.76 & 0 \\ 0 & 3.50 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 19.04 & 0 \\ 0 & 3.95 \end{pmatrix}$

$v_2/v_1$	CN-M1	CN-CP	MGM-M1	MG-SC	MG-RS	$A^{hom}$
$10^{-2}$	$\begin{pmatrix} 0.51 & 0 \\ 0 & 0.27 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.51 & 0 \\ 0 & 0.02 \end{pmatrix}$	$0.51I$	$\begin{pmatrix} 0.31 & 0 \\ 0 & 0.13 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.15 & 0 \\ 0 & 0.09 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.51 & 0 \\ 0 & 0.02 \end{pmatrix}$
$10^{-1}$	$\begin{pmatrix} 0.55 & 0 \\ 0 & 0.37 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.55 & 0 \\ 0 & 0.18 \end{pmatrix}$	$0.55I$	$\begin{pmatrix} 0.42 & 0 \\ 0 & 0.30 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.39 & 0.06 \\ 0.06 & 0.32 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.55 & 0 \\ 0 & 0.18 \end{pmatrix}$
$10^1$	$\begin{pmatrix} 5.5 & 0 \\ 0 & 3.7 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 5.5 & 0 \\ 0 & 1.82 \end{pmatrix}$	$5.5I$	$\begin{pmatrix} 4.21 & 0 \\ 0 & 3.07 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 4.05 & 0.08 \\ 0.08 & 3.54 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 5.5 & 0 \\ 0 & 1.82 \end{pmatrix}$
$10^2$	$\begin{pmatrix} 50.5 & 0 \\ 0 & 26.82 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 50.5 & 0 \\ 0 & 1.98 \end{pmatrix}$	$50.5I$	$\begin{pmatrix} 31.05 & 0 \\ 0 & 12.58 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 13.34 & 0.15 \\ 0.15 & 8.80 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 50.5 & 0 \\ 0 & 1.98 \end{pmatrix}$

Tabelle 6.18: MG-effektiver Koeffizient  $K^{MG}$  für verschiedene Mehrgitterverfahren für das periodisch geschichtete Medium aus Abbildung 6.1 und der Wert  $A^{hom}$  aus der Theorie der Homogenisierung.

Mehrgitterverfahren, ergeben sich im Vergleich zu  $A^{hom}$  ebenfalls deutlich unterschiedliche MG-effektive Koeffizienten. Die longitudinale Komponente von  $K^{MG}$  dieser Verfahren ist aber wie beim exakten Tensor aufgrund  $K(x)$  stets größer als die transversale Komponente. Die Konvergenzraten dieser Verfahren sind für  $v_2/v_1 = 10^2$  aber besser als die von CN-CP, das für  $K^{MG}$  den homogenisierten Koeffizienten liefert. Ein Zusammenhang zwischen dem Konvergenzverhalten der Mehrgitterverfahren und dem Ergebnis für  $K^{MG}$  ist nicht erkennbar.

*Bemerkung 6.11.* Aus der Variante GAP-M1 mit der matrixabhängigen Prolongation nach Alcouffe ergibt sich ebenfalls für  $K^{MG}$  der homogenisierte Koeffizient  $A^{hom}$ , falls die Schichtbreite gleich der Gitterweite  $h_0$  ist [Kna98]. Dies gilt, da sich diese Prolongation, Gl. (3.93), in  $x_1$ -Richtung zur Standard-Prolongation reduziert und damit das arithmetische Mittel  $(v_1 + v_2)/2$  liefert. In der  $x_2$ -Richtung ergibt sich aus der Prolongation das harmonische Mittel.

*Bemerkung 6.12.* Daß die Konvergenzraten der Mehrgitterverfahren aus Tabelle 6.17 nicht invariant bezüglich  $v_2/v_1$  und  $(v_2/v_1)^{-1}$  sind, ist ein Effekt der vorgegebenen Randbedingungen für das Modellproblem. Berechnet man die Strömung für das Modell mit dem um 90 Grad gedrehten Laminat um  $(0.5, 0.5)$  aus Abb. 6.1 für  $K(x)$ , erhält man die Konvergenzraten aus Tabelle 6.19, die eine Skalierungsinvarianz für die Verfahren – außer dem Ruge-Stüben-Verfahren – zeigen. Für  $v_2/v_1 = 10^{-1}$  und 10 sind hier das CN-CP-Verfahren und die Galerkinprodukt-Verfahren mit matrixabhängiger Prolongation am besten. Für den gesamten Wertebereich liefert aber nur das Ruge-Stüben-Verfahren gute Konvergenzraten.

$v_2/v_1$	MGA-M1	GAP-ST	GAP-M1	GAP-M2	CN-M1	CN-CP	MG-SC	MG-RS
$10^{-3}$	0.874	0.874	0.853	0.851	0.871	0.848	0.859	0.273
$10^{-2}$	0.850	0.853	0.675	0.731	0.822	0.680	0.774	0.223
$10^{-1}$	0.497	0.602	0.095	0.161	0.347	0.165	0.288	0.263
$10^1$	0.541	0.595	0.120	0.187	0.391	0.088	0.233	0.305
$10^2$	0.900	0.907	0.743	0.776	0.870	0.719	0.794	0.293
$10^3$	0.953	0.954	0.930	0.920	0.949	0.924	0.933	0.409

Tabelle 6.19: Konvergenzraten für das um 90 Grad gedrehte, periodisch geschichtete Medium  $K(x)$  aus Abb. 6.1.

### 6.5.2 Medien mit periodischen Einlagerungen

Wir untersuchen, wie sich die unterschiedlichen Mehrgitterverfahren bei weichen und harten Einlagerungen im Medium verhalten. Wir betrachten Medien, in denen sowohl symmetrische als auch

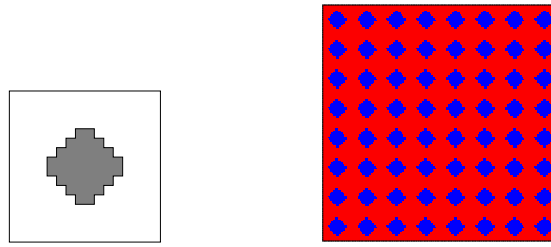


Abbildung 6.2: Medium mit periodischen symmetrischen Einlagerungen I

unsymmetrische Einlagerungen periodisch enthalten sind. Die Länge der Periodizitätszelle im Medium beträgt in allen Fällen  $1/16$  bzw.  $8h_0$ . Das Permeabilitätsfeld  $K(x)$  sei stets  $K = v_2 I$  im dunkel schattierten Bereich und  $K = v_1 I$  im hellen Bereich für die Periodizitätszellen aus Abb. 6.2-6.5.

### Symmetrische Einlagerungen

Für das Medium mit den periodischen symmetrischen Einlagerungen I nach Abb. 6.2 erhält man die Konvergenzraten, die in Tabelle 6.21 angegeben sind. Im Bereich  $v_2 \leq 1$ , d.h. für weiche Einlagerungen, ergeben sich für alle getesteten Verfahren gute Konvergenzraten. Die Raten der Verfahren mit matrixabhängiger Prolongation, GAP-M1, GAP-M2, MGM-M1, und des Coarsening-Mehrgitterverfahrens und Schurkomplement-Verfahrens sind am besten. Für steife Einlagerungen,  $v_2 > 1$ , sind die Galerkinprodukt-Verfahren GAP-M1 und GAP-M2 am besten.

Ein effektiver Permeabilitätskoeffizient für das Medium mit den Einlagerungen nach Abb. 6.2 wurde in der Literatur für  $v_2/v_1 = 10$  bereits berechnet: er lautet  $1.573I$  [Bou77]. In Tabelle 6.20 sind die MG-effektiven Koeffizienten  $K^{\text{MG}}$  der verwendeten Verfahren für dieses Medium mit  $v_2/v_1 = 10$  angegeben.  $K^{\text{MG}}$  aus den Verfahren MGA-M1, GAP-ST und CN-M1 überschätzt den Literaturwert deutlich. Die Konvergenzraten dieser Verfahren sind für  $v_2 = 10$  im Gegensatz zu den anderen auch deutlich schlechter.

$v_2/v_1$	MGA-M1	GAP-ST	GAP-M1	GAP-M2	CN-M1
10	$3.11I$	$3.06I$	$\begin{pmatrix} 1.04 & 0 \\ 0 & 1.55 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.10 & 0 \\ 0 & 1.82 \end{pmatrix}$	$2.31I$

$v_2/v_1$	CN-CP	MGM-M1	MG-SC	MG-RS
10	$1.54I$	$1.72I$	$1.12I$	$\begin{pmatrix} 1.41 & 0.5 \\ 0.5 & 1.61 \end{pmatrix}$

Tabelle 6.20: MG-effektiver Koeffizient für verschiedene Mehrgitterverfahren für das Medium mit den periodischen Einlagerungen I aus Abb. 6.2 für  $v_2 = 10$ .

$v_2/v_1$	MGA-M1	GAP-ST	GAP-M1	GAP-M2	CN-M1	CN-CP	MGM-M1	MG-SC	MG-RS
$10^{-4}$	0.190	0.209	0.072	0.083	0.100	0.092	0.060	0.092	0.192
$10^{-3}$	0.190	0.209	0.072	0.083	0.099	0.092	0.060	0.092	0.193
$10^{-2}$	0.185	0.204	0.071	0.081	0.098	0.090	0.061	0.091	0.202
$10^{-1}$	0.136	0.155	0.064	0.066	0.083	0.048	0.062	0.076	0.210
1	0.051	0.051	0.051	0.053	0.051	0.051	0.051	0.065	0.107
$10^1$	0.458	0.478	0.069	0.075	0.289	0.067	0.114	0.108	0.231
$10^2$	0.885	0.896	0.108	0.108	0.811	0.762	0.458	0.142	0.246
$10^3$	0.960	0.964	0.161	0.168	0.941	0.948	0.559	0.236	0.287
$10^4$	0.971	0.972	0.184	0.197	0.969	0.973	0.569	0.263	0.269

Tabelle 6.21: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für ein Medium mit periodischen symmetrischen Einlagerungen I, wie in Abb. 6.2 dargestellt.

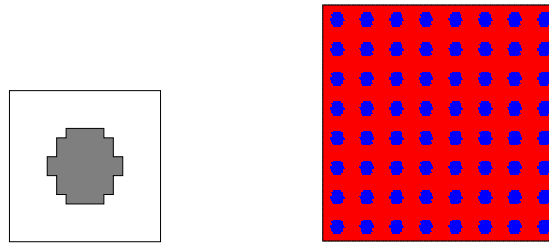


Abbildung 6.3: Medium mit periodischen symmetrischen Einlagerungen II

$v_2/v_1$	MGA-M1	GAP-ST	GAP-M1	GAP-M2	CN-M1	CN-CP	MGM-M1	MG-SC	MG-RS
$10^{-4}$	0.157	0.162	0.064	0.068	0.076	0.092	0.048	0.044	0.209
$10^{-3}$	0.157	0.162	0.064	0.067	0.076	0.092	0.048	0.044	0.214
$10^{-2}$	0.153	0.159	0.063	0.066	0.076	0.069	0.049	0.043	0.192
$10^{-1}$	0.116	0.123	0.055	0.056	0.070	0.045	0.050	0.045	0.204
$10^1$	0.430	0.446	0.065	0.074	0.267	0.089	0.123	0.068	0.221
$10^2$	0.875	0.886	0.084	0.084	0.791	0.861	0.306	0.073	0.228
$10^3$	0.957	0.962	0.087	0.085	0.936	0.957	0.367	0.187	0.248
$10^4$	0.970	0.971	0.087	0.086	0.967	0.970	0.378	0.188	0.249

Tabelle 6.22: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für das Medium mit periodischen symmetrischen Einlagerungen II wie in Abb. 6.3.

$v_2/v_1$	MGA-M1	GAP-ST	GAP-M1	GAP-M2	CN-M1
$10^{-2}$	0.81I	0.82I	$\begin{pmatrix} 0.47 & 0 \\ 0 & 0.72 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.55 & 0 \\ 0 & 0.92 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.72 & 0 \\ 0 & 0.74 \end{pmatrix}$
$10^{-1}$	0.83I	0.84I	$\begin{pmatrix} 0.50 & 0 \\ 0 & 0.76 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.58 & 0 \\ 0 & 0.97 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.76 & 0 \\ 0 & 0.78 \end{pmatrix}$
$10^1$	2.69I	2.64I	$\begin{pmatrix} 0.94 & 0 \\ 0 & 1.41 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.01 & 0 \\ 0 & 1.69 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.99 & 0 \\ 0 & 2.03 \end{pmatrix}$
$10^2$	19.56I	19.09I	$\begin{pmatrix} 1.02 & 0 \\ 0 & 1.54 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1.03 & 0 \\ 0 & 1.80 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 9.12 & 0 \\ 0 & 9.35 \end{pmatrix}$

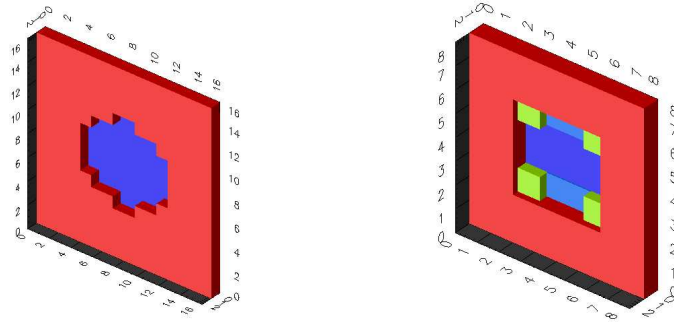
  

$v_2/v_1$	CN-CP	MGM-M1	MG-SC	MG-RS
$10^{-2}$	$\begin{pmatrix} 0.60 & 0 \\ 0 & 0.70 \end{pmatrix}$	0.68I	0.84I	$\begin{pmatrix} 0.59 & 0.08 \\ 0.08 & 0.90 \end{pmatrix}$
$10^{-1}$	$\begin{pmatrix} 0.66 & 0 \\ 0 & 0.67 \end{pmatrix}$	0.74I	0.87I	$\begin{pmatrix} 0.69 & 0.12 \\ 0.12 & 0.85 \end{pmatrix}$
$10^1$	$\begin{pmatrix} 1.43 & 0 \\ 0 & 1.47 \end{pmatrix}$	1.56I	1.12I	$\begin{pmatrix} 1.70 & 0.13 \\ 0.13 & 1.83 \end{pmatrix}$
$10^2$	$\begin{pmatrix} 15.36 & 0 \\ 0 & 18.04 \end{pmatrix}$	1.93I	1.14I	$\begin{pmatrix} 2.07 & 0.09 \\ 0.09 & 2.39 \end{pmatrix}$

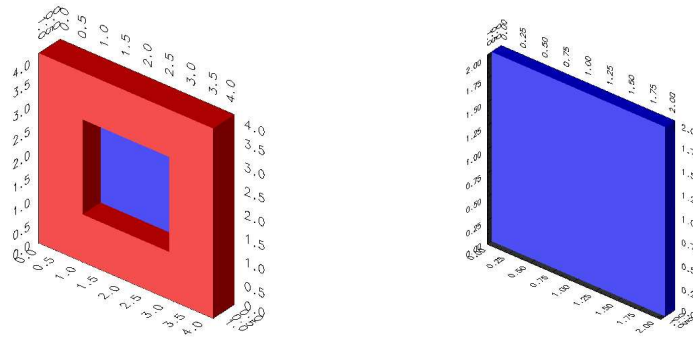
Tabelle 6.23: MG-effektiver Koeffizient für verschiedene Mehrgitterverfahren für das Medium mit symmetrischen Einlagerungen II aus der Abbildung 6.3.

Die Konvergenzraten für die Berechnung der Strömungsgleichung für das Medium mit den symmetrischen Einlagerungen II nach Abb. 6.3 sind in der Tabelle 6.22 notiert. Betrachtet man sie, ergibt sich ein ähnliches Resultat wie für die Berechnung mit dem periodischen Medium aus Abb. 6.2. Hier liefern für  $v_2/v_1 \leq 1$  alle Verfahren sehr gute Konvergenzraten. Insbesondere ist das Mehrgitterverfahren mit der einfachen Upscalingsmethode nach Migdal-Kadanoff für kleine Werte  $v_2/v_1 \leq 10^{-1}$  ausgezeichnet. Für alle Werte von  $v_2/v_1$  zeigen die Verfahren GAP-M1 und GAP-M2 die besten Konvergenzraten. Auch das Schurkomplement-Verfahren liefert für den gesamten Wertebereich sehr gute Raten.

Für die symmetrische Periodizitätszelle aus Abbildung 6.3 ergeben sich beispielhaft durch das iterative Upscaling mit dem numerischen Coarse Graining die in Abb. 6.4 dargestellten hochskalierte Permeabilitätswerte  $K_{11}^{\text{num}}$ . Für die Werte  $v_1 = 1$  und  $v_2 = 0.1$  lautet der numerisch hochskalierte Permeabilitätswert durch das iterative Upscaling für Dirichlet-Nullrandbedingungen bzw. NZF-Randbedingungen:  $K^{\text{num}} = \begin{pmatrix} 0.763 & 0 \\ 0 & 0.778 \end{pmatrix}$  bzw.  $K^{\text{num}} = \begin{pmatrix} 0.678 & 0 \\ 0 & 0.689 \end{pmatrix}$ .



(a) 256 Elemente und 64 Elemente des Gitters für das Zellproblem



(b) 16 Elemente und 4 Elemente des Gitters für das Zellproblem

Abbildung 6.4: Iteratives numerisches Coarse Graining für die Periodizitätszelle aus Abb. 6.3 mit  $v_1 = 1$  und  $v_2 = 0.1$ .

Berechnet man das homogenisierte Problem für die Periodizitätszelle mit periodischen Randbedingungen für das Zellproblem ergibt sich der homogenisierte Koeffizient für  $v_1 = 1$ ,  $v_2 = 0.1$  zu [Neu95]:  $\begin{pmatrix} 0.762 & 0 \\ 0 & 0.736 \end{pmatrix}$ .

Der MG-effektive Koeffizient aus dem CN-M1-Verfahren nähert dieses Ergebnis aus der Homogenisierungstheorie am besten, vgl. Tabelle 6.23.  $K^{\text{MG}}$  aus dem Verfahren mit dem einfachen Upscalingsverfahren nach Migdal-Kadanoff approximiert das Ergebnis ebenfalls gut. Die anderen Verfahren liefern schlechtere MG-effektive Koeffizienten. Eine damit zusammenhängende Aussage für die Konvergenzraten der Verfahren erkennt man für diesen kleinen Wert von  $v_2$  nicht.

*Bemerkung 6.13.* In der Arbeit [Neu95] von Neuß wird das Modellproblem aus (6.7) für ein Gebiet mit  $7 \times 7$  Beispielszellen auf einem unstrukturierten Gitter berechnet. Darin wird das im Abschnitt 5.6, Bemerkung 5.17, erwähnte Mehrgitterverfahren in Form eines Zweigitter-Verfahrens mit einem Vor- und Nachglättungsschritt mit einem symmetrischen Gauß-Seidel-Verfahren verwendet. Zum Vergleich sind die asymptotischen Konvergenzraten<sup>1</sup> für dieses Verfahren wie folgt angegeben:

$v_2$	$10^3$	$10^2$	$10^1$	1	$10^{-1}$	$10^{-2}$	$10^{-3}$	$10^{-4}$
Konvergenzrate	div	div	0.403	0.181	0.185	0.190	0.190	0.190

Tabelle 6.24: Asymptotische Konvergenzraten aus [Neu95] für ein Zweigitter-Verfahren für periodische Medien analog zum Coarsening-Mehrgitterverfahren für die Berechnung mit dem Medium mit den symmetrischen Einlagerungen aus Abb. 6.3,  $v_1 = 1$ .

<sup>1</sup>Für die asymptotische Konvergenzrate wird eine Vektoriteration mit einem festen Abbruch nach 80 Schritten betrachtet.



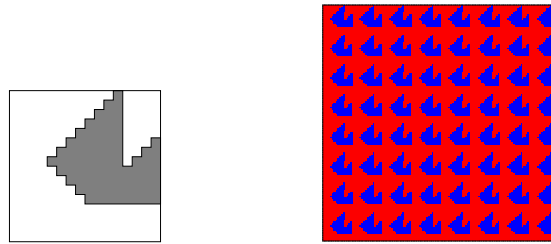


Abbildung 6.5: Medium mit periodischen unsymmetrischen Einlagerungen

$v_2/v_1$	MGA-M1	GAP-ST	GAP-M1	GAP-M2	CN-M1	CN-CP	MGM-M1	MG-SC	MG-RS
$10^{-4}$	0.660	0.700	0.097	0.112	0.532	0.570	0.163	0.225	0.205
$10^{-3}$	0.651	0.692	0.096	0.111	0.522	0.561	0.160	0.190	0.210
$10^{-2}$	0.574	0.618	0.089	0.099	0.434	0.475	0.133	0.169	0.221
$10^{-1}$	0.230	0.258	0.065	0.070	0.143	0.067	0.069	0.089	0.215
$10^1$	0.449	0.476	0.111	0.139	0.291	0.103	0.156	0.282	0.262
$10^2$	0.880	0.890	0.356	0.393	0.812	0.800	0.543	0.834	0.206
$10^3$	0.955	0.958	0.314	0.372	0.943	0.947	div	0.943	0.285
$10^4$	0.966	0.967	0.392	0.345	0.965	0.966	div	0.963	0.302

Tabelle 6.25: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für ein Medium mit periodischen unsymmetrischen Einlagerungen, wie in Abb. 6.5 gezeigt.

Im Fall steifer Einlagerungen,  $v_2 > 10$ , erhält man mit einem Vor- und Nachglättungsschritt keine Konvergenz mehr. In [Neu95] wird gezeigt, daß man hier nur mit unzumutbar großer Anzahl von Glättungsschritten ein konvergentes Verfahren erhält.

Die Varianten des Coarsening-Mehrgitterverfahrens, die dem verwendeten Verfahren von Neuß entsprechen (vgl. Bemerkung 5.17), konvergieren zwar für den Fall steifer Einlagerungen, aber die Konvergenzraten sind äußerst schlecht. Die Verfahren GAP-M1 und GAP-M2 eignen sich hier besser.

*Bemerkung 6.14.* Eine befriedigende Lösung, die in [Neu95] diskutiert wird, um ein besseres Konvergenzverhalten zu erhalten, besteht in der Verwendung eines Block-Gauß-Seidel-Glätters anstelle des einfachen Gauß-Seidel-Verfahrens. Darauf gehen wir nicht ein.

### Unsymmetrische Einlagerungen

Die Konvergenzraten für das periodische Medium mit den unsymmetrischen Einlagerungen aus Abb. 6.5 sind in Tabelle 6.25 enthalten. Für dieses Medium erweisen sich nur das Ruge-Stüben-Verfahren und die Mehrgitterverfahren mit Prolongation nach Alcouffe oder de Zeeuw, GAP-M1 und GAP-M2, als robuste Lösungsverfahren bezüglich der Variation von  $v_2/v_1$ . Insbesondere für  $v_2/v_1 \geq 10^2$  liefern die übrigen Verfahren kein akzeptables Konvergenzverhalten.

### 6.5.3 Schachbrett-Medien

Eine Schachbrett-Struktur ist ein mögliches Modell für eine granulatartige Mischung bestehend z.B. aus Kieselsteinen oder Sandkörnern und dem Zwischenraum. Wir betrachten ein Medium mit einer einfachen und einer verschobenen Schachbrett-Struktur wie in Abbildung 6.6. Die Blockbreite des einfachen bzw. verschobenen Schachbrett-Mediums lautet  $1/16$  bzw.  $1/4$  und damit  $8h_0$  bzw.  $32h_0$ .  $K(x)$  sei wieder  $v_2I$  im dunkel schattierten Bereich und  $v_1I$  im hellen Bereich.

Die Konvergenzraten der verwendeten Mehrgitterverfahren für das einfache und verschobene Schachbrett-Medium, in Tabelle 6.26 und 6.28, fallen im Vergleich zu den bisherigen Raten für periodische Medien deutlich schlechter aus. Bis auf das Ruge-Stüben-Verfahren liefern die Verfahren nur für

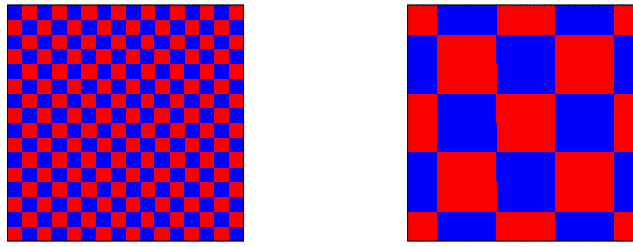


Abbildung 6.6: Einfaches und verschobenes Schachbrett-Medium

$v_2/v_1$	MGA-M1	MGG-M1	GAP-ST	GAP-M1	GAP-M2	CN-M1	CN-CP	MG-SC	MG-RS
$10^{-4}$	0.534	div	0.534	0.512	0.515	0.450	0.424	0.545	0.206
$10^{-3}$	0.532	div	0.531	0.507	0.513	0.448	0.421	0.543	0.213
$10^{-2}$	0.503	div	0.502	0.480	0.483	0.418	0.392	0.516	0.221
$10^{-1}$	0.303	0.213	0.303	0.284	0.289	0.229	0.221	0.328	0.235
$10^1$	0.346	0.255	0.347	0.326	0.333	0.273	0.262	0.362	0.227
$10^2$	0.583	div	0.583	0.561	0.566	0.499	0.478	0.591	0.211
$10^3$	0.640	div	0.640	0.620	0.624	0.562	0.540	0.647	0.233
$10^4$	0.669	div	0.669	0.650	0.654	0.595	0.574	0.676	0.233

Tabelle 6.26: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für ein einfaches Schachbrett-Medium wie in Abb. 6.6.

$v_2/v_1 = 10^{-1}$  und  $v_2/v_1 = 10$  gute Konvergenzraten. Nur das Ruge-Stüben-Verfahren ist robust für die verschiedenen Werte von  $v_2/v_1$ . Das CN-CP-Verfahren liefert die zweitbesten Konvergenzraten. Die Galerkinprodukt-Verfahren mit matrixabhängigen Transferoperatoren sind für die Schachbrett-Medien schlechter als die beiden Varianten des Coarsening-Mehrgitterverfahrens.

*Bemerkung 6.15.* Das gute Resultat für das Ruge-Stüben-Verfahren ist auf seine problemangepaßte Vergrößerung zurückzuführen. In Abb. 6.7 sind exemplarisch Gitter für drei aufeinanderfolgende Level aus dem Ruge-Stüben-Mehrgitterverfahren für das verschobene Schachbrett-Medium dargestellt. Es wird daraus deutlich, daß am Übergang zwischen den Schachbrett-Blöcken wegen der schwachen Verbindungen viel weniger als innerhalb der Blöcke vergrößert wird.

Die Raten des CN-CP-Verfahrens zeigen aber auch, daß man mit geometrischer Vergrößerung ein akzeptables Konvergenzverhalten erhalten kann.

Für ein unendlich ausgedehntes Schachbrett-Medium mit isotropem diagonalem Feld  $K(x)$  ist der

$v_2/v_1$	MGA-M1	MGG-M1	GAP-ST	GAP-M1	GAP-M2
$10^{-2}$	0.51I	0.1I	0.51I	$\begin{pmatrix} 0.33 & 0 \\ 0 & 0.51 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.37 & 0 \\ 0 & 0.62 \end{pmatrix}$
$10^{-1}$	0.55I	0.32I	0.55I	$\begin{pmatrix} 0.37 & 0 \\ 0 & 0.55 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.40 & 0 \\ 0 & 0.68 \end{pmatrix}$
$10^1$	5.5I	3.16I	5.5I	$\begin{pmatrix} 3.65 & -0.02 \\ -0.02 & 5.52 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 4.04 & 0 \\ 0 & 6.76 \end{pmatrix}$
$10^2$	50.5I	10.0I	50.5I	$\begin{pmatrix} 33.50 & -0.24 \\ -0.24 & 50.77 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 36.65 & -0.12 \\ -0.12 & 61.93 \end{pmatrix}$

$v_2/v_1$	CN-M1	CN-CP	MG-SC	MG-RS	$A^{hom}$
$10^{-2}$	$\begin{pmatrix} 0.37 & -0.05 \\ -0.05 & 0.37 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.21 & -0.08 \\ -0.08 & 0.22 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.48 & 0.11 \\ 0.11 & 0.48 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.20 & 0.01 \\ 0.01 & 0.23 \end{pmatrix}$	0.1I
$10^{-1}$	$\begin{pmatrix} 0.45 & -0.03 \\ -0.03 & 0.45 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.34 & -0.05 \\ -0.05 & 0.35 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.53 & 0.1 \\ 0.1 & 0.53 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.24 & -0.16 \\ -0.16 & 0.50 \end{pmatrix}$	0.32I
$10^1$	$\begin{pmatrix} 4.49 & 0.28 \\ 0.28 & 4.49 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 3.44 & 0.45 \\ 0.45 & 3.46 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 5.34 & -1.03 \\ -1.03 & 5.32 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 3.84 & 0.97 \\ 0.97 & 4.16 \end{pmatrix}$	3.16I
$10^2$	$\begin{pmatrix} 36.56 & 4.70 \\ 4.70 & 36.56 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 21.46 & 7.83 \\ 7.83 & 21.67 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 48.45 & -11.19 \\ -11.19 & 48.14 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 20.09 & -0.84 \\ -0.84 & 46.1 \end{pmatrix}$	10I

Tabelle 6.27: MG-effektiver Koeffizient für verschiedene Mehrgitterverfahren für das einfache Schachbrett-Medium aus der Abbildung 6.6 und der effektive Wert  $A^{hom}$  aus der Homogenisierungstheorie.

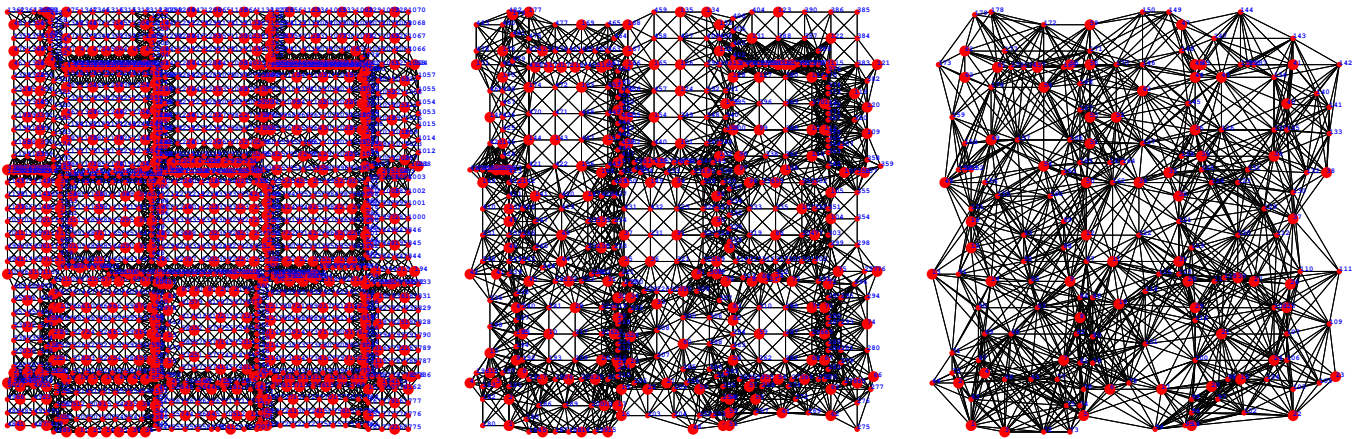


Abbildung 6.7: Gitterhierarchie aus dem Vergrößerungsalgorithmus des Ruge-Stüben-Mehrgitterverfahrens mit den F-Unbekannten ( $\bullet$ ) und C-Unbekannten ( $\bullet$ ) für das verschobene Schachbrett-Medium aus Abbildung 6.6.

effektive Permeabilitätskoeffizient isotrop [Koz80, JKO94]:

$$A^{hom} = \sqrt{v_1 v_2} I.$$

Die MG-effektiven Koeffizienten sind in 6.27 tabelliert. Nur das Mehrgitterverfahren mit dem einfachen Upscalingsverfahren durch das geometrische Mittel liefert den exakten homogenisierten Koeffizienten  $A^{hom}$ . Aus den Coarsening-Mehrgitterverfahren erhalten wir keinen isotropen Tensor für  $K^{MG}$ , weil wir keine periodischen Randbedingungen für die Zellprobleme vorgeben. Da wir ein endliches Gebiet im Modellproblem mit Randbedingungen nach (6.8) betrachten, ist  $A^{hom}$  als MG-effektiver Koeffizient auch nicht die optimale Wahl für die Berechnung des Grobgitteroperators. Für extrem kleine und große Werte  $v_2$  des Permeabilitätsfeldes  $K(x)$  divergiert sogar das Mehrgitterverfahren mit dem Upscaling durch geometrisches Mittel. Als effektiver Permeabilitätskoeffizient eignet sich hier der MG-effektive Koeffizient aus dem Ruge-Stüben- oder Coarsening-Mehrgitterverfahren, für die auch die Konvergenzraten am besten sind.

In der Arbeit [MDH98] wird bereits konstatiert, daß die matrixabhängige Prolongation nach Alcouffe et al. und damit das Verfahren GAP-M1 für das Modellproblem mit Schachbrett-Medium das arithmetische Mittel von  $v_1$  und  $v_2$  als falschen effektiven Permeabilitätswert liefert.

Die Ursache liegt in der Interpolationsabbildung, die zuerst die Differenzensterneinträge in  $x_1$ - oder  $x_2$ -Richtung arithmetisch mittelt, um ein eindimensionales Interpolationsproblem zu erhalten. Die Prolongation ist damit mit einem Medium konsistent, das eine konstante Permeabilität  $\frac{1}{2}(v_1 + v_2)I$  hat. Wir erhalten aus dem GAP-M1-Verfahren nur annähernd diesen Wert für  $K^{MG}$ , da die Blockbreite größer als die Gitterweite  $h_0$  ist.

*Bemerkung 6.16.* Eine Möglichkeit, die matrixabhängige Prolongation so abzuändern, daß sie dieses Problem löst, weiterhin aber einen symmetrischen 9-Punkte-Stern mit den Eigenschaften von Seite 46 beibehält, konnte noch nicht gefunden werden.

#### 6.5.4 Medium mit Querschichtung

Für ein Permeabilitätsfeld wie in Abbildung 6.8 besteht aufgrund der Schichtung der Permeabilität in der Diagonalrichtung der effektive Permeabilitätskoeffizient in einem Tensor mit Außerdiagonaleinträgen.  $K(x)$  sei  $v_2 I$  im dunkel schattierten Bereich und  $v_1 I$  im hell schattierten Bereich. Für moderate Werte von  $v_2/v_1$  zwischen  $10^{-1}$  und 10 bieten alle Mehrgitterverfahren aus Tabelle 6.29 gute Konvergenzraten. Für kleinere Werte  $v_2/v_1 \leq 10^{-1}$  zeichnen sich vor allem das GAP-M1- und Schurkomplement-Verfahren aus. Für den gesamten Wertebereich von  $v_2/v_1$  liefert

$v_2/v_1$	MGA-M1	MGG-M1	GAP-ST	GAP-M1	GAP-M2	CN-M1	CN-CP	MG-SC	MG-RS
$10^{-4}$	0.568	div	0.621	0.517	0.532	0.461	0.398	0.526	0.254
$10^{-3}$	0.562	div	0.616	0.513	0.525	0.458	0.395	0.523	0.252
$10^{-2}$	0.517	0.780	0.575	0.469	0.480	0.410	0.359	0.480	0.225
$10^{-1}$	0.251	0.155	0.309	0.221	0.229	0.177	0.163	0.230	0.212
$10^1$	0.295	0.186	0.356	0.265	0.271	0.225	0.228	0.292	0.203
$10^2$	0.598	0.827	0.649	0.551	0.559	0.505	0.443	0.575	0.228
$10^3$	0.668	div	0.712	0.624	0.635	0.582	0.521	0.646	0.234
$10^4$	0.696	div	0.737	0.655	0.666	0.616	0.558	0.677	0.221

Tabelle 6.28: Konvergenzraten für das verschobene Schachbrett-Medium aus der Abbildung 6.6.

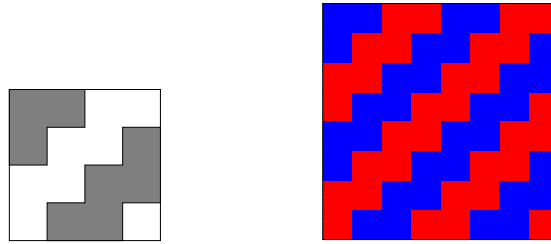


Abbildung 6.8: Medium mit periodischen Querschichten

nur das Ruge-Stüben-Verfahren gute Konvergenzraten.

Für die Wahl  $v_2/v_1 = 8$  wurde für das Medium mit den Querschichten der effektive Tensor bereits in der Literatur berechnet. Für den exakten effektiven Permeabilitätstensor erhält man nach [SV93] für  $v_2/v_1 = 8$ :

$$\begin{pmatrix} 3.09 & 0.93 \\ 0.93 & 3.09 \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} 4.02 & 0 \\ 0 & 2.16 \end{pmatrix} U^t.$$

Die Matrix der Eigenvektoren

$$U := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.15)$$

bestimmt die Hauptachsen des effektiven Tensors. Die MG-effektiven Koeffizienten aus den Mehrgitterverfahren sind in Tabelle 6.30 angegeben.

$v_2/v_1$	MGA-M1	GAP-M1	GAP-M2	CN-M1	CN-CP	MGM-M1	MG-SC	MG-RS
$10^{-4}$	0.535	0.187	0.203	0.450	0.551	0.406	0.135	0.230
$10^{-3}$	0.527	0.182	0.191	0.445	0.543	0.395	0.136	0.191
$10^{-2}$	0.457	0.159	0.144	0.367	0.472	0.327	0.146	0.202
$10^{-1}$	0.162	0.098	0.107	0.109	0.095	0.092	0.113	0.183
8	0.232	0.105	0.119	0.165	0.120	0.140	0.157	0.178
$10^1$	0.278	0.116	0.136	0.202	0.140	0.168	0.176	0.175
$10^2$	0.676	0.322	0.339	0.601	0.684	0.553	0.397	0.274
$10^3$	0.786	0.480	0.489	0.729	0.791	0.689	0.464	0.228
$10^4$	0.817	0.528	0.536	0.762	0.822	0.725	0.468	0.222

Tabelle 6.29: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für ein Medium mit periodischen Querschichtungen, wie in Abb. 6.8 dargestellt.

$v_2/v_1$	MGA-M1	GAP-ST	GAP-M1	GAP-M2	CN-M1
8	$4.5I$	$4.5I$	$\begin{pmatrix} 2.28 & -0.01 \\ -0.01 & 3.42 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 2.57 & -0.02 \\ -0.02 & 4.19 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 3.75 & 0.29 \\ 0.29 & 3.75 \end{pmatrix}$
$10^2$	$50.5I$	$50.5I$	$\begin{pmatrix} 19.84 & -0.02 \\ -0.02 & 30.55 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 21.31 & -0.04 \\ -0.04 & 37.35 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 35.55 & 6.68 \\ 6.68 & 35.55 \end{pmatrix}$

$v_2/v_1$	CN-CP	MGM-M1	MG-SC	MG-RS
8	$\begin{pmatrix} 2.78 & 0.45 \\ 0.45 & 2.80 \end{pmatrix}$	$3.7I$	$\begin{pmatrix} 2.83 & 0.28 \\ 0.28 & 2.74 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 4.06 & 0.43 \\ 0.43 & 4.93 \end{pmatrix}$
$10^2$	$\begin{pmatrix} 39.03 & 0.81 \\ 0.81 & 39.11 \end{pmatrix}$	$34.54I$	$\begin{pmatrix} 14.43 & 7.85 \\ 7.85 & 12.48 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 25.57 & 2.27 \\ 2.27 & 27.06 \end{pmatrix}$

Tabelle 6.30: MG-effektiver Koeffizient  $K^{\text{MG}}$  für verschiedene Mehrgitterverfahren für das Medium mit den Querschichten aus Abb. 6.8.

Aus  $K^{\text{MG}}$  für die Coarsening-Mehrgitterverfahren,

$$K^{\text{MG}} = \begin{pmatrix} 2.78 & 0.45 \\ 0.45 & 2.8 \end{pmatrix} \approx U \begin{pmatrix} 3.25 & 0 \\ 0 & 2.35 \end{pmatrix} U^t \quad \text{für das CN-CP,}$$

$$K^{\text{MG}} = \begin{pmatrix} 3.75 & 0.29 \\ 0.29 & 3.75 \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} 4.04 & 0 \\ 0 & 3.46 \end{pmatrix} U^t \quad \text{für das CN-M1,}$$

für den Wert  $v_2/v_1 = 8$  erhält man die exakten Hauptachsen des effektiven Tensors. Aus  $K^{\text{MG}}$  für das Schurkomplement- und Ruge-Stüben-Verfahren ergeben sie sich ebenso näherungsweise.

Den MG-effektiven Tensoren aus den Coarsening-, MG-RS- und MG-SC-Verfahren mit den Außerdiagonalkomponenten entsprechen damit in der Grobgitter-Gleichung auf dem größten Gitterlevel Querableitungen, die das Strömungsverhalten qualitativ korrekt charakterisieren. Diese Verfahren sind in der Lage, eine grobskalige anisotrope Permeabilität zu erfassen, auch wenn sie von einem feinskaligen Problem mit isotroper Permeabilität herrührt. Die Konvergenzraten des GAP-M1- und GAP-M2-Verfahrens sind hingegen insbesondere für  $v_2 = 10^2$  besser als die der Coarsening-Verfahren, obwohl die Außerdiagonalkomponenten ihrer  $K^{\text{MG}}$ -Werte fast null sind. Für das Ruge-Stüben-Verfahren treten gute Raten und MG-effektive Koeffizienten hingegen gleichzeitig auf.

Die Mehrgitterverfahren, die mit den einfachen Upscalingsverfahren arbeiten, liefern keinen anisotropen  $K^{\text{MG}}$ -Tensor, vgl. auch Bemerkung 2.13.

## 6.6 Weitere Beispielfelder

Als weitere, praxisrelevante Testfelder behandeln wir ein Medium, das eine Realisierung des logarithmisch normalverteilten Zufallsfeldes darstellt und zusätzlich entweder einen konstanten Blockbereich oder konstante Kanalbereiche enthält. Der Block liegt zentriert um den Mittelpunkt von  $\Omega$ , und die Kanäle verlaufen zentriert um den Mittelpunkt in  $x_1$ - und  $x_2$ -Richtung, vgl. Abb. 6.9. Die Varianz und die Korrelationslänge betragen  $\sigma_f^2 = 1$  und  $l_0 = 8h_0$ . Die Werte des Permeabilitätsfeldes im Block- bzw. Kanalbereich des Mediums werden in einer weiteren Simulation so gewählt, daß zum Wert der ursprünglichen Realisierung eine Konstante hinzuaddiert wird. Weiterhin betrachten wir noch ein Schachbrett-Medium, bei dem die Werte in den konstanten Bereichen zufällig gleichverteilt gewählt werden.

### Medium mit Block und Kanälen

Für die Permeabilitätsfelder mit dem Block- und Kanalbereich sei die Blocklänge stets  $3/8$  bzw.  $48h_0$  und die Kanalbreite  $3/16$  bzw.  $24h_0$ . Für die beiden Simulationen mit dem Medium mit den Kanälen aus Tabelle 6.33 und 6.34 setzen wir für das Coarsening-Mehrgitterverfahren CN-CP den Parameter  $\theta$  auf:

$$\theta = \begin{cases} 1 & \text{für } v_2 \geq 10 \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Für das Medium mit dem Blockbereich ist  $\theta = 0$ .

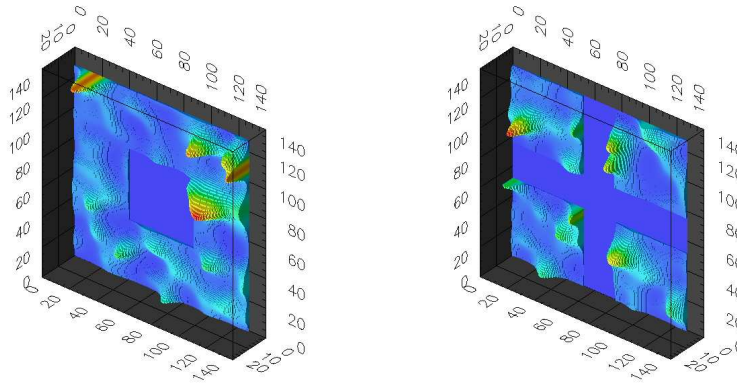


Abbildung 6.9: Eine isotrope Realisierung des lognormalverteilten Zufallsmediums mit konstantem Blockbereich im Innern bzw. zwei Kanäle in die Koordinatenrichtungen. Die Varianz beträgt  $\sigma_f^2 = 1$  und die Korrelationslänge  $l_0 = 8h_0$ ,  $v_2 = 10^{-3}$ .

$v_2$	MGG-ST	GAP-ST	GAP-M1	CN-M1	CN-CP	MGM-M1	MG-SC	MG-RS
$10^{-4}$	0.720	0.351	0.068	0.129	0.094	0.208	0.118	0.162
$10^{-3}$	0.178	0.351	0.068	0.129	0.072	0.208	0.118	0.155
$10^{-2}$	0.169	0.351	0.068	0.128	0.072	0.208	0.118	0.156
$10^{-1}$	0.175	0.349	0.067	0.121	0.074	0.208	0.118	0.165
1	0.170	0.345	0.064	0.116	0.074	0.207	0.117	0.151
$10^1$	0.183	0.356	0.063	0.166	0.138	0.207	0.116	0.192
$10^2$	0.316	0.804	0.066	0.360	0.283	0.645	0.164	0.167
$10^3$	div	0.917	0.067	0.836	0.867	div	0.180	0.154
$10^4$	div	0.931	0.068	0.921	0.928	div	0.210	0.152

Tabelle 6.31: Konvergenzraten verschiedener Mehrgitterverfahren für das Medium mit einem konstantem Blockbereich vom Wert  $v_2I$ , wie in Abb. 6.9 dargestellt.

$v_2$	MGG-ST	GAP-ST	GAP-M1	CN-M1	CN-CP	MGM-M1	MG-SC	MG-RS
$10^{-4}$	0.175	0.346	0.063	0.120	0.074	0.207	0.118	0.141
$10^{-3}$	0.175	0.346	0.063	0.120	0.074	0.207	0.118	0.141
$10^{-2}$	0.175	0.346	0.063	0.120	0.074	0.207	0.118	0.141
$10^{-1}$	0.174	0.346	0.063	0.119	0.074	0.207	0.118	0.137
1	0.170	0.344	0.063	0.117	0.074	0.207	0.117	0.176
$10^1$	0.185	0.365	0.063	0.176	0.106	0.207	0.117	0.208
$10^2$	0.321	0.805	0.066	0.366	0.292	0.650	0.164	0.150
$10^3$	div	0.917	0.067	0.836	0.867	div	0.180	0.167
$10^4$	div	0.931	0.068	0.921	0.928	div	0.210	0.166

Tabelle 6.32: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für ein Medium mit einem Blockbereich im Inneren, wie in Abb. 6.9, in dem auf den Permeabilitätstensor der ursprünglichen, lognormalverteilten Feldrealisierung der konstante Wert  $v_2I$  addiert ist.

Die Tabellen 6.31–6.34 enthalten die Konvergenzraten für die Berechnung der Strömungsgleichung (6.7) mit den Randbedingungen (6.8). Für das Medium mit konstantem Blockbereich aus Abb. 6.9 arbeitet das Mehrgitterverfahren GAP-M1 mit Galerkinprodukt und Prolongation nach Alcouffe deutlich am besten. Dies gilt auch für den Fall, daß in dem Blockbereich der konstante Wert zur Permeabilität  $K(x)$  der Realisierung hinzuaddiert wird. Nur das Coarsening-Mehrgitterverfahren CN-CP liefert für  $v_2/v_1 \leq 1$  annähernd gleich gute Konvergenzraten.

$v_2$	MGG-ST	GAP-ST	GAP-M1	CN-M1	CN-CP	MGM-M1	MG-SC	MG-RS
$10^{-4}$	div	0.640	0.083	0.349	0.342	div	0.116	0.162
$10^{-3}$	div	0.639	0.083	0.348	0.304	div	0.166	0.163
$10^{-2}$	0.704	0.624	0.077	0.333	0.288	div	0.208	0.204
$10^{-1}$	0.296	0.516	0.072	0.230	0.083	0.837	0.167	0.183
1	0.108	0.213	0.065	0.129	0.065	0.229	0.090	0.198
$10^1$	0.357	0.273	0.088	0.165	0.122	0.325	0.098	0.167
$10^2$	div	0.360	0.157	0.233	0.359	div	0.093	0.160
$10^3$	div	0.405	0.198	0.264	0.460	div	0.107	0.191
$10^4$	div	0.440	0.229	0.295	0.286	div	0.129	0.164

Tabelle 6.33: Konvergenzraten für das Medium mit zwei Kanälen in die Koordinatenrichtungen, wie in Abb. 6.9 dargestellt. Der Permeabilitätswert im Bereich der Kanäle ist konstant auf  $K(x) \equiv v_2 I$  gesetzt.

$v_2$	MGG-ST	GAP-ST	GAP-M1	CN-M1	CN-CP	MGM-M1	MG-SC	MG-RS
$10^{-4}$	0.111	0.289	0.068	0.153	0.069	0.202	0.161	0.138
$10^{-3}$	0.111	0.289	0.068	0.153	0.069	0.202	0.161	0.155
$10^{-2}$	0.111	0.289	0.068	0.153	0.070	0.200	0.160	0.153
$10^{-1}$	0.109	0.283	0.068	0.146	0.070	0.181	0.157	0.157
1	0.108	0.253	0.069	0.139	0.074	0.094	0.134	0.184
$10^1$	0.397	0.289	0.095	0.170	0.123	0.457	0.112	0.191
$10^2$	div	0.361	0.158	0.233	0.360	div	0.095	0.208
$10^3$	div	0.405	0.198	0.264	0.463	div	0.108	0.179
$10^4$	div	0.440	0.229	0.295	0.285	div	0.129	0.151

Tabelle 6.34: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für ein Medium mit zwei Kanälen, in deren Bereich  $v_2 I$  auf das ursprüngliche Permeabilitätsfeld addiert ist.

Für das Medium mit den Kanälen gilt diese Aussage in ähnlicher Form auch. Aus den Konvergenzraten in Tabelle 6.33 und 6.34 entnimmt man, daß für zunehmendes  $v_2 \geq 10$  das GAP-M1-Verfahren schlechter wird und das Schurkomplement- und Ruge-Stüben-Verfahren am effizientesten arbeiten. Das CN-CP-Verfahren liefert für das Feld, für das der konstante Wert  $v_2 I$  auf die Permeabilität der gewählten Realisierung addiert wird, für  $v_2 \leq 10$  dem GAP-M1-Verfahren vergleichbare, gute Konvergenzraten.

### Zufälliges Schachbrett-Muster

Für das zufällige Schachbrett-Medium aus Abbildung 6.10 als Permeabilitätsfeld  $K(x)$  wurden die Schachbrett-Blöcke zufällig gleichverteilt mit den Werten  $v_1 I$  und  $v_2 I$  gesetzt. Die Werte sind  $v_1$  im hellen Bereich und  $v_2$  im dunkel schattierten Bereich. Die kleinste Blocklänge entspricht  $4h_0$ . Die untersuchten Verfahren liefern außer dem Ruge-Stüben-Verfahren nur für die Werte  $10^{-1}$  und 10 für  $v_2/v_1$  akzeptable Konvergenzraten. Das Ruge-Stüben-Verfahren zeigt Robustheit für alle Werte  $v_2/v_1$  zwischen  $10^{-4}$  und  $10^4$  der Schachbrett-Blöcke, was wir auf die problemangepaßte Gittervergrößerung zurückführen können. Die Tabelle 6.35 gibt die ermittelten Konvergenzraten an.

## 6.7 Zusammenfassung der Resultate

Faßt man die Ergebnisse der verschiedenen Verfahren aus den Abschnitten 6.4–6.6 für das Modellproblem mit skalaren Permeabilitätsfeldern zusammen, ergibt sich, daß für Felder mit kleinen Koeffizientensprüngen bzw.  $\sigma_f^2 \leq 1$  die Unterschiede in den Konvergenzraten der Mehrgitterverfahren sehr gering sind. Für größere Koeffizientensprünge oder Varianzen zeigen sich allerdings



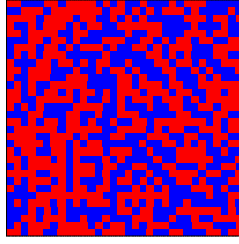


Abbildung 6.10: Zufälliges Schachbrett-Medium

$v_2/v_1$	GAP-ST	GAP-M1	CN-CP	MGM-ST	MG-SC	MG-RS
$10^{-4}$	0.875	0.759	0.870	div	0.527	0.244
$10^{-3}$	0.872	0.698	0.866	div	0.540	0.247
$10^{-2}$	0.795	0.395	0.766	0.747	0.416	0.265
$10^{-1}$	0.343	0.179	0.143	0.232	0.205	0.249
$10^1$	0.418	0.234	0.211	0.252	0.265	0.252
$10^2$	0.851	0.585	0.808	div	0.683	0.310
$10^3$	0.935	0.904	0.931	div	0.907	0.297
$10^4$	0.957	0.953	0.952	div	0.941	0.356

Tabelle 6.35: Konvergenzraten für verschiedene Mehrgitterverfahren für ein Medium mit der zufälligen Schachbrett-Struktur aus der Abbildung 6.10.

beträchtliche Unterschiede im Konvergenzverhalten der Verfahren.

Die Mehrgitterverfahren, die einfache Upscalingsmethoden für den Grobgitteroperator heranziehen, und das geometrische Mehrgitterverfahren mit Galerkinprodukt und Standard-Prolongation eignen sich nur zur Berechnung bei schwach heterogenen Medien. Die einzige Ausnahme hiervon bildet das MGM-M1-Verfahren, das für die periodischen Medien mit den symmetrischen Einlagerungen auch für große Koeffizientensprünge akzeptabel läuft.

Für alle Felder mit großen Sprüngen in der Permeabilität oder mit  $\sigma_f^2 \geq 3$  ist das Ruge-Stüben-Verfahren ausgezeichnet. Auch für die Galerkinprodukt-Verfahren mit matrixabhängigen Transferoperatoren nach Alcouffe et al. oder de Zeeuw sind die Konvergenzraten mit Ausnahme für die Schachbrett-Medien bei starken Heterogenitäten und das um 90 Grad gedrehte Laminat hervorragend. Dies gilt auch für die Medien mit steifen Einlagerungen im untersuchten Bereich  $v_2/v_1 \leq 10^4$ . Für schwach heterogene Medien sind die Raten des MG-RS systematisch schlechter als bei diesen Verfahren, aber stets akzeptabel. Die Coarsening-Mehrgitterverfahren und das Schurkomplement-Mehrgitterverfahren liefern etwas schlechtere Konvergenzraten als obige Verfahren. Für steife Einlagerungen mit großen Koeffizientensprüngen in  $K(x)$  sind die Konvergenzraten der Coarsening-Mehrgitterverfahren vor allem nicht mehr akzeptabel. Dies gilt auch für die Berechnungen mit dem gedrehten Laminat und dem Querschicht-Medium. Für das einfache und verschobene Schachbrett-Medium arbeiten die Coarsening-Verfahren allerdings besser als die Galerkinprodukt-Verfahren mit matrixabhängiger Prolongation. Insgesamt erhalten wir, daß nur das Ruge-Stüben-Verfahren zumindest für alle von uns getesteten Medien robust bezüglich großer Heterogenitäten ist.

Betrachten wir den MG-effektiven Koeffizienten für die Mehrgitterverfahren in den Fällen, in denen ein Literaturwert bekannt ist, so stimmt  $K^{\text{MG}}$  nur für das CN-CP-Verfahren in allen Fällen mit diesem Wert näherungsweise überein. Dies zeigt über die Resultate aus Kapitel 4 und 5 hinaus, daß sich das Coarse Graining als Upscalingsmethode sehr eignet. Abgesehen von den Verfahren mit einfachen Upscalingsmethoden, die nur isotrope  $K^{\text{MG}}$ -Tensoren liefern, erhält man auch für das GAP-M1-, GAP-M2- und MG-RS-Verfahren für die isotrope Einzelrealisierung, das Laminat und die Medien mit Einlagerungen eine akzeptable Übereinstimmung – für das MG-RS-Verfahren zusätzlich beim Querschicht-Medium. Mit Ausnahme des Laminats ist in diesen Fällen für ein oder mehrere dieser Mehrgitterverfahren auch das Konvergenzverhalten besser als der übrigen Verfahren. Es liegt gleichzeitig eine gute Konvergenzrate und Modellgüte auf dem größten Gitter vor.



In diesen Fällen eignet sich eingeschränkt die Konvergenzrate des Mehrgitterverfahrens mit den entsprechend berechneten Grobgitteroperatoren als Indikator für die grobskalige Modellgüte. Die Umkehrung gilt aber nicht. In Einzelfällen differieren die Konvergenzraten des CN-CP-, GAP-M1- und MG-RS-Verfahren dennoch sehr, wie das Beispiel des periodisch geschichteten Mediums erkennen läßt. Dies zeigt, daß das Kriterium nur sehr eingeschränkt gilt und daß auch die geeignete Wahl der Transferoperatoren als weitere Mehrgitter-Komponente entscheidend ist.

*Bemerkung 6.17.* Stellt sich in der Praxis die Frage nach der Wahl eines einsetzbaren Mehrgitterverfahrens, muß über das Konvergenzverhalten hinaus zusätzlich der Aufwand berücksichtigt werden. Beachtet man bei der Entscheidung für die Wahl des Mehrgitterverfahrens diesen, würde man sich gegen das Rüge-Stüben- und Coarsening-Verfahren entscheiden, da die Ermittlung der Grobgitter bzw. der Grobgitteroperatoren im Vergleich zu den Galerkinprodukt-Verfahren mit matrixabhängigen Transferoperatoren aufwendiger ist.



## Kapitel 7

# Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit beschäftigen wir uns mit Upscalingsverfahren und Mehrgitterverfahren für ein Mehrskalensproblem. Wir betrachten ein Modell für die Strömung in einem heterogenen porösen Medium, wie es in einem Grundwasserleiter vorliegt. Durch die Heterogenitäten der Permeabilität des Bodens auf den verschiedenen Längenskalen entsteht das Mehrskalensproblem, für dessen genaue Beschreibung die Vorgänge auf allen Skalen berücksichtigt werden müssen. Ist man nur am Verhalten auf der Makroskala interessiert, muß der Einfluß kleinskaliger Vorgänge durch ein geeignetes Upscaling auf dieser berücksichtigt werden.

Wir entwickeln mit der Coarse Graining Methode ein neues Verfahren zum Upscaling der Strömungsgleichung, indem das zugrundeliegende, feinskalige Permeabilitätsfeld hochskaliert wird.

Durch das Hochskalieren enthält das Feld nur noch Heterogenitäten, die auf Skalen größer als eine vorgegebene Längenskala variieren. Die neue Methode liefert im Rahmen einer stochastischen Modellierung einen skalenabhängigen effektiven Permeabilitätstensor. Sie beruht auf der Annahme, daß das feinskalige Permeabilitätsfeld eine Realisierung eines logarithmisch normalverteilten Zufallsfeldes ist. Die gewonnene effektive Permeabilität wird störungstheoretisch und mithilfe einer Renormierungsgruppen-Analyse berechnet. Im Grenzfall eines Upscalings zu sehr großen Längenskalen erhält man im zweidimensionalen, isotropen Fall den geometrischen Mittelwert, der als exakter Wert bekannt ist.

Wir erweitern die theoretische Herleitung des hochskalierten Permeabilitätsfeldes zu einem numerischen Upscalingsverfahren der Permeabilität, in der ähnlich wie in der Methode der Homogenisierung lokal hochskalierte Permeabilitätskoeffizienten durch die Lösung eines Zellproblems berechnet werden. Für periodische Medien ist der numerisch hochskalierte Tensor identisch mit dem homogenisierten Koeffizienten aus der Homogenisierungstheorie. Die numerischen Berechnungen erlauben die Überprüfung der theoretischen Resultate aus der Coarse Graining Methode, die abgesehen von der Abweichung der hochskalierten Permeabilität von Realisierung zu Realisierung in guter Übereinstimmung sind. In Vergleichen mit einfachen Upscalingsmethoden wie arithmetischer oder geometrischer Mittelung erweist sich das numerische Coarse Graining am besten. Weiter untersuchen wir die theoretisch abgeleiteten Größen mit dem numerischen Coarse Graining für große Varianzen des Feldes, für die die störungstheoretische Berechnung nicht mehr sinnvoll ist.

Auf der Basis des numerischen Upscalingsverfahrens entwickeln wir ein algebraisches Mehrgitterverfahren, bei dem der Grobgitteroperator mithilfe der hochskalierten Permeabilitätsfeldern durch das iterative Coarse Graining berechnet wird. Durch diese Vorgehensweise wird der Grobgitteroperator, der die langwelligen Fehlerkomponenten in einem Mehrgitterzyklus reduziert, an das Problem angepaßt. Weiter entwickeln wir für das Verfahren Transferoperatoren, die ebenfalls die Lösungen der Zellprobleme benutzen und das Konvergenzverhalten deutlich verbessern.

Zum Lösen der Strömungsgleichung im Rahmen des Modellproblems, das mit der Finite-Element-Methode diskretisiert wird, vergleichen wir bis zu fünfzehn Mehrgitterverfahren, die sich in ihren verwendeten Komponenten unterscheiden. Neben dem Coarsening-Verfahren betrachten wir das Ruge-Stüben-Verfahren und das Schurkomplement-Verfahren als algebraische Mehrgitterverfahren. Außerdem setzen wir Verfahren ein, die zur Berechnung des Grobgitteroperators einfache Upsca-

lingsverfahren heranziehen und Verfahren, die mit dem Galerkinprodukt und matrixabhängigen Transferabbildungen arbeiten. Als Kriterium für die Effizienz der Verfahren betrachten wir ausschließlich die numerisch ermittelten Konvergenzraten. Damit untersuchen wir für zufällig generierte Medien und periodische Medien anhand des Modellproblems ausführlich, wie effizient die Mehrgitterverfahren, die die verschiedenen Upscalingsverfahren und Transferoperatoren verwenden, im Vergleich zu den algebraischen Verfahren sind.

Die Verfahren, die einfache Upscalingsverfahren zur Berechnung des Grobgitteroperators benutzen, eignen sich nur sehr eingeschränkt zur Verwendung für heterogene Medien. Nur wenn die Koeffizienten schwach variieren, erhält man für diese Verfahren ein gutes Konvergenzverhalten. Effizienter als diese Verfahren arbeiten die algebraischen Verfahren und die Verfahren mit Galerkinprodukt und matrixabhängiger Prolongation.

Zur Berechnung der Strömung für stark heterogene Felder, Realisierungen des Zufallsfeldes wie auch periodische Medien, arbeiten das Ruge-Stüben-Verfahren und die Galerkinprodukt-Verfahren mit matrixabhängiger Prolongation in fast allen Fällen am besten. Für die Galerkinprodukt-Verfahren mit matrixabhängigen Transferoperatoren sind die Konvergenzraten, mit Ausnahme für das Laminat und die Schachbrett-Medien bei starken Heterogenitäten, auch für die Medien mit steifen Einlagerungen sehr gut. Das Vorgehen beim Coarsening-Verfahren, den Grobgitteroperator durch das numerische Coarse Graining zu bestimmen, erweist sich für das Lösen des Modellproblems mit Realisierungen des Zufallsfeldes als Permeabilitätsfeld als erfolgreich. Im Vergleich zum Ruge-Stüben-Verfahren und den Mehrgittervarianten mit matrixabhängigen Transferoperatoren und Galerkinprodukt liefert das Coarsening-Mehrgitterverfahren mit Ausnahme des Schachbrett-Mediums aber für periodische Felder mit steifen Einlagerungen schlechtere Konvergenzraten. Die numerischen Konvergenzraten zeigen zusammenfassend, daß das Ruge-Stüben-Mehrgitterverfahren für alle Medien mit großer Heterogenität sehr effizient arbeitet. Nur dieses erweist sich als robust bei großer Variation der Heterogenitätsstärke der Felder.

Einen Zusammenhang zwischen dem Konvergenzverhalten und der im Mehrgitterverfahren entstehenden Modellgüte, die durch einen MG-effektiven Koeffizienten untersucht wird, ist nur eingeschränkt erkennbar.

Die in der Arbeit vorgestellte Coarse Graining Methode ist auch für die Behandlung des Transports einer Konzentration in einer Strömung, modelliert mit der Konvektions-Diffusions-Gleichung, einsetzbar. In diesem Fall erhält man einen skalenabhängigen effektiven Dispersionskoeffizienten. Damit ist eine Weiterentwicklung des Coarsening-Mehrgitterverfahrens auf diesen Fall möglich. Möglichkeiten, das Konvergenzverhalten des Coarsening-Mehrgitterverfahrens für periodische Medien zu verbessern, sind der Einsatz von geeigneten Block-Glättungsverfahren und eines verbesserten Upscalings. Dieses kann im Kombinieren des numerischen Coarse Grainings mit einem direkten Upscaling mithilfe der lokalen Steifigkeitsmatrix bestehen, um den Grobgitteroperator zu bestimmen. Ähnlich wird in den neuen elementbasierten AMGe-Verfahren vorgegangen [BCF<sup>+</sup>00, JV01]. Im Hinblick auf die Verwendung realer Daten für das Permeabilitätsfeld kann das Coarse Graining auch auf unstrukturierte Gitter erweitert werden. Hierfür ist die Entwicklung eines Indikators für eine problemangepaßte Vergrößerung beim Hochskalieren nötig. Dies kann mit der Entwicklung eines problemangepaßten Vergrößerungsalgorithmus für das Coarsening-Verfahren, analog wie im Ruge-Stüben-Verfahren, verbunden werden. Da die Möglichkeiten des Upscalings zum einen und die Wahl von geeigneten Mehrgitterverfahren zum anderen für die Behandlung von Transportvorgängen im Vergleich zur Anwendung auf Strömungsvorgänge eingeschränkt sind, öffnet sich hier ein weites Anwendungsfeld für das numerische Coarse Graining und das Coarsening-Mehrgitterverfahren.





# Anhang A

## A.1 Greensche Funktion für ein homogenes Medium

Die Greensche Funktion der Strömungsgleichung mit konstanter Permeabilität  $K$ , die ein symmetrischer, positiv definiten Tensor ist, lautet in drei Dimensionen [LLJ01]:

$$g(x, x') = -\frac{c}{\sqrt{(x-x')^t L L^t (x-x')}} \quad (\text{A.1})$$

mit  $c := \frac{1}{4\pi\sqrt{\det\tilde{K}}}$ , wobei  $\tilde{K} := P^t K P := \text{diag}(k_1, k_2, k_3)$  mit den Eigenwerten  $k_1, k_2, k_3$  von  $K$  und  $L := P \text{diag}\left(\frac{1}{\sqrt{k_1}}, \frac{1}{\sqrt{k_2}}, \frac{1}{\sqrt{k_3}}\right)$ .

## A.2 Modifizierter Mehrgitter-Algorithmus

Alternativ zum Mehrgitter-Algorithmus aus Abschnitt 3.3 kann man auch eine leicht veränderte Variante benutzen, die innerhalb der Grobgitterkorrektur stets eine neue Näherung und damit auch einen neuen Defekt berechnet:

### Algorithmus A.1.

Mehrgitterzyklus  $MGC(k, u_k, f_k) :=$

Wenn  $k = J$

Gib  $u_J := A_J^{-1} f_J$  zurück.

Sonst

Vorglättung:  $u_k := S_k^{\nu_1}(u_k, f_k)$ .

Grobgitterkorrektur: Schleife  $1, \dots, \gamma$ :

Defektberechnung:  $d_k := A_k u_k - f_k$ .

$e_{k+1} := 0$ .

$e_{k+1} := MGC(k+1, e_{k+1}, r_k^{k+1} d_k)$ .

$u_k := u_k - p_{k+1}^k e_{k+1}$ .

Nachglättung:  $u_k := S_k^{\nu_2}(u_k, f_k)$ .

Gib  $u_k$  zurück.

Für  $\gamma = 1$  unterscheidet sich der Algorithmus nicht von dem in Abschnitt 3.3.

## A.3 Explizite Berechnungen zur Coarse Graining Methode

Wenn es möglich ist, benutzen wir zur Auswertung der Integrale Integrationstafeln wie [Gra94] und das Computer-Algebrasystem MAPLE [AB94].

### A.3.1 Berechnungen für den anisotropen Fall

Für den ersten Term in  $\delta K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda)$  aus Gl. (4.62) im anisotrop korrelierten Fall findet man für  $i = j = 1$ :

$$\begin{aligned}
& C \int_0^\infty d\Lambda \int_{-\infty}^\infty dq_1 \int_{-\infty}^\infty dq_2 q_1^2 \exp\left(-q_1^2(l_1^2/2 + \Lambda) - q_2^2(l_2^2/2 + \Lambda)\right) \\
&= C \int_0^\infty d\Lambda \int_{-\infty}^\infty dq_1 \left(-\frac{d}{d\Lambda} \exp\left(-q_1^2(l_1^2/2 + \Lambda)\right)\right) \sqrt{\frac{\pi}{l_2^2/2 + \Lambda}} \\
&= -C \int_0^\infty d\Lambda \left(\frac{d}{d\Lambda} \sqrt{\frac{\pi}{l_1^2/2 + \Lambda}}\right) \sqrt{\frac{\pi}{l_2^2/2 + \Lambda}} \\
&= C \int_0^\infty d\Lambda \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{l_1^2/2 + \Lambda}^3} \sqrt{\frac{\pi}{l_2^2/2 + \Lambda}} = C \frac{4\pi}{2} \frac{l_1 - l_2}{l_1(l_1^2 - l_2^2)} \\
&= C \frac{2\pi}{l_1(l_1 + l_2)},
\end{aligned} \tag{A.2}$$

mit  $C := -K_g \sigma_f^2 l_1 l_2 / (2\pi)$ . Für den zweiten Term in (4.62) ergibt sich mit  $a_s = 1$ :

$$\begin{aligned}
& C \int_0^\infty d\Lambda \int_{-1/\lambda}^{1/\lambda} dq_1 \int_{-1/\lambda}^{1/\lambda} dq_2 q_1^2 \exp\left(-q_1^2(l_1^2/2 + \Lambda) - q_2^2(l_2^2/2 + \Lambda)\right) \\
&= -C \int_0^\infty d\Lambda \int_{-1/\lambda}^{1/\lambda} dq_1 \left(\frac{d}{d\Lambda} \exp\left(-q_1^2(l_1^2/2 + \Lambda)\right)\right) 2 \frac{\sqrt{2\pi}}{2\sqrt{l_2^2 + 2\Lambda}} \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{l_2^2 + 2\Lambda}}{\sqrt{2\lambda}}\right) \\
&= -C \int_0^\infty d\Lambda \left(\frac{d}{d\Lambda} \frac{2\sqrt{2\pi}}{2\sqrt{l_1^2 + 2\Lambda}} \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{l_1^2 + 2\Lambda}}{\sqrt{2\lambda}}\right)\right) \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{l_2^2 + 2\Lambda}} \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{l_2^2 + 2\Lambda}}{\sqrt{2\lambda}}\right) \\
&= -C 2\pi \int_0^\infty d\Lambda \left(-\frac{\operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{l_1^2 + 2\Lambda}}{\sqrt{2\lambda}}\right)}{\sqrt{l_1^2 + 2\Lambda}^3} + \frac{2 \exp\left(-\frac{l_1^2 + 2\Lambda}{2\lambda^2}\right)}{\sqrt{2\pi}\lambda(l_1^2 + 2\Lambda)}\right) \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{l_2^2 + 2\Lambda}}{\sqrt{2\lambda}}\right)}{\sqrt{l_2^2 + 2\Lambda}}.
\end{aligned} \tag{A.3}$$

Die entsprechenden Terme für  $i = j = 2$  erhält man, indem man  $l_1$  und  $l_2$  in den Ausdrücken vertauscht.

### A.3.2 Berechnungen für die weiche Abschneidefunktion

Im isotropen Fall errechnet man für den effektiven Permeabilitätstensor mit der weichen Abschneidefunktion:

$$\begin{aligned}
K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) &= K_g \left(1 + \frac{\sigma_f^2}{2}\right) \delta_{ij} - \delta_{ij} \sigma_f^2 K_g^2 \frac{(2\pi l_0^2)^{d/2}}{(2\pi)^d} \times \\
&\quad \int \left(1 - \exp\left(-\frac{q^2 \lambda^2}{2a_w^2}\right)\right) \exp(-l_0^2 q^2 / 2) \frac{q_1^2}{K_g q^2} d^d q \\
&= K_g \left(1 + \frac{\sigma_f^2}{2}\right) \delta_{ij} - \delta_{ij} \sigma_f^2 K_g \frac{(2\pi l_0^2)^{d/2}}{d(2\pi)^d} \int \left(1 - \exp\left(-\frac{q^2 \lambda^2}{2a_w^2}\right)\right) \exp(-l_0^2 q^2 / 2) d^d q \\
&= K_g \left(1 + \frac{\sigma_f^2}{2}\right) \delta_{ij} - \delta_{ij} \sigma_f^2 K_g \frac{1}{d} \left(1 - \left(\frac{l_0^2}{l_0^2 + \lambda^2 / a_w^2}\right)^{d/2}\right), \quad d = 1, 2, 3.
\end{aligned} \tag{A.4}$$

Für den effektiven Permeabilitätskoeffizienten im anisotrop korrelierten Fall ergibt sich für  $d = 2$ :

$$\begin{aligned}
\delta K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda) &= -K_g \sigma_f^2 \int_{-\infty}^\infty dq_1 \int_{-\infty}^\infty dq_2 \frac{q_i q_j}{q^2} \frac{\sqrt{2\pi} l_1^2}{2\pi} \frac{\sqrt{2\pi} l_2^2}{2\pi} \times \\
&\quad \exp\left(-\frac{q_1^2 l_1^2}{2} - \frac{q_2^2 l_2^2}{2}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{q^2 \lambda^2}{2a_w^2}\right)\right) \\
&= 0 \quad \text{für } i \neq j.
\end{aligned} \tag{A.5}$$



$$\begin{aligned}
\delta K_{11}^{\text{eff}}(\lambda) &= -\frac{K_g \sigma_f^2}{2\pi} l_1 l_2 \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 \int_{-\infty}^{\infty} dq_2 \int_0^{\infty} d\tau q_1^2 \exp\left(-\frac{q_1^2 l_1^2}{2} - \frac{q_2^2 l_2^2}{2}\right) \times \\
&\quad \left(\exp(-q^2 \tau) - \exp(-q^2(\lambda^2/(2a_w^2) + \tau))\right) \\
&= -\frac{K_g \sigma_f^2}{2\pi} l_1 l_2 \int_0^{\infty} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 q_1^2 \exp\left(-\frac{q_1^2 l_1^2}{2}\right) \times \\
&\quad \left(\exp(-q_1^2 \tau) \sqrt{\frac{\pi}{\frac{l_2^2}{2} + \tau}} - \exp(-q_1^2(\lambda^2/(2a_w^2) + \tau)) \sqrt{\frac{\pi}{\frac{l_2^2}{2} + \frac{\lambda^2}{2a_w^2} + \tau}}\right) \\
&= -\frac{K_g \sigma_f^2}{2\pi} l_1 l_2 \int_0^{\infty} d\tau \left(\sqrt{\frac{\pi}{\frac{l_2^2}{2} + \tau}} \frac{d}{d\tau} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{l_1^2}{2} + \tau}} - \sqrt{\frac{\pi}{\frac{l_2^2}{2} + \frac{\lambda^2}{2a_w^2} + \tau}} \frac{d}{d\tau} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{l_1^2}{2} + \frac{\lambda^2}{2a_w^2} + \tau}}\right) \\
&= -\frac{K_g \sigma_f^2}{2\pi} l_1 l_2 \left(\frac{2\pi}{l_1(l_1 + l_2)} - 2\pi \frac{\sqrt{\frac{l_1^2}{2} + \frac{\lambda^2}{2a_w^2}} - \sqrt{\frac{l_2^2}{2} + \frac{\lambda^2}{2a_w^2}}}{\sqrt{\frac{l_2^2}{2} + \frac{\lambda^2}{2a_w^2}}(l_1^2 - l_2^2)}\right) \\
&= -K_g \sigma_f^2 l_1 l_2 \left(\frac{1}{l_1(l_1 + l_2)} - \frac{1}{l_1^2 + \lambda^2/a_w^2 + \sqrt{(l_1^2 + \lambda^2/a_w^2)(l_2^2 + \lambda^2/a_w^2)}}\right)
\end{aligned} \tag{A.6}$$

Um  $\delta K_{22}^{\text{eff}}(\lambda)$  zu erhalten, müssen in  $\delta K_{11}^{\text{eff}}(\lambda)$  die Korrelationslängen  $l_1$  und  $l_2$  vertauscht werden.

### A.3.3 Berechnungen für die Abweichung des hochskalierten Permeabilitätskoeffizienten

Mit Gl. (4.76) aus Abschnitt 4.3.2 schreiben wir in Ordnung  $O(\sigma_f^2)$

$$\begin{aligned}
K_{ij}^{\text{real}}(q, \lambda) &= \overline{K}_{ij} + \delta K_{ij}^{\text{real}}(q, \lambda) \\
&= \overline{K}_{ij} + \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int P_{\lambda, q}^- (\hat{k}(q - q')) i q'_i P_{\lambda, q'}^+ (g(q') i q'_j \hat{k}(q' - q''')) d^d q''' d^d q',
\end{aligned} \tag{A.7}$$

wobei man eine Lokalisierung  $q = 0$  wie in  $K^{\text{eff}}(q, \lambda)$  noch nicht vornimmt. Für die mittlere quadratische Abweichung erhält man:

$$\overline{(K_{ij}^{\text{real}}(\lambda) - K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda))^2}(q) = \int \overline{\delta K_{ij}^{\text{real}}(q', \lambda) \delta K_{ij}^{\text{real}}(q - q', \lambda)} d^d q' - (\delta K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda))^2, \tag{A.8}$$

wobei die Indizes  $i, j$  fest sind und  $q = 0$  erst nach der Ensemblemittelung zu setzen ist. Mit  $\delta K^{\text{real}}(q, \lambda)$  ergibt sich

$$\begin{aligned}
\overline{(K_{ij}^{\text{real}}(\lambda) - K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda))^2}(q) &= \frac{1}{(2\pi)^{4d}} \int \overline{P_{q'}^- (\hat{k}(q' - q'')) P_{q-q'}^- (\hat{k}(q - q' - q^{(4)}))} \times \\
&\quad q_i'' P_{q''}^+ (g(q'') q_j'' P_{q^{(4)}}^+ (g(q^{(4)}) q_j^{(4)} \hat{k}(q'' - q''') \hat{k}(q^{(4)} - q^{(5)}))) d^d q^{(5)} \dots d^d q' \\
&+ \frac{1}{(2\pi)^{4d}} \int P_{q'}^- (\hat{k}(q' - q'') \hat{k}(q^{(4)} - q^{(5)})) q_i'' P_{q''}^+ (g(q'') q_j'') \times \\
&\quad P_{q-q'}^- (\hat{k}(q - q' - q^{(4)}) \hat{k}(q'' - q''')) q_i^{(4)} P_{q^{(4)}}^+ (g(q^{(4)}) q_j^{(4)}) d^d q^{(5)} \dots d^d q'.
\end{aligned} \tag{A.9}$$

Da  $q = 0$  zu setzen ist, ergibt sich auch aus der Translationsinvarianz eine Einschränkung für die Wellenzahlvektoren  $q'''$  und  $q^{(5)}$  im Fourier-Raum. Man erhält nur Beiträge für  $q''' = q^{(5)} = 0$ , da die „auslaufenden“ Wellenzahlvektoren null sein müssen. Nutzt man außerdem die Delta-

Distribution in den fouriertransformierten Korrelationsfunktionen aus, erhält man:

$$\begin{aligned}
& \overline{(K_{ij}^{\text{real}}(\lambda) - K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda))^2} := \overline{(K_{ij}^{\text{real}}(\lambda) - K_{ij}^{\text{eff}}(\lambda))^2}(q=0) = \\
& \frac{K_g^4}{(2\pi)^{2d}} \int P_{q'}^-(\omega(q' - q'')q_i'' P_{q''}^+(g(q'')q_j''\omega(q''))q_i'' P_{q''}^+(g(-q'')q_j'')) d^d q'' d^d q' \\
& + \frac{K_g^4}{(2\pi)^{2d}} \int P_{q'}^-(\omega(q' - q'')q_i'' P_{q''}^+(g(q'')q_j'') P_{q'}^-(\omega(q''))(q_i'' - q_i') \times \\
& P_{q''-q'}^+(g(q'' - q')(q_j'' - q_j')) d^d q'' d^d q'.
\end{aligned} \tag{A.10}$$

Damit erhält man Gl. (4.78) aus Abschnitt 4.3.2. Für den ersten Term in (4.78) für  $i, j = 1, \dots, d$ , isotroper Korrelationsfunktion und weicher Abschneidefunktion erhält man:

$$\begin{aligned}
& \frac{K_g^4}{(2\pi)^{2d}} \int P_{\lambda, q}^-(P_{\lambda, q'}^+(q_i'g(q')q_j' q_i'g(-q')q_j'\omega(q')\omega(q - q'))) d^d q' d^d q \\
& = \frac{K_g^2}{(2\pi)^{2d}} \int P_{\lambda, q}^-(P_{\lambda, q'}^+(\frac{q_i'^2 q_j'^2}{q'^2 q'^2}\omega(q')\omega(q - q'))) d^d q' d^d q \\
& = C \int P_{\lambda, q'}^+(\frac{q_i'^2 q_j'^2}{q'^2 q'^2}\omega(q') \exp(-\frac{q^2 \lambda^2}{2a_w^2}) \exp(-(q - q')^2 l_0^2/2)) d^d q' d^d q \\
& = C \int P_{\lambda, q'}^+(\frac{q_i'^2 q_j'^2}{q'^2 q'^2}\omega(q') \exp(-\frac{(q + q')^2 \lambda^2}{2a_w^2}) \exp(-q^2 l_0^2/2)) d^d q' d^d q \\
& = C \int P_{\lambda, q'}^+(\frac{q_i'^2 q_j'^2}{q'^2 q'^2}\omega(q') \exp(-\frac{q'^2 \lambda^2}{2a_w^2}) \exp(-q^2 \frac{l_0^2}{2} (1 + \frac{\lambda^2}{a_w^2 l_0^2}) - qq' \frac{\lambda^2}{a_w^2})) d^d q' d^d q \\
& = \frac{C^2 (2\pi)^{2d}}{K_g^2} \left(\frac{2\pi}{l_0^2 L}\right)^{d/2} \int \left(1 - \exp(-\frac{q'^2 \lambda^2}{2a_w^2})\right) \frac{q_i'^2 q_j'^2}{q'^2 q'^2} \exp(-q'^2 l_0^2 L/2) \exp\left(\frac{q'^2 \lambda^4/a_w^4}{2l_0^2 L}\right) d^d q' \\
& \stackrel{i=j}{=} \frac{C^2 (2\pi)^{2d}}{K_g^2 l_0^{2d}} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{d/2} S_1(d) \int_0^\infty q^{d-1} \left(\exp(-q'^2 \left(\frac{l_0^2}{2} L - \frac{\lambda^4/a_w^4}{2l_0^2 L}\right)) \right. \\
& \qquad \qquad \qquad \left. - \exp(-q'^2 \left(\frac{\lambda^2}{2a_w^2} + \frac{l_0^2}{2} L - \frac{\lambda^4/a_w^4}{2l_0^2 L}\right))\right) dq' \\
& = \frac{C^2 (2\pi)^{2d}}{K_g^2 l_0^{2d}} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{d/2} S_2(d) \left(\left(\frac{l_0^2}{2} L - \frac{\lambda^4/a_w^4}{2l_0^2 L}\right)^{-d/2} - \left(\frac{\lambda^2}{2a_w^2} + \frac{l_0^2}{2} L - \frac{\lambda^4/a_w^4}{2l_0^2 L}\right)^{-d/2}\right)
\end{aligned}$$

mit  $L := 1 + \frac{\lambda^2}{a_w^2 l_0^2}$  und  $C := K_g^2 \sigma_f^2 (2\pi l_0^2)^{d/2} / (2\pi)^{2d}$  und für  $i = j$ :

$$S_1(d) := \begin{cases} 1/2 & \text{für } d = 1 \\ 3\pi/4 & \text{für } d = 2 \\ 4\pi/5 & \text{für } d = 3, \end{cases}$$

$$S_2(d) := \begin{cases} \sqrt{\pi}/2 & \text{für } d = 1 \\ 3\pi/8 & \text{für } d = 2 \\ \pi^{3/2}/5 & \text{für } d = 3. \end{cases}$$

Insgesamt ergibt sich für den ersten Term:

$$\begin{aligned}
& \frac{K_g^4}{(2\pi)^{2d}} \int P_{\lambda, q}^-(P_{\lambda, q'}^+(q_i'g(q')q_j' q_i'g(-q')q_j'\omega(q')\omega(q - q'))) d^d q' d^d q = \\
& K_g^2 \sigma_f^4 S(d) \left(F(\lambda/(l_0 a_w), 2, 0) - F(\lambda/(l_0 a_w), 3, 1)\right) \tag{A.11}
\end{aligned}$$

mit  $F(x, a, b) := (1 + ax^2 + bx^4)^{-d/2}$  und

$$S(d) := \begin{cases} 1/2 & \text{für } d = 1 \\ 3/8 & \text{für } d = 2 \\ 1/5 & \text{für } d = 3 \end{cases} \quad \text{und } i = j ,$$

$$S(d) := \begin{cases} 1/8 & \text{für } d = 2 \\ 1/15 & \text{für } d = 3 \end{cases} \quad \text{und } i \neq j .$$

Den zweiten Term in (4.78) berechnet man wie folgt:

$$\begin{aligned} & \frac{K_g^4}{(2\pi)^{2d}} \int d^d q \int d^d q' P_q^- \left( P_{q', q' - q}^+ (\omega(q - q') i q'_i g_0(q') i q'_j \omega(q') i (q' - q)_i g_0(q' - q) i (q' - q)_j) \right) \\ &= \frac{K_g^4}{(2\pi)^{2d}} \int d^d q \int d^d q' P_{q+q'}^- \left( P_{q, q'}^+ (\omega(q) i q'_i g_0(q') i q'_j \omega(q')) i q_i g_0(-q) i q_j \right) \\ &= \frac{K_g^4}{(2\pi)^{2d}} \int d^d q' P_{q'}^+ \left( i q'_i g_0(q') i q'_j \omega(q') \int d^d q P_{q+q'}^- \left( P_q^+ (\omega(q) i q_i g_0(-q) i q_j) \right) \right). \quad (\text{A.12}) \end{aligned}$$

Im isotropen Fall erhält man mit der weichen Abschneidefunktion nun für  $i = j$ , wenn man  $P_q^+$  in der zweiten Integration zunächst vernachlässigt:

$$\begin{aligned} & \frac{K_g^4}{(2\pi)^{2d}} \int d^d q' P_{q'}^+ \left( \frac{q_i'^2}{K_g q'^2} \omega(q') \int d^d q P_{q+q'}^- \left( \frac{q_i^2}{K_g q^2} \omega(q) \right) \right) \\ &= \frac{C}{K_g^2} \int d^d q' \left( 1 - \exp\left(-q'^2 \frac{\lambda^2}{2a_w^2}\right) \right) \frac{q_i'^2}{q'^2} \exp\left(-q'^2 \frac{l_0^2}{2}\right) \times \\ & \quad \int d^d q \exp\left(- (q + q')^2 \frac{\lambda^2}{2a_w^2}\right) \frac{q_i^2}{q^2} \exp\left(-q^2 \frac{l_0^2}{2}\right) \\ &= \frac{C}{d K_g^2} \int d^d q' \left( 1 - \exp\left(-q'^2 \frac{\lambda^2}{2a_w^2}\right) \right) \frac{q_i'^2}{q'^2} \exp\left(-q'^2 \frac{l_0^2}{2}\right) \times \\ & \quad \int d^d q \exp\left(-q^2 \left(\frac{\lambda^2}{2a_w^2} + \frac{l_0^2}{2}\right) - 2q \cdot q' \frac{\lambda^2}{2a_w^2}\right) \exp\left(-q'^2 \frac{\lambda^2}{2a_w^2}\right) \\ &= \frac{C}{d K_g^2} \int d^d q' \left( 1 - \exp\left(-q'^2 \frac{\lambda^2}{2a_w^2}\right) \right) \frac{q_i'^2}{q'^2} \exp\left(-q'^2 \left(\frac{l_0^2}{2} + \frac{\lambda^2}{2a_w^2}\right)\right) \times \\ & \quad \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^2/(2a_w^2) + l_0^2/2}}^d \exp\left(q'^2 \frac{\lambda^4/(4a_w^4)}{\lambda^2/(2a_w^2) + l_0^2/2}\right) \\ &= \frac{C}{d^2 K_g^2} \frac{\pi^{d/2}}{(\lambda^2/(2a_w^2) + l_0^2/2)^{d/2}} \int d^d q' \left( 1 - \exp\left(-q'^2 \frac{\lambda^2}{2a_w^2}\right) \right) \exp\left(-q'^2 L\right) \\ &= \frac{C l_0^{-d}}{d^2 K_g^2} \frac{(2\pi)^{d/2}}{(1 + \lambda^2/(l_0^2 a_w^2))^{d/2}} \left( \sqrt{\frac{\pi}{L}}^d - \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^2/(2a_w^2) + L}}^d \right) \quad (\text{A.13}) \end{aligned}$$

mit  $L := l_0^2/2 + \lambda^2/(2a_w^2) - \frac{\lambda^4/(4a_w^4)}{\lambda^2/(2a_w^2) + l_0^2/2}$ ,  $C := K_g^4 \sigma_f^4 l_0^{2d} (2\pi)^{-d}$ . Damit erhält man:

$$\begin{aligned}
& \frac{K_g^4}{(2\pi)^{2d}} \int d^d q' P_{q'}^+ \left( \frac{q_i'^2}{K_g q'^2} \omega(q') \int d^d q P_{q+q'}^- \left( \frac{q_i^2}{K_g q^2} \omega(q) \right) \right) \\
&= \frac{K_g^2 \sigma_f^4}{d^2 (1 + \lambda^2/(l_0^2 a_w^2))^{d/2}} \left( \left( 1 + \frac{\lambda^2}{l_0^2 a_w^2} - \frac{\lambda^4/(l_0^4 a_w^4)}{1 + \lambda^2/(l_0^2 a_w^2)} \right)^{-d/2} \right. \\
&\quad \left. - \left( 1 + \frac{2\lambda^2}{l_0^2 a_w^2} - \frac{\lambda^4/(l_0^4 a_w^4)}{1 + \lambda^2/(l_0^2 a_w^2)} \right)^{-d/2} \right) \quad (\text{A.14}) \\
&= \frac{K_g^2 \sigma_f^4}{d^2} \left( \left( 1 + \frac{2\lambda^2}{l_0^2 a_w^2} \right)^{-d/2} - \left( 1 + \frac{3\lambda^2}{l_0^2 a_w^2} + \frac{\lambda^4}{l_0^4 a_w^4} \right)^{-d/2} \right) \\
&= \frac{K_g^2 \sigma_f^4}{d^2} \left( F(\lambda/(l_0 a_w), 2, 0) - F(\lambda/(l_0 a_w), 3, 1) \right).
\end{aligned}$$

Führt man noch den Projektor  $P_{q'}^+$  in der zweiten Integration von (A.13) ein, ergibt sich wegen

$$\int P_{\lambda, q}^+(f(q)) d^d q = \int \left( 1 - \exp\left(-\frac{q^2 \lambda^2}{2a_w^2}\right) \right) f(q) d^d q$$

für  $i = j$  für den zweiten Term von (4.78):

$$\begin{aligned}
& \frac{K_g^4}{(2\pi)^{2d}} \int d^d q \int d^d q' P_{q+q'}^- \left( P_{q, q'}^+ (\omega(q) i q_i' g_0(q') i q_j' \omega(q')) i q_i g_0(-q) i q_j \right) = \\
&= \frac{C}{K_g^2} \int d^d q' \left( 1 - \exp\left(-q'^2 \frac{\lambda^2}{2a_w^2}\right) \right) \frac{q_i'^2}{q'^2} \exp\left(-q'^2 \frac{l_0^2}{2}\right) \times \\
&\quad \int d^d q \exp\left(-\frac{(q+q')^2 \lambda^2}{2a_w^2}\right) \frac{q_i^2}{q^2} \exp\left(-q^2 \frac{l_0^2}{2}\right) \\
&\quad - \frac{C}{K_g^2} \int d^d q' \left( 1 - \exp\left(-q'^2 \frac{\lambda^2}{2a_w^2}\right) \right) \frac{q_i'^2}{q'^2} \exp\left(-q'^2 \frac{l_0^2}{2}\right) \times \\
&\quad \int d^d q \exp\left(-\frac{((q+q')^2 + q^2) \lambda^2}{2a_w^2}\right) \frac{q_i^2}{q^2} \exp\left(-q^2 \frac{l_0^2}{2}\right) \\
&= \frac{K_g^2 \sigma_f^4}{d^2} \left( F(\lambda/(l_0 a_w), 2, 0) - F(\lambda/(l_0 a_w), 3, 1) \right) \\
&\quad - \frac{K_g^2 \sigma_f^4}{d^2} \left( F(\lambda/(l_0 a_w), 3, 1) - F(\lambda/(l_0 a_w), 4, 3) \right). \quad (\text{A.15})
\end{aligned}$$

Das Ergebnis für die mittlere quadratische Abweichung lautet damit insgesamt:

$$\begin{aligned}
\overline{(K_{ii}^{\text{real}}(\lambda) - K_{ii}^{\text{eff}}(\lambda))^2} &= K_g^2 \sigma_f^4 (S(d) + 1/d^2) F(\lambda/(l_0 a_w), 2, 0) - \\
&\quad K_g^2 \sigma_f^4 (S(d) + 2/d^2) F(\lambda/(l_0 a_w), 3, 1) + \frac{K_g^2 \sigma_f^4}{d^2} F(\lambda/(l_0 a_w), 4, 3). \quad (\text{A.16})
\end{aligned}$$

*Bemerkung A.1.* Für  $i \neq j$  ist

$$S_1(d) := \begin{cases} \pi/4 & \text{für } d = 2 \\ 4\pi/15 & \text{für } d = 3. \end{cases}$$

### A.3.4 Berechnungen für die Fehlerberechnung

Im isotrop korrelierten Fall ergibt sich für den Fehler von  $u_\lambda(x)$  in der Ordnung  $O(\sigma_f^2)$ :

$$\begin{aligned} \overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2} &= \frac{1}{d K_g^2} \int P_{\lambda,q}^+ \left( \frac{1}{q^2} v_0^2 \sigma_f^2 \frac{(2\pi l_0^2)^{d/2}}{(2\pi)^d} \exp\left(-\frac{q^2 l_0^2}{2}\right) \right) d^d q \\ &= \frac{v_0^2 \sigma_f^2 (2\pi l_0^2)^{d/2}}{d K_g^2 (2\pi)^d} \int \frac{1}{q^2} \left(1 - \exp\left(-\frac{q^2 \lambda^2}{2a_w^2}\right)\right) \exp\left(-\frac{q^2 l_0^2}{2}\right) d^d q \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

mit der weichen Abschneidefunktion aus (4.67). Für  $d = 3$  ergibt sich daraus mit sphärischen Polarkoordinaten:

$$\begin{aligned} \overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2} &= \frac{v_0^2 \sigma_f^2 (2\pi l_0^2)^{3/2}}{3 K_g^2 (2\pi)^3} 4\pi \int_0^\infty \left(1 - \exp\left(-\frac{q^2 \lambda^2}{2a_w^2}\right)\right) \exp\left(-\frac{q^2 l_0^2}{2}\right) dq \\ &= \frac{v_0^2 \sigma_f^2}{6 K_g^2} (2\pi)^{-3/2} l_0^3 4\pi \left( \sqrt{\frac{2\pi}{l_0^2}} - \sqrt{\frac{2\pi}{l_0^2 + \lambda^2/a_w^2}} \right) \\ &= \frac{v_0^2 \sigma_f^2}{6 K_g^2} 2l_0^2 \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \lambda^2/(l_0^2 a_w^2)}}\right). \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Für eine in der Ordnung konsistente Normierung von  $\overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2}$  dividieren wir mit

$$\overline{(u(x))^2} = \left( \frac{v_0 L l_0}{K_g} \right)^2, \quad (\text{A.19})$$

das sich aus Dimensionsgründen für eine makroskopische Längenskala  $L l_0$  ergibt. Ist die Skala  $\lambda$  kleiner als die Korrelationslänge  $l_0$ , erhält man als Entwicklung in  $\lambda/l_0$ :

$$\frac{\overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2}}{\overline{(u(x))^2}} = \frac{\sigma_f^2}{6L^2 a_w^2} \left(\frac{\lambda}{l_0}\right)^2 + O\left(\left(\frac{\lambda}{l_0}\right)^4\right). \quad (\text{A.20})$$

Für den Fall  $l_0/\lambda \ll 1$  ergibt sich hingegen

$$\frac{\overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2}}{\overline{(u(x))^2}} = \frac{\sigma_f^2}{3} \frac{1}{L^2} + O\left(\frac{l_0}{\lambda}\right) \quad (\text{A.21})$$

für drei Raumdimensionen. In zwei Dimensionen ergibt sich ebenfalls mit Polarkoordinaten:

$$\begin{aligned} \overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2} &= \frac{v_0^2 \sigma_f^2}{2K_g^2} \frac{2\pi l_0^2}{(2\pi)^2} 2\pi \int_0^\infty \frac{1}{q} \left(1 - \exp\left(-\frac{q^2 \lambda^2}{2a_w^2}\right)\right) \exp\left(-\frac{q^2 l_0^2}{2}\right) dq \\ &= -\frac{v_0^2 \sigma_f^2}{2K_g^2} l_0^2 \int_0^\infty \left( \sum_{\nu=1}^\infty \frac{1}{\nu!} \left(-\frac{\lambda^2}{2a_w^2}\right)^\nu q^{2\nu-1} \right) \exp\left(-\frac{q^2 l_0^2}{2}\right) dq \\ &= -\frac{v_0^2 \sigma_f^2}{2K_g^2} l_0^2 \frac{1}{2} \sum_{\nu=0}^\infty \frac{1}{\nu+1} \left(-\frac{\lambda^2}{a_w^2 l_0^2}\right)^{\nu+1} \\ &= \frac{v_0^2 \sigma_f^2}{4K_g^2} l_0^2 \sum_{\nu=1}^\infty \frac{(-1)^{\nu+1}}{\nu} \left(\frac{\lambda^2}{a_w^2 l_0^2}\right)^\nu \\ &= \frac{v_0^2 \sigma_f^2}{4K_g^2} l_0^2 \ln\left(1 + \frac{\lambda^2}{a_w^2 l_0^2}\right) \quad \text{für } \lambda/l_0 \leq a_w. \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

$$\Rightarrow \frac{\overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2}}{\overline{(u(x))^2}} = \frac{\sigma_f^2}{4L^2 a_w^2} \left(\frac{\lambda}{l_0}\right)^2 + O\left(\left(\frac{\lambda}{l_0}\right)^4\right) \quad \text{für } \lambda < l_0. \quad (\text{A.23})$$

Für  $d = 1$  erhält man analog:

$$\begin{aligned}
\overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2} &= \frac{v_0^2 \sigma_f^2}{K_g^2} \frac{\sqrt{2\pi} l_0^2}{2\pi} 2 \int_0^\infty \frac{1}{q^2} \left(1 - \exp\left(-\frac{q^2 \lambda^2}{2a_w^2}\right)\right) \exp\left(-\frac{q^2 l_0^2}{2}\right) dq \\
&= -\frac{v_0^2 \sigma_f^2}{K_g^2} \frac{\sqrt{2\pi} l_0^2}{2\pi} 2 \int_0^\infty \left(\sum_{\nu=1}^\infty \frac{1}{\nu!} \left(-\frac{\lambda^2}{2a_w^2}\right)^\nu q^{2\nu-2}\right) \exp\left(-\frac{q^2 l_0^2}{2}\right) dq \\
&= \frac{v_0^2 \sigma_f^2}{K_g^2} \frac{\sqrt{2\pi} l_0^2}{2\pi} 2 \left( \int_0^\infty \frac{\lambda^2}{2a_w^2} \exp\left(-\frac{q^2 l_0^2}{2}\right) dq \right. \\
&\quad \left. - \int_0^\infty \left(\sum_{\nu=2}^\infty \frac{1}{\nu!} \left(-\frac{\lambda^2}{2a_w^2}\right)^\nu q^{2\nu-2}\right) \exp\left(-\frac{q^2 l_0^2}{2}\right) dq \right).
\end{aligned} \tag{A.24}$$

$$\Rightarrow \frac{\overline{(\delta u(x)|_\lambda)^2}}{\overline{(u(x))^2}} = \frac{\sigma_f^2}{2L^2 a_w^2} \left(\frac{\lambda}{l_0}\right)^2 + O\left(\left(\frac{\lambda}{l_0}\right)^4\right) \quad \text{für } \lambda < l_0. \tag{A.25}$$

## A.4 Numerisches Coarse Graining mit Nullrandbedingungen

### Vergleich für die effektive Permeabilität

Die numerischen Berechnungen in Kapitel 5 zur hochskalierten Permeabilität verwenden zur Lösung des hergeleiteten Zellproblems (5.21),

$$-\operatorname{div} K(x') \nabla (\chi_j^{(x)}(x') + x'_j) = 0 \quad \text{für } x' \in E_\lambda^{(x)}, x \text{ fest}, \tag{A.26}$$

stets die eingeführten NZF-Randbedingungen. Gl. (A.26) kann auch mit einer anderen Wahl der Randbedingungen, z.B. Dirichlet-Nullrandbedingungen, berechnet werden. Wir gehen hier nur auf die Berechnung mit Nullrandbedingungen ein. In diesem Fall ergibt sich eine wesentlich schlechtere Übereinstimmung mit den theoretischen Resultaten aus der Coarse Graining Methode als für die NZF-Randbedingungen.

Exemplarisch zeigen wir dazu in der Abb. A.1 die effektive Permeabilität für ein isotropes Medium. Die Berechnungen sind identisch zu denen in Abschnitt 5.4.1. Die Varianz des Feldes ist  $\sigma_f^2 = 1$ , und  $K^{\text{eff}}(\lambda)$  ist für Nullrandbedingungen (NRB) und NZF-Randbedingungen im Vergleich zu den theoretischen Resultaten aus der Renormierungsgruppen-Analyse für die Berechnung mit Projektor und weicher Abschneidefunktion (weich) dargestellt.

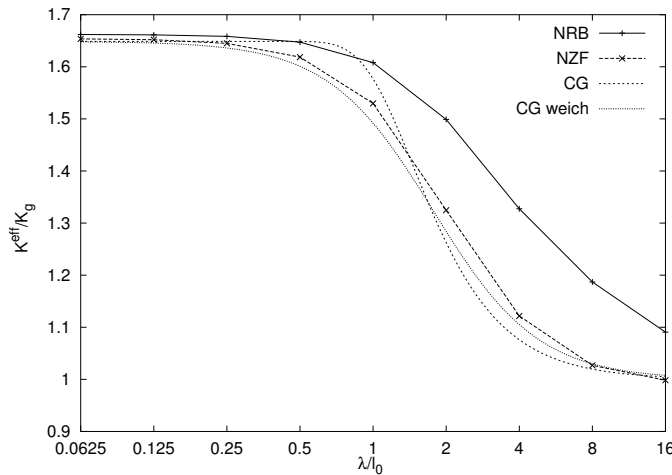


Abbildung A.1: Die effektive Permeabilität  $K^{\text{eff}}(\lambda)/K_g$  für ein isotropes Medium,  $\sigma_f^2 = 1$ , aus der Coarse Graining Methode, berechnet mithilfe des Projektors oder des weichen Abschneiders (weich), im Vergleich zur numerischen Permeabilität für Nullrandbedingungen und NZF-Randbedingungen ( $a_s = a_w = 2$ ).

# Literaturverzeichnis

- [AB94] M. L. Abell and J. P. Braselton. *The Maple V handbook*. AP Professional, Boston, 1994.
- [ABCM02] D. N. Arnold, F. Brezzi, B. Cockburn, and L. D. Marini. Unified analysis of discontinuous galerkin methods for elliptic problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 39(5):1749–1779, 2002.
- [ABDP81] R. E. Alcouffe, A. Brandt, J. E. Dendy, and J. W. Painter. The multi-grid method for the diffusion equation with strongly discontinuous coefficients. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 2(4):430–454, 1981.
- [Abr72] M. Abramowitz. *Handbook of mathematical functions*. Dover Publ., New York, 1972.
- [AEN02] S. Attinger, J. Eberhard, and N. Neuss. Filtering procedures for flow in heterogeneous porous media: numerical results. *Comput. Visual. Sci.*, 5:67–72, 2002.
- [AMGT89] R. Ababou, D. McLaughlin, L. W. Gelhar, and A. F. B. Tompson. Numerical simulation of three-dimensional saturated flow in randomly heterogeneous porous media. *Transport in Porous Media*, 4:549–565, 1989.
- [Att02] S. Attinger. Generalized coarse graining procedures for flow in porous media. *Eingereicht in: Computational Geosciences*, 2002.
- [AWY97] T. Arbogast, M. F. Wheeler, and I. Yotov. Mixed finite elements for elliptic problems with tensor coefficients as cell-centered finite differences. *SIAM J. Numer. Anal.*, 34(2):828–852, 1997.
- [BBJ<sup>+</sup>97] P. Bastian, K. Birken, K. Johannsen, S. Lang, N. Neuss, H. Rentz-Reichert, and C. Wieners. Ug - a flexible software toolbox for solving partial differential equations. *Computing and Visualization in Science*, 1:27–40, 1997.
- [BCF<sup>+</sup>00] M. Brezina, A. J. Cleary, R. D. Falgout, V. E. Henson, J. E. Jones, T. A. Manteuffel, S. F. McCormick, and J. W. Ruge. Algebraic multigrid based on element interpolation (amge). *SIAM J. Sci. Comput.*, 22(5):1570–1592, 2000.
- [BG90] J.-P. Bouchaud and A. Georges. Anomalous diffusion in disordered media: statistical mechanisms, models and physical applications. *Physics Reports*, 195(4-5):127–293, 1990.
- [Bou77] J. F. Bourgat. Numerical experiments of the homogenization method for operators with periodic coefficients. In R. Glowinski and J.-L. Lions, editors, *Computing Methods in Applied Science and Engineering I*, pages 330–356. Springer, Versailles, December 5–9 1977.
- [BP02] A. Bourgeat and A. L. Piatnitski. Approximations of effective coefficients in stochastic homogenization. Preprint, 2002.

- [BR97] F. Bassi and S. Rebay. A high-order accurate discontinuous finite element method for the numerical solution of the compressible navier-stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 131:267–279, 1997.
- [Bra73] A. Brandt. Multi-level adaptive technique for fast numerical solution to boundary value problems. In *3rd International Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics, Paris, 1972, Lecture Notes in Physics 18*, pages 83–89. Springer, 1973.
- [Bra77] A. Brandt. Multi-level adaptive solutions to boundary-value problems. *Math. Comput.*, 31(138):333–390, 1977.
- [Bra97] D. Braess. *Finite Elemente*. Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1997.
- [Bri97] R. Brigola. *Fourieranalysis, Distributionen und Anwendungen*. Vieweg, Braunschweig, 1997.
- [CD99] D. Cioranescu and P. Donato. *An introduction to homogenization*. Oxford Univ. Press, Oxford, 1999.
- [CFCPP92] R. J. Creswick, H. A. Farach, and Jr. C. P. Poole. *Introduction to Renormalization Group methods in Physics*. Wiley Inter-Science, New York, 1992.
- [CH00] Z. Chen and T. Y. Hou. A mixed multiscale finite element method for the elliptic problems with oscillating coefficients. *Eingereicht in: Math. Comp.*, 2000.
- [Cir03] O. A. Cirpka. Spectral methods for groundwater flow in heterogeneous formations. In F. Stauffer, editor, *20th International Course on Groundwater Management “Stochastic Tools for Groundwater Modelling”*. ETH Zürich, March 10-14 2003.
- [CM93] A. J. Chorin and J. E. Marsden. *A mathematical introduction to fluid mechanics*. Springer-Verlag, New-York, 1993.
- [DDH94] D. S. Dean, I. T. Drummond, and R. R. Horgan. Perturbation schemes for flow in random media. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 27:5135–5144, 1994.
- [DDH95] D. S. Dean, I. T. Drummond, and R. R. Horgan. Effective diffusivity in non-isotropic gradient flows. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 28:6013–6025, 1995.
- [Den82a] J. E. Dendy. Black box multigrid. *Journal of Computational Physics*, 48:366–386, 1982.
- [Den82b] J. E. Dendy. Black box multigrid for nonsymmetric problems. *Appl. Math. Comput.*, 13:261–284, 1982.
- [Den00] M. Dentz. *Temporal behavior of transport parameters in heterogeneous porous media*. Dissertation, University of Heidelberg, 2000.
- [DK92a] B. B. Dykaar and P. K. Kitanidis. Determination of the effective hydraulic conductivity for heterogeneous porous media using a numerical spectral approach 1. method. *Water Resour. Res.*, 28(4):1155–1166, 1992.
- [DK92b] B. B. Dykaar and P. K. Kitanidis. Determination of the effective hydraulic conductivity for heterogeneous porous media using a numerical spectral approach 2. results. *Water Resour. Res.*, 28(4):1167–1178, 1992.
- [Dur91] L. J. Durlofsky. Numerical calculation of equivalent grid block permeability tensors for heterogeneous porous media. *Water Resour. Res.*, 27(5):699–708, 1991.
- [Dur92] L. J. Durlofsky. Representation of grid block permeability in coarse scale models of randomly heterogeneous porous media. *Water Resour. Res.*, 28(7):1791–1800, 1992.



- [Ebe00] J. Eberhard. Heterogene Medien: Transportparameter in der Einzelrealisierung und im Ensemble. Diplomarbeit, Universität Heidelberg, 2000.
- [EHW00] Y. R. Efendiev, T. Y. Hou, and X.-H. Wu. Convergence of a nonconforming multiscale finite element method. *SIAM J. Numer. Anal.*, 37(3):888–910, 2000.
- [EW02a] Y. R. Efendiev and X.-H. Wu. Multiscale finite element for problems with highly oscillatory coefficients. *Numer. Math.*, 90(3):459–486, 2002.
- [EW02b] Y. R. Efendiev and X.-H. Wu. Multiscale finite element for problems with highly oscillatory coefficients. *Numer. Math.*, 90:459–486, 2002.
- [Fed61] R. P. Fedorenko. A relaxation method for solving elliptic difference equations. *USSR Comput. Math. and Math. Phys.*, 1(5):1092–1096, 1961.
- [Fed64] R. P. Fedorenko. The speed of convergence of one iterative process. *USSR Comput. Math. and Math. Phys.*, 4(3):227–235, 1964.
- [For84] O. Forster. *Analysis 3*. Vieweg, Braunschweig, 1984.
- [Fre75] R. A. Freeze. A stochastic-conceptual analysis of one-dimensional groundwater flow in nonuniform homogeneous media. *Water Resour. Res.*, 11:725–741, 1975.
- [Fuh93] J. Fuhrmann. *Zur Verwendung von Mehrgitterverfahren bei der numerischen Behandlung elliptischer partieller Differentialgleichungen zweiter Ordnung mit variablen Koeffizienten*. Dissertation, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, 1993.
- [Gel93] L. W. Gelhar. *Stochastic Subsurface Hydrology*. Prentice Hall, New Jersey, 1993.
- [GGBM78] A. L. Gutjahr, L. W. Gelhar, A. A. Bakr, and J. R. MacMillan. Stochastic analysis of spatial variability in subsurface flows, 2. evaluation and application. *Water Resour. Res.*, 14(5):953–959, 1978.
- [Gra94] I. S. Gradshteyn. *Table of integrals, series, and products*. Oxford University Press, 1994.
- [GT83] D. Gilbarg and N. S. Trudinger. *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order*. Springer-Verlag, Berlin, 1983.
- [Hac76] W. Hackbusch. Ein iteratives Verfahren zur schnellen Auflösung elliptischer Randwertprobleme. Technical Report 76-12, Universität Köln, 1976.
- [Hac85] W. Hackbusch. *Multi-Grid Methods and Applications*. Springer, Berlin, 1985.
- [Hac86] W. Hackbusch. *Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen*. Teubner, Stuttgart, 1986.
- [Hac91] W. Hackbusch. *Iterative Lösung großer schwachbesetzter Gleichungssysteme*. Teubner, Stuttgart, 1991.
- [Hac02] W. Hackbusch. Introduction to multi-grid methods, 2002. Course notes of Zürich summer school: FEM for PDEs with Multiple Scales, ETH Zürich.
- [HC99] D. T. Hristopulos and G. Christakos. Renormalization group analysis of permeability upscaling. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, 13:131–160, 1999.
- [HED02] C. He, M. G. Edwards, and L. J. Durlofsky. Numerical calculation of equivalent cell permeability tensors for general quadrilateral control volumes. *Comp. Geosciences*, 6(1):29–47, 2002.
- [HM01] J. J. Hastings and A. H. Muggeridge. Upscaling uncertain permeability using small cell renormalization. *Mathematical Geology*, 33(4):491–505, 2001.

- [HV01] V. E. Henson and P. S. Vassilevski. Element-free amge: general algorithms for computing interpolation weights in amg. *SIAM J. Sci. Comput.*, 23(2):629–650, 2001.
- [HW97] T. Y. Hou and X.-H. Wu. A multiscale finite element method for elliptic problems in composite materials and porous media. *Journal of Computational Physics*, 134:169–189, 1997.
- [HWC99] T. H. Hou, X.-H. Wu, and Z. Cai. Convergence of a multiscale finite element method for elliptic problems with rapidly oscillating coefficients. *Mathematics of Computation*, 68(227):913–943, 1999.
- [JKO94] V. V. Jikov, S. M. Kozlov, and O. A. Oleinik. *Homogenization of Differential Operators and Integral Functionals*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1994.
- [JSD94a] P. Jussel, F. Stauffer, and T. Dracos. Transport modeling in heterogeneous aquifers: 1. statistical description and numerical generation of gravel deposits. *Water Resour. Res.*, 30(6):1803–1817, 1994.
- [JSD94b] P. Jussel, F. Stauffer, and T. Dracos. Transport modeling in heterogeneous aquifers: 2. three-dimensional transport model and stochastic numerical tracer experiments. *Water Resour. Res.*, 30(6):1819–1831, 1994.
- [JV97] U. Jaekel and H. Vereecken. Renormalization group analysis of macrodispersion in a directed random flow. *Water Resour. Res.*, 33(10):2287–2299, 1997.
- [JV01] J. E. Jones and P. S. Vassilevski. Amge based on element agglomeration. *SIAM J. Sci. Comput.*, 23(1):109–133, 2001.
- [Kin89] P. R. King. The use of renormalization for calculating effective permeability. *Transport in Porous Media*, 4:37–58, 1989.
- [Kit90] P. K. Kitanidis. Effective hydraulic conductivity for gradually varying flow. *Water Resour. Res.*, 26(6):1197–1208, 1990.
- [Kna95] S. Knapek. Multiskalenverfahren bei der Modellierung, Diskretisierung und Lösung von Diffusionsproblemen. Diplomarbeit, Technische Universität München, 1995.
- [Kna98] S. Knapek. Matrix-dependent multigrid-homogenization for diffusion problems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 20:515–533, 1998.
- [Koz77] S. M. Kozlov. Averaging of differential operators with almost periodic rapidly oscillating coefficients. *Soviet Math. Dokl.*, 18(5):1323–1326, 1977.
- [Koz79] S. M. Kozlov. Averaging of differential operators with almost periodic, rapidly oscillating coefficients. *Math. USSR Sbornik*, 35(4):481–498, 1979.
- [Koz80] S. M. Kozlov. Averaging of random operators. *Math. USSR Sbornik*, 37(2):167–180, 1980.
- [Kra70] R. H. Kraichnan. Diffusion by a random velocity field. *Phys. Fluids*, 13(1):22–31, 1970.
- [Kra76] R. H. Kraichnan. Diffusion of passive-scalar and magnetic fields by helical turbulence. *J. Fluid Mech.*, 77(4):753–768, 1976.
- [KYL02] R. Khaleel, T.-C. J. Yeh, and Z. Lu. Upscaled flow and transport properties for heterogeneous unsaturated media. *Water Resour. Res.*, 38(5):11.1–11.12, 2002.
- [LLJ01] S. H. Lee, M. F. Lough, and C. L. Jensen. Hierarchical modeling of flow in naturally fractured formations with multiple length scales. *Water Resour. Res.*, 37(3):443–455, 2001.

- [Mac94] W. D. MacComb. *The physics of fluid turbulence*. Clarendon Press, Oxford, 1994.
- [Mat67] G. Matheron. *Éléments pour une théorie des milieux poreux*. Masson et Cie, 1967.
- [MDH98] J. D. Moulton, J. E. Dendy, and J. M. Hyman. The black box multigrid numerical homogenization algorithm. *Journal of Computational Physics*, 141:1–29, 1998.  
Also: Los Alamos National Laboratory Report: LAUR-96-3588, Theoretical Division, Los Alamos Laboratory, 1994.
- [MS99] A.-M. Matache and C. Schwab. Homogenization via p-fem for problems with microstructure. Technical report, ETH Zürich, 1999. Research Report No. 99-09.
- [MS01] A.-M. Matache and C. Schwab. Two-scale fem for homogenization problems. Technical report, ETH Zürich, 2001. Research Report No. 2001-06.
- [MW82] A. Mantoglou and J. L. Wilson. The turning bands method for the simulation of random fields using line generation by a spectral method. *Water Resour. Res.*, 18(5):1379–1394, 1982.
- [Neu95] N. Neuss. *Homogenisierung und Mehrgitter*. Dissertation, Universität Heidelberg, 1995.
- [NJW01] N. Neuss, W. Jäger, and G. Wittum. Homogenization and multigrid. *Computing*, 66:1–26, 2001.
- [NO93] S. P. Neuman and S. Orr. Prediction of steady state flow in nonuniform geologic media by conditional moments: exact nonlocal formalism, effective conductivities, and weak approximation. *Water Resour. Res.*, 29(2):341–364, 1993.
- [NT98] B. F. Nielsen and A. Tveito. An upscaling method for one-phase flow in heterogeneous reservoirs; a weighted output least squares (wols) approach. *Comp. Geosciences*, 2(2), 1998.
- [PNT96] E. K. Paleologos, S. P. Neuman, and D. Tartakovsky. Effective hydraulic conductivity of bounded, strongly heterogeneous porous media. *Water Resour. Res.*, 32(5):1333–1341, 1996.
- [PTVF92] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C : the art of scientific computing*. Cambridge University Press, 1992.
- [PY90] A. V. Pozhidaev and V. V. Yurinskii. On the error of averaging symmetric elliptic systems. *Math. USSR Izvestiya*, 35(1):183–201, 1990.
- [QSS02] A. Quarteroni, R. Sacco, and F. Saleri. *Numerische Mathematik 1*. Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 2002.
- [RdM97] Ph. Renard and G. de Marsily. Calculating equivalent permeability: a review. *Advances in Water Resources*, 20(5-6):253–278, 1997.
- [Reu94] A. Reusken. Multigrid with matrix-dependent transfer operators for convection-diffusion problems. In P. W. Hemker and P. Wesseling, editors, *Seventh International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*. Birkhäuser, Basel, 1994.
- [RGH90] Y. Rubin and J. J. Gomez-Hernandez. A stochastic approach to the problem of upscaling of conductivity in disordered media: theory and unconditional numerical simulations. *Water Resour. Res.*, 26(4):691–701, 1990.
- [RGSW93] M. J. L. Robin, A. L. Gutjahr, E. A. Sudicky, and J. L. Wilson. Cross-correlated random field generation with the direct fourier transform method. *Water Resour. Res.*, 29(7):2385–2397, 1993.

- [RS85] J. W. Ruge and K. Stüben. Efficient solution of finite difference and finite element equations by algebraic multigrid (amg). In D. J. Paddon and H. Holstein, editors, *Multigrid Methods for Integral and Differential Equations*, The Institute of Mathematics and its Applications Conference Series, pages 169–212. Clarendon Press, Oxford, 1985.
- [RS87] J. W. Ruge and K. Stüben. Algebraic multigrid. In S. F. McCormick, editor, *Multigrid methods*, pages 73–130. SIAM, 1987.
- [RSMB99] Y. Rubin, A. Sun, R. Maxwell, and A. Bellin. The concept of block-effective macrodispersivity and a unified approach for grid-scale- and plume-scale-dependent transport. *J. Fluid Mech.*, 395:161–180, 1999.
- [SP80] E. Sanchez-Palencia. *Non-Homogeneous Media and Vibration Theory*, volume 129 of *Lecture Notes in Physics*. Springer, Berlin, 1980.
- [SR98] F. Stauffer and M. Rauber. Stochastic macrodispersion models for gravel aquifers. *Journal of Hydraulic Research*, 36(6):885–896, 1998.
- [Sta03] F. Stauffer. Aquifer heterogeneity and their geostatistical description. In F. Stauffer, editor, *20th International Course on Groundwater Management “Stochastic Tools for Groundwater Modelling”*. ETH Zürich, March 10-14 2003.
- [Sud86] E. A. Sudicky. A natural-gradient experiment on solute transport in a sand aquifer: spatial variability of hydraulic conductivity and its role in the dispersion process. *Water Resour. Res.*, 22:2069–2082, 1986.
- [SV93] F. Santosa and M. Vogelius. First order correctors to the homogenized eigenvalues of a periodic composite medium. *SIAM J. Appl. Math.*, 53(6):1636–1668, 1993.
- [SVGC95] X. Sanchez-Vila, J. P. Girardi, and J. Carrera. A synthesis of approaches to upscaling of hydraulic conductivities. *Water Resour. Res.*, 31(4):867–882, 1995.
- [Tar80] L. Tartar. Incompressible fluid flow in a porous medium – convergence of the homogenization process. in [SP80], pages 368–377, 1980.
- [Van84] E. Vanmarcke. *Random Fields*. MIT Press, Cambridge, England, 1984.
- [Wag93] C. Wagner. Ein robustes Mehrgitterverfahren für Diffusions-Transport-Probleme in der Bodenphysik. Diplomarbeit, Universität Heidelberg, 1993.
- [Wag99] C. Wagner. Introduction to algebraic multigrid, course notes of an algebraic multigrid course at the university of heidelberg. Technical report, University of Heidelberg, 1999.
- [Wer02] D. Werner. *Funktionalanalysis*. Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 2002.
- [Wes91] P. Wesseling. *An introduction to multigrid methods*. Wiley, Chichester, England, 1991.
- [WGH00] X.-H. Wen and J. J. Gomez-Hernandez. Upscaling hydraulic conductivities in heterogeneous media: an overview. *Journal of Hydrology*, 183:ix–xxxii, 2000.
- [Wit89a] G. Wittum. On the convergence of multi-grid methods with transforming smoothers. theory with applications to the navier-stokes equations. *Numer. Math.*, 57:15–38, 1989.
- [Wit89b] G. Wittum. On the robustness of ilu smoothing. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 10:699–717, 1989.

- [WKW97] C. Wagner, W. Kinzelbach, and G. Wittum. Schur-complement multigrid. a robust method for groundwater flow and transport problems. *Numer. Math.*, 75:523–545, 1997.
- [Yur81] V. V. Yurinskii. Averaging an elliptic boundary-value problem with random coefficients. *Siberian Mathematical Journal*, 21:470–482, 1981.
- [Yur86] V. V. Yurinskii. Averaging of symmetric diffusion in random medium. *Siberian Mathematical Journal*, 27(4):603–613, 1986.
- [Zee90] P. M. de Zeeuw. Matrix-dependent prolongations and restrictions in a blackbox multigrid solver. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 33:1–27, 1990.
- [ZKON79] V. V. Zhikov, S. M. Kozlov, O. A. Oleinik, and Kha T'en Ngoan. Averaging and g-convergence of differential operators. *Russian Math. Surveys*, 34(5):69–147, 1979.



# Danksagung

Meinen Dank spreche ich besonders Prof. Dr. Gabriel Wittum aus, der das Entstehen dieser Arbeit ermöglicht hat und mich in jeder Hinsicht unterstützt hat. Besonderer Dank geht auch an ihn für die vielen Anregungen und die herzliche Atmosphäre in allen Beisammensein.

Mein Dank geht auch an Prof. Dr. Willi Jäger für die Gespräche mit ihm, seine Zweitbetreuung im Rahmen des Graduiertenkollegs „Komplexe Prozesse: Modellierung, Simulation und Optimierung“ und für die Übernahme des Zweitgutachtens. Besonders danken möchte ich auch Dr. Nicolas Neuß für die vielen Diskussionen und Anregungen und das angenehme Arbeitsklima. Er hat meine Arbeit begleitet und sie mitgeprägt. Ebenso gilt mein Dank Dr. Sabine Attinger für die wertvollen Gedanken, Anregungen und Stunden der gemeinsamen Berechnungen. Dr. Nicolas Neuß danke ich auch für das Korrekturlesen von Teilen dieser Arbeit.

Besonderer Dank gilt meinen Eltern und meiner Ehefrau Simone, die mich in aller Liebe und unermüdlich unterstützt hat. Weiterer Dank geht an alle Mitarbeiter der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Gabriel Wittum, die mir in vielen kleinen Dingen geholfen haben und immer für eine gute Atmosphäre gesorgt haben. Danken möchte ich auch dem Graduiertenkolleg für die weitere Betreuung und finanzielle Unterstützung.

Außerdem geht mein Dank an alle, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Heidelberg, Mai 2003

DENN ICH WILL DEN NAMEN DES HERRN PREISEN.  
GEBT UNSERM GOTT ALLEIN DIE EHRE! 5. Mose 32,3