

Análise e Métodos Numéricos em EDPs com Múltiplas Escalas

Parte III: Métodos Numéricos para EDPs com Coeficientes oscilatórios

Alexandre L. Madureira
www.lncc.br/~alm

Laboratório Nacional de Computação Científica – LNCC
Petrópolis - RJ

ENAMA II
João Pessoa, 5/11/2008

Conteúdo

- 1 Filosofia da Modelagem Multiescala
- 2 Métodos Numéricos Modernos

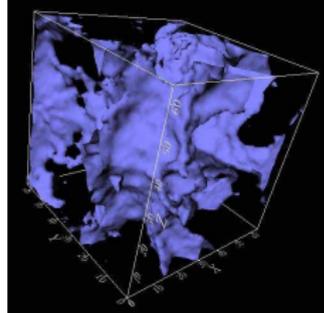
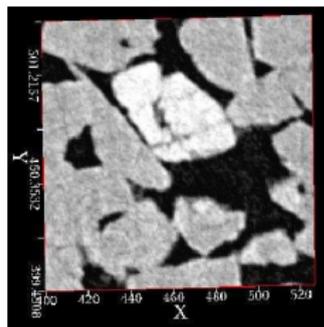
Conteúdo

1 Filosofia da Modelagem Multiescala

- Motivação: Meios Porosos
- Definição, objetivo e idéias principais

2 Métodos Numéricos Modernos

Exemplo - Escoamento em Meios Porosos



Deslocamento de petróleo em rocha contendo água

- Microtomografia com raios X para descrever a geometria (resolução de 5 microns)
- Malha computacional com mais de 100 milhões de nós

<http://ccs.chem.ucl.ac.uk/research/porousmedia.shtml>

Definição de Problemas Multiescalas

Definição (Física)

Provêm de fenômenos físicos que ocorrem em diferentes escalas temporais e/ou espaciais

Definição (Matemática)

São sequências de problemas contendo um ou mais parâmetros, cujas soluções apresentam “derivadas” espaciais e/ou temporais de magnitude crescentes quando algum dos parâmetros vai a zero

Definição (Computacional)

São problemas que demandam capacidade computacional além do disponível.

Definição de Problemas Multiescalas

Definição (Física)

Provêm de fenômenos físicos que ocorrem em diferentes escalas temporais e/ou espaciais

Definição (Matemática)

São sequências de problemas contendo um ou mais parâmetros, cujas soluções apresentam “derivadas” espaciais e/ou temporais de magnitude crescentes quando algum dos parâmetros vai a zero

Definição (Computacional)

São problemas que demandam capacidade computacional além do disponível.

Definição de Problemas Multiescalas

Definição (Física)

Provêm de fenômenos físicos que ocorrem em diferentes escalas temporais e/ou espaciais

Definição (Matemática)

São sequências de problemas contendo um ou mais parâmetros, cujas soluções apresentam “derivadas” espaciais e/ou temporais de magnitude crescentes quando algum dos parâmetros vai a zero

Definição (Computacional)

São problemas que demandam capacidade computacional além do disponível.

Objetivo da modelagem Multiescala

A modelagem multiescala destina-se a capturar os efeitos “macroscópicos” da solução. Os efeitos da microescala têm que ser considerados, mas comumente estes não têm tanta importância *per se*.

Exemplos:

- Em compósitos, não é de interesse o que ocorre com as inclusões, mas sim o comportamento macroscópicos do material (resistência a calor, condutividade, etc)
- Para a indústria, não interessa tanto “como” o óleo escoou em cada poro, mas sim o escoamento final com um todo

Objetivo da modelagem Multiescala

A modelagem multiescala destina-se a capturar os efeitos “macroscópicos” da solução. Os efeitos da microescala têm que ser considerados, mas comumente estes não têm tanta importância *per se*.

Exemplos:

- Em compósitos, não é de interesse o que ocorre com as inclusões, mas sim o comportamento macroscópicos do material (resistência a calor, condutividade, etc)
- Para a indústria, não interessa tanto “como” o óleo escoou em cada poro, mas sim o escoamento final com um todo

Objetivo da modelagem Multiescala

A modelagem multiescala destina-se a capturar os efeitos “macroscópicos” da solução. Os efeitos da microescala têm que ser considerados, mas comumente estes não têm tanta importância *per se*.

Exemplos:

- Em compósitos, não é de interesse o que ocorre com as inclusões, mas sim o comportamento macroscópicos do material (resistência a calor, condutividade, etc)
- Para a indústria, não interessa tanto “como” o óleo escoou em cada poro, mas sim o escoamento final com um todo

Técnicas Principais

A idéia básica é incorporar informações da microescala sem resolver todos os detalhes. Seja a equação diferencial

$$L^\epsilon u^\epsilon = f, \quad \text{onde } \epsilon \ll 1.$$

O seguinte esquema se aplica:

$$\begin{array}{ccc} L^\epsilon u^\epsilon = f & \xrightarrow{\text{homogenização}} & LU = F \\ \downarrow \text{disc. multiesc} & & \downarrow \text{disc. tradicional} \\ L^{h,\epsilon} u^{h,\epsilon} = f & \xrightarrow{\text{aproximadamente}} & L^h U^h = F^h \end{array}$$

Imposição: custo(disc. multiesc) \ll custo(disc. completa)

Desejo: custo(disc. multiesc) = independente de ϵ

Técnicas Principais

A idéia básica é incorporar informações da microescala sem resolver todos os detalhes. Seja a equação diferencial

$$L^\epsilon u^\epsilon = f, \quad \text{onde } \epsilon \ll 1.$$

O seguinte esquema se aplica:

$$\begin{array}{ccc} L^\epsilon u^\epsilon = f & \xrightarrow{\text{homogenização}} & LU = F \\ \downarrow \text{disc. multiesc} & & \downarrow \text{disc. tradicional} \\ L^{h,\epsilon} u^{h,\epsilon} = f & \xrightarrow{\text{aproximadamente}} & L^h U^h = F^h \end{array}$$

Imposição: $\text{custo}(\text{disc. multiesc}) \ll \text{custo}(\text{disc. completa})$

Desejo: $\text{custo}(\text{disc. multiesc}) = \text{independente de } \epsilon$

Técnicas Principais

A idéia básica é incorporar informações da microescala sem resolver todos os detalhes. Seja a equação diferencial

$$L^\epsilon u^\epsilon = f, \quad \text{onde } \epsilon \ll 1.$$

O seguinte esquema se aplica:

$$\begin{array}{ccc} L^\epsilon u^\epsilon = f & \xrightarrow{\text{homogenização}} & LU = F \\ \downarrow \text{disc. multiesc} & & \downarrow \text{disc. tradicional} \\ L^{h,\epsilon} u^{h,\epsilon} = f & \xrightarrow{\text{aproximadamente}} & L^h U^h = F^h \end{array}$$

Imposição: custo(disc. multiesc) \ll custo(disc. completa)

Desejo: custo(disc. multiesc) = independente de ϵ

Conteúdo

1 Filosofia da Modelagem Multiescala

2 Métodos Numéricos Modernos

- Elementos Finitos Multiescalas (MsFEM)
- Residual Free Bubbles (RFB)
- Método Heterogêneo Multiescalas (HMM)

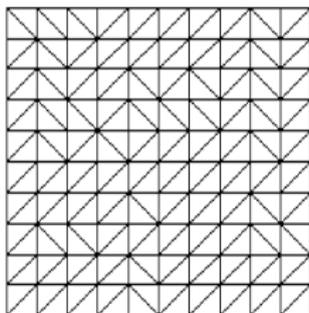
EDP com coeficiente oscilatório

Seja $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ polígono, e

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}[a^\epsilon(\mathbf{x}) \nabla u^\epsilon(\mathbf{x})] &= f(\mathbf{x}) \quad \text{em } \Omega \subset \mathbb{R}^2, \\ u^\epsilon &= 0 \quad \text{em } \partial\Omega, \end{aligned}$$

onde $\epsilon \ll 1$ “representa” as microescalas, e $a^\epsilon : \Omega \rightarrow \mathbb{R}_{\text{sim}}^{2 \times 2}$ é uniformemente positiva definida.

Seja uma partição de Ω em elementos finitos K :



Discretização

- regular
- quasi-uniforme com malha $\approx h$

Definição do MsFEM

O método de elementos finitos multiescalas [Hou, Wu, Cai, 1997, 1999] usa funções que resolvem localmente (em cada elemento) o operador.

Para o i -ésimo nó da malha e todo elemento K , seja ψ_i tal que

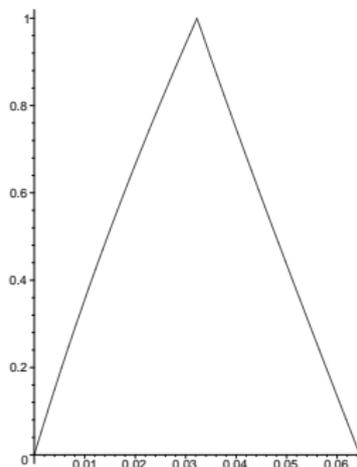
$$\begin{aligned} -\operatorname{div}[\mathbf{a}^\epsilon \nabla \psi_i] &= 0 \quad \text{em } K, \\ \psi_i|_{\partial K} &\text{ linear,} \quad \psi_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{ij} \quad \text{em todo nó } \mathbf{x}_j \end{aligned}$$

Definimos o espaço de elementos finitos multiescala

$$V_0^{h,\epsilon} = \operatorname{span} \{\psi_1, \dots, \psi_N\}.$$

Funções de base em uma dimensão

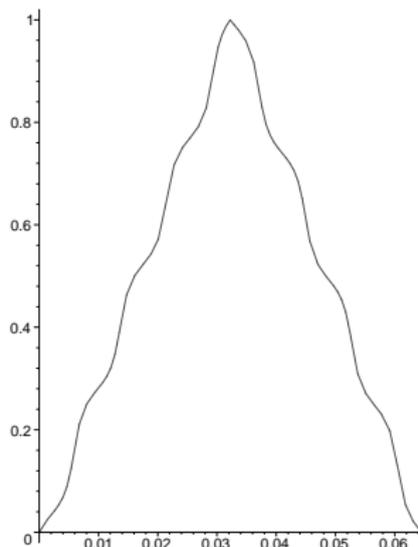
Uma função de base multiescla para $\epsilon = 1/4$ e $h = 1/32$:



Parece-se muito com a função de base linear por partes. Neste caso, $h \ll \epsilon$ e a função de base tradicional funciona bem.

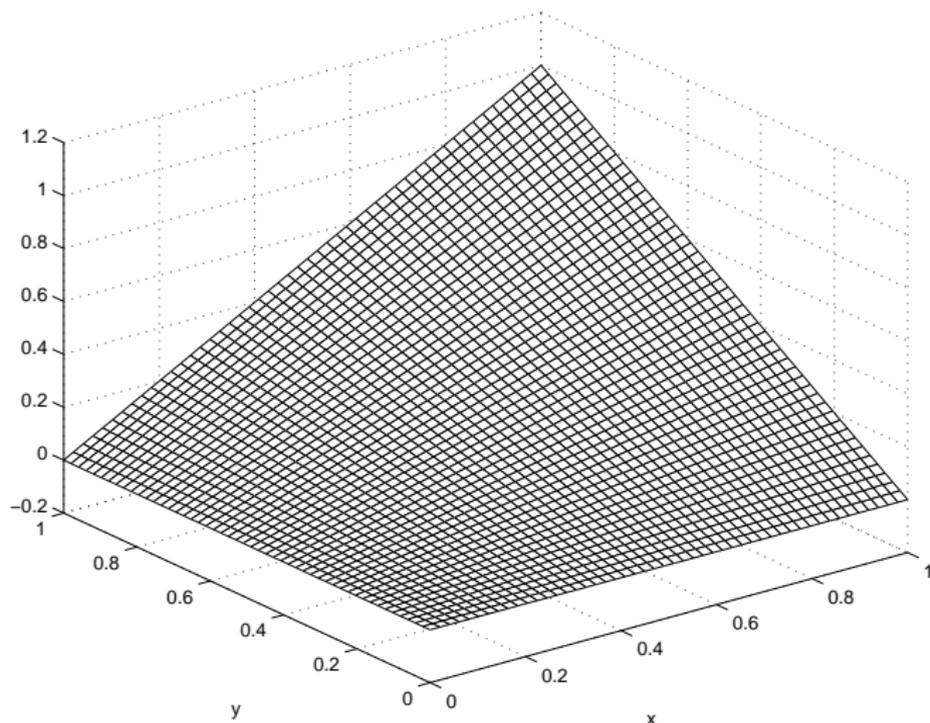
Funções de base em uma dimensão

Quando $\epsilon \ll h$, a função de base tem caráter oscilatório, como para $\epsilon = 1/128$ e $h = 1/32$:



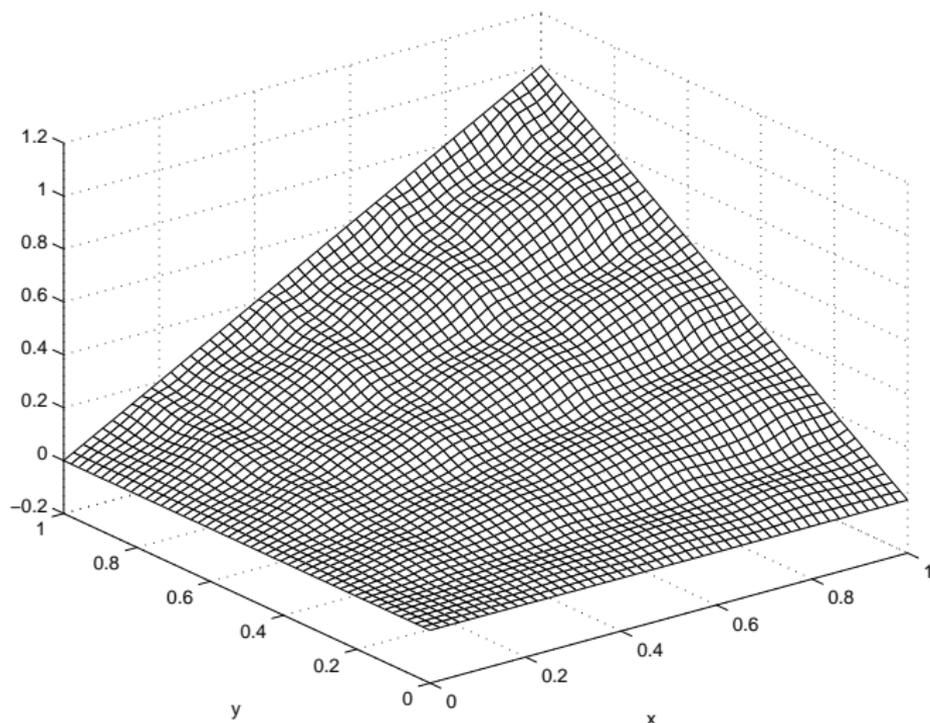
Funções de base em duas dimensões

Para $h < \epsilon$, a função de base multiescala é próxima da bilinear:

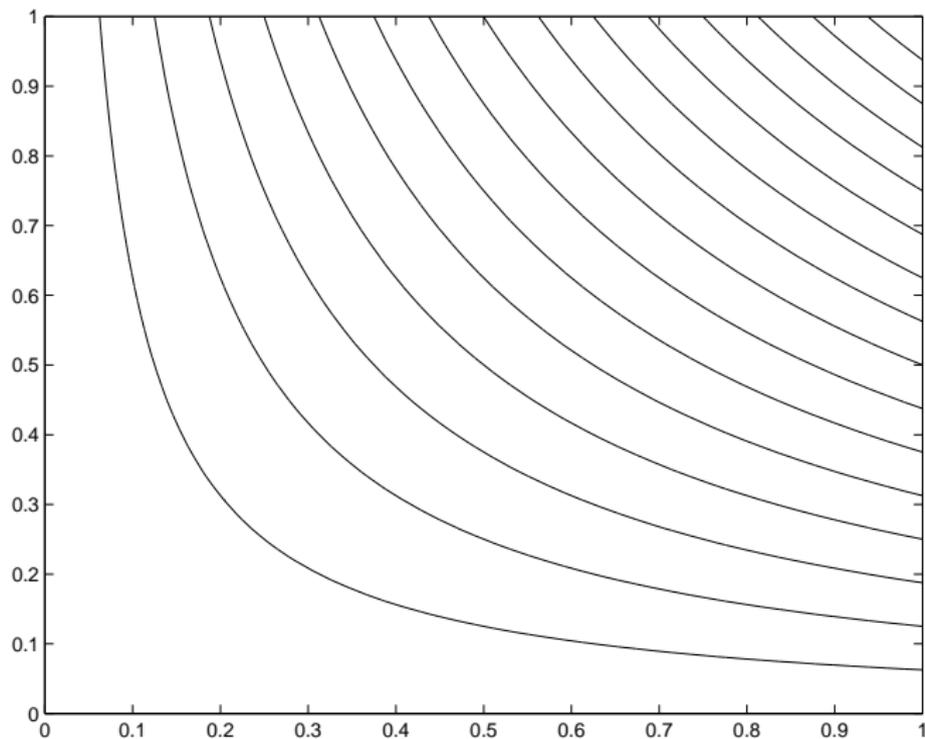


Funções de base em duas dimensões

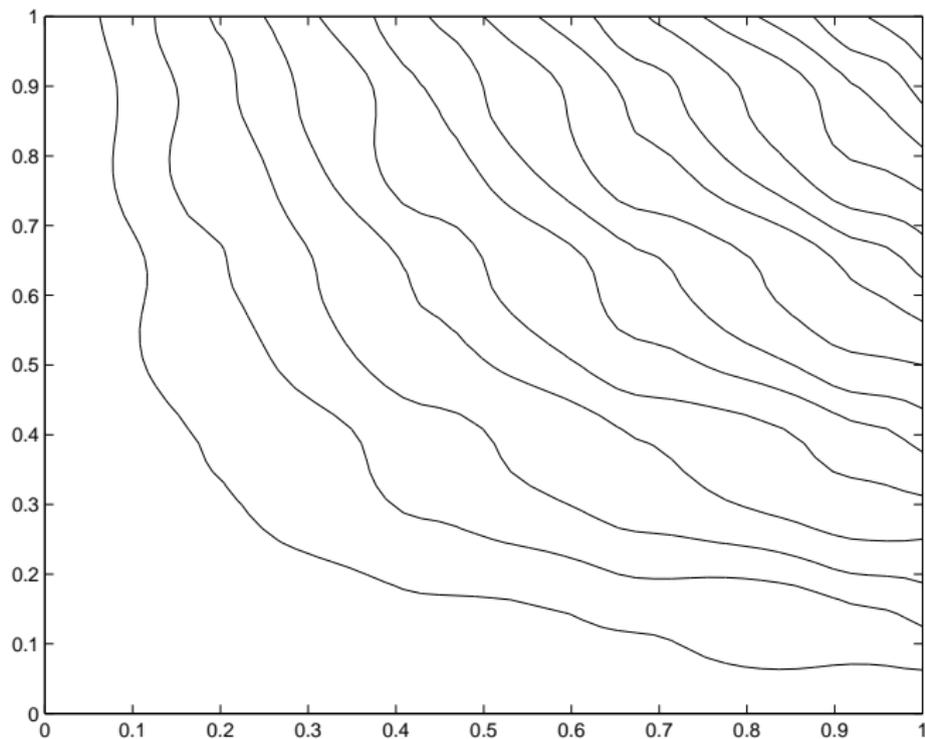
E a função de base multiescala para $\epsilon/h = 1/64$:



Curvas de nível para a função multiescala quando $h < \epsilon$:



Curvas de nível para a função multiescala com $\epsilon \ll h$:



Definição do MsFEM

Usando o espaço de elementos finitos multiescala

$$V_0^{h,\epsilon} = \text{span} \{ \psi_1, \dots, \psi_N \},$$

a solução $u^{h,\epsilon} \in V_0^{h,\epsilon}$ é tal que para todo $v^{h,\epsilon} \in V_0^{h,\epsilon}$.

$$\int_{\Omega} \left(a^\epsilon(\mathbf{x}) \nabla u^{h,\epsilon}(\mathbf{x}) \nabla v^{h,\epsilon} \right) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) v^{h,\epsilon}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

Uma estimativa de erro nos dá (para soluções regulares)

$$\|u^\epsilon - u^{h,\epsilon}\|_{H^1(0,1)} \leq c(f) \min\{h/\epsilon, h + \epsilon + (\epsilon/h)^{1/2}\}.$$

Note que o método apresenta problemas para $\epsilon \approx h$.

Definição do MsFEM

Usando o espaço de elementos finitos multiescala

$$V_0^{h,\epsilon} = \text{span} \{ \psi_1, \dots, \psi_N \},$$

a solução $u^{h,\epsilon} \in V_0^{h,\epsilon}$ é tal que para todo $v^{h,\epsilon} \in V_0^{h,\epsilon}$.

$$\int_{\Omega} \left(a^\epsilon(\mathbf{x}) \nabla u^{h,\epsilon}(\mathbf{x}) \nabla v^{h,\epsilon} \right) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) v^{h,\epsilon}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

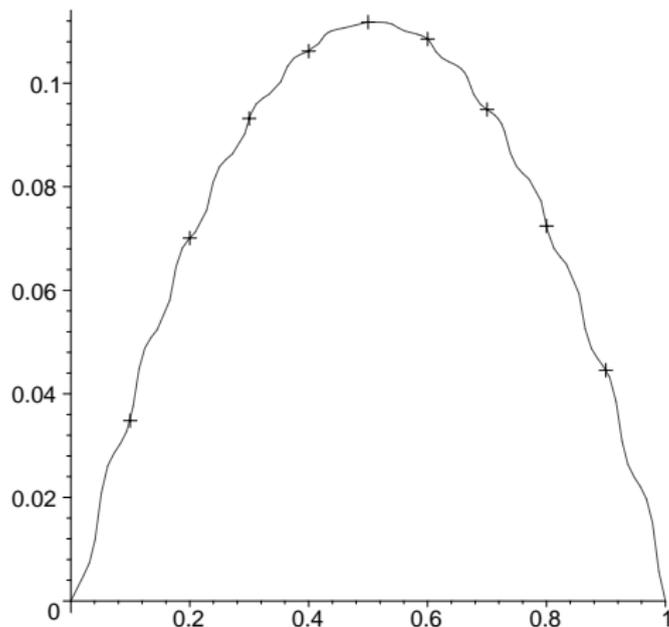
Uma estimativa de erro nos dá (para soluções regulares)

$$\|u^\epsilon - u^{h,\epsilon}\|_{H^1(0,1)} \leq c(f) \min\{h/\epsilon, h + \epsilon + (\epsilon/h)^{1/2}\}.$$

Note que o método apresenta problemas para $\epsilon \approx h$.

Teste numérico

Para $\epsilon = 1/16$ e $h = 1/10$ obtemos:



— Solução Exata
+ + + + + Multiscale finite element solution

Alguns Comentários

- Em uma dimensão, a solução multiescala é nodalmente exata. Em dimensões maiores isto não ocorre
- Impor condições de contorno lineares nas arestas dos elementos introduz erros (ressonância) quando $h \sim \epsilon$
- O custo do método ainda é alto, pois problemas locais têm que ser resolvidos (computação paralela)

Alguns Comentários

- Em uma dimensão, a solução multiescala é nodalmente exata. Em dimensões maiores isto não ocorre
- Impor condições de contorno lineares nas arestas dos elementos introduz erros (ressonância) quando $h \sim \epsilon$
- O custo do método ainda é alto, pois problemas locais têm que ser resolvidos (computação paralela)

Alguns Comentários

- Em uma dimensão, a solução multiescala é nodalmente exata. Em dimensões maiores isto não ocorre
- Impor condições de contorno lineares nas arestas dos elementos introduz erros (ressonância) quando $h \sim \epsilon$
- O custo do método ainda é alto, pois problemas locais têm que ser resolvidos (computação paralela)

Alguns Comentários

- Em uma dimensão, a solução multiescala é nodalmente exata. Em dimensões maiores isto não ocorre
- Impor condições de contorno lineares nas arestas dos elementos introduz erros (ressonância) quando $h \sim \epsilon$
- O custo do método ainda é alto, pois problemas locais têm que ser resolvidos (computação paralela)

Alguns Comentários

- Em uma dimensão, a solução multiescala é nodalmente exata. Em dimensões maiores isto não ocorre
- Impor condições de contorno lineares nas arestas dos elementos introduz erros (ressonância) quando $h \sim \epsilon$
- O custo do método ainda é alto, pois problemas locais têm que ser resolvidos (computação paralela)

Residual Free Bubbles (RFB)

Em geral, para problemas com múltiplas escalas, é possível decompor a solução como

$$u_{\text{solução}} = u_{\text{macro}} + u_{\text{micro}}$$

No método RFB, a decomposição é

$$u_{\text{RFB}} = u_{\text{linear}} + u_b$$

onde u_{linear} é a parte linear por partes, e a “bolha” u_b captura informações sobre a microescala.

Residual Free Bubbles (RFB)

Seja Ω um polígono, $\epsilon > 0$ representa a pequena escala,

$$\begin{aligned}L^\epsilon u &= f \quad \text{em } \Omega, \\u &= 0 \quad \text{em } \partial\Omega,\end{aligned}$$

e sua formulação fraca: achar $u \in H_0^1(\Omega)$ tal que

$$a(u, v) = (f, v) \quad \text{para todo } v \in H_0^1(\Omega).$$

e $(f, v) = \int_{\Omega} f v \, d\mathbf{x}$. Tomamos como exemplo

$$L^\epsilon u = -\operatorname{div}(a^\epsilon(\mathbf{x}) \nabla u), \quad a(u, v) = \int_{\Omega} (a^\epsilon(\mathbf{x}) \nabla u) \cdot \nabla v \, d\mathbf{x}.$$

Residual Free Bubbles (RFB)

Considere a partição de Ω em elementos finitos, e o espaço *enriquecido* associado

$$V_h := V_1 \oplus B,$$

onde

- $V_1 \subset H_0^1(\Omega)$ é o espaço das funções lineares por partes, que só “enxerga” as propriedades “macro”
- $B = \{v \in H_0^1(\Omega) : v|_K \in H_0^1(K) \text{ para todo elemento } K\}$ é o espaço das “bolhas”, funções que se anulam no bordo dos elementos, e que capturando o efeito das pequenas escalas

O método consiste em achar $u_h \in V_h = V_1 \oplus B$ onde

$$a(u_h, v_h) = (f, v_h) \quad \text{para todo } v_h \in V_h.$$

Residual Free Bubbles (RFB)

Escrevendo $u_h = u_1 + u_b$ temos

$$\begin{aligned} a(u_1 + u_b, v_1) &= (f, v_1) \quad \text{para todo } v_1 \in V_1, \\ a(u_1 + u_b, v_b) &= (f, v_b) \quad \text{para todo } v_b \in H_0^1(K). \end{aligned}$$

Pela segunda equação, a bolha é solução do problema local

$$\begin{aligned} L^\epsilon u_b &= -L^\epsilon u_1 + f \quad \text{em } K, \\ u_b &= 0 \quad \text{em } \partial K. \end{aligned}$$

Escrevendo $u_b = T(-L^\epsilon u_1 + f)$ temos para todo $v_1 \in V_1$

$$a((I - TL^\epsilon)u_1, v_1) = (f, v_1) - a(Tf, v_1)$$

Alguns Comentários

- Uma forma de se interpretar a formulação acima é como um “upscaling” numérico
- Note que a formulação final depende somente das funções de base *lineares*.
- O método guarda forte similaridades com o MsFEM. Em particular o custo computacional e as taxas de convergências são os mesmos

Alguns Comentários

- Uma forma de se interpretar a formulação acima é como um “upscaling” numérico
- Note que a formulação final depende somente das funções de base *lineares*.
- O método guarda forte similaridades com o MsFEM. Em particular o custo computacional e as taxas de convergências são os mesmos

Alguns Comentários

- Uma forma de se interpretar a formulação acima é como um “upscaling” numérico
- Note que a formulação final depende somente das funções de base *lineares*.
- O método guarda forte similaridades com o MsFEM. Em particular o custo computacional e as taxas de convergências são os mesmos

Alguns Comentários

- Uma forma de se interpretar a formulação acima é como um “upscaling” numérico
- Note que a formulação final depende somente das funções de base *lineares*.
- O método guarda forte similaridades com o MsFEM. Em particular o custo computacional e as taxas de convergências são os mesmos

Método Heterogêneo Multiescalas (HMM)

Esta proposta é estudada por E, Engquist, Huang, Ming, Li, Vanden-Eijnden, Zhang, Yue, a partir de 2003.

Damos uma breve descrição do método considerando novamente o problema

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}[a^\epsilon(\mathbf{x}) \nabla u^\epsilon(\mathbf{x})] &= f(\mathbf{x}) \quad \text{em } \Omega \subset \mathbb{R}^2, \\ u^\epsilon &= 0 \quad \text{em } \partial\Omega. \end{aligned}$$

Seja V^1 o espaço das funções de elementos finitos contínuas e lineares por partes.

Método Heterogêneo Multiescalas (HMM)

Se existir matriz efetiva A que incorpore os efeitos das microescalas, a forma bilinear

$$\int_{\Omega} (A \nabla V) \cdot \nabla W \, dx \quad \text{para } V, W \in V^1,$$

seria boa para aproximar a solução original.

Para um elemento K , considere a quadratura

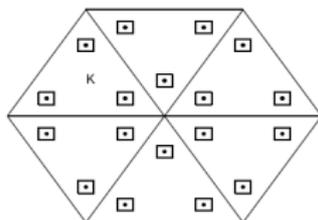
$$\int_K p(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \approx \sum_{l=1}^L w_l p(\mathbf{x}_l).$$

Logo

$$\int_K (A \nabla V) \cdot \nabla W \, dx \approx \sum_{l=1}^L w_l [(A \nabla V) \cdot \nabla W](\mathbf{x}_l).$$

Método Heterogêneo Multiescalas (HMM)

Aproximamos $[(A \nabla V) \cdot \nabla W](\mathbf{x}_I)$ da seguinte forma. Considere $I_\delta(\mathbf{x}_I)$ o quadrado de tamanho δ centrado em \mathbf{x}_I



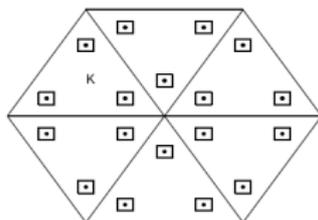
Tome então $[(A \nabla V) \cdot \nabla W](\mathbf{x}_I) \approx \frac{1}{\delta} \int_{I_\delta(\mathbf{x}_I)} [a^\epsilon(\mathbf{x}) \nabla v_I(\mathbf{x})] \cdot \nabla w_I(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$, onde dado $V \in V^1$ ache v_I tal que

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}[a^\epsilon(\mathbf{x}) \nabla v_I(\mathbf{x})] &= 0 \quad \text{em } I_\delta(\mathbf{x}_I), \\ v_I &= V \quad \text{em } \partial I_\delta(\mathbf{x}_I). \end{aligned}$$

No caso periódico: $\|u_{\text{homog}} - u_{\text{HMM}}\|_{H^1(\Omega)} \leq c(h + \epsilon)$

Método Heterogêneo Multiescalas (HMM)

Aproximamos $[(A \nabla V) \cdot \nabla W](\mathbf{x}_I)$ da seguinte forma. Considere $I_\delta(\mathbf{x}_I)$ o quadrado de tamanho δ centrado em \mathbf{x}_I



Tome então $[(A \nabla V) \cdot \nabla W](\mathbf{x}_I) \approx \frac{1}{\delta} \int_{I_\delta(\mathbf{x}_I)} [a^\epsilon(\mathbf{x}) \nabla v_I(\mathbf{x})] \cdot \nabla w_I(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$, onde dado $V \in V^1$ ache v_I tal que

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}[a^\epsilon(\mathbf{x}) \nabla v_I(\mathbf{x})] &= 0 \quad \text{em } I_\delta(\mathbf{x}_I), \\ v_I &= V \quad \text{em } \partial I_\delta(\mathbf{x}_I). \end{aligned}$$

No caso periódico: $\|u_{\text{homog}} - u_{\text{HMM}}\|_{H^1(\Omega)} \leq c(h + \epsilon)$

Alguns Comentários

- A escolha de δ depende do problema em questão.
- Para problemas periódicos, δ pode ser o período, e o custo do método torna-se independente do tamanho da microescala.
- Desde 2003, o HMM tem sido aplicado num número impressionante de problemas (pelo menos 25 artigos), principalmente por um pequeno grupo de pesquisadores centrados em Princeton.

Alguns Comentários

- A escolha de δ depende do problema em questão.
- Para problemas periódicos, δ pode ser o período, e o custo do método torna-se independente do tamanho da microescala.
- Desde 2003, o HMM tem sido aplicado num número impressionante de problemas (pelo menos 25 artigos), principalmente por um pequeno grupo de pesquisadores centrados em Princeton.

Alguns Comentários

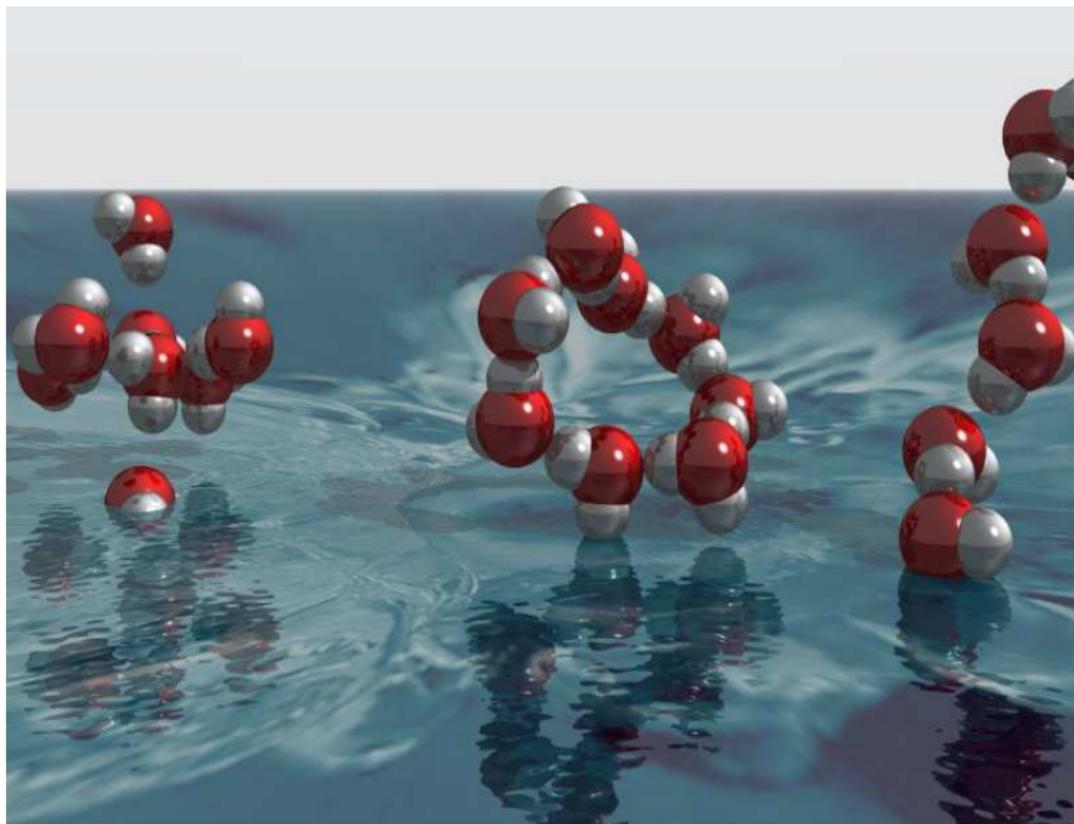
- A escolha de δ depende do problema em questão.
- Para problemas periódicos, δ pode ser o período, e o custo do método torna-se independente do tamanho da microescala.
- Desde 2003, o HMM tem sido aplicado num número impressionante de problemas (pelo menos 25 artigos), principalmente por um pequeno grupo de pesquisadores centrados em Princeton.

Bibliografia I

-  W. E. B. Engquist, X. Li, W. Ren, E. Vanden-Eijnden,
The Heterogeneous Multiscale Method: A Review,
<http://www.math.princeton.edu/multiscale/>
-  T. Y. Hou,
Numerical approximations to multiscale solutions in partial differential equations,
Frontiers in numerical analysis, 241–301, Springer (2002)

FIM

Obrigado!



The Structure of the First Coordination Shell in Liquid Water

Illustration by Hirohito Ogasawara