

České vysoké učení technické v Praze
Fakulta stavební
Katedra mechaniky



DIPLOMOVÁ PRÁCE

Efektivní metody pro propagování nejistot v
popisu proudění podzemní vody

Vedoucí práce: Ing. Jan Sýkora, Ph.D.

Praha 2014

Jan Havelka

Název práce: Efektivní metody pro propagování nejistot v popisu proudění podzemní vody
Autor: Jan Havelka
Katedra: Katedra mechaniky
Vedoucí práce: Ing. Jan Sýkora, Ph.D.

Abstrakt

Numerické modelování je stále rozsáhlejší přístup k řešení inženýrských úloh. Pokrok výpočetní techniky umožňuje řešit i mnohem složitější modely a získat tak více informací o chování systému v určitých podmínkách. Jednou z takovýchto úloh může být rozšíření modelu o náhodnost, která může mít například původ v nedostatku nebo nepřesnosti měření vstupní veličiny. Cílem předložené práce je algoritmické zpracování a porovnání dnes používaných metod pro řešení parciálních diferenciálních rovnic s nejistými vstupními parametry v popisu proudění podzemní vody.

Klíčová slova

Propagování nejistot, náhodná pole, Galerkinova metoda, kolokační metoda, metoda Monte Carlo, proudění podzemní vody, metoda konečných prvků, Matlab.

Title: Efficient methods for propagation of uncertainty in
description of groundwater flow
Author: Jan Havelka
Department: Department of Mechanics
Supervisor: Ing. Jan Sýkora, Ph.D.

Abstract

Numerical simulations have become popular approach for solving engineering problems. The progress of computer technology then enables to solve more complex models and consequently to get more information about system behavior. Such a complex problem is here represented by the extension of deterministic material model by uncertain inputs, which may take origin in the lack or inaccuracy of the measurements. Therefore the aim of this work is to create an algorithms and to compare currently used methods for solving partial differential equations with uncertain input parameters in the description of groundwater flow.

Keywords

Uncertainty propagation, random field, stochastic Galerkin method, stochastic collocation method, Monte Carlo method, groundwater flow, finite element method, Matlab.

Čestné prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci napsal samostatně, pouze za odborného vedení vedoucí práce Ing. Janem Sýkorou, Ph.D. Dále prohlašuji, že veškeré podklady, ze kterých jsem čerpal, jsou uvedeny v seznamu literatury.

Nemám závažný důvod proti užití tohoto školního díla ve smyslu §60 Zákona č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon).

V Praze dne 15. 5. 2014

Jan Havelka

Poděkování

Na tomto místě bych rád poděkoval svému vedoucímu, Ing. Janu Sýkorovi, Ph.D., za motivující přístup, nesmírnou trpělivost, vlastní čas strávený nad konzultacemi, možnostmi využití pracovních prostor a sehnání prostředků, bez kterých by tato práce nemohla vzniknout.

Tato práce by se neobešla také bez uvedení do problematiky v podání doc. RNDr. Ivany Pultarové, Ph.D., která ve velmi krátkém časovém úseku energickým přístupem na úkor svého času byla schopna předat teoretický základ nematematické komunitě představované autorovou osobou.

Neopomenutelné zásluhy mají Ing. Anna Kučerová, Ph.D., Ing. Jan Vořel, Ph.D. a další členové katedry mechaniky za cenné podněty a rady pro řešení nestandardních problémů, vždy obětavý přístup, vytvoření příjemného prostředí a společně strávený čas.

Vlastní část poděkování patří Ing. Martinu Doškářovi za přátelství a spolupráci provázenou celým společným studiem, množstvím podnětů, výměnu informací, algoritmů a neutuchající nadšení inspirující k další tvorbě.

V neposlední řadě bych rád poděkoval své rodině a přátelům za podporu během studia.

Tato diplomová práce vznikla za podpory projektu Grantové agentury ČR č. P105/12/1146 (Metody paralelizace inženýrských úloh využívající cenově dostupné technologie) a P105/12/0331 (Efektivní řešiče transportních procesů v saturovaném a nesaturovaném porézním prostředí).

Obsah

1 Úvod	1
2 Proudění podzemní vody	4
2.1 Darcyho zákon	5
2.1.1 Nelinearita hydraulické vodivosti	7
2.2 Rovnice kontinuity	9
2.3 Okrajové a počáteční podmínky	11
3 Pravděpodobnost	12
3.1 Základní vztahy pravděpodobnosti	13
3.2 Charakteristiky náhodné veličiny	15
3.3 Náhodná pole	16
4 Karhunen-Loève rozvoj	17
4.1 Karhunen-Loève módy	18
4.2 Chyba Karhunen-Loève rozvoje	21
4.2.1 Chyba aproximované veličiny	23
4.2.2 Ostatní chyby	24
5 Polynomiální Chaos	26
5.1 Aproximace funkcí	29
6 Řešení úlohy	30
6.1 Metoda Monte Carlo	30
6.2 Galerkinova metoda	32
6.3 Stochastická kolokace	35
6.4 Vyhodnocení základní statistiky	36
7 Porovnání metod	40
7.1 Výpočetní nároky	48
7.2 Shrnutí	51
7.2.1 Metoda Monte Carlo	51
7.2.2 Galerkinova metoda	52
8 Závěr	54
Literatura	55
Seznam obrázků	59
Seznam tabulek	60

A	Hermitovy polynomy	a
B	Implementace MKP	f
B.1	Matice tuhosti	g
B.2	Gramova matice	h
C	Použité řešiče lineárních soustav	i

1 Úvod

Svět se změnil z analogového na digitální, z klasické kontinuální do diskrétní matematiky [19, 17] a numerické simulace se během posledních let staly běžnou praxí a neodmyslitelnou částí při řešení inženýrských úloh. Trvající trend růstu výkonu počítačů umožňuje najít přesnější řešení stále komplexnějších systémů založených na matematických modelech.

Tyto modely lze přibližně rozdělit do dvou kategorií, které se vzájemně prolínají. Prvním a nejspíše nejznámějším druhem jsou modely, které se snaží nějakým způsobem předpovědět budoucnost. Do této kategorie patří například model předpovědi počasí [6, 30, 31], který ze znalosti aktuální teploty a tlaku určuje vývoj těchto veličin v čase. Dalším druhem prognostického modelu může být obchodování na burze a řešení Black-Scholes rovnice [3, 24]. Zmíněné modely jsou velmi obtížně řešitelné a obsahují velké množství nejistot, které vyplývají z obtížně sestavitelného popisu základního systému.

Dalším druhem jsou modely vytvořené za účelem omezení počtu experimentů z důvodu vysokých nákladů na jejich realizaci. Ty slouží například v leteckém průmyslu pro návrh tvaru křídla, trupu nebo motorů a posouzení jejich efektivity [12, 21, 18]. Prakticky se vyzkouší jen malá část výsledných návrhů. Do této kategorie tedy patří i veškeré optimalizační algoritmy hledající například ideální geometrii, rozložení hmotnosti nebo materiálové vlastnosti za podmínek, kterým model vystavujeme [36, 12, 21].

Zejména druhá kategorie modelů je z dnešního pohledu velmi žádaná a více než kdy jindy se klade důraz na efektivitu návrhu, šetření materiálem a celkově snížení množství spotřebované energie. Tento vývoj jde ruku v ruce s vývojem na poli materiálů, automatizací výrobních procesů, ve kterých hraje lidský faktor stále menší roli, atp..

Matematické modely je zároveň nutné chápat pouze jako idealizace, jejichž cílem je zapsání zákonů přírody v matematickém jazyce, následné postavení modelu do neznámé situace a predikce chování reality. Může být velmi obtížné zachytit všechny vlivy a parametry řídící daný systém ať již z důvodu nedostatečné znalosti základního systému, složitosti řešení úplného modelu nebo nejistotami vstupních hodnot.

Porovnáním chování modelu oproti realitě tedy budeme vždy následně pozorovat odchylky způsobené idealizacemi jak na úrovni modelu, jeho řešení, tak na již zmíněných nejistotách vstupních parametrů pocházejících z reálných měření v podobě geometrie, fyzikálních konstant, vlastností materiálů nebo působení okolního prostředí. Odchylkou na úrovni modelu je myšlena taková chyba, která i za přesného řešení modelu se vstupními daty vystihujícími okolní prostředí vede na výrazně odlišné výsledky, než jaké ukazuje reálné

pozorování. Tato chyba může být způsobena například překročením mezí, za kterých byl model vytvořen nebo obecně nesprávně zavedenými předpoklady. Z hlediska numerického řešení výsledné úlohy může navíc hrát významnou roli diskretizační chyba, která se vývojem na poli výpočetní techniky stává zanedbatelnou, což dává možnost věnovat se obohacení modelu o další vlivy.

Důležitějším faktorem pro posouzení celkové výstižnosti modelu je ale nalezení určité rovnováhy možných nepřesností, než neuvážená snaha odstranit jediný zdroj chyb, což ve většině případů vede na neúměrné zvýšení výpočetních nároků za nepatrného přiblížení se k přesnému řešení. Je tedy nutné se nejprve zamyslet jaký model řešíme, jakou přesnost očekáváme a následně se rozhodnout jaké vlivy je vhodné zanedbat a jakými se naopak zabývat.

Náplní této práce je kombinace modelu pro makroskopický popis proudění podzemní vody s prostorovou nejistotou materiálové vlastnosti, vyjadřující jak snadno prostředí propouští vodu. Předpokládá se tedy, že nejistota materiálového parametru dosahuje takových hodnot, že má v reálných podmínkách zanedbatelný vliv na odezvu systému. Zejména v prostředí proudění podzemní vody je toto téma aktuální z důvodu obtížnosti odhadu vlastností podloží a experimentální vrty jsou zároveň velmi drahé. Úspěšná prognóza chování takového modelu je založena na znalosti vstupní statistiky tohoto parametru a obecné znalosti prostorové distribuce této veličiny.

Tato myšlenka je motivována analýzou rizik inženýrských systémů. Možná kritéria pro vyhodnocení různých poruch protipovodňových opatření jsou uvedeny například v [8]. Porucha zemní hráze může nastat například vnitřní erozí v tělese nebo samotném podloží důsledkem zvýšené rychlosti proudění, která má při překročení kritických hodnot za následek odplavování jemných zrn a oslabování skeletu. Velmi zajímavá může být analýza časově závislých procesů, kdy lze například studovat vznik poruchy vlivem kolísání hladiny a doba odvodnění tělesa vyjádřena pravděpodobností. V opačném případě pak může jít o odhad doby, za kterou dojde k průsaku podzemních vod na terén chráněného území [9]. Mimo poruch u protipovodňových opatření může být také zkoumána pravděpodobnost výskytu a polohy výronového bodu, přítok do drenů a podobně.

V neposlední řadě je cílem této práce poskytnout představu o matematickém popisu proudění podzemní vody, popsat význam jednotlivých veličin a vztahů mezi nimi, stejně jako smysl a popis metod vyvinutých za účelem řešení takovýchto úloh. Důraz byl rovněž kladen na srozumitelnost textu, než na obecnost a úplnost, tj. vynechání takových detailů, aby byla hlavní myšlenka pochopena, ale zároveň ukázání celého postupu řešení s konkrétními výsledky. Čtenář s hlubším zájmem o jednotlivé části práce je odkázán na odbornou literaturu v dané kapitole.

Posloupnost a náplň jednotlivých kapitol je následující: Druhá kapitola se věnuje odvození základních řídicích rovnic pro popis proudění podzemní vody. Odvození jednotlivých částí je provázeno popisem zjednodušujících předpokladů s jejich důsledky a stručným popisem významu použitých matematických operací. Celkově dává náhled na možné omezení, ve kterých se v rámci modelu můžeme pohybovat, tj. za jakých podmínek byl model vytvořen a v jakých podmínkách je tedy reprezentativní. Velmi stručně jsou následně popsány použité okrajové podmínky.

Třetí kapitola zavádí základní vztahy teorie pravděpodobnosti. Základním smyslem této části je poskytnutí celkového přehledu o významu a značení jednotlivých operací a pojmů, které budou použity v dalších kapitolách.

Obsahem čtvrté kapitoly je představení způsobu modelování náhodného pole jako funkce nezávislých náhodných proměnných. Zároveň se zabývá chybou způsobenou diskretizací ve stochastickém prostoru v rámci aproximovaného materiálového parametru.

Pátá kapitola poskytuje úvod do polynomiálního chaosu, tj. bázi pro aproximaci odezvy stochastické části. Po stručném předvedení základních vlastností je část kapitoly věnována způsobu aproximace známých funkcí.

Šestá kapitola je věnována řešení tohoto druhu úloh metodou konečných prvků. Přesněji řečeno je prostorová část úlohy vždy zpracována Galerkinovou metodou a pro řešení stochastické části jsou celkem předvedeny tři přístupy, kterými jsou stochastická Galerkinova metoda, stochastická kolokace a metoda Monte Carlo. Výsledky jednotlivých metod jsou koeficienty báze funkcí, případně jednotlivé simulace a odezva modelu v předem definovaných uzlech. V závěru této kapitoly jsou proto odvozeny vztahy pro transformaci těchto koeficientů do relevantních statistických veličin s fyzikálním významem.

V sedmé kapitole se porovnávají dva hlavní přístupy pro řešení rozšířených rovnic, tj. standardní metoda Monte Carlo a stochastická Galerkinova metoda. Celkem jsou ukázány dva příklady a porovnání obou metod na úrovni přesnosti, časových a systémových nároků. Pro metodu Monte Carlo je znázorněna efektivita implementace paralelní verze. Následuje diskuse nad oběma přístupy, zhodnocení hlavních výhod a nevýhod a návrh úprav pro zrychlení případně možnostmi navýšení výpočetních kapacit.

2 Proudění podzemní vody

Simulování proudění podzemní vody je založeno na vytvoření a následném řešení matematického modelu, nejčastěji reprezentovaného diferenciálními rovnicemi s okrajovými a počátečními podmínkami. Tyto rovnice jsou odvozeny z fyzikálních principů, jimiž se řídí proces, který chceme modelovat a jejich základním smyslem je „zakódování“ určité zákonitosti na elementárním dílku. V případě proudění podzemní vody jsou relevantními fyzikálními principy Darcyho zákon a rovnice kontinuity. Kombinací všech matematických vztahů popisujících jednotlivé principy je možné získat obecnou rovnici popisující proudění podzemní vody, v tomto případě parciální diferenciální rovnici (PDR) druhého řádu.

Následně se používá několik variant této rovnice v závislosti na tom, zda řešíme dvojrozměrnou nebo trojrozměrnou úlohu, jestli je uvažovaný materiál izotropní nebo anizotropní nebo jestli bude třeba celou úlohu modelovat jako časově závislou (neustálenou, nestacionární) nebo časově nezávislou (ustálenou, stacionární). V následujících kapitolách nejprve odvodíme nejobecnější rovnici proudění (neustálené proudění stlačitelné kapaliny v heterogenním anizotropním prostředí) a dále zavedeme řadu zjednodušujících předpokladů (ustálené proudění nestlačitelné kapaliny v homogenním izotropním prostředí)¹, které vyjadřují povahu systému a vlastnosti, které jsou rozhodující pro zkoumaný problém. Tyto předpoklady zjednoduší řešitelnost úlohy za přijatelné újmou na přesnosti řešení.

Autor vnímá jako velmi důležité pochopit odvození, vznik a přijetí všech zjednodušujících předpokladů základního problému, jakožto interpretaci fyzikálních a matematických (geometrických) významů. V návaznosti na kapitolu 6.2, která pojednává o stochastickém rozšíření, se bude přistupovat k modelu proudění jako k samostatnému objektu bez omezení k zavedeným předpokladům. Řešení rozšířených rovnic pak může velice jednoduše vést k porušení základních předpokladů a tedy k nereálným výsledkům². Je tedy důležité vědět o omezeních, za kterých vytváříme předpoklady a ve kterých se zároveň můžeme bezpečně pohybovat. To je také důvod, proč je věnována této problematice zvýšená pozornost.

¹Je rovněž důležité chápat jako první zjednodušující prvek oproti realitě přijetí Darcyho zákona, jelikož jde o empirický vztah a je odvozen pro makroskopickou úroveň a uvažuje pouze lineární závislost rychlosti proudění na hydraulickém gradientu.

²Například lineární závislost hydraulického gradientu na hydraulické vodivosti je s rostoucí rychlostí proudění pozvolna porušována. Kritériem posouzení platnosti Darcyho zákona v tomto případě bývá kontrola Reynoldsova čísla, které rozlišuje laminární a turbulentní proudění. Obvykle $Re < 1$ je laminární proudění a Darcyho zákon lze použít. Experimentální testy prokázaly, že pro $Re < 10$ může být stále rychlost proudění Darcyovská. Pro $Re > 10$ není Darcyho zákon platný [32].

2.1 Darcyho zákon

V roce 1856 francouzský inženýr Henry Darcy pracoval na projektu zahrnující použití písku na filtraci vody. Prováděl laboratorní pokusy a zkoumal faktory, kterými se řídí rychlost proudění vody pískem. Výsledky jeho pokusů definují základní empirické principy makroskopického proudění podzemních vod, které jsou začleněné v rovnici nyní známé jako Darcyho zákon [43].

Pokus se sestává ze sloupce naplněného pískem. Dva manometry měří *hydraulickou výšku* u ve dvou bodech, kterou lze rozložit podle (rov. 2.2) na výšku geodetickou u_g a tlakovou u_p ³. Vzorek je plně nasycený a je v něm vynuceno ustálené proudění. Průtok Q je pak přímo úměrný rozdílu hydraulických výšek mezi manometry Δu , inverzně úměrný vzdálenosti mezi manometry Δl a přímo úměrný průtočné ploše A .

$$Q \propto \Delta u \quad Q \propto \frac{1}{\Delta l} \quad Q \propto A \quad (2.1)$$

$$u = u_p + u_g \quad (2.2)$$

Kombinací těchto pozorování a zapsáním rovnice v diferenciální podobě získáme Darcyho zákon pro jednorozměrné proudění [43]

$$Q = -k_l A \frac{du}{dl}, \quad (2.3)$$

kde A [m²] je *průtočná plocha*, $k_l \in \langle 0, \infty \rangle$ [m/s] je *hydraulická vodivost*⁴ ve směru l . Je to materiálový parametr, který je měřítkem, jak snadno prostředí propouští vodu. Vyšší hodnoty k_l snáze propouštějí vodu a naopak. Q [m³/s] je celkový průtok plochou A ve směru l ⁵, $\frac{du}{dl}$ [–] je *hydraulický gradient* a představuje míru, s jakou se mění hydraulická výška ve směru l .

³Z definice je hydraulická výška u výška vodního sloupce od libovolně zvolené srovnávací roviny. Tlaková výška je část hydraulické výšky opravená o polohovou výšku a je tedy invariantní vzhledem k poloze souřadného systému. Zároveň pokud platí $u_p > 0$, nacházíme se v bodě s přetlakem. V opačném případě pro $u_p < 0$ dochází k sání. Konvence pro tah a tlak je zde tedy opačná než v případě klasické stavební mechaniky.

⁴Pro termín hydraulická vodivost se používají také názvy filtrační koeficient, Darcyho koeficient, propustnost nebo pouze vodivost. Často je také udávána v jednotkách [m/den, m/rok, mm/den] a liší se tedy od pravidla používání jednotek SI.

⁵Záporné znaménko na pravé straně rovnice je dáno tím, že hydraulická výška klesá ve směru proudění. V případě, že je průtok v kladném směru l , Q je pozitivní a $\frac{du}{dl}$ je negativní.

Další způsob zapsání Darcyho zákona je vyjádření *specifického toku* q , což je rychlost proudění na jednotku průtočné plochy

$$q = \frac{Q}{A} = -k_l \frac{du}{dl}. \quad (2.4)$$

Zobecněním předchozí rovnice pro vícerozměrnou úlohu získáme následující vztah (zobecněný Darcyho zákon)

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = -\kappa(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x}), \quad (2.5)$$

kde $\kappa(\mathbf{x})$ [m/s] je *tenzor filtrace*, $\nabla_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x})$ [–] je gradient skalárního pole hydraulických výšek. Index \mathbf{x} u diferenciálního operátoru je značení derivací vzhledem k prostorovým souřadnicím a význam tedy získá až po rozšíření rovnic o stochastickou proměnnou.

Darcyho zákon pro trojrozměrnou úlohu je analogický k jednorozměrné úloze a v kartézských souřadnicích je nejčastěji vyjádřen jako

$$\kappa(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} k_x & 0 & 0 \\ 0 & k_y & 0 \\ 0 & 0 & k_z \end{bmatrix}, \quad (2.6)$$

kde k_{xx} , k_{yy} a k_{zz} jsou hydraulické vodivosti v příslušných směrech souřadného systému. Přesněji řečeno to jsou vlastní čísla tenzoru filtrace, tj. skutečné velikosti hydraulické vodivosti ve směrech vlastních vektorů (natočeného souřadného systému)⁶. Pro určení hodnoty k_{xx} je Darcyho zkouška provedena podél osy x natočeného souřadného systému. Stejnou myšlenku lze aplikovat na zbývající směry. Obecně nemusí být pro dané pórovité médium hodnoty k_{xx} , k_{yy} a k_{zz} stejné, v takovém případě se nazývá anizotropní. Pokud platí $k_{xx}=k_{yy}=k_{zz}$, nazývá se médium izotropní⁷.

Pro materiál vykazující anizotropii bez ortotropie, tj. hlavní osy vodivosti se neshodují se souřadným systémem, má tenzor filtrace nejobecnější tvar s devíti komponentami

⁶Pravidlo natočení souřadného systému platí pouze za předpokladu symetrie tenzoru filtrace, tedy za předpokladu ortotropie materiálu. Pro nesymetrický tenzor filtrace nevzniká ortogonální systém vlastních vektorů a nejedná se pouze o natočení souřadného systému.

⁷V prostředí zemin mohou být považovány za izotropní například písčité zeminy. Obecně však nelze říci, že by existoval jednoznačně izotropní materiál a jde tedy pouze o určitou idealizaci. Anizotropní zeminou jsou například jíly a obecně vrstvené zeminy.

$$\kappa(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{bmatrix}, \quad (2.7)$$

kde $k_{ij} \neq k_{ji}$, pro $i \neq j$.

Darcyho zákon má pak tvar

$$\begin{Bmatrix} q_x \\ q_y \\ q_z \end{Bmatrix} = - \begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \partial u / \partial x \\ \partial u / \partial y \\ \partial u / \partial z \end{Bmatrix}. \quad (2.8)$$

V našem případě se omezíme na ortotropní materiál s hlavními směry orientovanými ve směru zvoleného souřadného systému a pouze dvojrozměrnou úlohu, tedy

$$\begin{Bmatrix} q_x \\ q_z \end{Bmatrix} = - \begin{bmatrix} k_x & 0 \\ 0 & k_z \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \partial u / \partial x \\ \partial u / \partial z \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} k_x \partial u / \partial x \\ k_z \partial u / \partial z \end{Bmatrix}. \quad (2.9)$$

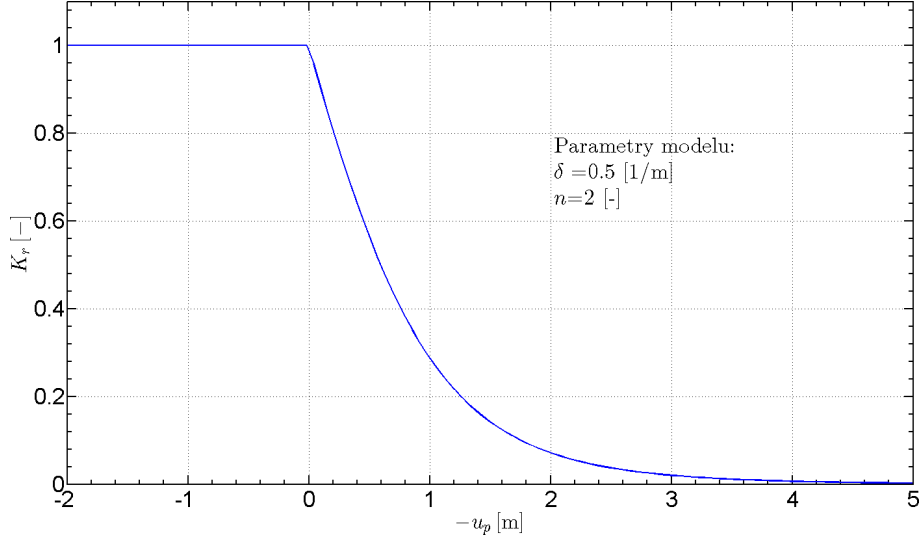
Vzhledem k tomu, že ve studiích proudění podzemní vody je při využití Darcyho zákona tok vody \mathbf{q} makroskopická veličina vztažená k hydraulickému gradientu a hydraulickým vlastnostem prostředí (tj. porozita, propustnost, hydraulická vodivost), jsou i odvozené PDR pro obecné proudění podzemní vody stanoveny pro makroskopické proudění v porézních materiálech. Z inženýrského pohledu to znamená, že Darcyho zákon aproximuje tok pórovitým prostředím spojitým *fiktivním polem průměrné rychlosti* a zanedbává prostorové rozložení pórů a puklin⁸.

2.1.1 Nelinearita hydraulické vodivosti

Hydraulická vodivost vykazuje nelineární chování jak vzhledem k hydraulickému gradientu⁹, tak k hodnotě samotné hydraulické výšky. Zatímco první zmíněný typ nelinearity je vztažen k rychlosti proudění, druhým typem se modeluje nenasycené půdní prostředí. Pro tento typ nelinearity byly zatím nalezeny pouze přibližné empirické vztahy založené na laboratorních experimentech. V současnosti je k dispozici velké množství rovnic, které se snaží najít vztah pro relativní propustnost $K_r \in \langle 0, 1 \rangle$ pro proudění v nenasycených zeminách, viz [5, 41, 10, 16]. Dále budeme pracovat s Van Genuchtenovým

⁸Pro potřeby popisu proudění byly vyvinuty ještě obecnější rovnice pro mikroskopické měřítko, založené na teorii hydrodynamiky. Například využitím Navier-Stokesových rovnic byla prokázána platnost Darcyho zákona na makroskopické úrovni [2].

⁹Tuto nelinearitu zanedbáme, protože pro tento typ úlohy se pohybuje hodnota Reynoldsova čísla v mezích lineárního chování.



Obrázek 1: Redukce hydraulické vodivosti K_r

modelem [10], který uvažuje vztah mezi relativní propustností a tlakovými výškami následujícím způsobem

$$\kappa(\mathbf{x}, u(\mathbf{x})) = K_r(u(\mathbf{x}))\kappa(\mathbf{x}), \quad (2.10)$$

kde K_r je bezrozměrný skalární redukční součinitel nebo také relativní propustnost dle (rov. 2.11). Graf tohoto součinitele vzhledem k tlakovým výškám je na (obr. 1).

Redukční součinitel ovlivňuje pouze hydraulickou vodivost nad *freatickou linií*¹⁰, kde dochází k sání. Tímto součinitelem se modeluje proudění v nenasycených ($K_r \rightarrow 0$) nebo částečně nasycených ($1 \geq K_r > 0$) zeminách.

$$K_r(u(\mathbf{x})) = \frac{\{1 - (\delta|u_p|)^{n-1}[1 + (\delta|u_p|)^n]^{-m}\}^2}{[1 + (\delta|u_p|)^n]^{m/2}}, \quad (2.11)$$

kde $\delta > 0$ [1/m], $n > 1$ [-] a $m = 1 - 1/n$ [-] jsou parametry modelu získané z laboratorních pozorování.

Tento součinitel se zavádí z důvodu realističtějšího modelování prostředí, kam nezasahuje hladina podzemní vody zároveň za splnění principu spojitosti, respektive za možnosti použití divergentní věty, viz následující kapitola.

¹⁰Freatická linie je výraz pro hranici mezi kladnou a zápornou tlakovou výškou, tedy teoretickou hladinu podzemní vody.

2.2 Rovnice kontinuity

Odvození základní rovnice pro proudění podzemní vody je založeno na principu spojitosti a zákonu zachování hmotnosti. Zatímco princip spojitosti předpokládá, že kapalina spojitě vyplňuje celou uvažovanou oblast, zákon zachování hmotnosti nám říká, že celková změna hmotnosti δm v této oblasti musí být rovna rozdílu všech zdrojů a propadů. Tato rovnost se vyjádří jako

$$\Delta m = (m_i + m_r) - (m_o + m_s), \quad (2.12)$$

kde m_i [kg/s] je hmotnost kapaliny za jednotku času, která přitéká do oblasti, m_r [kg/s] je hmotnost zdrojů uvnitř oblasti, m_o [kg/s] je hmotnost kapaliny, která odtéká z oblasti a m_s [kg/s] je hmotnost propadů uvnitř oblasti.

Tento vztah, jakkoliv je obecný a pochopitelný, je z hlediska popsání komplexnějšího systému nepoužitelný a rovnici je třeba zapsat v integrální podobě jako rovnováhu všech zdrojů a propadů. Tato rovnováha musí platit na libovolné oblasti, kde platí princip spojitosti. Vybereme tedy takovou podoblast $\Lambda \subseteq D$ s hranicí $\partial\Lambda$ a zapíšeme stejnou rovnost jako v případě (rov. 2.12)

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Lambda} n_s \rho \, dV = - \oint_{\partial\Lambda} \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} \rho \, dS + \int_{\Lambda} f \rho \, dV, \quad (2.13)$$

kde $n_s = n_s(\mathbf{x}, t)$ [–] je pórovitost, $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$ [kg/m³] je hustota kapaliny, $\mathbf{q} = \mathbf{q}(\mathbf{x}, t)$ [m/s] je vektor filtrační rychlosti, $f = f(\mathbf{x}, t)$ [1/s] je intenzita přítoku nebo odtoku ze zdrojů nebo propadů uvnitř oblasti Λ za jednotku času, $\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Lambda} n_s \rho \, dV$ vyjadřuje změnu hmotnosti v čase, $-\oint_{\partial\Lambda} \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} \rho \, dS$ je celková hmotnost vody, která proteče hranicí oblasti. $\int_{\Lambda} f \rho \, dV$ vyjadřuje celkovou bilanci zdrojů a propadů uvnitř oblasti. Použitím Gauss-Ostrogradského věty¹¹ ve tvaru

$$\oint_{\partial\Lambda} \mathbf{n} \cdot \mathbf{F} \, dS = \int_{\Lambda} \nabla \cdot \mathbf{F} \, dV, \quad (2.14)$$

převědeme plošný integrál na objemový

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Lambda} n_s \rho \, dV + \int_{\Lambda} \nabla \cdot \mathbf{q} \rho \, dV = \int_{\Lambda} f \rho \, dV. \quad (2.15)$$

¹¹Intuitivní překlad a inženýrský pohled na větu o divergenci je možný interpretovat přímo na proudění podzemní vody. Pokud se tekutina pohybuje uvnitř spojitě oblasti a chceme vědět, kolik tekutiny vytéká nebo vtéká do určité části v této oblasti, pak nám buď stačí sečíst toky po hranici sledované oblasti, nebo sečíst intenzity toků uvnitř sledované oblasti. Přesněji řečeno proudění je reprezentováno vektorovým polem rychlosti toků, jehož divergence v libovolném bodě představuje právě intenzitu toku v daném bodě. Součet intenzit toků uvnitř uvažované oblasti musí být tedy v souladu se součtem samotných toků na hranici stejné oblasti.

Vzhledem k tomu, že oblast $\Lambda \subset D$ je libovolná, je rovnice splněna pouze v případě, kdy jsou si i samotné integrované funkce rovny. Tento krok vede přímo k diferenciálnímu tvaru rovnice kontinuity

$$\frac{\partial}{\partial t}(n_s \rho) + \nabla \cdot (\mathbf{q} \rho) = f \rho. \quad (2.16)$$

Dále platí [11]

$$\frac{\partial}{\partial t}(n_s \rho) = S \rho \frac{\partial u}{\partial t}, \quad (2.17)$$

kde $S = S(\mathbf{x}, t)$ [–] je *měrná storativita* (objemová zásobnost), $u = u(\mathbf{x}, t)$ [m] je hydraulická (piezometrická) výška.

Po dosazení vztahů (rov. 2.17, 2.5) do základní rovnice (rov. 2.16) získáme rovnici neustáleného proudění stlačitelné kapaliny

$$S \rho \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\kappa \nabla_{\mathbf{x}} u \rho) = f \rho. \quad (2.18)$$

Tato rovnice nejlépe popisuje proudění podzemní vody na makroskopické úrovni, avšak její řešitelnost je velmi komplikovaná. Pro většinu případů si vystačíme s ustáleným prouděním, kde změna v čase je nulová (rov. 2.19) a vypadne tedy člen s časovou derivací.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 0. \quad (2.19)$$

Minoritní příspěvek v přesnosti řešení přináší stlačitelnost kapaliny, tj. jak je ovlivněna hustota ρ pro rozdílné hydraulické výšky. Po zavedení časové a prostorově konstantní hustoty vztahem $\rho(\mathbf{x}, t, u) = \rho$ získáme řídicí rovnici systému s okrajovými podmínkami ve tvaru

$$\begin{aligned} -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\kappa(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x})) &= \tilde{f}(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in D, \\ \mathbf{n}(\mathbf{x}) \cdot (\kappa(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x})) &= \tilde{f}_N(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \partial D_N, \\ u(\mathbf{x}) &= \tilde{f}_D(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \partial D_D, \quad \partial D_N \cup \partial D_D = \partial D, \end{aligned} \quad (2.20)$$

kde \tilde{f}_N jsou předepsané toky kolmé na hranici ∂D_N , které jsou definovány jako kladné, působí-li proti směru vnější normály \mathbf{n} , \tilde{f}_D jsou předepsané hydraulické výšky.

2.3 Okrajové a počáteční podmínky

Z hlediska řešení stacionárního proudění potřebujeme jako vstupní informaci pouze okrajové podmínky, tedy předem známé stavy na určitých částech konstrukce, které co nejlépe vystihují reálnou situaci, tj. kde působí jaké tlaky, kde je v doméně umístěn zdroj vody nebo kde je naopak čerpána atd..

- Prvním typem je tzv. *Dirichletova* podmínka označená indexem D , tj. podmínka, kde předepisujeme samotnou hodnotu hledané veličiny. V našem případě tato podmínka slouží pro předepsání hodnot známých hydraulických výšek.
- Druhým typem je tzv. *Neumannova* podmínka označená indexem N , tj. podmínka, kde předepisujeme známé derivace hledané veličiny. Derivace hledané veličiny se vyskytují ve vztahu pro popsání toku a tato podmínka tedy slouží pro předepsání známého odtoku, zdroje nebo izolace na části hranice.
- Třetím typem podmínky, kterou budeme používat je tzv. *průsaková* okrajová podmínka, která je kombinací Neumannovy a Dirichletovy podmínky. Z praktického hlediska slouží tato podmínka k nalezení výronového bodu.

Předchozími kroky jsme získali lineární eliptickou parciální diferenciální rovnici druhého řádu s možnými okrajovými podmínkami a zároveň jsme definovali tzv. silnou formulaci problému.

3 Pravděpodobnost

Tato kapitola se věnuje základním vztahům v teorii pravděpodobnosti. Současně zavádí pojmy a značení, které budeme dále potřebovat pro stochastické výpočty.

Vždy když se ptáme na to, jaké máme šance, naděje nebo obecně na nějaké měřítko očekávatelnosti, mluvíme o pravděpodobnosti. Svou matematickou podobu získala sledováním a kvantifikováním hazardních her, které byly a jsou středem zájmu [4]. Většina lidí má intuitivní představu o tom, co vlastně pravděpodobnost je a už od útlého věku si začínáme uvědomovat, jaké jsou šance na výhru a jakými pravidly se náhodnost v určitých systémech řídí. To, co dělá hazardní hry jednodušší ve smyslu pravděpodobnosti na rozdíl od nejistot v reálném životě, je fakt, že hazardní hry jsou ze své podstaty jednoznačně opakovatelné. V těchto hrách se opakuje velké množství hodů, tažení nebo pokusů. Po mnoha pokusech v zásadě stejného experimentu začne být i bez znalosti principů řídících tento systém zřejmé, jaké jsou relativní frekvence nebo šance na výhru.

Pravděpodobnost se tedy vyskytuje u systémů, kde zatím nemáme dostatečné kapacity nebo znalosti pro popsání základních vlastností ať materiálů, fyzikálních dějů nebo nejsme schopni dané veličiny měřit s dostatečnou přesností nebo v potřebném rozsahu. Například u populárního příkladu házení „spravedlivé“ mince je využití pravděpodobnosti pomocným krokem jak nějakým způsobem zachytit realitu, tj. alespoň částečně odpovědět na otázku jaká strana mince padne. Druhý pohled na tento problém je ale takový, že o tomto systému jen nemáme dostatečné množství informací, jako například počáteční rychlosti, prostředí v jakém se mince pohybuje, povrch na který mince dopadá atp., při jejichž znalosti jsme schopni předpovědět výslednou stranu. Mnohem složitějším příkladem může být obchodování na burze, kde se náhodné výsledky makléřských aktivit, které reprezentují ekonomické prostředí, tržní sentiment, politické zájmy, atd., promítají v ceně akcií a směnných kurzů.

Tento druh úloh se matematicky řeší tak, že každému náhodnému výstupu přiřadíme nějaké číslo. V případě hodu mincí přiřadíme jedné straně číslo 1 a druhé straně číslo 0. Tímto jsme definovali náhodnou proměnnou $X = X(\omega) \in \{0, 1\}$, kde ω je elementární děj, který náleží prostoru všech možných výstupů experimentu $\Omega = \{\text{panna, orel}\}$. Čísla $X(\omega)$ nám tedy poskytují informaci o daném jevu i v případě, kdy přesně nevíme, jakými zákonitostmi se daný systém řídí. Přesněji řečeno, Ω je abstraktní prostor obsahující všechny možné realizace ω daného experimentu. Potom náhodná proměnná $X = X(\omega)$ je funkce obecně obsahující reálná čísla definovaná na Ω .

Pro zpracování náhodné proměnné X je nejprve potřeba vybrat všechny

relevantní podmnožiny Ω ve třídě \mathcal{F} , nazývané σ – algebra. Je přirozené zahrnout i všechny ω z prostoru Ω a také sjednocení, rozdíl a průnik jednotlivých podmnožin. Zároveň se požaduje, aby základní operace jako \cup , \cap , c na podmnožinách \mathcal{F} neležely mimo třídu \mathcal{F} [39].

3.1 Základní vztahy pravděpodobnosti

Pravděpodobnostní prostor je tvořen trojicí (Ω, \mathcal{F}, P) , kde Ω je prostor všech přípustných realizací, $\mathcal{F} \subset 2^\Omega$ je σ – algebra a P je pravděpodobnostní míra splňující:

1. $0 \leq P(A) \leq 1, \quad \forall A \in \mathcal{F},$
2. $P(\Omega) = 1,$
3. Pro $A_1, A_2, \dots \in \mathcal{F}$ a $A_i \cap A_j = \emptyset, \quad \forall i \neq j,$

$$P\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} P(A_i).$$

Distribuční funkce F_X veličiny X je vyjádřena pravděpodobností výskytu daného jevu jako

$$F_X(x) = P(X \leq x) = P(\omega : X(\omega) \leq x), x \in \mathbb{R}, \quad (3.1)$$

pravděpodobnost výskytu veličiny X na intervalu $(a, b]$ se vyjádří distribuční funkcí jako

$$P(\omega : a < X(\omega) \leq b) = F_X(b) - F_X(a), \quad a < b. \quad (3.2)$$

V této práci se budeme zabývat pouze spojitým rozdělením, které nemá skoky. Pravděpodobnost, že X se rovná číslu je následně rovna

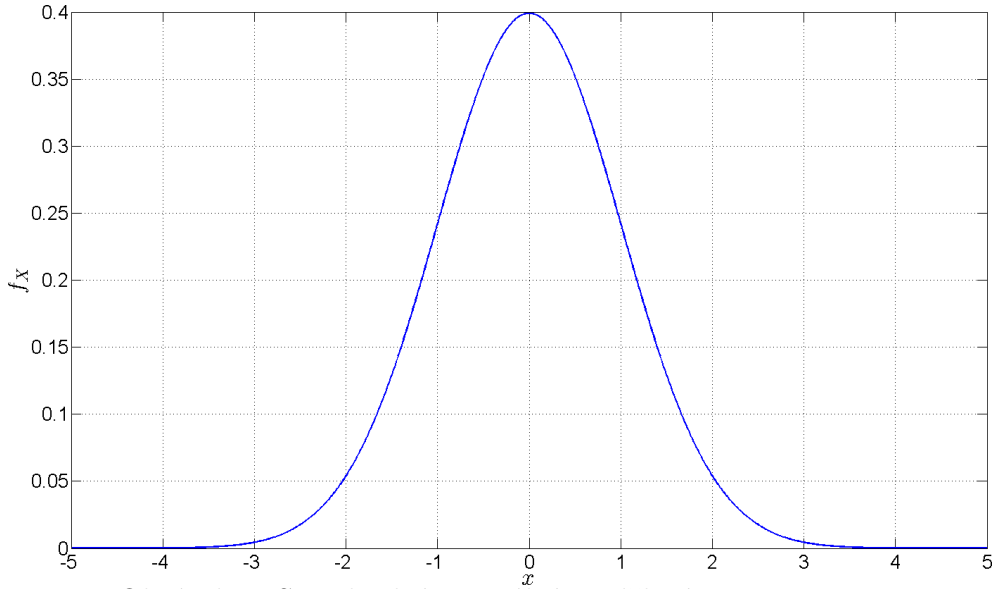
$$P(X = h) = F_X(h) - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_X(h - \varepsilon) = 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}. \quad (3.3)$$

Většina spojitých rozdělení má *hustotu pravděpodobnosti* f_X , pomocí které se dá vyjádřit distribuční funkce $F_X(x)$ jako

$$F_X(x) = \int_a^x f_X(y) dy, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (3.4)$$

kde

$$f_X(x) \geq 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad \int_a^b f_X(y) dy = 1.$$



Obrázek 2: Standardní normální rozdělení, $\mu = 0$, $\sigma = 1$

Jedním z nejdůležitějších druhů rozdělení je *Gaussovo normální rozdělení* (NR), značené jako $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$, kde parametr $\mu \in \mathbb{R}$ je *střední hodnota* rozdělení a $\sigma^2 > 0$ je *rozptyl*. Hustota pravděpodobnosti je vyjádřena jako

$$f_X(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right], \quad x \in \mathbb{R}. \quad (3.5)$$

Speciálním případem tohoto rozdělení je *standardní normální rozdělení* (SNR) $\mathcal{N}(0, 1)$ s hustotou pravděpodobnosti (obr. 2).

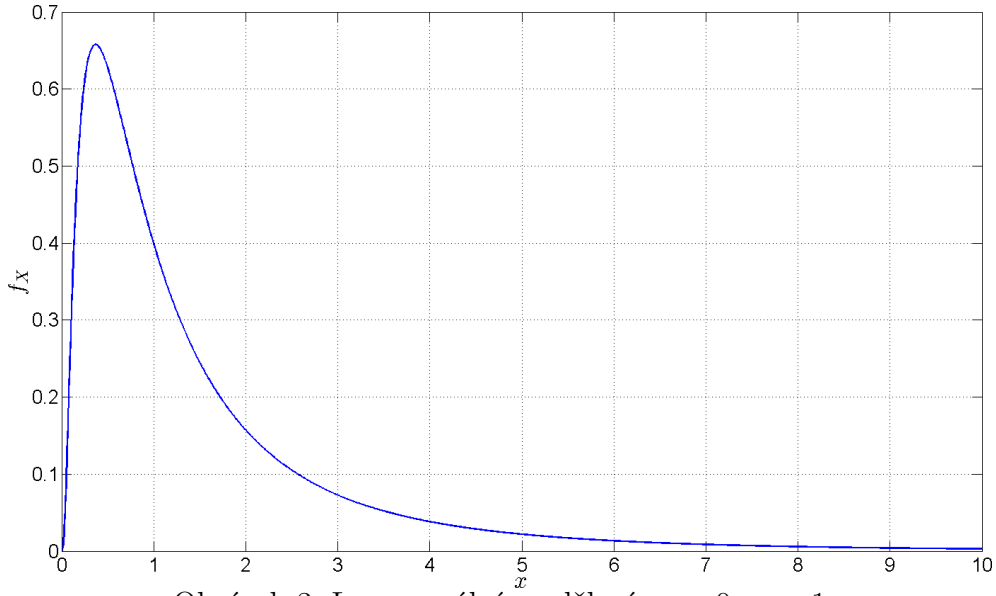
Z inženýrského hlediska je velmi důležité *logaritmicko-normální rozdělení* (LNR) $\mathcal{LN}(\mu, \sigma, \bar{x})$, (obr. 3).

$$f_X(x) = \frac{1}{x\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(\ln(x) - \mu)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (3.6)$$

kde $x \geq \bar{x}$. Nejčastěji se využívá pro definování hustoty pravděpodobnosti fyzikálních veličin, které nejsou definovány nebo nemají význam pro $x < \bar{x}$ a stejně jako u hydraulické vodivosti bývá toto omezení $x \geq \bar{x} = 0$.

Je to takové rozdělení, že pokud platí $X \sim \mathcal{LN}(\mu, \sigma)$, pak $Y = \ln(X) \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$. Toto pravidlo lze aplikovat i obráceně, tedy pokud $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$, pak $Y = \exp(X) \sim \mathcal{LN}(\mu, \sigma)$. Tyto rozdělení tedy lze mezi sebou libovolně transformovat. Transformace lognormálních parametrů pro standardní normální rozdělení¹² se vypočte dle vztahu (rov. 3.7).

¹²Tj. předpokládáme, že náhodná proměnná $X \sim \mathcal{LN}(\mu_{X,\ln}, \sigma_{X,\ln})$. Pak rovněž $X = \exp(Z)$, kde $Z \sim \mathcal{N}(\mu_{X,n}, \sigma_{X,n})$. Přepočet parametrů z $\mu_{X,\ln}$ na $\mu_{X,n}$ je dán vztahy (rov. 3.7).



Obrázek 3: Lognormální rozdělení, $\mu = 0$, $\sigma = 1$

$$\begin{aligned}\sigma_{X,ln}^2 &= \ln \left[1 + \left(\frac{\sigma_{X,n}}{\mu_{X,n}} \right)^2 \right], \\ \mu_{X,ln} &= \ln(\mu_{X,n}) - \frac{1}{2} \sigma_{X,ln}^2.\end{aligned}\tag{3.7}$$

3.2 Charakteristiky náhodné veličiny

Pro následné studium náhodné veličiny X je třeba vyhodnotit základní charakteristiky, které popisují důležité vlastnosti této veličiny a vyjadřují je jedním číslem. Základní informací veličiny X je její *střední hodnota* μ_X , tj. průměrný nebo nejočekávanější výsledek sledovaného procesu.

$$\mu_X = \mathbb{E}[X] = \int_{-\infty}^{\infty} x f_X(x) dx.\tag{3.8}$$

Rozptyl σ_X^2 veličiny X nebo přesněji *směrodatná odchylka* σ_X vyjadřuje rozptýlení náhodné veličiny okolo střední hodnoty a je definován jako

$$\sigma_X^2 = \text{var}(X) = \mathbb{E}[(X - \mu_X)^2] = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu_X)^2 f_X(x) dx.\tag{3.9}$$

Dále pro získání informací o náhodné veličině můžeme využít *necentrované momenty* m -tého řádu, pro $m \in \mathbb{N}$ definované jako

$$\mathbb{E}[X^m] = \int_{-\infty}^{\infty} x^m f_X(x) dx,\tag{3.10}$$

nebo *centrované momenty*, kde centrem veličiny X je střední hodnota μ_X , tj.

$$\mathbb{E}[(X - \mu_X)^m] = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mu_X)^m f_X(x) dx.\tag{3.11}$$

Pro naše účely ale budeme potřebovat vyhodnotit tyto charakteristiky pro reálnou funkci g náhodné proměnné X . Střední hodnota takové funkce se vypočte dle (rov. 3.12) a ostatní statistické momenty se vypočtou dle stejného pravidla¹³.

$$\mathbb{E}[g(X)] = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) f_X(x) dx. \quad (3.12)$$

3.3 Náhodná pole

Náhodnost se v různých systémech může projevovat buď v prostorovém rozložení, časovém rozložení nebo v jejich kombinaci. Náhodné procesy jsou tedy funkcí prostorové a časové proměnné. V této práci se zaměříme na diskrétní a pouze prostorové rozložení náhodnosti parametru hydraulické vodivosti. Matematický model, který toto popisuje se nazývá náhodné pole a může být v diskrétním případě chápán jako sada náhodných proměnných:

$$\mathbf{X}_t = \mathbf{X}_t(\omega), \quad \text{pro } t \in T, \omega \in \Omega,$$

kde T je v našem případě konečně rozměrný soubor indexů¹⁴. Stochastický proces pak tvoří náhodný vektor $\mathbf{X} = (X_{t_1}, \dots, X_{t_n})$, $t_1, \dots, t_n \in T$, který může být považován za funkci dvou proměnných, tj.

- Pro zafixovaný index t se jedná o náhodnou proměnnou zachycující vývoj náhodné veličiny v bodě anebo v čase, v závislosti na významu indexu t :

$$X_t = X_t(\omega), \quad \omega \in \Omega.$$

- Pro zafixovaný stochastický parametr ω se jedná o funkci prostorové anebo časové proměnné t :

$$X_t = X_t(\omega), \quad t \in T.$$

To se nazývá *realizace* nebo *trajektorie* procesu X_t [39].

Diskretizací náhodného procesu redukuje dimenzi původního problému a aproximujeme ho konečným počtem *nezávislých* náhodných proměnných, což vede k vnesení určité chyby do výpočtu. Pravidla, jak přibližně volit jemnost diskretizace na úkor přesnosti řešení jsou ukázány v podkapitole 4.2.1. Metoda používaná pro diskretizaci náhodného procesu je stručně popsána v následující kapitole.

¹³Všechny předchozí vztahy předpokládají, že známe funkci hustoty pravděpodobnosti f_X náhodné veličiny X

¹⁴V případě spojitého stochastického procesu má index t roli spojitého intervalu [39].

4 Karhunen-Loève rozvoj

Tato sekce stručně pojednává o Karhunen-Loève rozvoji (KLR), tedy o stochastické diskretizaci náhodných polí na jednotlivé, vzájemně nezávislé náhodné proměnné. Detailnější popis je k nalezení v [29, 13, 14, 39].

KLR reprezentuje stochastický proces a vyjadřuje ho jako nekonečnou řadu, podobně jako Fourierova řada slouží k reprezentaci funkcí na omezeném intervalu. Na rozdíl od Fourierovy řady, kde koeficienty jsou reálná čísla a báze tvoří goniometrické funkce, jsou koeficienty KLR náhodné proměnné a báze je v tomto případě sada vlastních funkcí dle daného procesu. Základní myšlenkou je zároveň vytvoření takových bází, které nejlépe pokrývají daný problém v L_2 smyslu, tj. minimalizuje střední hodnotu kvadrátu chyby.

KLR skalární veličiny pro Gaussovské náhodné pole lze zapsat následujícím způsobem

$$\kappa(\mathbf{x}, \omega) = \sum_{i=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_i} \phi_i(\mathbf{x}) y_i(\omega), \quad (4.1)$$

kde je zřejmé rozdělení prostorové $\phi_i(\mathbf{x})$ a stochastické $y_i(\omega)$ části. Tento zápis je výhodný zejména v dalším pokračování a při postupném hledání řešení celé úlohy. Častěji se ale lze setkat se vztahem, kdy $\lambda_1 = 1$, $y_1 = 1$ a $\phi_1(\mathbf{x}) = \mu(\mathbf{x})$, pro které se předchozí vztah dá přepsat jako

$$\kappa(\mathbf{x}, \omega) = \mu_\kappa(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_i} \phi_i(\mathbf{x}) y_i(\omega), \quad (4.2)$$

kde $\mu(\mathbf{x})$ je střední hodnota náhodného pole, y_i jsou vzájemně nezávislé¹⁵ náhodné proměnné s nulovou střední hodnotou a jednotkovým rozptylem, λ_i, ϕ_i jsou vlastní čísla a vlastní funkce kovariančního jádra C_κ . U vztahu (rov. 4.2) si lze povšimnout, že pro zafixovaný prostorový bod $\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{x}}$ a jedinou náhodnou proměnnou $y_i = Y$ se KLR přepíše jako $\kappa(Y) = \mu + \lambda \phi Y = \mu + \sigma Y$, kde $\kappa \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma)$ a $\lambda \phi(\tilde{\mathbf{x}})$ je tedy v každém prostorovém bodě pouze konstanta zesilující rozptýlení náhodné veličiny.

Pro účely numerického výpočtu je vždy řada (rov. 4.2) zkrácena na m počet tvarů

$$\kappa(\mathbf{x}, \omega) \approx \kappa_m(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{m+1} \sqrt{\lambda_i} \phi_i(\mathbf{x}) y_i, \quad (4.3)$$

protože $\sqrt{\lambda_i}$ má pouze roli škálování vlastních funkcí, pro snazší manipulaci a přehlednost přepíšeme vztah $\hat{\phi}_i = \sqrt{\lambda_i} \phi_i$, se kterým má výsledný KLR tvar

¹⁵Tj. pro Gaussovské náhodné proměnné *nekorelované* náhodné proměnné [39].

$$\kappa_m(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{m+1} \hat{\phi}_i(\mathbf{x}) y_i. \quad (4.4)$$

Chybě způsobené zkrácením řady (rov. 4.2) se zabývá samostatná podkapitola 4.2.1.

V našem případě ale potřebujeme vytvořit rozvoj tenzorové veličiny, která má pro dvojrozměrnou úlohu obecně čtyři složky, kde každá by mohla být modelována samostatným náhodným polem. V nejjednodušším případě, pro izotropní materiál vyjádřený následujícím vztahem

$$\kappa(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} k_x & 0 \\ 0 & k_x \end{bmatrix} = k_x \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (4.5)$$

platí stejná rovnice jako v případě rozvoje skalární veličiny, protože jako náhodné pole stačí modelovat pouze skalární veličinu k_x . Pro zachování izotropie materiálu je rozhodující, aby obě nenulové složky byly modelovány jedním náhodným polem, což se v (rov. 4.5) předpokládá.

V modelu proudění podzemní vody se dále budeme soustředit na modelování anizotropního ortotropního materiálu vyjádřeného následujícím vztahem

$$\kappa(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} k_x & 0 \\ 0 & k_y \end{bmatrix}. \quad (4.6)$$

Pro jednoduchost zavedeme stejný předpoklad jako v případě izotropního materiálu, tedy korelaci mezi nenulovými složkami rovnou jedné. Výhoda zavedení takového předpokladu je možnost modelovat anizotropní tenzorové pole vodivosti jedním náhodným polem. Nevýhodou je omezení modelu pouze na případy, kdy je tento předpoklad platný, což omezuje využití modelu.

4.1 Karhunen-Loève módy

Pro určení vlastních funkcí (tj. bází, tvarů) ϕ_i a vlastních čísel λ_i KLR se nejčastěji používají analytické předpisy kovariančních funkcí¹⁶ se základními statistickými momenty daného procesu, tj. střední hodnota a směrodatná odchylka nebo v případě, kdy máme k dispozici reprezentativní snímky oblasti lze kovarianční funkci získat pomocí obrazové analýzy [42, 28].

Vzhledem k nedostatečným reálným vstupům v podobě reprezentativních snímků oblasti nebo záznamů variogramu se budeme dále v této práci soustředit na použití kovarianční funkce C_κ jako základu k tvorbě vlastních

¹⁶Kovarianční funkce je v odborné literatuře rovněž označována jako kovarianční jádro.

funkcí a vlastních čísel. Je třeba mít na mysli, že kovarianční jádro, jako jeden ze vstupních parametrů, má největší vliv na konečnou podobu náhodného pole a tedy i odezvu modelu. Volba kovariančního jádra nebo jakýkoliv jiný způsob pro získání příslušných bází je tedy kritickým krokem celé úlohy ve smyslu porovnání vstupních parametrů k realitě.

Nejběžnější typy kovariančních funkcí:

$$C_{\kappa}^{(1)}(\mathbf{x}) = \tilde{\sigma}^2 \exp \left(- \left| \frac{x - x'}{l_x} \right| - \left| \frac{y - y'}{l_y} \right| \right), \quad (4.7)$$

$$C_{\kappa}^{(2)}(\mathbf{x}) = \tilde{\sigma}^2 \exp \left[- \left(\frac{x - x'}{\sqrt{2}l_x} \right)^2 - \left(\frac{y - y'}{\sqrt{2}l_y} \right)^2 \right], \quad (4.8)$$

$$C_{\kappa}^{(3)}(\mathbf{x}) = c, \quad (4.9)$$

kde l_x a l_y jsou korelační délky¹⁷ [42, 28] a $\tilde{\sigma}$ je směrodatná odchylka.

Přesné řešení KLR pro zadanou kovarianční funkci je známe pouze ve speciálních případech, které jsou demonstrovány například v [39]. Obecně se přistupuje k numerické aproximaci problému vlastních čísel. Pro tento účel se nejčastěji využívá prostorová diskretizace pomocí sítě konečných prvků a řešený problém má tvar

$$\mathbf{W}\tilde{\phi}_i = \lambda_i \mathbf{M}\tilde{\phi}_i, \quad (4.10)$$

kde $\tilde{\phi}_i$ jsou nenormované vlastní vektory diskretizované úlohy a λ_i jsou odpovídající vlastní čísla. Matice $\mathbf{W} = \mathbf{M}\mathbf{C}\mathbf{M}$ je symetrická pozitivně semi-definitní [13], \mathbf{M} je Gramova matice dle (rov. 4.12), přičemž matice \mathbf{M} je symetrická, pozitivně definitní, regulární [13] a vzorec (rov. 4.10) lze přepsat v nesymetrické formě jako

$$\mathbf{C}\mathbf{M}\tilde{\phi}_i = \lambda_i \tilde{\phi}_i. \quad (4.11)$$

Matice \mathbf{C} se získá projekcí kovarianční funkce na konečně prvkovou síť a C_{ij} tedy odpovídá kovarianci mezi uzly diskretizované domény. Jde tedy o transformaci matice vzdáleností (distance matrix), kdy se vzdálenosti jednotlivých bodů přepočítávají na kovariance dané vstupními hodnotami, tj. směrodatnou odchylkou, korelační délkou a transformační funkcí. Matice \mathbf{C} bude tedy vždy plná, symetrická a pozitivně definitní.

¹⁷Tj. délka vyjadřující vzdálenost, v jaké již dva body nejsou vzájemně významně korelovány, resp mají korelaci dle (rov. 4.7) rovnou $\text{corr}_{\kappa}^{(1)} \leq e^{-1}$. Tímto parametrem se tedy volí míra prostorových fluktuací modelované veličiny.

$$M_{ij} = \int_D N_i(\mathbf{x}) N_j(\mathbf{x}) dA, \quad i, j = 1, \dots, n, \quad (4.12)$$

kde $\mathbf{N}(\mathbf{x}) = (N_1(\mathbf{x}), \dots, N_n(\mathbf{x}))$ jsou prostorové bázové funkce. Vyhodnocení integrálu se věnuje příloha B.2.

Prvky matice \mathbf{C} v uzlech sítě se vypočítají dle následujícího vztahu

$$C_{ij} = \tilde{\sigma}^2 \exp \left(- \left| \frac{x_i - x_j}{l_x} \right| - \left| \frac{y_i - y_j}{l_y} \right| \right), \quad i, j = 1, \dots, n. \quad (4.13)$$

Všechny vlastní funkce $\tilde{\phi}_i$ pak musí být normovány tak, aby vyhověly následující podmínce

$$\int_D \phi_i^2(\mathbf{x}) dA = 1, \quad i = 1, \dots, n. \quad (4.14)$$

Vlastní funkce ϕ_i aproximujeme jako $\phi_i(\mathbf{x}) = \sum_j^n \phi_{ij} N_j(\mathbf{x})$ ¹⁸ a předchozí rovnici přepíšeme jako

$$\begin{aligned} \int_D \phi_i^2(\mathbf{x}) dA &= \int_D \left(\sum_j^n \phi_{ij} N_j(\mathbf{x}) \right)^2 dA \\ &= \int_D \left(\sum_j^n \phi_{ij} N_j(\mathbf{x}) \right) \left(\sum_k^n \phi_{ik} N_k(\mathbf{x}) \right) dA \\ &= \sum_j^n \sum_k^n \phi_{ij} \phi_{ik} \int_D N_j(\mathbf{x}) N_k(\mathbf{x}) dA \\ &= \sum_j^n \sum_k^n \phi_{ij} \phi_{ik} M_{jk} \\ &= \phi_i^T \mathbf{M} \phi_i = 1, \quad \text{pro } \forall i = 1, \dots, n, \end{aligned} \quad (4.15)$$

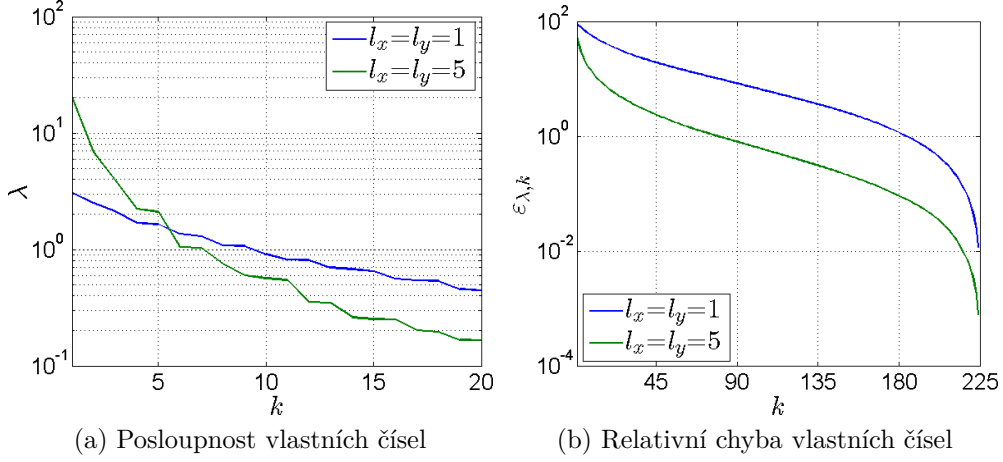
kde ϕ_i jsou jednotlivé vlastní vektory a \mathbf{M} je Gramova matice dle (rov. 4.12). Předchozí rovnice je tedy vždy splněna pro vlastní vektory násobené váhou dle následujícího vztahu

$$\phi_i = \frac{\tilde{\phi}_i}{\sqrt{\tilde{\phi}_i^T \mathbf{M} \tilde{\phi}_i}}. \quad (4.16)$$

Vlastní čísla s odpovídajícími vlastními tvary musí být seřazeny od největšího po nejmenší, tj.

$$\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_n \quad (4.17)$$

¹⁸Pro aproximaci náhodného pole si vždy vystačíme s lineárními bázovými funkcemi. Prostorová aproximace odezvy modelu může používat bázové funkce s odlišným stupněm polynomu.



Obrázek 4: Vlastní čísla pro různé kovarianční délky v semi-logaritmickém měřítku: (a) vlastní čísla λ , (b) chyba $\varepsilon_{\lambda,k}$ dle (rov. 4.18).

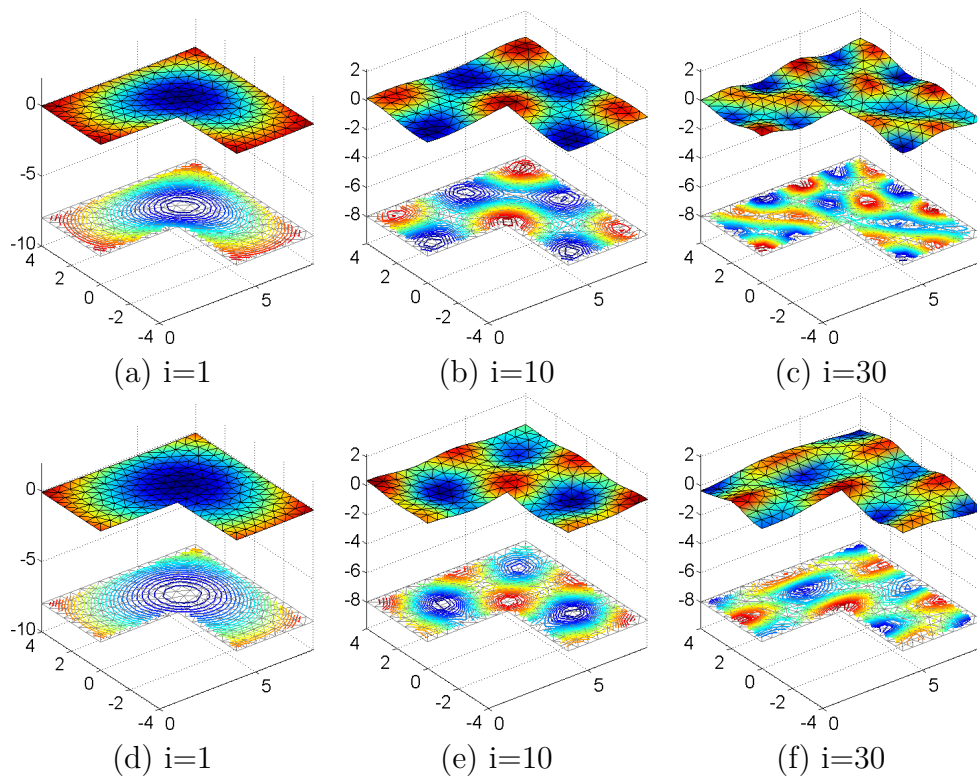
4.2 Chyba Karhunen-Loève rozvoje

Volba počtu vlastních tvarů ovlivňuje přesnost aproximace náhodného pole. Minimální počet tvarů pro zvolenou chybu závisí na okrajových podmínkách, tvaru domény a zejména na stochastických vstupních parametrech, tj. korelační délky, rozptylu a kovarianční funkci. Vzorec pro apriorní určení chyby v závislosti na počtu tvarů pro obecnou doménu a diskretizaci zatím není k dispozici. Pro orientační odhad chyby použijeme vlastnost konvergence vlastních čísel, jelikož určují váhu, se kterou jednotlivé tvary vstupují do výpočtu a lze je tak samotné považovat za přibližné měřítko chyby.

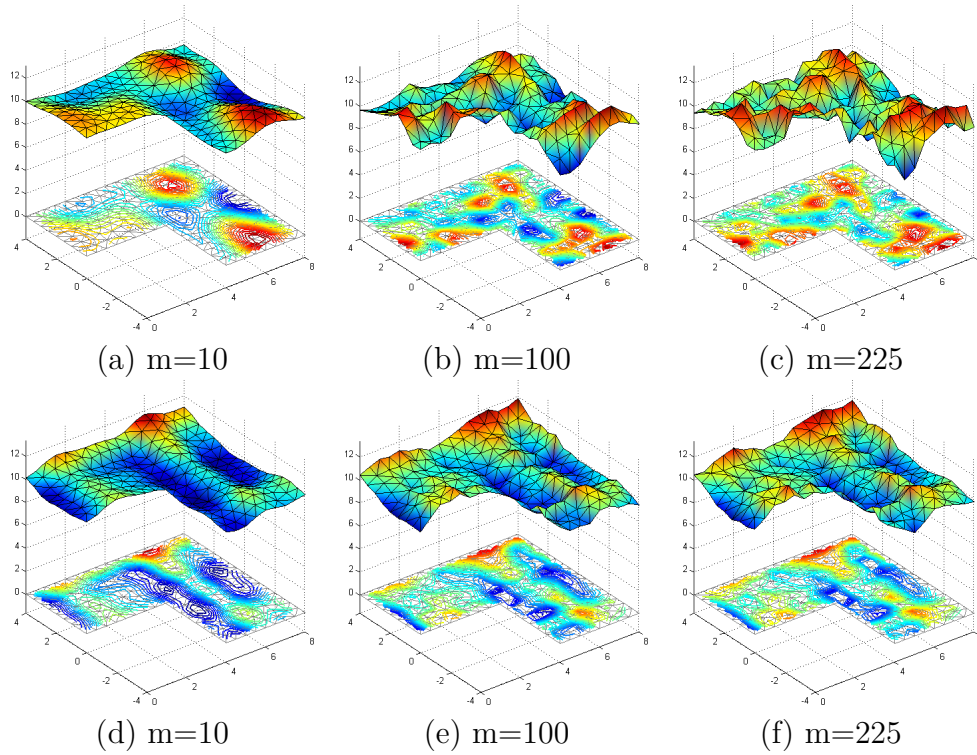
Příklad 4.1. Graf (obr. 4a) ukazuje posloupnost vlastních čísel pro doménu (obr. 9) pro různé volby stochastických parametrů, graf (obr. 4b) je relativní chyba vyhodnocená dle následujícího vzorce

$$\varepsilon_{\lambda,k} = \left(1 - \frac{\sum_{i=1}^k \lambda_i}{\sum_{j=1}^{m+1} \lambda_j}\right) \cdot 100. \quad (4.18)$$

Z obrázků lze mimo jiné vyčíst logickou spojitost mezi volbou parametrů a rychlostí konvergence, kdy zvýšením korelační délky zvyšujeme prostorovou korelaci a snižujeme tím tedy fluktuace v prostorovém rozložení hydraulické vodivosti. Vezmeme-li v úvahu, že KL-funkce ϕ_i jsou obecně oscilující funkce s jemnějšími prostorovými fluktuacemi s rostoucím indexem i (obr. 5), zvyšováním korelační délky, tzn. zvýšením prostorové korelace, si tak pro zvolenou chybu vystačíme s nižším počtem vlastních tvarů. Míra konvergence vlastních čísel je tedy inverzně úměrná korelační délce.



Obrázek 5: Jednotlivé vlastní tvary ϕ_i KLR: (a)-(c) $l_x = l_y = 1\text{m}$, (d)-(f) $l_x = l_y = 5\text{m}$



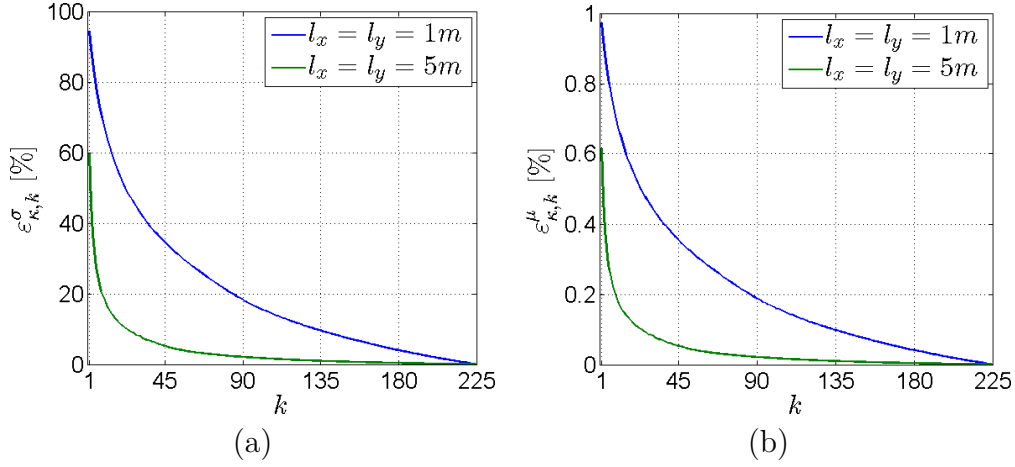
Obrázek 6: Realizace náhodných polí $\kappa_{xx,m}$: (a)-(c) $l_x = l_y = 1\text{m}$, (d)-(f) $l_x = l_y = 5\text{m}$

Tento fakt znázorňují jak samotné vlastní tvary (obr. 5), tak příklady realizací náhodných polí (obr. 6)¹⁹, kde lze pozorovat snížení jemnějších prostorových fluktuací pro vyšší korelační délky.

4.2.1 Chyba aproximované veličiny

Dalším druhem chyby, kterým se lze zabývat v rámci KLR, je chyba na samotné aproximaci veličiny, tj. jakou chybu vneseme do výpočtu zkrácením řady pro zvolenou diskretizaci. Zatím tedy neřešíme odezvu modelu, ale jen modelování vstupního pole vodivosti. Pro vyhodnocení chyby byl nejdříve pro každý testovací příklad vytvořen soubor 5 000 000 vzorků metodou Monte Carlo. Jelikož jsou základními vstupními parametry KLR střední hodnota a směrodatná odchylka parametru, byly i chyby sledovány na těchto statistických veličinách dle vzorců (rov. 4.19) a (rov. 4.20).

¹⁹Označení obrázků (a-c) a (d-f) v (obr. 5) koresponduje se vstupními parametry (a-c) a (d-f) v (obr. 6). Pro každou sadu obrázků byla ale použita odlišná kombinace náhodných čísel.



Obrázek 7: Chyba aproximace veličiny: (a) rozptyl, (b) střední hodnota

$$\varepsilon_{\kappa,k}^{\mu} = \frac{1}{S} \sum_{j=1}^S \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{\kappa_k^{(i)}(y^{(j)}) - \kappa_m^{(i)}(y^{(j)})}{\kappa_m^{(i)}(y^{(j)})} \right| \cdot 100, \quad (4.19)$$

$$\varepsilon_{\kappa,k}^{\sigma} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\text{var}_j \left(\kappa_k^{(i)}(y^{(j)}) - \kappa_m^{(i)}(y^{(j)}) \right)}{\text{var}^{(j)} \left(\kappa_m^{(i)}(y^{(j)}) \right)} \cdot 100, \quad (4.20)$$

kde S je počet simulací a n je počet uzlů konečně prvkové sítě. Index k je označení zkrácení sumy oproti plnému počtu vlastních tvarů m pro danou diskretizaci a index i je pořadnice vektoru konečně prvkové sítě²⁰. Výsledkem je prostorově průměrná relativní chyba, kterou způsobíme zkrácením řady oproti plnému KLR.

Jak lze vidět na (obr. 7), je chyba na střední hodnotě parametru oproti směrodatné odchylce zanedbatelná, což se projeví i na odezvě modelu. Tuto vlastnost následně použijeme při řešení úlohy, viz příloha C.

4.2.2 Ostatní chyby

Jedním druhem chyby, na který často není brán ohled, ačkoliv může mít rozhodující vliv, je chyba způsobená příliš hrubou diskretizací kovarianční funkce²¹. Pro tento druh chyby existují jen obecná doporučení a pravidla, jak přibližně volit jemnost diskretizace vzhledem ke stochastickým vstupním parametrům.

²⁰Pro konkrétní příklad byl zvolen počet simulací $S = 5\,000\,000$. Počet uzlů konečně prvkové sítě je $n = 225$ a tedy i maximální počet vlastních tvarů je $m = 225$, index k je pořadnice osy x na obrázcích (obr. 7).

²¹Ve všech zmíněných příkladech je diskretizace pro kovarianční funkci shodná s konečně prvkovou sítí.

Nejjednodušším kritériem je volba velikosti prvku vzhledem ke korelační délce, kdy poměr velikosti prvku ke korelační délce by neměl přesahovat 0.5 [26], podle [15] je chyba velmi závislá na typu kovarianční funkce. Pro typ 1 v (rov. 4.7) je udávána zanedbatelná chyba při poměru 0.2 z důvodu nediferencovatelnosti funkce v počátku [15], pro typ 2 je zanedbatelná chyba už při poměru 0.5. Jako relativní měřítko velikosti prvku může postačit například poloměr opsané kružnice prvku. Tuto chybu lze obejít například výpočtem KLR na jemnější síti a promítnutí výsledných uzlových hodnot na hrubší síť. Je tedy důležité vědět o omezeních a možných řešeních tohoto problému a s tím si pro účely této práce vystačíme. Další informace je možné najít například v [15, 26].

Chybě odezvy systému v závislosti na počtu vlastních tvarů se věnuje samostatná kapitola 7.

5 Polynomiální Chaos

V této kapitole jsou popsány základní vztahy a vlastnosti polynomiálního chaosu, přičemž se omezuje pouze na Hermitovy polynomy. Detailnější popis, včetně důkazů a odvození je uveden například v [34, 40, 39].

Polynomiálním chaosem se obecně myslí sada polynomů s předem definovanými vlastnostmi, kterými jsou v našem případě ortogonalita ke zvolené míře a spojitost. Pro Hermitovy polynomy se předpokládá, že jsou to funkce standardizovaných normálně rozdělených náhodných veličin, na základě čeho jsou pevně svázány s mírou, vůči které jsou ortogonální. Změna rozdělení náhodné veličiny je tedy spojena se změnou typu polynomu. V této práci jsou náhodné veličiny vždy normálně rozdělené, což dělá z tohoto typu polynomů vhodnou bázi pro zachycení odezvy, respektive transformace vstupních veličin, použitou v následující kapitole. V pokračování této práce bude přistoupeno rovněž k aproximaci log-normálního rozdělení pomocí Hermitových polynomů. Způsob a princip aproximace rozdělení je předveden na samotném závěru této kapitoly. V rámci této práce a předvedeného algoritmu ale nebyl implementován.

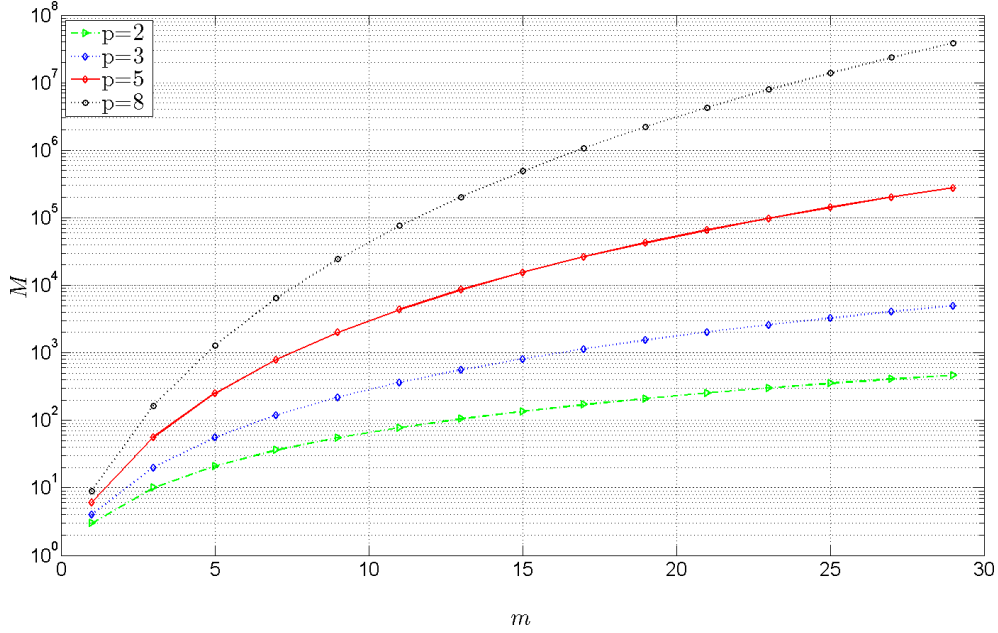
Hermitovy polynomy jsou vzájemně ortogonální funkce splňující

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[h_j(y)h_k(y)] &= \int_R h_j(y)h_k(y) \, d\mathbb{P}(y) \\ &= \int_R h_j(y)h_k(y)\tilde{w}(y) \, dy \\ &= k!\delta_{jk} = \gamma_k\delta_{jk}, \quad \forall j, k = 1, \dots, M,\end{aligned}\tag{5.1}$$

kde $h_j(y)$ jsou jednorozměrné polynomy náhodné proměnné y s rozdělením pravděpodobnosti dle váhy $\tilde{w}(y)$, $d\mathbb{P}(y)$ je pravděpodobnostní míra vůči které je sada polynomů ortogonální a která se v případě spojitých funkcí dá přepsat jako $d\mathbb{P}(y) = \tilde{w}(y) \, dy$, viz [39], δ_{jk} je Kroneckerova delta funkce definovaná jako (rov. 5.2) a γ_k jsou normalizační koeficienty dle (rov. 5.3). Počet báзовých funkcí M pro pokrytí daného problému pak závisí na počtu náhodných proměnných m a maximálním stupni polynomu p a je vyjádřen binomickým koeficientem $M = \binom{m+p}{m}$. Počet báзовých funkcí tedy roste faktoriálně. Příklad trendu růstu M pro různé stupně polynomů je pak na (obr. 8).

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{pro } i = j, \\ 0, & \text{pro } i \neq j. \end{cases}\tag{5.2}$$

$$\mathbb{E}[h_k^2(y)] = \gamma_k.\tag{5.3}$$



Obrázek 8: Počet báзовých funkcí pro stupně polynomů p

Jednotlivé polynomy se získají z diferenciální rovnice jejíž řešení je dáno Rodriguesovým vzorcem [34] jako

$$h_n(y) = (-1)^n e^{-\frac{y^2}{2}} \frac{d^n}{dy^n} e^{-\frac{y^2}{2}} = \left(y - \frac{d}{dy} \right)^n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.4)$$

V případě parametrizace stochastického prostoru, viz kapitola 4, budeme používat polynomy o m proměnných a maximální stupni p , které se získají jako součin jednorozměrných polynomů, tj.

$$H_{\mathbf{k}}(\mathbf{y}) = h_{k_1}(y_1) \dots h_{k_m}(y_m) = \prod_{i=1}^m h_{k_i}, \quad k_1 + \dots + k_m \leq p, \quad (5.5)$$

kde \mathbf{k} je tzv. multi-index, tj. řádek matice o rozměrech $M \times m$, viz (tab. 1) nebo [39, 13, 22], jejíž sloupce identifikují proměnnou a jednotlivé prvky pak stupeň polynomu této proměnné, což usnadňuje manipulaci s vícerozměrnými integrály jako je například (rov. 5.7) nebo (rov. 6.13).

Dalším velmi důležitým vztahem je *diferenční* nebo také *rekurentní* rovnice, která při znalosti dvou polynomů v řadě definuje následující. Pro Hermitovy polynomy je tento vztah dán následující rovnicí

$$h_{n+1}(y) = y h_n(y) - n h_{n-1}(y), \quad (5.6)$$

kde stejný vztah lze uplatnit i pro polynomy více proměnných.

k	multi-index \mathbf{k}	$\prod_{i=1}^m k_i!$	$\sum_{i=1}^m k_i$
1	(0, 0, 0, 0)	1	0
2	(1, 0, 0, 0)	1	\vdots
3	(0, 1, 0, 0)	1	1
4	(0, 0, 1, 0)	1	\vdots
5	(0, 0, 0, 1)	1	
6	(2, 0, 0, 0)	2	
7	(1, 1, 0, 0)	1	
8	(1, 0, 1, 0)	1	\vdots
9	(1, 0, 0, 1)	1	2
10	(0, 2, 0, 0)	2	\vdots
11	(0, 1, 1, 0)	1	
	\dots		
	\dots		
33	(0, 1, 0, 2)	2	\vdots
34	(0, 0, 1, 2)	2	3
35	(0, 0, 0, 3)	6	\vdots

Tabulka 1: Příklad multi-indexové matice pro $m=4$, $p=3$

Vztah mezi vícerozměrnými polynomy a výpočet normalizačních koeficientů je odvozen v (rov. 5.7)²².

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[H_{\mathbf{j}}(\mathbf{y})H_{\mathbf{k}}(\mathbf{y})] &= \int_R H_{\mathbf{j}}(\mathbf{y})H_{\mathbf{k}}(\mathbf{y}) \tilde{w}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \\
&= \int_R \dots \int_R \prod_{r=1}^m h_{j_r} \prod_{s=1}^m h_{k_s} \tilde{w}(y_1) \dots \tilde{w}(y_m) \, dy_1 \dots dy_m \\
&= \int_R \dots \int_R \prod_{r=1}^m h_{j_r} h_{k_r} \tilde{w}(y_1) \dots \tilde{w}(y_m) \, dy_1 \dots dy_m \quad (5.7) \\
&= \prod_{r=1}^m \int_R \dots \int_R h_{j_r} h_{k_r} \tilde{w}(y_r) \, dy_r \\
&= \prod_{r=1}^m (k_r \delta_{jk})! = \prod_{r=1}^m k_r! \delta_{jk}, \quad \forall j, k = 1, \dots, M.
\end{aligned}$$

²²V (rov. 5.7) se přechází z vektorové notace \mathbf{j}, \mathbf{k} do složkové notace, Následně se použijí indexy j, k jako index multi-indexové matice, tj. jako indexy jednotlivých řádků v prvním sloupci (tab. 1).

5.1 Aproximace funkcí

Důvodem k aproximaci funkcí je jejich vyjádření v polynomech nebo jiných funkcích, které dokážeme následně jednodušeji zpracovat. Zde se zaměříme pouze na jeden příklad aproximace známé funkce polynomy. Základní vztahy jsou však obecně platné a lze je využít i na jiné případy. Jak bylo zmíněno v kapitole 2.1, má hydraulická vodivost význam pouze na kladné reálné ose a tedy nesmí mít takový typ rozdělení, který umožňuje této veličině přiřadit záporné číslo. Zatím jsme předpokládali, že $\kappa \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma)$, což umožňuje výskyt záporných hodnot koeficientů (obr. 2). Přímý přechod na log-normální rozdělení (obr. 3) není možný²³ a z toho důvodu se přechází na aproximaci log-normálního rozdělení pomocí Hermitových polynomů.

Prvním krokem je využití možnosti transformace mezi log-normálním a normálním rozdělením podle (rov. 3.7). Dle 3.1 budeme pro ortogonální projekci potřebovat vyjádřit $Z = e^X \sim \mathcal{LN}$ pomocí $Y \sim \mathcal{N}(0, 1)$ jako $X = \mu + \sigma Y$, pak $f(Y) = e^\mu e^{\sigma Y}$.

Dále předpokládáme aproximaci funkce $f(Y)$ ve smyslu lineární kombinace

$$f(Y) \approx f_N(Y) = \sum_{i=1}^N \tilde{f}_i H_i(Y), \quad (5.8)$$

kde f_N značí aproximaci funkce f polynomy do stupně N , $H_i(Y)$ jsou v našem případě Hermitovy polynomy a \tilde{f}_i jsou koeficienty lineární kombinace, které se získají jako

$$\tilde{f}_i = \frac{1}{\gamma_i} \mathbb{E}[f(Y) H_i(Y)], \quad (5.9)$$

kde při znalosti funkce $f(Y)$ lze integrál vždy vyhodnotit a v případě Hermitových polynomů a log-normálního rozdělení existuje analytický vztah (rov. 5.10) pro jeho vyhodnocení [39].

$$\tilde{f}_i = \exp\left(\mu + \frac{\sigma^2}{2}\right) \frac{\sigma^i}{i!}. \quad (5.10)$$

Výsledná aproximace je pak vyjádřena vztahem

$$f_N(Y) = \exp\left(\mu + \frac{\sigma^2}{2}\right) \sum_{i=1}^N \frac{\sigma^i}{i!} H_i(Y). \quad (5.11)$$

²³Změna typu rozdělení je spojena se změnou váhy \tilde{w} v integrálu (rov. 5.1). Daný vztah by šel vyčíslit numericky, ale ve výsledném vztahu by se neobjevila Kroneckerova delta funkce, protože dané polynomy jsou ortogonální pouze k určité váze. Řešení je tedy možné přes použití Laurentových polynomů, nebo aproximaci rozdělení Hermitovými polynomy.

6 Řešení úlohy

Analytické řešení diferenciálních rovnic je známé pouze v některých speciálních případech. Pro praktické úlohy se složitou geometrií a okrajovými podmínkami se obecně přistupuje k numerické aproximaci. Rozšířením řídicích rovnic o náhodnost obecně vzniká sdružená úloha. Pokud se zajímáme právě o takové úlohy, tak se v zásadě používají tři základní přístupy, tj. metoda Monte Carlo, stochastická Galerkinova metoda a stochastická kolokační metoda. Postupně podrobně předvedeme základní principy a jednotlivé kroky řešení každé metody. Následující kapitola porovnává jednotlivé metody jak z hlediska výpočetní náročnosti, přesnosti, tak náročnosti implementace²⁴.

Základním modelem proudění pro nás bude lineární difúzní rovnice s okrajovými podmínkami

$$\begin{aligned} -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\kappa(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x})) &= \tilde{f}(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in D, \\ \mathbf{n}(\mathbf{x}) \cdot (\kappa(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x})) &= \tilde{f}_N(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \partial D_N, \\ u(\mathbf{x}) &= \tilde{f}_D(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \partial D_D, \partial D_N \cup \partial D_D = \partial D. \end{aligned} \quad (6.1)$$

Rozšířený model se stochastickými vstupními parametry a okrajovými podmínkami je definován jako

$$\begin{aligned} -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\kappa_m(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \nabla_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x}, \mathbf{y})) &= \tilde{f}(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in D, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m, \\ \mathbf{n}(\mathbf{x}) \cdot (\kappa_m(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \nabla_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x}, \mathbf{y})) &= \tilde{f}_N(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \partial D_N, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m, \\ u(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \tilde{f}_D(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \partial D_D, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m. \end{aligned} \quad (6.2)$$

6.1 Metoda Monte Carlo

Referenční metodou pro řešení vícerozměrných integrálů bude metoda Monte Carlo pro její průhlednost, rozšíření a minimální zásahy do základního modelu. Jedná se o standardní metodu, kde se k aproximaci stochastického prostoru nepoužívá sada polynomů, ale velké množství simulací deterministického modelu. Tímto krokem se nahradí výpočet vícerozměrných integrálů souborem pseudonáhodných čísel, který dostatečně reprezentuje vstupní statistiku. Stochastický prostor tedy převedeme na předem daný počet *nezávislých* deterministických rovnic. Samotný deterministický problém, respektive základní model bude, už jen v prostoru, řešen Galerkinovou metodou, které se podrobněji věnuje kapitola 6.2.

²⁴Výpočetní náročností se myslí jak potřebná doba výpočtu, tak hardwarové nároky pro samotné spuštění simulace. Není však brán ohled na vlastní implementaci jednotlivých metod.

Nejdříve zpracujeme náhodnost vstupující do rovnice a následně řešení v prostorových souřadnicích. Smyslem metody Monte Carlo je vynucení rovnosti (rov. 6.3) v jednotlivých náhodně vygenerovaných uzlech $\mathbf{y}^{(k)}$. Zavedeme tedy soubor náhodných čísel $\Psi_S = \{\mathbf{y}^{(1)}, \mathbf{y}^{(2)}, \dots, \mathbf{y}^{(S)}\}$, kde $\mathbf{y}^{(k)} \in \mathbb{R}^{m+1}$ je k -tá realizace všech náhodných proměnných, S je počet simulací a m je počet vlastních tvarů KLR. Každý řádek matice $\Psi_S \in \mathbb{R}^{m+1, S}$ je pak $\Psi_S^{(i, \cdot)} \sim \mathcal{N}(0, 1)$ jediná náhodná proměnná s $i = 1, \dots, S$ simulacemi a nezávislost jednotlivých proměnných je zaručena vynucením podmínky $\text{corr}(\Psi_S^{(i, \cdot)}, \Psi_S^{(j, \cdot)}) = \delta_{ij}$ [39].

Aplikací předchozího kroku ztratí rovnice (rov. 6.3) závislost na náhodné proměnné \mathbf{y} , protože $\mathbf{y}^{(k)}$, $k = 1, \dots, S$ už nemá charakter náhodné proměnné ale pevně zvolených bodů ve zvoleném náhodném prostoru.

$$\begin{aligned} -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}^{(k)}) \nabla_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x}, \mathbf{y}^{(k)}) \right) &= \tilde{f}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in D, \\ \mathbf{n}(\mathbf{x}) \cdot \left(\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}^{(k)}) \nabla_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x}, \mathbf{y}^{(k)}) \right) &= \tilde{f}_N(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \partial D_N, \\ u(\mathbf{x}, \mathbf{y}^{(k)}) &= \tilde{f}_D(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \partial D_D, \quad \partial D_N \cup \partial D_D = \partial D. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Výsledkem je sada deterministických diferenciálních rovnic, které se liší pouze vstupním parametrem. Řešení úlohy u s náhodným polem κ pro přehlednost přepíšeme jako

$$\begin{aligned} u^{(k)}(\mathbf{x}) &= u(\mathbf{x}, \mathbf{y}^{(k)}), \quad \text{pro } k = 1, \dots, S, \\ \kappa^{(k)}(\mathbf{x}) &= \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}^{(k)}), \quad \text{pro } k = 1, \dots, S. \end{aligned}$$

Pro každou k -tou rovnici pak hledáme pouze deterministické řešení $u^{(k)}$ pro pole vodivosti $\kappa^{(k)}$ ve tvaru

$$u^{(k)}(\mathbf{x}) \approx u_N^{(k)}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \tilde{u}_i^{(k)} N_i(\mathbf{x}), \quad (6.4)$$

kde \tilde{u}_i jsou neznámé koeficienty a $N_i(\mathbf{x})$ jsou prostorové báze funkce.

$$\kappa^{(k)}(\mathbf{x}) \approx \kappa_m^{(k)}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{m+1} y_i^{(k)} \hat{\phi}_i(\mathbf{x}). \quad (6.5)$$

Aplikací Galerkinovy projekce 6.2 získáme následující rozšíření

$$-\int_D \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\kappa_m^{(k)}(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} u_N^{(k)}(\mathbf{x}) \right) N_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_D f(\mathbf{x}) N_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \quad (6.6)$$

kde $N_j(\mathbf{x})$ jsou testovací funkce shodné s aproximačními bázeovými funkcemi vybranými pro hledané řešení. Následně se použije integrace per partes a po vyhodnocení známých integrálů získáme soustavu lineárních rovnic.

$$\begin{aligned}
-\int_D \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\kappa_m^{(k)}(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \sum_{i=1}^n \tilde{u}_i^{(k)} N_i(\mathbf{x}) \right) N_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} &= \int_D f(\mathbf{x}) N_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\
\int_D \kappa_m^{(k)}(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^N \tilde{u}_i^{(k)} \nabla_{\mathbf{x}} N_i(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} N_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} &= \int_D f(\mathbf{x}) N_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\
\int_D \kappa_m^{(k)}(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^n \tilde{u}_i^{(k)} B_i(\mathbf{x}) B_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} &= \int_D f(\mathbf{x}) N_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\
\sum_{i=1}^n \tilde{u}_i^{(k)} \int_D \kappa_m^{(k)}(\mathbf{x}) B_i(\mathbf{x}) B_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} &= \int_D f(\mathbf{x}) N_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\
\sum_{i=1}^n a_{ij}^{(k)} \tilde{u}_i^{(k)} &= b_j \\
A^{(k)} u^{(k)} &= b.
\end{aligned} \tag{6.7}$$

kde $a_{ij}^{(k)} = \int_D \kappa_m^{(k)}(\mathbf{x}) B_i(\mathbf{x}) B_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}$ a $b_j = \int_D f(\mathbf{x}) N_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}$. Způsobu vyhodnocení integrálů a algoritmickému zpracování se věnuje příloha [B](#).

Výsledkem je matice $\tilde{u}_i^{(k)} \in \mathbb{R}^{n,S}$ uzlových hodnot konečně prvkové sítě.

6.2 Galerkinova metoda

Dalším přístupem je aproximace stochastického prostoru pomocí sady polynomů a řešení úlohy pomocí dvojnásobné Galerkinovy projekce. Samotná metoda je přisuzována ruskému matematikovi Borisu Galerkinovi a jde o obecný postup pro řešení diferenciálních rovnic nahrazením tzv. *silné formulace* její integrální formou, tj. *slabou formulací*. Metoda byla rozpracována ve dvacátých letech 20. století, ale významnějšího rozvoje se dočkala až v padesátých letech díky pokroku výpočetní techniky. Dnes je nejpoužívanější metodou pro numerické simulace nejrůznějších fyzikálních problémů.

Řešení úlohy hledáme podle [\[39\]](#) ve tvaru

$$u(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \approx u_M(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{j=1}^M \tilde{u}_j(\mathbf{x}) H_j(\mathbf{y}), \tag{6.8}$$

kde $M = \binom{m+p}{m}$ je binomický koeficient, který udává potřebný počet vzájemně ortogonálních bází pro aproximaci m -dimenzionálními Hermitovými polynomy $H_j(\mathbf{y})$ o maximálním celkovém stupni p , viz kapitola [5](#) nebo příloha [A](#).

Substitucí (rov. 6.8) a (rov. 4.4) do rozšířené rovnice (rov. 6.2) získáme

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\kappa_m(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \nabla_{\mathbf{x}} u_M(\mathbf{x}, \mathbf{y})) + f(\mathbf{x}) = r(u_M, \kappa_m, f) \neq 0, \quad (6.9)$$

kde $r(u_M, \kappa_m, f)$ je residuum diskretizované úlohy, pro které nemůžeme vynutit rovnost v celém prostoru, protože by to znamenalo, že jsme našli analytické řešení.

Uvažujme \mathbb{P}_p^m jako prostor všech m -dimenzionálních polynomů do stupně p . Galerkinův přístup je založen na nalezení takového řešení v \mathbb{P}_p^m , že residuum (rov. 6.9) je na zvolený prostor ortogonální v L_w^2 smyslu, tj.

$$\|r(u_M, \kappa_m, f) H_k\|_{L_w^2} = \mathbb{E}[r(u_M, \kappa_m, f) H_k] = 0, \quad \forall k = 1, \dots, M. \quad (6.10)$$

Zpětným rozepsáním předchozího vztahu získáme rovnici

$$\mathbb{E} \left[-\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\sum_{i=1}^{m+1} \hat{\phi}_i(\mathbf{x}) y_i \nabla_{\mathbf{x}} \left(\sum_{j=1}^M \tilde{u}_j(\mathbf{x}) H_j(\mathbf{y}) \right) \right) H_k(\mathbf{y}) \right] = \mathbb{E}[f(\mathbf{x}) H_k(\mathbf{y})], \quad (6.11)$$

přeskupením všech známých členů přepíšeme rovnici na

$$\sum_{i=1}^{m+1} \sum_{j=1}^M -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\hat{\phi}_i(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \tilde{u}_j(\mathbf{x})) \mathbb{E}[y_i H_j(\mathbf{y}) H_k(\mathbf{y})] = \mathbb{E}[f(\mathbf{x}) H_k(\mathbf{y})]. \quad (6.12)$$

Využitím diferenční rovnice (rov. 5.6) a ortogonalit polynomů (rov. 5.7) jsme vždy schopni vyhodnotit následující integrál

$$\mathbb{E}[y_i H_j(\mathbf{y}) H_k(\mathbf{y})] = e_{ijk}, \quad \forall j, k = 1, \dots, M \wedge \forall i = 1, \dots, m+1. \quad (6.13)$$

Algoritmické implementaci je věnována příloha A.

Pravá strana rovnice se vyhodnotí dle

$$\mathbb{E}[f(\mathbf{x}) H_k(\mathbf{y})] = f(\mathbf{x}) \mathbb{E}[H_1(\mathbf{y}) H_k(\mathbf{y})] = f(\mathbf{x}) \delta_{1k} = \hat{f}_k(\mathbf{x}), \quad \forall k = 1, \dots, M. \quad (6.14)$$

Po vyhodnocení známých integrálů v rovnici (rov. 6.12), tj. (rov. 6.14, 6.13), zanikne závislost rovnice na náhodných proměnných \mathbf{y} a získáme M sdružených deterministických diferenciálních rovnic ve složkové formulaci

$$\sum_{i=1}^{m+1} \sum_{j=1}^M -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\hat{\phi}_i(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \tilde{u}_j(\mathbf{x})) e_{ijk} = \hat{f}_k(\mathbf{x}), \quad \forall k = 1, \dots, M. \quad (6.15)$$

Při přepsání vztahu (rov. 6.16) získáme přehlednější maticovou formu rozšířených rovnic (rov. 6.17).

$$A_{jk}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{m+1} \hat{\phi}_i(\mathbf{x}) e_{ijk}. \quad (6.16)$$

$$-\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{A}(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})) = \hat{\mathbf{f}}(\mathbf{x}). \quad (6.17)$$

Řešení v prostorových souřadnicích se provede stejně jako v předchozí kapitole 6.1. Tj. předpokládáme řešení ve tvaru

$$u(\mathbf{x}) \approx u_j(\mathbf{x}) = \sum_{r=1}^n \tilde{u}_{jr} N_r(\mathbf{x}). \quad (6.18)$$

Dosazením do (rov. 6.15) a analogií (rov. 6.10) v prostorových souřadnicích a následnými úpravami získáme

$$\begin{aligned} - \int_D \sum_{i=1}^{m+1} \sum_{j=1}^M \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\hat{\phi}_i(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} \sum_{r=1}^n \tilde{u}_{jr} N_r(\mathbf{x}) \right) e_{ijk} N_s(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} &= \int_D \hat{f}_k(\mathbf{x}) N_s(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\ \int_D \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^{m+1} \left(\hat{\phi}_i(\mathbf{x}) e_{ijk} \right) \sum_{r=1}^n \tilde{u}_{jr} \nabla_{\mathbf{x}} N_r(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} N_s(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} &= \int_D \hat{f}_k(\mathbf{x}) N_s(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\ \int_D \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^{m+1} \left(\hat{\phi}_i(\mathbf{x}) e_{ijk} \right) \sum_{r=1}^n \tilde{u}_{jr} B_r B_s \, d\mathbf{x} &= \int_D \hat{f}_k(\mathbf{x}) N_s(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\ \sum_{j=1}^M \sum_{r=1}^N \tilde{u}_{jr} \int_D \sum_{i=1}^{m+1} \left(\hat{\phi}_i(\mathbf{x}) e_{ijk} \right) B_r B_s \, d\mathbf{x} &= \int_D \hat{f}_k(\mathbf{x}) N_s(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\ \sum_{j=1}^M \sum_{r=1}^N \tilde{u}_{jr} \sum_{i=1}^{m+1} e_{ijk} \int_D \hat{\phi}_i(\mathbf{x}) B_r(\mathbf{x}) B_s(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} &= \int_D \hat{f}_k(\mathbf{x}) N_s(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\ \sum_{j=1}^M \sum_{r=1}^n \tilde{u}_{jr} \sum_{i=1}^{m+1} e_{ijk} b_{irs} &= \hat{f}_{ks}, \forall k = 1, \dots, M \\ &\forall s = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Výsledkem je soustava sdružených blokových lineárních rovnic $Au = b$, kde $u, b \in \mathbb{R}^{Mn}$ a $A \in \mathbb{R}^{Mn, Mn}$, kterou lze zapsat jako

$$\begin{aligned} A_{(k-1)n+s, (j-1)n+r} &= \sum_{i=1}^{m+1} e_{ijk} b_{irs}, \quad b_{(k-1)n+s} = \delta_{1k} \int_D f(\mathbf{x}) N_s(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \\ &\forall k = 1, \dots, M, \forall s = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (6.20)$$

A výsledný vektor odezvy u_{jr} je vektorem koeficientů báзовých funkcí dle

$$u(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \approx \sum_{j=1}^M \sum_{r=1}^n \tilde{u}_{jr} N_r(\mathbf{x}) H_j(\mathbf{y}). \quad (6.21)$$

6.3 Stochastická kolokace

Poslední zmíněná metoda je s nadsázkou řečeno kombinací předchozích dvou. Čistá Galerkinova projekce je provedena pro řešení prostorového problému, zatímco pro popsání stochastického prostoru se vynutí podobná rovnost jako v případě (rov. 6.10) s tím rozdílem, že se nepožaduje splnění rovnosti v integrální míře na celém intervalu, ale pouze v předem určených bodech daných tzv. *řádkou mřížkou* [37], tj. velmi podobně jako v případě metody Monte Carlo 6.1. Klíčový v rozlišení těchto dvou metod je výběr návrhových bodů. Zatímco metoda Monte Carlo vybírá návrhové body náhodně, u stochastické kolokace jsou tyto body určeny předem. Základním smyslem této metody a použití řídké mřížky je snížení počtu bodů a rekonstrukce polynomiálního chaosu na získané odezvě. Logice redukce počtu návrhových bodů se podrobněji věnuje například [27, 38] a základní teorie je popsána v [39].

Řešení deterministického problému se věnovala kapitola 6.1. Jediným rozdílem bude vstupní parametr Ψ_S , který nyní obsahuje odlišnou sadu bodů a počet simulací S je nyní dán počtem návrhových bodů řídké mřížky. Výsledkem je odezva systému v jednotlivých návrhových bodech, tj. $\{\mathbf{y}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k)}\}_{k=1}^S$.

Stejně jako v případě Galerkinovy metody použijeme k aproximaci Hermitovy polynomy. Nyní ale máme k dispozici soubor výsledků v jednotlivých uzlech $\{\mathbf{y}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k)}\}$ a nebudeme potřebovat stochastickou Galerkinovu projekci pro získání potřebných koeficientů, ale pouze zrekonstruujeme polynomiální chaos na vybraném souboru uzlů. Z kapitoly 5.1 víme, že nejlepší aproximaci pro vybraný prostor polynomů v $L_{2,w}$ smyslu pro známou funkci u získáme jako

$$\tilde{u}_i = \frac{1}{\gamma_i} \mathbb{E}[u(y) H_i(y)] = \int_R u(y) H_i(y) \rho(y) dy. \quad (6.22)$$

$$u(y) \approx u_N(y) = \sum_{i=1}^N \tilde{u}_i H_i(y), \quad (6.23)$$

kde u_N značí aproximaci funkce u polynomy do stupně N , $H_i(\mathbf{y})$ jsou v našem případě Hermitovy polynomy a \tilde{u}_i jsou koeficienty lineární kombinace.

Každý integrál následně můžeme aproximovat pomocí integračních pravidel, tzv. kvadratur, pomocí kterých převedeme integrál na konečnou sumu

$$\tilde{u}_i \approx \frac{1}{\gamma_i} \sum_{k=1}^M u(y^{(k)}) H_i(y^{(k)}) \alpha_i^{(k)}, \quad (6.24)$$

kde $y^{(k)}$ nyní hrají roli integračních bodů s odpovídající vahou $\alpha_i^{(k)}$.

6.4 Vyhodnocení základní statistiky

Metody založené na aproximaci polynomy se obecně liší od metody Monte Carlo, která je ve smyslu vyhodnocení statistických momentů přímočará, zatímco stochastický Galerkin a stochastická kolokace potřebují nejdříve matematicky zpracovat.

Výsledkem metody Monte Carlo je matice o rozměrech $u_i^{(k)}$, kde $k = 1, \dots, S$ a $i = 1, \dots, n$. S je počet simulací a n je počet uzlů konečně prvkové sítě. Každému uzlu $u_i^{(k)}$ tedy náleží jeden sloupec matice $u_i^{(k)}$, který obsahuje transformaci vstupní statistiky danou difúzní rovnicí. Vyhodnocení střední hodnoty μ_i pro uzel i konečně prvkové sítě se provede jako

$$\mu_i = \frac{1}{S} \sum_{k=1}^S u_i^{(k)}. \quad (6.25)$$

Rozptyl σ_i^2 pak dle definice jako

$$\sigma_i^2 = \frac{1}{S} \sum_{k=1}^S \left(u_i^{(k)} - \mu_i \right)^2. \quad (6.26)$$

Zpracování výsledků metod založených na polynomiálním chaosu je složitější, protože matice u_{jr} není maticí výsledných uzlových hodnot, ale maticí koeficientů jednotlivých bázových funkcí.

Střední hodnota odezvy se vypočítá dle (rov. 6.27), rozptyl dle (rov. 6.28).

$$\begin{aligned} \mu_{u_M}(\mathbf{x}) &= \mathbb{E}[u_{M,i}(\mathbf{x}, \mathbf{y})] = \int_R \sum_{j=1}^M \tilde{u}_j(\mathbf{x}) H_j(\mathbf{y}) \tilde{w}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \\ &= \sum_{j=1}^M \tilde{u}_j(\mathbf{x}) \int_R H_1(\mathbf{y}) H_j(\mathbf{y}) \tilde{w}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \\ &= \sum_{j=1}^M \tilde{u}_j(\mathbf{x}) \prod_{i=1}^m j_i! \delta_{1j} \\ &= \tilde{u}_1(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (6.27)$$

V obou případech vyhodnocení základní statistiky $(\mu_{u_M}, \sigma_{u_M}^2)$ je výsledek závislý na prostorové souřadnici \mathbf{x} . Z praktického hlediska budeme dále výsledkem mínit pouze vektor uzlových hodnot na konečně prvkové síti bez příslušné prostorové aproximace.

$$\begin{aligned}
\sigma_{u_M}^2(\mathbf{x}) &= \mathbb{E} \left[(u_{M,i}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mu_{u_M})^2 \right] \\
&= \int_R \left[\sum_{j=1}^M \tilde{u}_j(\mathbf{x}) H_j(\mathbf{y}) - \tilde{u}_1(\mathbf{x}) \right] \left[\sum_{k=1}^M \tilde{u}_k(\mathbf{x}) H_k(\mathbf{y}) - \tilde{u}_1(\mathbf{x}) \right] \tilde{w}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \\
&= \sum_{j=2}^M \sum_{k=2}^M \int_R \tilde{u}_j(\mathbf{x}) H_j(\mathbf{y}) \tilde{u}_k(\mathbf{x}) H_k(\mathbf{y}) \tilde{w}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \\
&= \sum_{j=2}^M \sum_{k=2}^M \tilde{u}_j(\mathbf{x}) \tilde{u}_k(\mathbf{x}) \int_R H_j(\mathbf{y}) H_k(\mathbf{y}) \tilde{w}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \\
&= \sum_{j=2}^M \sum_{k=2}^M \tilde{u}_j(\mathbf{x}) \tilde{u}_k(\mathbf{x}) \prod_{i=1}^m k_i! \delta_{jk} \\
&= \sum_{k=2}^M \tilde{u}_k^2(\mathbf{x}) \prod_{i=1}^m k_i!.
\end{aligned} \tag{6.28}$$

V poslední kapitole je možné získat náhled na možné rizika a posouzení protipovodňových opatření. Z tohoto hlediska je jako jedna z nejdůležitějších veličin rychlost proudění vyjádřená jako součin tenzoru vodivosti a gradientu hydraulických výšek (rov. 2.5). Z důvodu přehlednosti vyjádříme rychlost proudění jako skalární pole, kde hodnota v každém bodě reprezentuje normu, tj. skutečnou rychlost proudění. Informace která se tímto krokem ztrácí je směr proudění. V takovém případě se základní statistika této veličiny vypočítá jako

$$\begin{aligned}
\mu_q(\mathbf{x}) &= \mathbb{E}[\mathbf{q}(\mathbf{x}, \mathbf{y})] = \mathbb{E}[\kappa \nabla u] \approx \mathbb{E} \left[\kappa_m(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \nabla_x \sum_{j=1}^M \sum_{r=1}^n \tilde{u}_{jr} N_r(\mathbf{x}) H_j(\mathbf{y}) \right] \\
&= \int_R \kappa_m(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \nabla_x \sum_{j=1}^M \sum_{r=1}^n \tilde{u}_{jr} N_r(\mathbf{x}) H_j(\mathbf{y}) \tilde{w}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \\
&= \sum_{j=1}^M \sum_{r=1}^n \tilde{u}_{jr} \nabla_x N_r(\mathbf{x}) \int_R \kappa_m(\mathbf{x}, \mathbf{y}) H_j(\mathbf{y}) \tilde{w}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \\
&= \sum_{j=1}^M \sum_{r=1}^n \tilde{u}_{jr} \mathbf{B}_r(\mathbf{x}) \int_R \sum_{i=1}^{m+1} \hat{\phi}_i(\mathbf{x}) y_i H_j(\mathbf{y}) \tilde{w}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \\
&= \sum_{i=1}^{m+1} \sum_{j=1}^M \sum_{r=1}^n \tilde{u}_{jr} \mathbf{B}_r(\mathbf{x}) \hat{\phi}_i(\mathbf{x}) \int_R y_i H_j(\mathbf{y}) \tilde{w}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \\
&= \sum_{i=1}^{m+1} \sum_{j=1}^{m+1} \sum_{r=1}^n \tilde{u}_{jr} \mathbf{B}_r(\mathbf{x}) \hat{\phi}_i(\mathbf{x}) e_{ij} \\
&= \sum_{i,j=1}^{m+1} \sum_{r=1}^n \tilde{u}_{jr} \mathbf{B}_r(\mathbf{x}) \hat{\phi}_i(\mathbf{x}) \delta_{ij} \\
&= \sum_{i=1}^{m+1} \sum_{r=1}^n \tilde{u}_{ir} \mathbf{B}_r(\mathbf{x}) \hat{\phi}_i(\mathbf{x}).
\end{aligned} \tag{6.29}$$

Poslední krok bere v úvahu lexikografické řazení bází, viz (tab. 4). Poněkud překvapivě zahrnuje průměrná hodnota rychlostí i polynomy prvních stupňů. Při bližším pohledu a zejména při vyhodnocení předchozího vztahu se ale ukazuje, že vliv těchto členů je zanedbatelný.

Vyhodnocením předchozího vztahu zároveň získáme průměrnou rychlost ve dvou směrech. Dalším krokem ve zpracování výsledků je tedy vyjádření velikosti rychlosti jako normy rychlosti v obou směrech, která je zavedena pouze v algoritmickém zpracování.

$$\begin{aligned}
\sigma_q^2(\mathbf{x}) &= \mathbb{E} \left[(q(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mu_q)^2 \right] = \mathbb{E} \left[q(\mathbf{x}, \mathbf{y})^2 - \mu_q^2 \right] = \mathbb{E} \left[q(\mathbf{x}, \mathbf{y})^2 \right] - \mu_q^2 \\
&\approx \mathbb{E} \left[\left\{ \kappa_m \nabla_x \sum_{j=1}^M \tilde{u}_{j,N}(\mathbf{x}) H_j(\mathbf{y}) \right\} \left\{ \kappa_m \nabla_x \sum_{k=1}^M \tilde{u}_{k,N}(\mathbf{x}) H_k(\mathbf{y}) \right\} \right] - \mu_q^2 \\
&\approx \sum_{j,k=1}^M \nabla_x \tilde{u}_{j,N}(\mathbf{x}) \nabla_x \tilde{u}_{k,N}(\mathbf{x}) \mathbb{E} \left[\kappa_m^2 H_j(\mathbf{y}) H_k(\mathbf{y}) \right] - \mu_q^2 \\
&\approx \sum_{j,k=1}^M \nabla_x \tilde{u}_{j,N}(\mathbf{x}) \nabla_x \tilde{u}_{k,N}(\mathbf{x}) \mathbb{E} \left[\sum_{i=1}^{m+1} \hat{\phi}_i(\mathbf{x}) y_i \sum_{t=1}^{m+1} \hat{\phi}_t(\mathbf{x}) y_t H_j(\mathbf{y}) H_k(\mathbf{y}) \right] - \mu_q^2 \\
&\approx \sum_{j,k=1}^M \nabla_x \tilde{u}_{j,N}(\mathbf{x}) \nabla_x \tilde{u}_{k,N}(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^{m+1} \sum_{t=1}^{m+1} \hat{\phi}_i(\mathbf{x}) \hat{\phi}_t(\mathbf{x}) \mathbb{E} \left[y_i y_t H_j(\mathbf{y}) H_k(\mathbf{y}) \right] - \mu_q^2 \\
&\approx \sum_{j,k=1}^M \nabla_x \tilde{u}_{j,N}(\mathbf{x}) \nabla_x \tilde{u}_{k,N}(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^{m+1} \lambda_i \mathbb{E} \left[y_i^2 H_j(\mathbf{y}) H_k(\mathbf{y}) \right] - \mu_q^2 \\
&\approx \sum_{i=1}^{m+1} \sum_{j,k=1}^M \nabla_x \tilde{u}_{j,N}(\mathbf{x}) \nabla_x \tilde{u}_{k,N}(\mathbf{x}) e_{ijk} - \mu_q^2 \\
&\approx \sum_{i=1}^{m+1} \sum_{j,k=1}^M \sum_{r,s=1}^n \tilde{u}_{jr} \mathbf{B}_r(\mathbf{x}) \tilde{u}_{ks} \mathbf{B}_s(\mathbf{x}) e_{ijk} - \mu_q^2 \\
&\approx \sum_{i=1}^{m+1} \sum_{j,k=1}^M \sum_{r,s=1}^n \tilde{u}_{jr} \tilde{u}_{ks} \mathbf{B}_r(\mathbf{x}) \mathbf{B}_s(\mathbf{x}) e_{ijk} - \mu_q^2.
\end{aligned} \tag{6.30}$$

Ostatní statistické momenty dalších veličin je možné dopočítat analogicky dle předchozích postupů s odkazem na kapitulu 3.2.

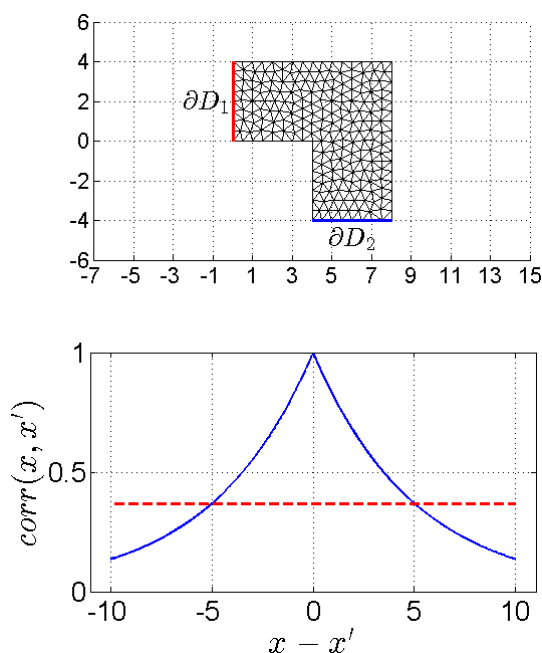
7 Porovnání metod

Jako referenční metoda pro porovnání chyby i časové náročnosti poslouží metoda Monte Carlo, pro kterou byla rovněž implementována její paralelní verze. Ve všech zmíněných případech byly výpočty provedeny na shodném počítačovém vybavení a se stejnými vstupními parametry.

Pracovní sestava

Procesor	2x Intel Xeon E5-2620 @ 2,0GHz
Grafické karty	2x NVIDIA Quadro 4000
Operační paměť	12x8GB (96GB) DDR3 1600MHz ECC
Disk systémový	OCZ RevoDrive 80GB
Diskové pole datové	4x3TB WD Red RAID5 (9TB)
Základní deska	Super X9DRG-QF
Operační systém	Microsoft Windows 7, 64bit

Příklad 7.1. Pro názornou ukázkou vlastností modelu uvažujme doménu s diskretizací dle (obr. 9). Pro rozdělení domény na konečné prvky byla použita funkce *Mesh2d* ve verzi pro Matlab [7].



Obrázek 9: Doména s okrajovými podmínkami a korelační funkcí pro (př. 7.1)

Základní prostorové parametry:

- Počet elementů: 384,
- Počet uzlů: 225,
- Okrajové podmínky: dle (obr. 9):

$$\begin{aligned} u(\mathbf{x}) &= 0, & \mathbf{x} \in \partial D_1, \\ u_p(\mathbf{x}) &= 0, & \mathbf{x} \in \partial D_2, \\ \mathbf{n}(\mathbf{x}) \cdot (\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \nabla_x u(\mathbf{x}, \mathbf{y})) &= 0, & \mathbf{x} \in \partial D_3 = (\partial D_1 \cup \partial D_2) \cap \partial D. \end{aligned}$$

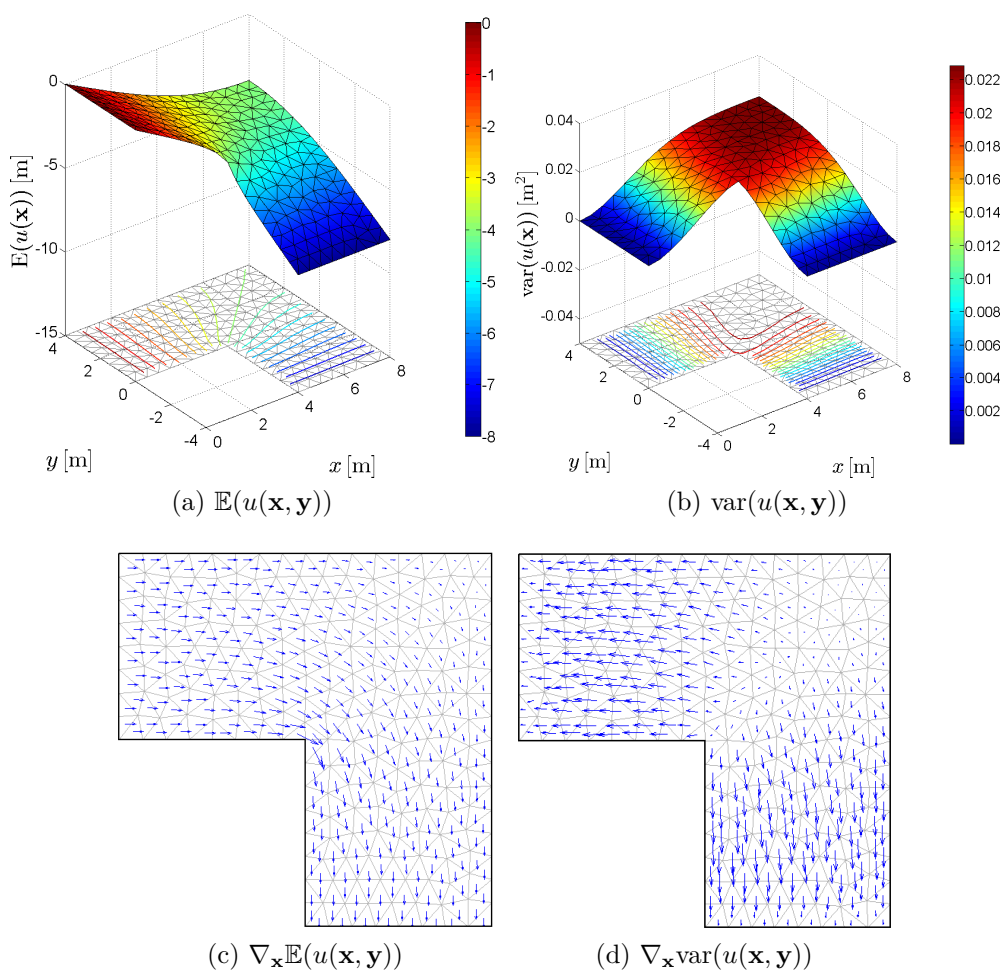
Základní stochastické parametry:

- Počet simulací S (MC): 5 000 000,
- Kovarianční funkce: $C_\kappa = \sigma^2 \exp\left(-\left|\frac{x-x'}{l_x}\right| - \left|\frac{y-y'}{l_y}\right|\right)$,
- Rozptyl: $\sigma^2 = 1$ [m/rok]²,
- Korelační délky: $l_x = l_y = 5$ m,
- Střední hodnota tenzoru filtrace: $\mu_\kappa(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 10 & 0 \\ 0 & 10 \end{bmatrix}$ [m/rok].

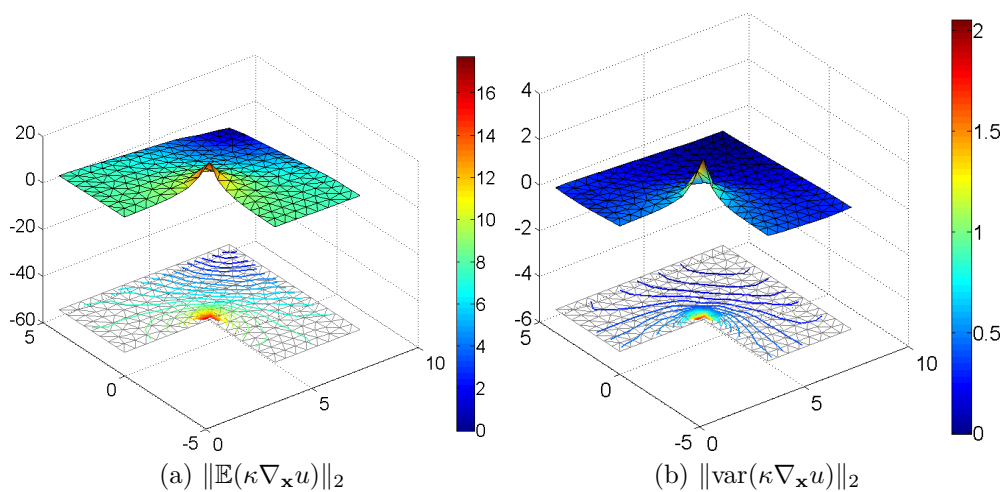
Zadáním příkladu jsme zafixovali fyzickou doménu, stejně jako okrajové podmínky a prostorovou diskretizaci. Částečně proměnnou tedy zůstane stochastická část úlohy, které vlastnosti budeme porovnávat z hlediska všech metod. Úplná volnost je omezena faktem, že pro diskretizaci kovarianční funkce byla vždy použita stejná síť.

Pro názornou ukázkou je na (obr. 9) zároveň s doménou ve stejném měřítku vykreslen řez korelační funkcí (rov. 4.13) podél osy x , který udává vzájemnou korelaci dvou bodů v prostoru pro konkrétní příklad. Červeně je pak vyznačena korelace pro danou korelační délku $l_x = l_y = 5$ m.

Jako hlavní výsledky byly vybrány směrodatná odchylka a střední hodnota pole odezvy (obr. 10) a rychlosti proudění (obr. 11).



Obrázek 10: Odezva modelu pro (př. 7.1): (a,c) střední hodnota, (b,d) rozptyl.



Obrázek 11: Rychlost proudění pro (př. 7.1): (a) střední hodnota, (b) rozptyl.

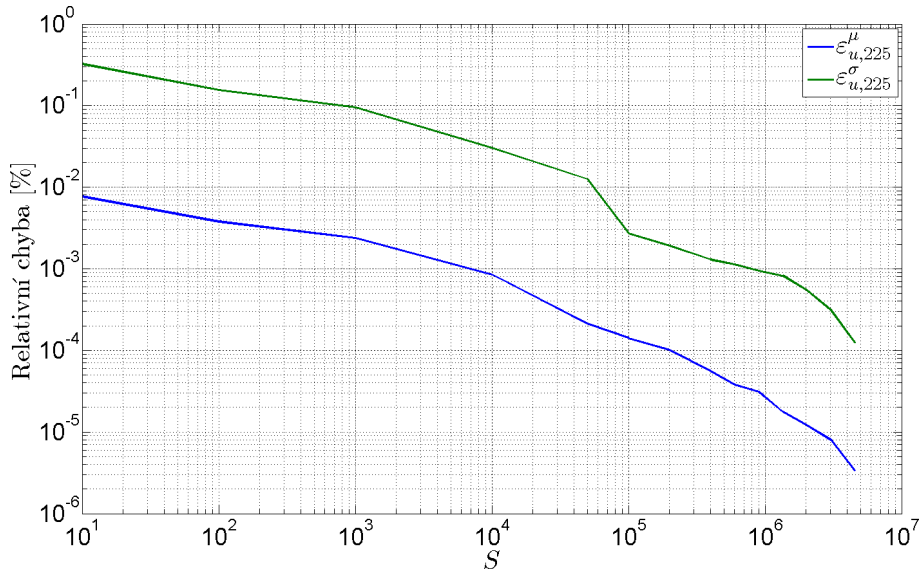
Následně pak může být zkoumána chyba na odezvě modelu způsobená jak zkrácením řady κ_m , počtem simulací, tak volbou stupně aproximačního polynomu v případě Galerkinovy metody. V případě metody Monte Carlo byla chyba vyhodnocena dle následujících vzorců

$$\varepsilon_{u,k}^{\mu} = \frac{1}{S} \sum_{j=1}^S \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{u_k^{(i)}(y_j) - u_m^{(i)}(y_j)}{u_m^{(i)}(y_j)} \right| \cdot 100, \quad (7.1)$$

$$\varepsilon_{u,k}^{\sigma} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\text{var}_j \left(u_k^{(i)}(y_j) - u_m^{(i)}(y_j) \right)}{\text{var}_j \left(u_m^{(i)}(y_j) \right)} \cdot 100, \quad (7.2)$$

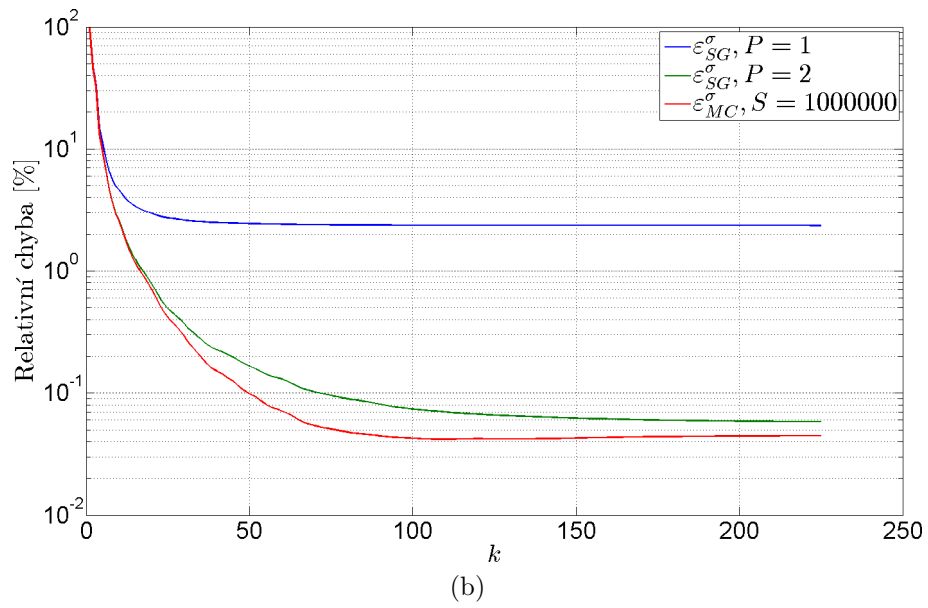
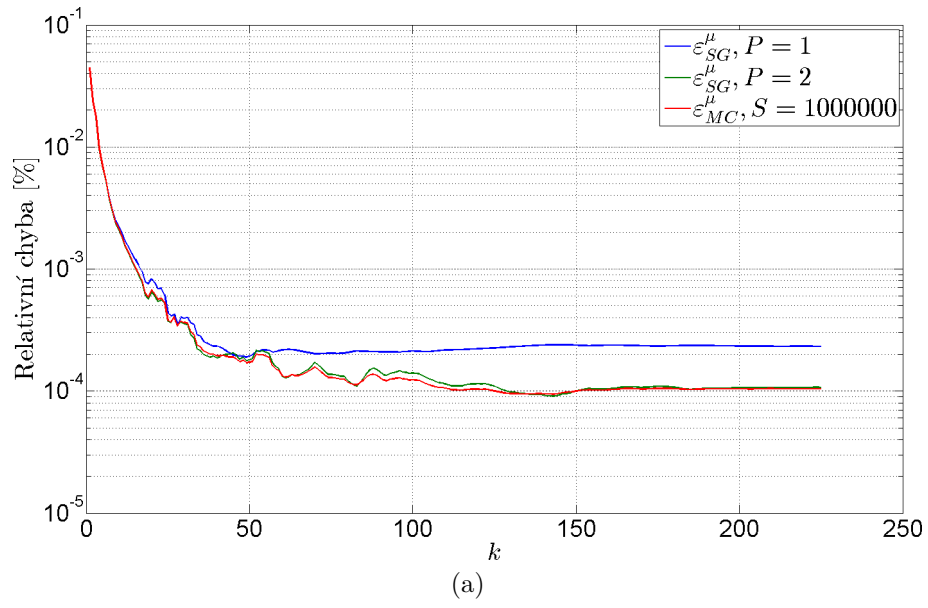
kde S je počet simulací a n je počet uzlů konečně prvkové sítě. Index k je označení zkrácení sumy oproti plnému počtu vlastních tvarů m pro danou diskretizaci a index i je pořadnice vektoru konečně prvkové sítě²⁵. Výsledkem je pak průměrná relativní chyba na odezvě modelu, kterou způsobíme zkrácením řady oproti plnému KLR, viz (obr. 13).

V případě metody Monte Carlo je do výpočtu kromě zkrácení sumy κ_m výsledná chyba na odezvě způsobena i snížením počtu simulací. Následující graf pak ukazuje trend snížení chyby pro různé volby počtu simulací



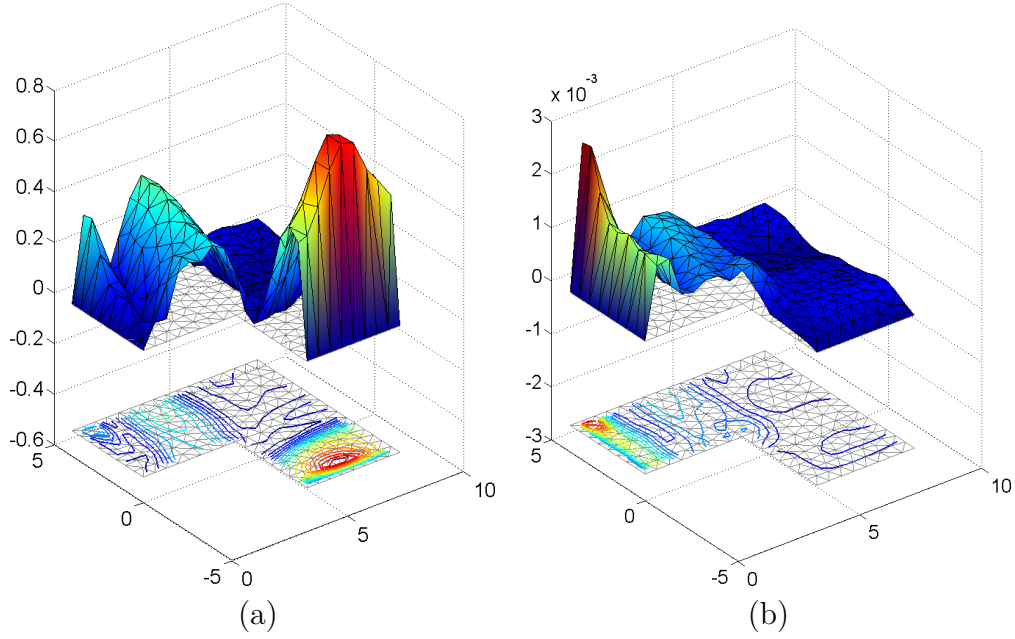
Obrázek 12: Chyba na odezvě v závislosti na počtu simulací S .

²⁵Pro konkrétní příklad byl zvolen počet simulací $S = 5\,000\,000$. Počet uzlů konečně prvkové sítě je $n = 225$ a tedy i maximální počet tvarů je $m = 225$, index k je pak pořadnice x osy na obrázcích (obr. 7).



Obrázek 13: Porovnání chyby jednotlivých metod při zkrácení sumy κ_m dle (rov. 7.2) a (rov. 7.1).

Průměrem přes všechny uzly ztrácíme přehled o maximální chybě a o informaci, kde se chyba prostorově koncentruje. Prostorové rozložení chyby na hydraulických výškách je předmětem následujících obrázků



Obrázek 14: Prostorové rozložení chyby: (a) rozptyl, (b) střední hodnota,

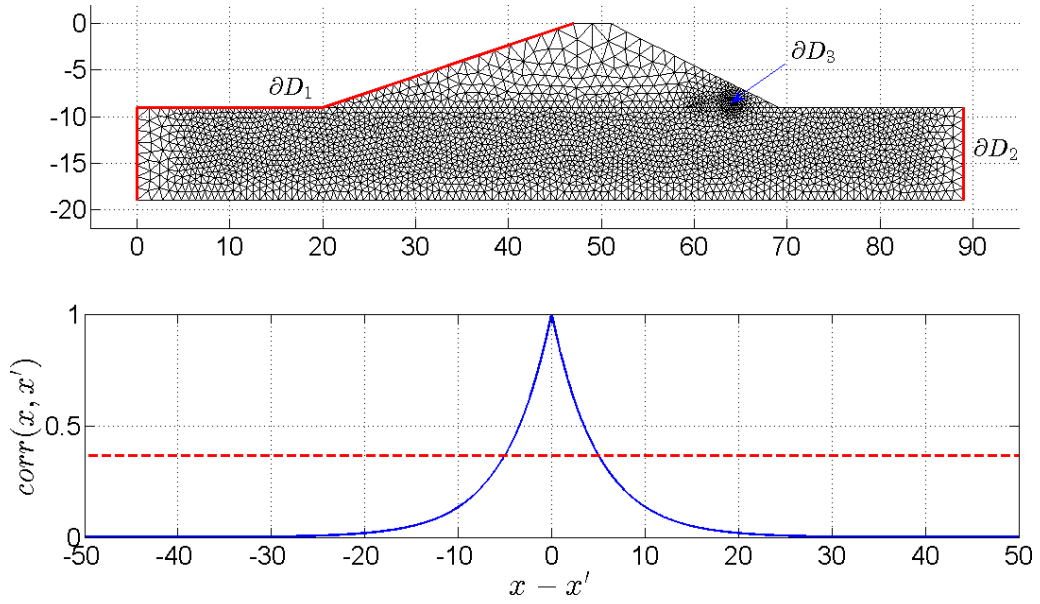
Chyba na (obr. 14) bylo způsobeno snížením počtu simulací z $S_{ref} = 5\,000\,000$ na $S = 50\,000$ a vypočtena dle následujících vztahů

$$\varepsilon_{u,m}^{\mu}(\mathbf{x}^{(i)}) = \left| \frac{\mathbb{E}[\mathbf{u}_S^{(i)}] - \mathbb{E}[\mathbf{u}_{S,ref}^{(i)}]}{\mathbb{E}[\mathbf{u}_{S,ref}^{(i)}]} \right| \cdot 100, \quad (7.3)$$

$$\varepsilon_{u,m}^{\sigma}(\mathbf{x}^{(i)}) = \left| \frac{\text{var}[\mathbf{u}_S^{(i)}] - \text{var}[\mathbf{u}_{S,ref}^{(i)}]}{\text{var}[\mathbf{u}_{S,ref}^{(i)}]} \right| \cdot 100, \quad (7.4)$$

kde index i značí uzel sítě konečných prvků.

Příklad 7.2. Druhý příklad je zaměřen na možné praktické využití modelu. Na (obr. 15) je řez tělesem zemní hráze s danou diskretizací a okrajovými podmínkami. Materiál tělesa hráze je uvažován jako propustný homogenní izotropní materiál s jistými vstupními parametry. Nejisté vstupní parametry jsou uvažovány pouze pro podloží. Pro rozdělení domény na konečné prvky byla opět použita funkce *Mesh2d* [7].



Obrázek 15: Doména s okrajovými podmínkami a korelační funkcí pro příklad (př. 7.2)

Základní prostorové parametry:

- Počet elementů: 5171,
- Počet uzlů: 2711,
- Okrajové podmínky: dle (obr. 15):

$$\begin{aligned} u(\mathbf{x}) &= 0, & \mathbf{x} \in \partial D_1, \\ u(\mathbf{x}) &= -9, & \mathbf{x} \in \partial D_2, \\ u_p(\mathbf{x}) &= 0, & \mathbf{x} \in \partial D_3, \\ \mathbf{n}(\mathbf{x}) \cdot (\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \nabla_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x}, \mathbf{y})) &= 0, & \mathbf{x} \in \partial D_4 = \left(\bigcup_{i=1}^3 \partial D_i \right) \cap \partial D. \end{aligned}$$

Základní stochastické parametry:

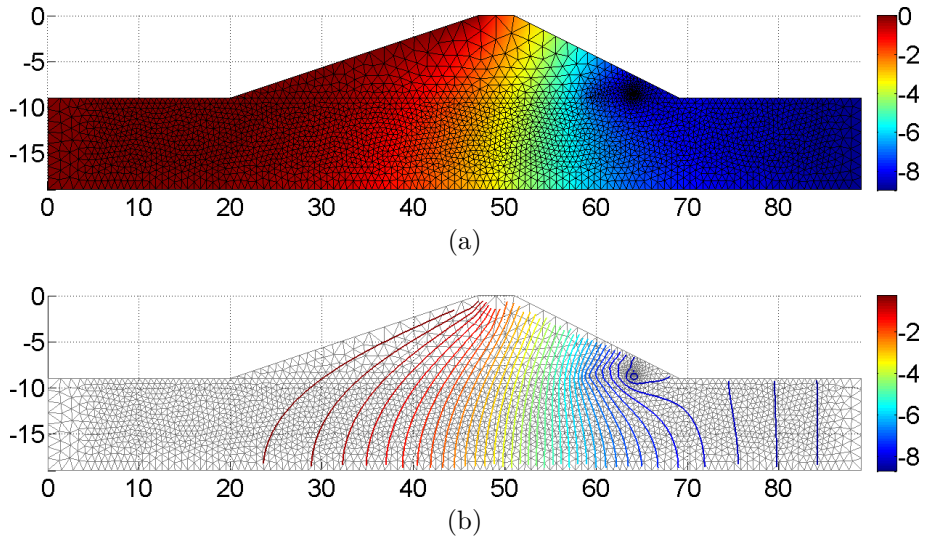
- Počet simulací S (MC): 500 000,
- Kovarianční funkce: $C_\kappa = \sigma^2 \exp \left(- \left| \frac{x-x'}{l_x} \right| - \left| \frac{y-y'}{l_y} \right| \right)$,
- Rozptyl: $\sigma^2 = (1 \times 10^{-3})^2$ [m/s]²,
- Korelační délky: $l_x = l_y = 5$ m,
- Střední hodnoty tenzoru filtrace pro různé části domény:

$$\mu_{\kappa,T}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} 10^{-5} \text{ [m/s]},$$

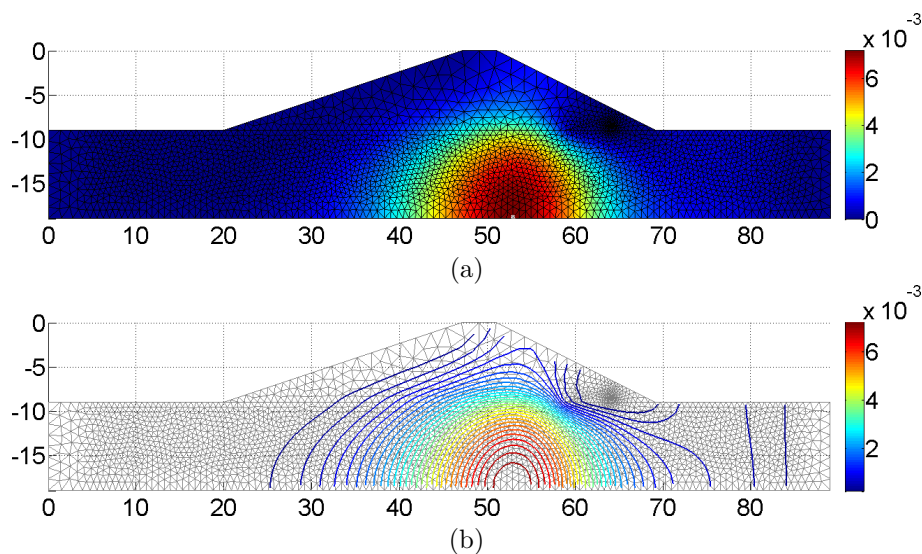
$$\mu_{\kappa,D}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} 10^{-4} \text{ [m/s]},$$

$$\mu_{\kappa,P}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} 10^{-5} \text{ [m/s]},$$

kde $\mu_{\kappa,P}$ je střední hodnota tenzoru filtrace podloží $\mu_{\kappa,D}$ je tenzor filtrace drenáže a $\mu_{\kappa,T}$ je tenzor filtrace tělesa hráze. Stejně jako v případě (obr. 9) je pro názornou ukázkou vykreslena korelační funkce ve stejném měřítku jako doména. Náhodné pole a tedy nejistota hydraulické vodivosti je uvažována pouze v podloží hráze.



Obrázek 16: Střední hodnota odezvy systému pro (př. 7.2).



Obrázek 17: Rozptyl odezvy systému pro (př. 7.2).

Odezva modelu byla předpokládána ve smyslu prostorové distribuce nejistoty, kdy se nejisté oblasti logicky koncentrují dále od pevně zadaných okrajových podmínek, jak je vidět zejména na (obr. 17b). V tomto smyslu by bylo zajímavé zahrnout do výpočtu parametr v podobě nejistého bodu začátku hladiny na hranici ∂D_1 . Pak by na celé této hranici byl konstantní rozptyl hydraulické výšky. Za zamyšlení pak stojí zvážení možnosti modelovat tyto dva parametry nezávisle a následně použít princip superpozice. V závislosti na rozptylu kolísání hladiny by se pak dalo určit jaká ze vstupních nejistot převáží a jakou je možno zanedbat.

Stejnou myšlenku o rozložení nejistoty hydraulické vodivosti lze samozřejmě aplikovat obecně, tedy i na (př. 7.1), kde tvar a přibližná poloha koncentrace nejistot v systému lze odhadnout před výpočtem. To, co model ale nabízí je přesnost a konkrétní hodnoty s možností rekonstrukce distribuce odezvy v bodě.

V předchozích příkladech nebyla zavedena okrajová podmínka předepisující rychlost proudění. V takovém případě bychom na takové hranici pozorovali nulový rozptyl rychlosti. Na (obr. 11) si lze všimnout, že nejistota rychlosti proudění se koncentruje v místech s vyšší rychlostí proudění a zároveň logicky v místech s vysokou nejistotou samotné hydraulické vodivosti. Následné chování modelu se dá předpovědět spojením těchto dvou pozorování, tedy že nejistota rychlosti proudění bude koncentrována v místech s vyšší rychlostí a zároveň dále od zadaných okrajových podmínek.

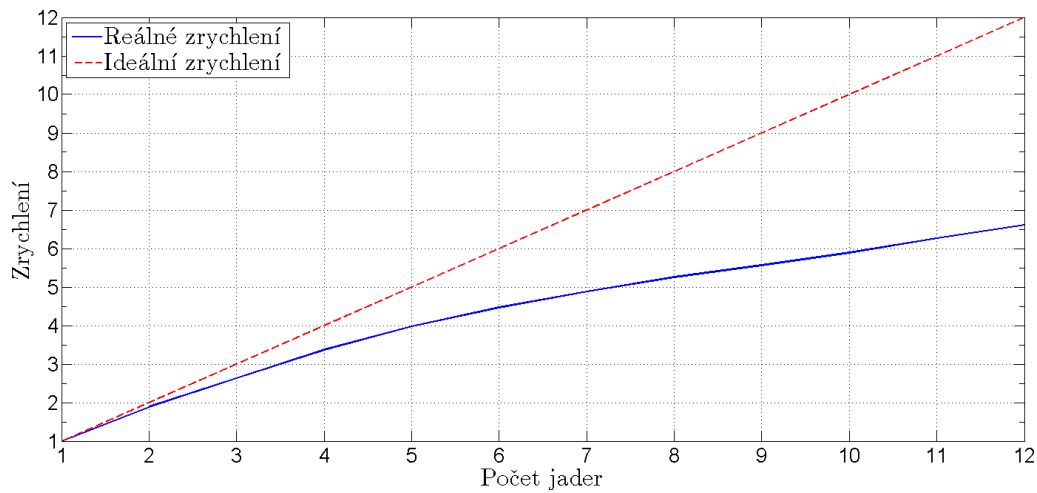
7.1 Výpočetní nároky

Porovnání metod z hlediska výpočetních nároků se dá rozdělit na dvě skupiny. Jednu skupinu tvoří časové nároky na výpočet v přepočtu na ekvivalent

jednoho výpočetního jádra a druhou pak systémové nároky pro výpočet, tj. hlavně minimální požadavky na operační paměť.

V tomto případě budou porovnávány pouze metody Monte Carlo a stochastická Galerkinova metoda. Důvodem vypuštění stochastické kolokace je jednak shodnost výpočetního jádra s metodou Monte Carlo a také limity knihovny používané pro vyhodnocení kolokačních bodů a příslušných vah.

Metoda Monte Carlo byla převážně spouštěna v paralelní verzi. Pro účel porovnání obou metod byla následně převedena na ekvivalent jednoho výpočetního jádra pomocí (tab. 2). Výsledný násobitel je vypočítaný jako průměrná hodnota z 1000 simulací pro příklad (př. 7.1), kde $S = 10\,000$.

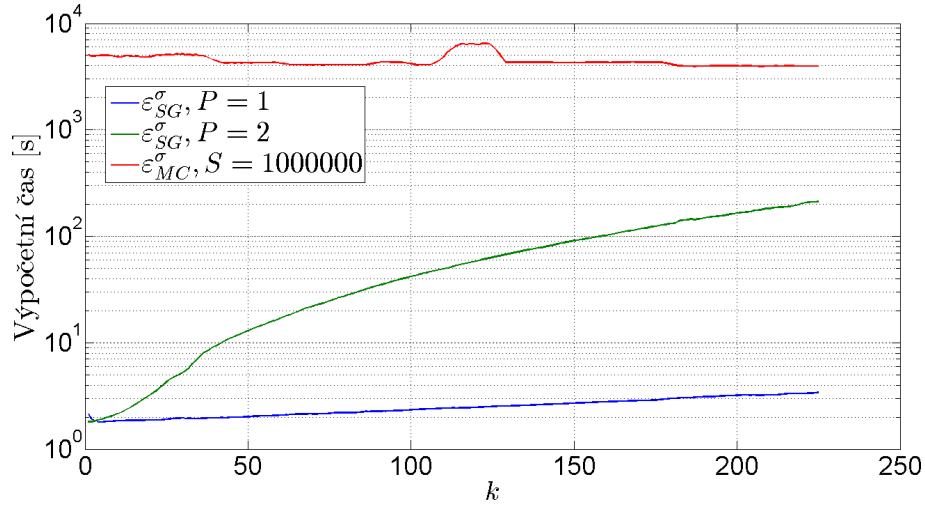


Obrázek 18: Graf zrychlení

Počet jader	$\mu [-]$	$\sigma [1 \times 10^4]$
1	1	3.1
2	2	1.07
3	2.7	1.58
4	3.5	3.58
5	4	4.47
6	4.7	3.76
7	5	8.73
8	5.2	12.4
9	5.5	12.12
10	5.9	9.21
11	6.2	8.22
12	6.6	13.45

Tabulka 2: Urychlení výpočtu

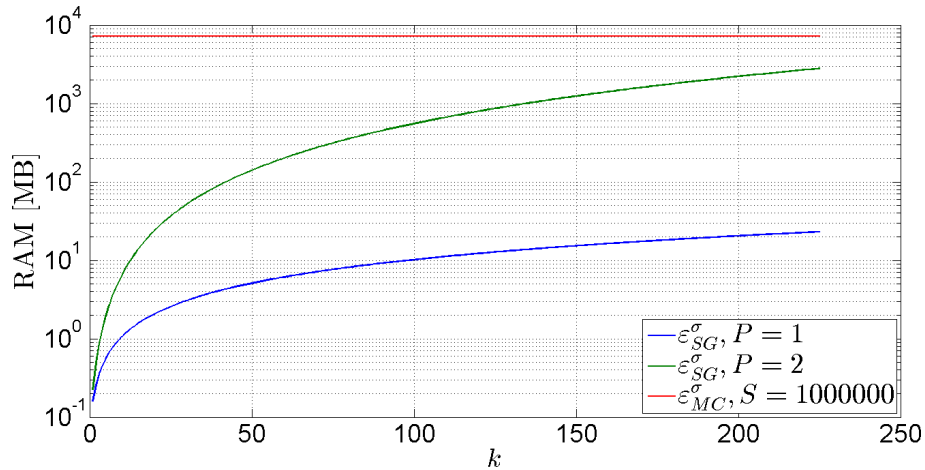
Po přepočtu na jedno jádro pak získáme konkrétní časy pro různou volbu počtu vlastních tvarů pro obě metody.



Obrázek 19: Výpočetní časy jednotlivých metod v závislosti na počtu vlastních tvarů

Obecně však lze pro Galerkinovu metodu získat výrazně lepší výpočetní časy. Nejnáročnějším krokem je sestavení globální matice tuhosti, kdy se alokuje mnohem větší množství paměti než je nutné a komprese sloupců a indexování zabírá neúměrné množství času. V pořadí druhým časově nejnáročnějším krokem je pak řešení soustavy rovnic, viz příloha C.

Následující graf pak porovnává minimální systémové nároky.



Obrázek 20: Paměťové nároky jednotlivých metod v závislosti na počtu vlastních tvarů

Pro příklad (př. 7.2) pak byly provedeny zkoušky kapacity výpočetního výkonu pracovní sestavy pro obě metody.

Galerkinova metoda

Výpočetní čas	~ 3h 20min
Počet vlastních tvarů	268
Stupeň polynomu	2
Dimenze matice tuhosti	98 449 965
Paměťové nároky	~50 GB

Metoda Monte Carlo

Výpočetní čas	~ 6h 20min
Počet vlastních tvarů	2711
Počet simulací	500 000
Dimenze matice tuhosti	2711
Paměťové nároky	~ 32.5 GB

7.2 Shrnutí

Výsledným porovnáním je shrnutí vlastností jednotlivých metod, jejich výhod, nevýhod a celkově praktického použití. Z předchozí kapitoly lze udělat většinu závěrů porovnáním dvou hlavních přístupů jak z hlediska paměťových a časových nároků, tak i z hlediska výsledné přesnosti.

7.2.1 Metoda Monte Carlo

Implementaci této metody bylo věnováno největší úsilí zejména díky faktu, že byla zpracovávána jako první a autor se seznamoval s tématem jako takovým. Řešič deterministického modelu, který je jádrem této metody prošel nesčetnými úpravami a optimalizacemi do současné podoby.

Z hlediska implementace této metody pro existující deterministický řešič s možností změny pole vodivosti je pak implementace velmi rychlá a relativně jednoduchá, protože spočívá pouze v tvorbě náhodného pole a vygenerování souboru nezávislých náhodných proměnných.

Největší výhodou této metody je fakt, že míra konvergence chyby je závislá pouze na počtu simulací S a nikoliv na počtu náhodných proměnných, což je vlastnost, kterou žádná jiná metoda nemá. Na druhou stranu vychází míra konvergence z centrální limitní věty a je rovna $\mathcal{O}(S^{-1/2})$ [39], tj. v log-log

měřítka by měla být míra konvergence přibližně lineární se směrnici $-1/2$ ²⁶. Problém nastává tehdy, kdy už samotný deterministický model je natolik složitý, že jediné řešení zabere větší množství času a výpočetních prostředků. Snížení chyby o jedinou desetinu si pak žádá 100 násobné zvýšení počtu simulací a tím pádem i výpočetních nároků. Je tedy rozumné se zamyslet nad zrychlením výpočetního jádra a přesunutí co největší části kódu mimo hlavní cyklus, což aktuální implementace splňuje.

Vůči nynějšímu kódu lze získat úsporu na využití operační paměti přibližně 50% zápisem odezvy systému na místo předgenerovaného náhodného pole nebo rozdělením náhodného pole a jeho postupným nahráváním do paměti v případě potřeby. V takovém případě je možné řešit i opravdu extrémně komplexní systémy, ale je zároveň nutné se smířit s faktem, že výpočet bude neúnosně pomalý, zejména kvůli komunikaci mezi *SATA3* a *DDR3*, tj. propojení *SouthBridge* a *NorthBridge*, rozhraním a jejich kapacitám. Řešením by pak mohl být buď asynchronní převod dat z jednoho média na druhý nebo dostatečně velké datové pole s *PCI – E* rozhraním, jednak díky dosahovaným rychlostem těchto médií a také proto, že obě média budou přímo komunikovat pouze přes *NorthBridge*.

Po vyřešení otázky paměťových prostředků je dalším aspektem výpočetní čas. Pro výrazné zrychlení jádra kódu by bylo zapotřebí změnit přístup k sestavování globální matice například zachováváním struktury, případně celé matice tuhosti, lokálních matic nebo vylepšení už tak vysoce efektivního algoritmu pro řešení výsledných rovnic. V každém případě je pak ale potřeba vyhodnotit velký počet simulací, bez čeho se tato metoda neobejde a jediným řešením pro tento problém se zdá být silnější paralelizace a vynaložení větších prostředků na výpočetní zázemí.

7.2.2 Galerkinova metoda

Relativně novou a nadějnou alternativou ke klasickým vzorkovacím metodám je pak stochastická Galerkinova metoda. Předvedené řešení i se svými nedokonalostmi a obtížemi z implementačního hlediska je vykoupeno získanými výsledky a celkově možnostmi zdokonalení této metody.

V porovnání s klasickou metodou pro (př. 7.1) se pak ukázala jako efektivnější ve všech směrech, tj. celkově si žádala nižší paměťové zdroje a výpočet byl rychlejší se zanedbatelnou chybou.

Z hlediska samotného algoritmu je nezbytné využít jiné knihovny pro zpracování/definování velkých soustav řídkých matic. V extrémních případech standardní funkce programu Matlab neumožňuje zadávání nenulových

²⁶V našem případě je průměrná míra konvergence na (obr. 12) rovna $\sim -1/2$.

indexů jiného typu než *double* a neumožňuje přímé definování matice ve formátu *CSC*, tj. komprimovaných sloupců. Oba tyto faktory pak vedou přibližně na dvojnásobné paměťové nároky pro samotnou tvorbu matice než jaké místo v paměti nakonec skutečně zabírá.

Další rozvoj z algoritmického hlediska se nabízí v paralelizaci samotného řešiče výsledných soustav rovnic anebo použití vhodného předpokládání, viz příloha C. Vzhledem k dimenzi výsledných soustav rovnic je pak možné zvážit další úroveň aproximace, viz [1] nebo věnovat úsilí vývoji řešiče soustav bez nutnosti složení globální matice tuhosti, kde samotné provedení je relativně jednoduché, ale otázkou zůstává časová náročnost takového přístupu. Pro redukci výpočetního času je například možné předem vypočítat integrály e_{ijk} , protože jsou nezávislé na řešeném problému a lze je tak vždy v případě potřeby jen nahrát z paměti.

8 Závěr

V této práci byl předveden přístup pro řešení rovnice proudění podzemní vody s nejistým materiálovým parametrem pomocí tří metod, kde všechny byly algoritmicky zpracovány v programu Matlab. Samotné řešení ale neposkytuje úplný náhled na chování modelu a velká část práce byla věnována obecnosti a efektivnosti kódu, stejně jako preprocessingu a postprocessingu, které jsou více než kde jinde nezbytnou částí ve zpracování výsledků.

Vlastní zpracování všech tří variant včetně pomocných funkcí obsahuje přes ~ 6000 řádků bez komentářů, kdy zároveň jednotlivé metody sdílejí společné knihovny. V drtivé většině jsou matice v průběhu programu definovány v úsporném řídkém formátu až na výjimky, jako je například rozklad matice na vlastní tvary na grafických kartách²⁷, protože současná implementace řešiče zatím nepodporuje tento formát, atd.. Většina funkcí byla také optimalizována pomocí vestavěného profileru.

K autorovu překvapení se v odborné literatuře nevyskytují tak základní vztahy jako jsou střední hodnota a rozptyl rychlosti proudění a zůstává tedy světlou nadějí, že tato práce alespoň někomu ulehčí práci při odvozování těchto vztahů. Náročnější, ale stále proveditelnou procedurou může být vyhodnocení statistiky odezvy ve smyslu prostorové pravděpodobnosti překročení určité hodnoty jak hydraulických výšek tak rychlosti proudění.

Jako výsledek řešení byla prezentována transformace výsledných koeficientů a vzorků odezvy na střední hodnotu a rozptyl hydraulických výšek a rychlosti proudění. Smyslem těchto metod však není jen získání pouze těchto hodnot, ale především analýza rizik a pravděpodobnosti překročení kritických hodnot.

Dalším pokračování práce je pak orientováno zejména na stochastickou Galerkinovu metodu, pro kterou byly pouze připraveny matematické vztahy pro použití realističtějšího log-normálního rozdělení náhodné veličiny a model nenasyceného půdního prostředí, tj. nelinearity hydraulické vodivosti. Obecně pro všechny metody nebylo přistoupeno k modelu kovarianční funkce vycházející z reálných půdních podmínek, který významně ovlivňuje podobu náhodného pole a tedy i odezvy modelu. Výzvou je pak vytvořit časově závislý model anebo sdružené úlohy a pokrýt tak většinu reálných situací.

²⁷Program nabízí přepínání mezi výpočtem na *CPU* a *GPU* avšak použití grafických karet začíná být výhodné v závislosti na použité kartě až přibližně od ~ 4000 uzlů volnosti.

Literatura

- [1] T. G. Kolda, B. W. Bader. Tensor decompositions and applications. *SIAM*, 51(3):455–500, 2009.
- [2] J. Bear. *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Courier Dover Publications, 1988. ISBN-10: 0486656756, ISBN-13: 978-0486656755.
- [3] Neil A. Chriss. *Black-Scholes and Beyond: Option Pricing Models*. McGraw-Hill Professional, 1 edition, 1996.
- [4] F. N. David. *Games, Gods & Gambling: A History of Probability and Statistical Ideas*. Dover Publications, 1962.
- [5] G. C. Li, C. S. Desai. Stress and seepage analysis of earth dams. *Journal of Geotechnical Engineering* 109 (7), 1983.
- [6] P. M. Inness, S. Dorling. *Operational Weather Forecasting*. Wiley-Blackwell, 2013.
- [7] D. Engwirda. Mesh2d v2.4. www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange. [Online; Březn-2014].
- [8] P. Fošumpaur. Modelové řešení průsaku návrhovými prostředky PPO a posouzení poruch. In *Udržitelná výstavba*, volume 3, 2007.
- [9] P. Fošumpaur. Posuzování podzemní části PPO pomocí modelu SEE-P/W. In Z. Kramářová, editor, *Udržitelná výstavba*, volume 5, pages 149–153. Ediční středisko ČVUT v Praze, 2009.
- [10] M. Th. Van Genuchten. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soil. *Journal Soil Science Society of America*, 44(5):892–898, 1980.
- [11] J. Říha a kolektiv. *Matematické modelování hydrodynamických a disperzních jevů*. Vysoké učení technické v Brně, 1997.
- [12] A. Jameson. Control theory applications for optimum design of aerodynamic shapes. pages 176–179. Proceedings of the 29th IEEE Conference on Decision and Control, Honolulu, 1990.
- [13] A. Keese. *Numerical solution of systems with stochastic uncertainties. A general purpose framework for stochastic finite elements*. PhD thesis, Department of Mathematics and Computer Science, TU Braunschweig, Germany, 2003.

- [14] A. Keese. A review of recent developments in the numerical solution of stochastic partial differential equations (stochastic finite elements). Technical report, Institute of Scientific Computing, Department of Mathematics and Computer Science, 2003.
- [15] B. Sudret, A. Der Kiureghian. Stochastic finite element methods and reliability. Technical report, Department of Civil and Environmental engineering, University of California, Berkeley, 2000.
- [16] I. Fatt, W.A. Klikoff. Effect of fractional wettability on multiphase flow through porous media. *AIME Trans*, 216:426–432, 1959.
- [17] S. Lipschutz, M. Lipson. *Schaum’s Outline of Discrete Mathematics*. Schaum’s Outline Series. McGraw-Hill, 3 edition, 2006.
- [18] A. Jameson, L. Martinelli. Aerodynamic shape optimization techniques based on control theory. In *Computational Mathematics Driven by Industrial Problems*, volume 1739 of *Lecture Notes in Mathematics*, pages 151–221. Springer Berlin Heidelberg, 2000.
- [19] E. Brynjolfsson, A. McAfee. *Race Against the Machine: How the Digital Revolution is Accelerating Innovation, Driving Productivity, and Irreversibly Transforming Employment and the Economy*. Digital Frontier Press, 2011.
- [20] T. A. Davis, J. R. Gilbert, S. I. Larimore, E. Ng, B. Peyton. A column approximate minimum degree ordering algorithm. *Proc. SIAM Conference on Applied Linear Algebra*, page 29, 1997.
- [21] A. Jameson, L. Martinelli, N.A. Pierce. Optimum aerodynamic design using the navier–stokes equations. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 10(1-4):213–237, 1998.
- [22] B. Rosić. *Variational Formulations and Functional Approximation Algorithms in Stochastic Plasticity of Materials*. PhD thesis, Department of Mathematics and Computer Science, TU Braunschweig, 2013.
- [23] Y. Saad. Iterative methods for sparse linear equations. *PWS Publishing Company*, 1996.
- [24] F. Black, M. Scholes. The pricing of options and corporate liabilities. volume 81, pages 637–654. *The Journal of Political Economy*, The University of Chicago Press, 1973.

- [25] J. R. Gilbert, C. Moler, R. Schreiber. Sparse Matrices in MATLAB: ,Design and Implementation. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 13(1):333–356, 1992.
- [26] R. De Borst, J. Carmeliet, J. Pamin, L. J. Sluys. *DIANA Computational Mechanics '94: Proceedings of the First International Diana Conference on Computational Mechanics*. Springer Netherlands, 1994.
- [27] S.A. Smolyak. Quadrature and interpolation formulas for tensor products of certain classes of functions. *Soviet Math. Dokl.*, 4:240–243, 1963.
- [28] C. Soize. Non-gaussian positive-definite matrix-valued random fields for elliptic stochastic partial differential operators. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pages 26–64, 2006.
- [29] Roger G. Ghanem, Pol D. Spanos. *Stochastic Finite Elements: A Spectral Approach*. Springer New York, 1991.
- [30] D. J. Stensrud. *Parameterization Schemes: Keys to Understanding Numerical Weather Prediction Models*. Cambridge University Press, 2009.
- [31] T. Vasquez. *Weather Forecasting Red Book*. Weather Graphics Technologies, 1 edition, 2006.
- [32] V. Hálek, J. Švec. *Hydraulika podzemní vody*. Praha, Academia, Tisk 1, Brno, 1973. p.[369]-375.
- [33] Wikipedia. Hadamard product (matrices) — Wikipedia, the free encyclopedia. [http://en.wikipedia.org/wiki/Hadamard_product_\(matrices\)](http://en.wikipedia.org/wiki/Hadamard_product_(matrices)). [Online; Květen-2014].
- [34] Wikipedia. Hermite polynomials — Wikipedia, the free encyclopedia. http://en.wikipedia.org/wiki/Hermite_polynomials. [Online; Březen-2014].
- [35] Wikipedia. Tensor product. http://en.wikipedia.org/wiki/Tensor_product. [Online; Květen-2014].
- [36] P. Y. Papalambros, D. J. Wilde. *Principles of Optimal Design: Modeling and Computation*. Cambridge University Press, 2 edition, 2000.
- [37] F. Heiss, V. Winschel. Likelihood approximation by numerical integration on sparse grids. *Journal of Econometrics*, 144(1):62–80, 2008.

- [38] G.W. Wasilkowski, H. Woéniakowski. Explicit cost bounds of algorithms for multivariate tensor product problems. *J. Complexity*, 11:1–56, 1995.
- [39] D. Xiu. *Numerical methods for stochastic computations: a spectral method approach*. Princeton University Press, 2010.
- [40] D. Xiu and G. E. Karniadakis. The Wiener–Askey polynomial chaos for stochastic differential equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 24(2):619–644, 2002.
- [41] D. M. Potts, L. Zdravkovič. *Finite Element Analysis in Geotechnical Engineering: Theory and Application*. Thomas Telford Ltd, 2001.
- [42] A. Kučerová, J. Sýkora, J. Zeman. Stochastic modelling of heterogeneous materials based on image analysis, 2014.
- [43] Y. Zhang. Groundwater flow and solute transport modeling, 2011. Dept. of Geology and Geophysics, University of Wyoming.

Seznam obrázků

1	Van Genuchtenův model redukce hydraulické vodivosti	8
2	Standardní normální rozdělení	14
3	Lognormální rozdělení	15
4	Vlastní čísla a chyba pro různé kovarianční délky	21
5	Vlastní tvary KLR	22
6	Realizace náhodných polí	23
7	Chyba aproximace veličiny	24
8	Počet bazových funkcí pro stupně polynomů p	27
9	Příklad domény s okrajovými podmínkami a korelační funkcí	40
10	Odezva modelu pro (př. 7.1)	42
11	Rychlost proudění pro (př. 7.1)	42
12	Chyba na odezvě v závislosti na počtu simulací S	43
13	Porovnání chyby jednotlivých metod při zkrácení sumy κ_m	44
14	Prostorové rozložení chyby	45
15	Druhý příklad domény s okrajovými podmínkami a korelační funkcí	46
16	Střední hodnota odezvy systému pro (př. 7.2)	47
17	Rozptyl odezvy systému pro (př. 7.2)	48
18	Graf zrychlení	49
19	Výpočetní časy jednotlivých metod v závislosti na počtu vlastních tvarů	50
20	Paměťové nároky jednotlivých metod v závislosti na počtu vlastních tvarů	50
21	Nenulové členy integrálu (rov. A.1)	d
22	Samostatné dvojrozměrné Hermitovy polynomy	d
23	Dvojrozměrné Hermitovy polynomy s pravděpodobnostní váhou	d
24	Počet iterací funkce pcg	j

Seznam tabulek

1	Příklad multi-indexové matice pro $m=4$, $p=3$	28
2	Urychlení výpočtu metody Monte Carlo	49
3	Příklady nenormovaných jednorozměrných Hermitových poly- nomů	a
4	Multi-indexová matice pro $m=3$, $p=3$	b
5	Příklady trojrozměrných Hermitových polynomů	b

A Hermitovy polynomy

V první řadě se zaměříme na algoritmické zpracování vyhodnocení následujícího integrálu

$$\mathbb{E}[y_i H_j(\mathbf{y}) H_k(\mathbf{y})] = e_{ijk}, \quad \forall j, k = 1, \dots, M \wedge \forall i = 0, \dots, m. \quad (\text{A.1})$$

$$h_{n+1}(y) = y h_n(y) - n h_{n-1}(y). \quad (\text{A.2})$$

Analytické řešení pro tento integrál lze získat za využití *rekurzivní* rovnice, která je pro Hermitovy polynomy definována jako (rov. A.2) a za pomoci které můžeme převést vztah (rov. A.1) na následující rovnici, pro kterou známe analytické řešení

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[H_j(\mathbf{y}) H_k(\mathbf{y})] &= \int_R H_j(\mathbf{y}) H_k(\mathbf{y}) \tilde{w}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \\ &= \prod_{r=1}^m k_r! \delta_{jk}, \quad \forall j, k = 1, \dots, M. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Pro odvození algoritmického zpracování vyhodnocení (rov. A.1) si nejprve musíme uvědomit, že y_i je jediná nezávislá náhodná proměnná v polynomu prvního stupně a index i označuje index sloupce multi-indexové matice. Indexy j, k u vícerozměrných polynomů $H_k(\mathbf{y})$ jsou indexy celých řádků multi-indexové matice.

Příklady jednorozměrných Hermitových polynomů

$h_0(y_i) = 1$	$h_3(y_i) = y_i^3 - 3y_i$
$h_1(y_i) = y_i$	$h_4(y_i) = y_i^4 - 6y_i^2 + 3$
$h_2(y_i) = y_i^2 - 1$	$h_5(y_i) = y_i^5 - 10y_i^3 + 15y_i$

Tabulka 3: Příklady nenormovaných jednorozměrných Hermitových polynomů

Indexy jednotlivých proměnných v (tab. 3) určují sloupec v (tab. 4) a budou využity teprve v (tab. 5).

j, k	multi-index j_i, k_i	$\sum_{i=1}^m k_i$
1	(0, 0, 0)	0
2	(1, 0, 0)	...1...
3	(0, 1, 0)	
4	(0, 0, 1)	
5	(2, 0, 0)	...2...
6	(1, 1, 0)	
7	(0, 2, 0)	
8	(1, 0, 1)	
9	(0, 1, 1)	
10	(0, 0, 2)	
11	(3, 0, 0)	...3...
12	(2, 1, 0)	
13	(1, 2, 0)	
14	(0, 3, 0)	
15	(2, 0, 1)	
16	(1, 1, 1)	
17	(0, 2, 1)	
18	(1, 0, 2)	
19	(0, 1, 2)	
20	(0, 0, 3)	

Tabulka 4: Multi-indexová matice pro $m=3$, $p=3$.

Vybrané příklady trojrozměrných Hermitových polynomů pro (tab. 4)

$$\begin{aligned}
H_0(\mathbf{y}) &= h_0(y_1)h_0(y_2)h_0(y_3) = 1 \\
H_1(\mathbf{y}) &= h_1(y_1)h_0(y_2)h_0(y_3) = y_1 \\
H_4(\mathbf{y}) &= h_0(y_1)h_0(y_2)h_1(y_3) = y_3 \\
H_{13}(\mathbf{y}) &= h_1(y_1)h_2(y_2)h_0(y_3) = y_1(y_2^2 - 1) \\
H_{16}(\mathbf{y}) &= h_1(y_1)h_1(y_2)h_1(y_3) = y_1y_2y_3 \\
H_{18}(\mathbf{y}) &= h_1(y_1)h_0(y_2)h_2(y_3) = y_1(y_3^2 - 1)
\end{aligned}$$

Tabulka 5: Příklady trojrozměrných Hermitových polynomů

Kde index u každého polynomu H_k v (tab. 5) značí index řádku multi-indexové matice (tab. 4). Indexy jednorozměrných polynomů h_i pak index sloupce multi-indexové matice.

Kombinací rekurentní rovnice a multi-indexové matice získáme pro tento typ úlohy velmi jednoduché pravidlo. Ve všech případech kombinací dvou

polynomů se snažíme výraz (rov. A.1) převést na (rov. A.3), pokud takový převod aby zároveň platilo, že $i = j$ není možný, polynomy jsou na sebe ortogonální. Díky tomu, že se v (rov. A.1) a (rov. A.2) objevuje samotná náhodná veličina pouze v první mocnině, je možné se na vyhodnocování integrálu koukat pouze jako na porovnávání řádků multi-indexové matice.

Pokud je rozdíl dvou řádků multi-indexové matice $R = I_j - I_k$ jednotkový vektor, má integrál (rov. A.1) nenulovou hodnotu pro indexy i, j, k , kde i je index jediné nenulové složky vektoru R . Hodnota e_{ijk} je rovna $\prod_{s=1}^m I_{j_s}!$, kde na indexu j nezáleží, protože výsledná matice je z definice symetrická.

V případě součinu tří polynomů je nutné s využitím Fubiniovy věty rozdělit integrál na polynomy jednotlivých náhodných proměnných, tj.

$$\mathbf{e}^{(r)} = \int_R \mathbf{S}(y_r) \otimes \mathbf{S}(y_r) \otimes \mathbf{S}(y_r) \tilde{w}(y_r) dy_r, \quad (\text{A.4})$$

kde \mathbf{S} je vektor obsahující polynomy jediné náhodné proměnné, kde stupeň polynomu je určen hodnotami ve sloupci multi-indexové matice, y_r pro $r = 1, \dots, m$ jsou jednotlivé náhodné proměnné, tj. m je celkový počet nezávislých náhodných proměnných a symbol \otimes značí tenzorový součin [35]. Výsledná matice integrálů se vyhodnotí jako

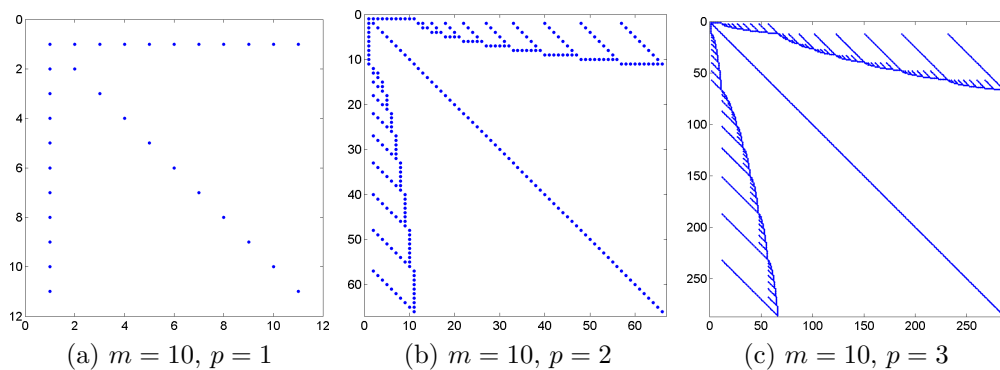
$$\mathbf{e} = \mathbf{e}^{(1)} \circ \mathbf{e}^{(2)} \dots \mathbf{e}^{(m-1)} \circ \mathbf{e}^{(m)}, \quad (\text{A.5})$$

kde $e_{ijk}^{(r)}$ jsou vyhodnocené integrály pro jedinou náhodnou proměnnou y_r a symbol \circ značí Hadamardův součin [33].

Mechanické vyhodnocení předchozích vztahů by bylo stále velmi náročné a využijeme tedy jednoduchou myšlenku, že v každém sloupci se bude vyskytovat jen konečný počet kombinací polynomů, tj. konkrétně pro součin tří polynomů o maximálním celkovém stupni p je počet kombinací $Q^{all} = \binom{p+3}{3}$. Vzhledem k tomu, že na pořadí polynomů v integrálu (rov. A.4) nezáleží, je potřeba vyhodnotit jen počet unikátních kombinací stupňů polynomů, tj. $Q^{uni} = \binom{p+3-1}{3} = \binom{p+2}{3}$ a vyhodnocení integrálu tedy transformujeme pouze na hledání správné kombinace indexů²⁸. Tímto způsobem lze zkonstruovat jednoduchá pravidla pro obecný počet polynomů libovolného stupně a počtu proměnných za extrémní efektivitu a složení relativně složitého integrálu přímo ve formátu řídké matice.

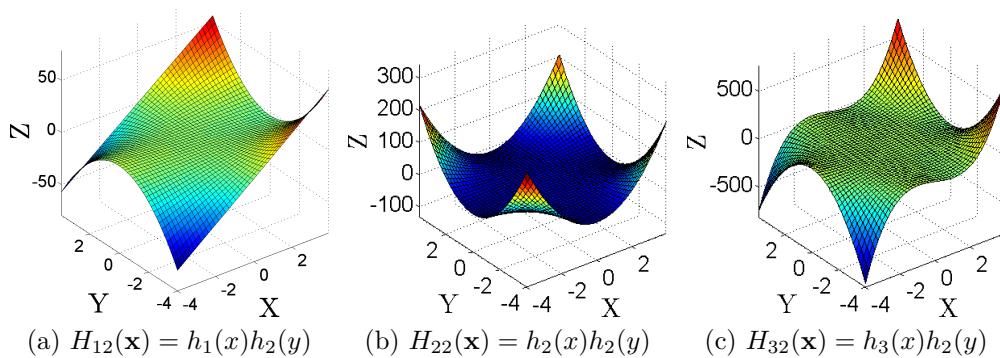
Vyhodnocením integrálu (rov. A.1) získáme trojrozměrnou matici e_{ijk} . Nenulové členy takové matice pro příklad, kde $m = 10$ a různé volby stupně polynomu pro $\sum_{i=1}^m e_{ijk}$ jsou na (obr. 21).

²⁸Navíc tuto kombinaci hledáme v jednotlivých sloupcích, což je výhoda v případě použití programu Matlab a řídkých matic, jelikož pro ukládání používá metodu *CSC* a "řezání" sloupců s následným hledáním v nich je velice efektivní procedura.

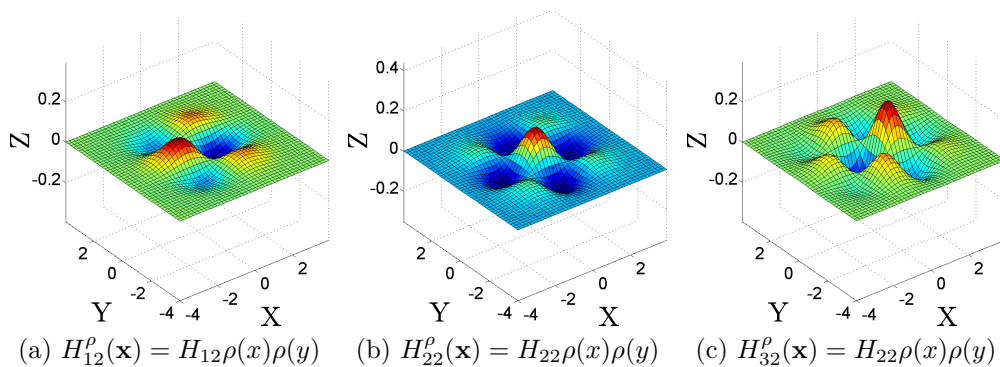


Obrázek 21: Příklad vyhodnocení integrálu (rov. A.1).

Pro názornost si ještě ukážeme několik dvojrozměrných Hermitových polynomů a zároveň funkce, které integrujeme.



Obrázek 22: Samostatné dvojrozměrné Hermitovy polynomy.



Obrázek 23: Dvojrozměrné Hermitovy polynomy s pravděpodobnostní váhou.

Ve všech případech jsou polynomy s odpovídající váhou vzájemně ortogonální. Aby byl integrál nenulový, bylo by nutné kombinovat polynomy se stejnou proměnnou. Proto jsou například i (obr. 23b) ortogonální. Rozepsáním s pomocí Fubiniovy věty získáme následující vztah

$$\begin{aligned}
\int_R H_{22}(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} &= \int_R h_2(x)h_2(y)\rho(x)\rho(y) \, dx \, dy \\
&= \int_R h_2(x) \rho(x) \, dx \int_R h_2(y)\rho(y) \, dy \\
&= \int_R h_2(x)h_0(x) \rho(x) \, dx \int_R h_2(y)h_0(y)\rho(y) \, dy = \delta_{02}\delta_{02} = 0.
\end{aligned}
\tag{A.6}$$

B Implementace MKP

V kapitole 6 jsme se věnovali řešení diferenciálních rovnic a vyhodnocení určitých integrálů jsme brali jako samozřejmost bez zmínění jednotlivých kroků a samotného řešení použitelného bez dalších úprav.

Diskretizace domény je provedena pomocí trojúhelníkových elementů s lineární aproximací. Odezva systému je zároveň pouze stavovou skalární veličinou, tj. výsledná odezva je reprezentována skalárním polem hydraulických výšek a aproximace odezvy na prvku má tvar

$$u(\mathbf{x}) = c_1x + c_2y + c_3, \quad (\text{B.1})$$

$$u(\mathbf{x}) = \mathbf{P}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{c} = \begin{bmatrix} x & y & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{Bmatrix}, \quad (\text{B.2})$$

kde x, y jsou nyní prostorové souřadnice.

Snahou je vyjádřit neznámé v uzlech jednotlivých prvků a nahradit tak vektor koeficientů \mathbf{c} vektorem uzlových hodnot \mathbf{r} . Toho docílíme jednoduše tím, že vektor polynomů $\mathbf{P}(\mathbf{x})$ nahradíme maticí souřadnic \mathbf{S} , resp. dosadíme uzlové hodnoty $S_i = \mathbf{P}(\tilde{\mathbf{x}}_i)$, pro $i = 1, 2, 3$, kde $\tilde{\mathbf{x}}_i$ jsou souřadnice jednotlivých uzlů prvku, uzlové hodnoty \mathbf{r} se následně vypočítají dle

$$\mathbf{r} = \mathbf{S} \cdot \mathbf{c} = \begin{bmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{Bmatrix}. \quad (\text{B.3})$$

Samotné neznámé koeficienty \mathbf{c} vyjádříme inverzí matice souřadnic \mathbf{S} jako

$$\mathbf{c} = \mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{r}. \quad (\text{B.4})$$

Zpětným dosazením vztahu (rov. B.4) do (rov. B.2) získáme vyjádření lineární aproximace neznámé skalární veličiny $u(\mathbf{x})$ pomocí báзовých funkcí $N_i(\mathbf{x})$, $i = 1, 2, 3$ a neznámých uzlových posunů \mathbf{r} jako

$$u(\mathbf{x}) = \mathbf{P}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{c} = \mathbf{P}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{r} = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{r}, \quad (\text{B.5})$$

kde $\mathbf{N}(\mathbf{x}) = [N_1(\mathbf{x}), N_2(\mathbf{x}), N_3(\mathbf{x})]$ je vektor báзовých funkcí dle (rov. B.6).

$$\begin{aligned} N_1(\mathbf{x}) &= [x(y_2 - y_3) - y(x_2 - x_3) + x_2y_3 - x_3y_2] \frac{1}{2A}, \\ N_2(\mathbf{x}) &= [x(y_3 - y_1) - y(x_3 - x_1) + x_3y_1 - x_1y_3] \frac{1}{2A}, \\ N_3(\mathbf{x}) &= [x(y_1 - y_2) - y(x_1 - x_2) + x_1y_2 - x_2y_1] \frac{1}{2A}. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Plocha prvku A je vyjádřena jako

$$A = \frac{1}{2}(x_1y_2 - x_2y_1 - x_1y_3 + x_3y_1 + x_2y_3 - x_3y_2). \quad (\text{B.7})$$

Dalším potřebným vztahem je gradient bázových funkcí $\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{N}(\mathbf{x})$, který se vyhodnotí jako

$$\begin{aligned} \mathbf{B} = \nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{N}(\mathbf{x}) &= \left\{ \begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{array} \right\} \left[\begin{array}{ccc} N_1(\mathbf{x}) & N_2(\mathbf{x}) & N_3(\mathbf{x}) \end{array} \right] \\ &= \left[\begin{array}{ccc} \frac{\partial N_1(\mathbf{x})}{\partial x} & \frac{\partial N_2(\mathbf{x})}{\partial x} & \frac{\partial N_3(\mathbf{x})}{\partial x} \\ \frac{\partial N_1(\mathbf{x})}{\partial y} & \frac{\partial N_2(\mathbf{x})}{\partial y} & \frac{\partial N_3(\mathbf{x})}{\partial y} \end{array} \right] \\ &= \left[\begin{array}{ccc} y_2 - y_3 & y_3 - y_1 & y_1 - y_2 \\ x_3 - x_2 & x_1 - x_3 & x_2 - x_1 \end{array} \right] \frac{1}{2A} = \left[\begin{array}{ccc} y_{23} & y_{31} & y_{12} \\ x_{32} & x_{13} & x_{21} \end{array} \right] \frac{1}{2A}. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

B.1 Matice tuhosti

Předchozími kroky jsme definovali vše potřebné pro vyhodnocení lokální matice tuhosti \mathbf{K}_l elementu, definované v kapitole 6.1 jako

$$\mathbf{K}_l = \int_D \mathbf{B}(\mathbf{x}) \cdot \kappa(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_D \mathbf{B} \cdot \kappa(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{B} \, d\mathbf{x}, \quad (\text{B.9})$$

kde $\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \mathbf{B}$ je gradient bázových funkcí $\mathbf{N}(\mathbf{x})$ a v případě lineární aproximace si můžeme dovolit vypustit prostorovou proměnnou \mathbf{x} , která po aplikaci gradientu vymizí, $\kappa(\mathbf{x})$ je tenzor filtrace jako prostorová proměnná.

V našem případě je tenzorové pole $\kappa(\mathbf{x})$ v prostoru buď konstantní nebo lineárně proměnné, tj. integrál lze vyjádřit jako

$$\int_D \kappa(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \kappa(\tilde{\mathbf{x}}_i) A = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \left[\begin{array}{cc} k_x(\tilde{\mathbf{x}}_i) & 0 \\ 0 & k_y(\tilde{\mathbf{x}}_i) \end{array} \right] = \frac{A}{3} \tilde{\kappa}, \quad (\text{B.10})$$

kde A je plocha prvku a $\tilde{\mathbf{x}}_i$ jsou souřadnice jednotlivých uzlů. Dosazením (rov. B.10) do (rov. B.9) přepíšeme vztah na

$$\begin{aligned}
\mathbf{K}_l &= \mathbf{B} \cdot \frac{A}{3} \tilde{\kappa} \cdot \mathbf{B} \\
&= \begin{bmatrix} y_{23} & x_{32} \\ y_{31} & x_{13} \\ y_{12} & x_{21} \end{bmatrix} \frac{1}{2A} \frac{A}{3} \begin{bmatrix} \tilde{k}_x & 0 \\ 0 & \tilde{k}_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{23} & y_{31} & y_{12} \\ x_{32} & x_{13} & x_{21} \end{bmatrix} \frac{1}{2A} \\
&= \begin{bmatrix} y_{23} & x_{32} \\ y_{31} & x_{13} \\ y_{12} & x_{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{k}_x & 0 \\ 0 & \tilde{k}_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{23} & y_{31} & y_{12} \\ x_{32} & x_{13} & x_{21} \end{bmatrix} \frac{1}{12A} \\
&= \begin{bmatrix} y_{23}^2 & y_{23}y_{31} & y_{23}y_{12} \\ y_{31}y_{23} & y_{31}^2 & y_{31}y_{12} \\ y_{12}y_{23} & y_{12}y_{31} & y_{12}^2 \end{bmatrix} \frac{\tilde{k}_x}{12A} - \begin{bmatrix} x_{23}^2 & x_{23}x_{31} & x_{23}x_{12} \\ x_{31}x_{23} & x_{31}^2 & x_{31}x_{12} \\ x_{12}x_{23} & x_{12}x_{31} & x_{12}^2 \end{bmatrix} \frac{\tilde{k}_y}{12A},
\end{aligned} \tag{B.11}$$

kde $\tilde{k}_x = \sum_{i=1}^3 k_x(\tilde{\mathbf{x}}_i)$ a $\tilde{k}_y = \sum_{i=1}^3 k_y(\tilde{\mathbf{x}}_i)$ jsou vztahy z předchozí rovnice, viz (rov. B.10).

Podobné vztahy pak můžou být jednoduše odvozeny pro obecnější tenzor hydraulické vodivosti. Cílem zápisu (rov. B.11) bylo dojít s odvozením vztahů co nejdále a nezatěžovat výpočet zbytečným vyhodnocováním matematických operací při sestavování globální matice tuhosti.

B.2 Gramova matice

Pro aproximaci kovarianční funkce je třeba vyhodnotit Gramovu matici pro prostorové báze funkce. Lokální Gramova matice lineárního trojúhelníkového prvku lze vyhodnotit analyticky dle následující rovnice

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}_l &= \int_D \mathbf{N}(\mathbf{x}) \otimes \mathbf{N}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\
&= \int_D \begin{bmatrix} N_1(\mathbf{x}) \\ N_2(\mathbf{x}) \\ N_3(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_1(\mathbf{x}) & N_2(\mathbf{x}) & N_3(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \, d\mathbf{x} \\
&= \int_D \begin{bmatrix} N_1N_1 & N_2N_1 & N_3N_1 \\ N_1N_2 & N_2N_2 & N_3N_2 \\ N_1N_3 & N_2N_3 & N_3N_3 \end{bmatrix} \, d\mathbf{x} \\
&= \frac{A}{12} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix},
\end{aligned} \tag{B.12}$$

kde A je plocha prvku a $\mathbf{N}(\mathbf{x})$ je vektor báze funkcí na prvku. Obecně lze Gramovu matici tohoto typu vyhodnotit předem a ušetřit tak systémové nároky.

C Použité řešiče lineárních soustav

V kapitole 6 byl pro každou metodu odvozen vztah zakončený nutností řešit lineární soustavu rovnic. Pro metody Monte Carlo a stochastickou kolokaci jsou vždy použity přímé řešiče řídkých soustav programu Matlab [25, 20]. V případě stochastické Galerkinovy metody jsou ale výsledné soustavy příliš velké a tyto řešiče by potřebovali neúměrné množství paměti. Pro tyto účely bylo využito implementované funkce předpodmíněných sdružených gradientů (*pcg*, z anglického *preconditioned conjugate gradients*) [23]. Tato funkce nabízí zadat jak matici předpodmínění, výslednou přesnost, maximální počet iterací, tak i startovací vektor.

Nastavení funkce *pcg()*:

- Maximální počet iterací: 500,
- Tolerance²⁹: 1×10^{-8} ,
- Matice předpodmínění: -,
- Startovací vektor: deterministická odezva.

V kapitole 7 bylo ukázáno, že střední hodnota odezvy téměř nezávisí na počtu vlastních tvarů nebo stupni aproximačního polynomu. Této vlastnosti využijeme při tvorbě startovacího vektoru, tj. použije se lineární deterministické řešení $\mathbf{u}_l^{(d)}$ s polem hydraulické vodivosti odpovídající střední hodnotě vstupní statistiky. Zároveň využijeme (rov. 6.27), ze které lze vyčíst, že střední hodnotě odezvy odpovídá koeficient polynomu nultého stupně, pak

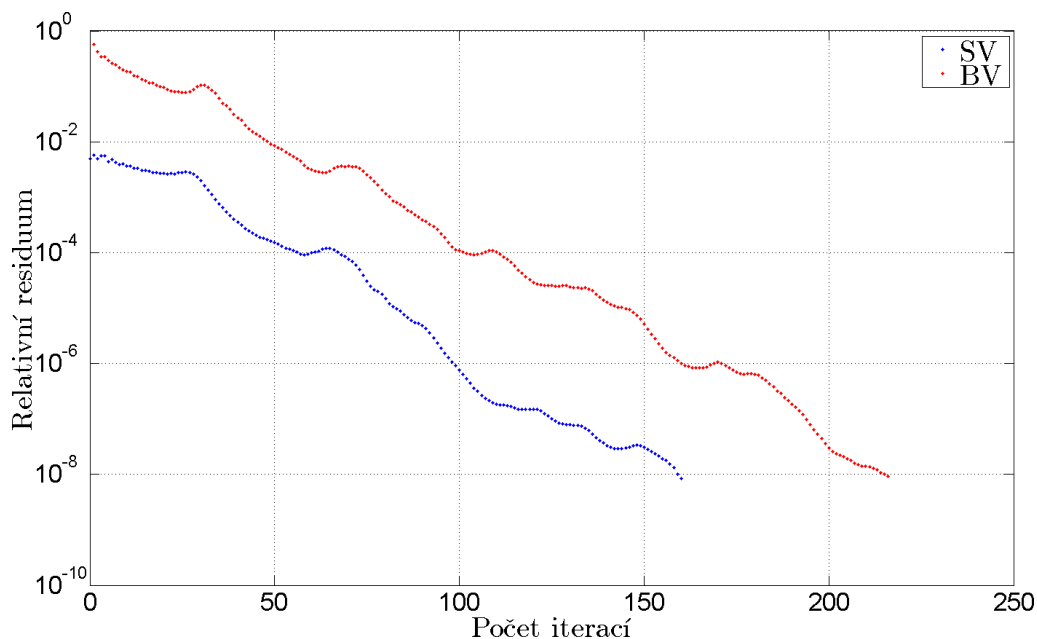
$$\tilde{\mathbf{u}}_1^{(s)} = \mathbf{u}_l^{(d)}, \quad (\text{C.1})$$

kde $\tilde{\mathbf{u}}_1^{(s)}$ je pouze část stochastického řešení pro polynom nultého stupně a $\mathbf{u}_l^{(d)}$ je deterministické řešení pro střední hodnotu pole vodivosti³⁰.

Cílem tohoto kroku není výsledná přesnost, která je zafixována na začátku procesu, ale snížení počtu iterací a tím i výpočetního času. Porovnání z hlediska iterací je na (obr. 24).

²⁹Pro soustavu rovnic $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ se tolerance počítá jako relativní chyba na residuu jako $\|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}\|_2 / \|\mathbf{b}\|_2$.

³⁰Příčemž střední hodnota pole vodivosti nemusí být nutně konstantní funkce.



Obrázek 24: Počet iterací funkce pcg, BV: bez startovacího vektoru, SV: se startovacím vektorem.

Konkrétní nastavení vstupních hodnot je shodné s (př. 7.1), počet vlastních tvarů je 25 a stupeň polynomu je 2. Hodnota řešené matice je $\sim 28\,000$ a časová redukce se pohybovala v rozmezí $20 \sim 50\%$. Konkrétní časové úspory se zde neuvádějí z důvodu nezahrnutí času pro řešení deterministického problému a zároveň z důvodu řešení velice malého problému, kde zahrnutí startovacího vektoru nemá z hlediska celého výpočtu rozhodující váhu.

Zároveň si zde můžeme povšimnout, že konvergence pro oba přístupy je velmi podobná a odhadem části řešení tedy jen posouváme počáteční chybu. S vyšším počtem iterací se tedy snižuje efektivita použití startovacího vektoru. Při testovacích pozorováních je rychlost konvergence vysoce ovlivněna použitím předpodmínění³¹. Kombinace správného startovacího vektoru a předpodmínění je tedy pro tuto metodu základem pro získání efektivního řešiče velkých lineárních soustav.

³¹Ve výsledném algoritmu je funkce předpodmínění vynechána.