



TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI  
Fakulta mechatroniky, informatiky  
a mezioborových studií ■

# Aplikace víceúrovňové metody Monte-Carlo v hydrogeologii

## Bakalářská práce

*Studijní program:* B2646 – Informační technologie  
*Studijní obor:* 1802R007 – Informační technologie

*Autor práce:* **Martin Špetlík**  
*Vedoucí práce:* Mgr. Jan Březina, Ph.D.





TECHNICAL UNIVERSITY OF LIBEREC  
Faculty of Mechatronics, Informatics  
and Interdisciplinary Studies ■

# Application of Multilevel Monte Carlo method in hydrogeology

Bachelor thesis

*Study programme:* B2646 – Information technology  
*Study branch:* 1802R007 – Information technology

*Author:* **Martin Špetlík**  
*Supervisor:* Mgr. Jan Březina, Ph.D.



## ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jméno a příjmení: **Martin Špetlík**  
Osobní číslo: **M15000054**  
Studijní program: **B2646 Informační technologie**  
Studijní obor: **Informační technologie**  
Název tématu: **Aplikace víceúrovňové metody Monte-Carlo v hydrogeologii**  
Zadávací katedra: **Ústav nových technologií a aplikované informatiky**

### Z á s a d y p r o v y p r a c o v á n í :

1. Otestujte použití MLMC pro výpočet vyšších momentů.
2. Implementujte aproximaci kvantilů pomocí rekonstrukce distribuční funkce. Případně testujte různé přístupy pro aproximaci kvantilů.
3. Integrujte MLMC do systému Analysis, možnost aplikace na obecný aproximativní výpočet.
4. Použijte realistická korelovaná náhodná pole pro vstup MLMC.
5. Aplikujte MLMC na citlivostní analýzu úloh proudění a transportu realizovaných pomocí Flow123d.
6. Volitelně: specifické optimalizace MLMC algoritmů.

Rozsah grafických prací: **dle potřeby**  
Rozsah pracovní zprávy: **30 - 40 stran**  
Forma zpracování bakalářské práce: **tištěná/elektronická**

Seznam odborné literatury:

- [1] R. Briš, M. Litschmannová: Statistika I., Technická univerzita Ostrava, 2012
- [2] M.B. Giles. 'Multilevel Monte Carlo methods'. Acta Numerica, 24:259-328, 2015
- [3] M.B. Giles, T. Nagapetyan, K. Ritter. 'Multilevel Monte Carlo approximation of distribution functions and densities'. SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification, 3:267-295, 2015

Vedoucí bakalářské práce: **Mgr. Jan Březina, Ph.D.**  
Ústav nových technologií a aplikované informatiky

Datum zadání bakalářské práce: **19. října 2017**

Termín odevzdání bakalářské práce: **14. května 2018**

prof. Ing. Zdeněk Plíva, Ph.D.  
děkan



Ing. Josef Novák, Ph.D.  
vedoucí ústavu

V Liberci dne 19. října 2017

## Prohlášení

Byl jsem seznámen s tím, že na mou bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb., o právu autorském, zejména § 60 – školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nesaahuje do mých autorských práv užitím mé bakalářské práce pro vnitřní potřebu TUL.

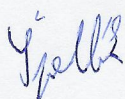
Užiji-li bakalářskou práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědom povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Bakalářskou práci jsem vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím mé bakalářské práce a konzultantem.

Současně čestně prohlašuji, že tištěná verze práce se shoduje s elektronickou verzí, vloženou do IS STAG.

Datum: 14.5.2018

Podpis:



## Poděkování

Rád bych tímto poděkoval Mgr. Janu Březinovi, Ph.D. za vstřícnost, cenné rady a mnoho času, který mi věnoval v průběhu zpracování této bakalářské práce.

## Abstrakt

Tato bakalářská práce se zabývá rekonstrukcí distribuční funkce náhodné veličiny s použitím zobecněných statistických momentů. Jejich hodnoty jsou získány pomocí víceúrovňové metody Monte-Carlo. Sledovanými náhodnými veličinami jsou výsledky konečně-prvkových počítačových simulací s náhodnými prostorovými parametry.

K vyřešení zkoumaného problému je použita metoda maximální entropie, která zde slouží k nalezení nejvhodnější funkce hustoty pravděpodobnosti, respektive distribuční funkce.

Navržený algoritmus je aplikován na reálnou simulaci proudění podzemní vody. Tuto simulaci realizuje program Flow123d. Cílem je určit množství vody, které vyteče z pozorované 2D oblasti. Vstupními daty simulací jsou Gaussovska náhodná pole hydraulických vodivostí.

Klíčová slova: metoda Monte-Carlo, víceúrovňová metoda Monte-Carlo, metoda maximální entropie, aproximace distribuční funkce

## Abstract

This bachelor thesis deals with the reconstruction of the distribution function of the random variable using generalized statistical moments. Their values are obtained using the multilevel Monte-Carlo method. Observed random variables are the results of the finite element computer simulations with random spatial parameters.

The maximum entropy method is used to solve the defined problem, this method is used here to find the most suitable probability density function or distribution function.

The proposed algorithm is applied to real simulation of underground water flow. The simulation is realized by Flow123d software. The goal is to determine the amount of water flowing out of the observed 2D area. Simulation input data are Gaussian random fields of hydraulic conductivity.

Keywords: Monte-Carlo method, multilevel Monte-Carlo method, maximum entropy method, approximation of the distribution function



# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod</b>	<b>12</b>
<b>2</b>	<b>Metoda Monte-Carlo</b>	<b>14</b>
2.1	Jednoúrovňová metoda MC . . . . .	14
2.2	Dvouúrovňová metoda MC . . . . .	15
2.3	Víceúrovňová metoda MC . . . . .	16
2.4	Výpočet momentů pomocí MLMC . . . . .	17
2.4.1	Výběr funkcí momentů . . . . .	17
2.5	Optimalizace MLMC . . . . .	18
2.5.1	Cílový rozptyl . . . . .	18
2.5.2	Cílová výpočetní cena . . . . .	19
<b>3</b>	<b>Aproximace funkce hustoty pravděpodobnosti</b>	<b>21</b>
3.1	Metoda maximální entropie . . . . .	21
3.1.1	Shannonova Entropie . . . . .	21
3.1.2	Aproximace hustoty pomocí MME . . . . .	21
3.2	Popis algoritmu . . . . .	22
3.2.1	Newtonova metoda . . . . .	22
3.2.2	Popis algoritmu metody maximální entropie . . . . .	23
<b>4</b>	<b>Knihovna MLMC</b>	<b>25</b>
<b>5</b>	<b>Testy pro umělou náhodnou veličinu</b>	<b>27</b>
5.1	MLMC - odhad momentů . . . . .	27
5.1.1	Monomiály . . . . .	27
5.1.2	Fourierovy funkce . . . . .	32
5.2	Testy aproximace hustoty pravděpodobnosti . . . . .	35
5.2.1	Monomialy . . . . .	36
5.2.2	Fourierovy funkce . . . . .	38
<b>6</b>	<b>Aplikace při použití reálné simulace</b>	<b>41</b>
6.1	Flow123d . . . . .	41
6.1.1	Fyzikální podstata úlohy . . . . .	41
6.1.2	Diskretizace úlohy . . . . .	42
6.1.3	Spouštění úlohy . . . . .	43
6.2	Výsledky . . . . .	43

6.2.1	MLMC . . . . .	44
6.2.2	Aproximace distribuční funkce . . . . .	45
<b>7</b>	<b>Závěr</b>	<b>48</b>

## Seznam obrázků

4.1	Diagram tříd . . . . .	26
5.1	Závislost $\widehat{V}_l^r$ pro vybrané monomiály na počtu vzorků . . . . .	28
5.2	Vliv úrovní na rozptyl momentů - 1000 N . . . . .	29
5.3	Vliv úrovní na rozptyl momentů - 10000 N . . . . .	29
5.4	Závislost $\widehat{V}_l^r$ pro vybrané Fourierovy funkce na počtu vzorků . . . . .	33
5.5	Fourierovy funkce - vliv úrovní na rozptyl momentů . . . . .	34
5.6	Aproximace distribuce $LN(0; 0,5)$ . . . . .	36
5.7	Q-Q graf - monomiály . . . . .	37
5.8	Aproximace distribuce $LN(0; 0,2)$ . . . . .	38
5.9	Aproximace distribuce $N(0; 0,5)$ . . . . .	38
5.10	Aproximace při použití 20 momentů . . . . .	39
5.11	Q-Q graf - Fourierovy funkce . . . . .	39
5.12	Nevhodně zvolené parametry . . . . .	40
6.1	Náčrt řešené úlohy . . . . .	42
6.2	Výpočetní síť . . . . .	42
6.3	Flow123d - vliv úrovní na rozptyl momentů . . . . .	44
6.4	Hustota pravděpodobnosti . . . . .	46
6.5	Aproximovaná a empirická distribuční funkce . . . . .	46
6.6	Q-Q graf - porovnání kvantilů empirické a aproximované distribuce . . . . .	47

## Seznam tabulek

5.1	Vliv momentů na $\widehat{N}_l^r$ . . . . .	30
5.2	Počet vykonání simulace . . . . .	31
5.3	Monomiály - porovnání metod MC . . . . .	31
5.4	MLMC - hodnoty vyšších momentů . . . . .	32
5.5	Fourierovy funkce - porovnání metod MC . . . . .	35
5.6	Monomiály - vliv $\mu_3$ na přesnost aproximace . . . . .	37
5.7	Fourierovy funkce - vliv šikmosti na přesnost . . . . .	40
6.1	Flow123d - porovnání metod MC . . . . .	45
6.2	Kvantily aproximované a empirické distribuční funkce . . . . .	47

# 1 Úvod

Cílem této bakalářské práce je aplikovat algoritmy pro víceúrovňovou metodu Monte-Carlo a rekonstrukci distribuční funkce náhodné veličiny. Vytvořené řešení nachází své uplatnění zejména při modelování komplikovaných procesů s náhodnými parametry. Konkrétní zkoumanou úlohou je proudění podzemní vody v prostředí se stochasticky generovanou hydraulickou vodivostí. Sledovanou veličinou je množství vody, které vyteče z pozorované oblasti za jednotku času.

Náhodnými veličinami jsou v rámci této práce označovány výsledky konečněprvkových počítačových simulací, do kterých vstupují náhodná data.

Počítačová simulace nahrazuje skutečný systém jeho matematickým modelem s podobnými pravděpodobnostními charakteristikami. Při vytváření simulace je základem analýza procesu, který má být simulován. Následně se vytvoří předpisy, které popisují chování zkoumaného systému. Nejčastěji mají podobu matematických rovnic. Nahrazování reálných dějů jejich počítačovou simulací s využitím náhodných dat je stále používanější technikou v celé řadě vědeckých oblastí. Široce se aplikuje v ekonomii, biochemii, fyzice a dalších oborech.

Pro získání náhodných dat je zapotřebí hardwarový generátor, který tato data generuje jako výsledky náhodných fyzikálních procesů. V rámci této práce jsou jako náhodná data označována pseudonáhodná data. To jsou data, která vytvářejí zdánlivě náhodnou posloupnost, ovšem jsou generována deterministickým algoritmem.

Při použití náhodných dat jsou výsledky simulace proměnlivé, k získání dobrého odhadu přesných hodnot je potřeba počítačové simulace opakovat. V takovém případě se již hovoří o metodě Monte-Carlo (MC). Pro stanovení vhodného počtu opakování je možné využít různé varianty této metody, některé z nich jsou podrobně popsány v dalších částech této práce (viz sekce 2.5), další přístupy představuje M. Giles [6].

Provedením klasické (jednoúrovňové) MC metody lze získat odhady parametrů rozdělení, sestavit empirickou distribuční funkci a určit kvantily rozdělení. Značná nevýhoda této metody tkví v pomalém přibližování odhadovaných a skutečných parametrů náhodné veličiny. K dosažení výsledků s malým rozptylem je třeba provést velké množství opakování simulace.

Východiskem se jeví použití víceúrovňové metody Monte-Carlo (MLMC). Tato metoda umí na základě redukce rozptylů vhodně stanovovat počty provedení simulací. V důsledku toho lze odhady parametrů získávat efektivněji než při použití klasické MC metody, přesnost přitom zůstává stejná. Prostřednictvím MLMC je možné odhadnout pouze střední hodnoty charakteristik náhodné veličiny. Nelze přímo určit kvantily rozdělení, funkci hustoty pravděpodobnosti nebo distribuční funkci. Pro tento účel je třeba využít jiné přístupy. V této práci byla zvolena metoda maximální

entropie, která je použita pro rekonstrukci hustoty rozdělení pravděpodobnosti při znalosti statistických momentů. Vytvořené řešení vychází z práce Wenhui Gou [7].

Zkoumaným problémem je pohyb podzemní vody horninou s vlivem blízkého podzemního úložiště jaderného odpadu. Ochrana před únikem radiace se skládá ze dvou částí. Primární obalový soubor je tvořen z ocelových kontejnerů a speciálního těsnícího jílu. Tato izolace je navržena na dobu 10 až 100 tisíc let. Po uplynutí této doby bude docházet k pomalému uvolňování kontaminantu do geosféry, která díky nízké vodivosti a velkému ředění představuje sekundární a hlavní bariéru. K přenosu kontaminace do povrchových vod by nemělo dojít dříve než za milión let, v té době bude již radioaktivita kontaminantu zanedbatelná.

Vzhledem k tomu, že nelze provádět experiment v trvání miliónu let, tak přichází na řadu matematické modelování a vytvoření počítačové simulace. Ta umožní na základě matematických rovnic popsat proudění podzemní vody v hornině. Parametry simulace není možné určit přesně, proto se s výsledky simulace pracuje jako s náhodnou veličinou. Pro získání středních hodnot charakteristik této náhodné veličiny lze použít metody MC. S ohledem na náročnost podobných simulací není vhodné volit klasickou MC metodu, ale lze aplikovat MLMC.

Text této práce je rozdělen do několika vzájemně souvisejících částí. Nejprve je v kapitole 2 podrobně popsána metoda Monte-Carlo a její víceúrovňová varianta. Kapitola 3 poskytuje vysvětlení metody aproximace funkce hustoty pravděpodobnosti, respektive distribuční funkce, při známých momentech rozdělení. Následuje popsání struktury vytvořené knihovny. Teoretické poznatky jsou poté otestovány na umělé náhodné veličině, která má podobu lognormálního rozdělení (viz část 5). Kapitola 6 ukazuje použití popsáných principů s reálnou simulací proudění podzemní vody. K tomuto účelu je použitý program Flow123d, který kromě modelování proudění podzemní vody umí řešit také úlohy transportu rozpuštěných látek v podzemních vodách a další.

## 2 Metoda Monte-Carlo

Metoda Monte-Carlo je velmi užitečným nástrojem pro odhady statistik získaných ze stochastických simulací.

Princip fungování metody Monte-Carlo, který je založený na centrální limitní větě, je znám poměrně dlouho. První příklad použití se datuje již do 19. století. Jednalo se o tzv. Buffonovu úlohu, tedy zjišťování hodnoty  $\pi$  pomocí házení jehly na rovinu pokrytou rovnoběžkami. Důležitou roli měla tato metoda také pro vývoj atomových bomb. V americké Národní laboratoři Los Alamos byla použita pro simulace štěpné reakce. Velký rozvoj nastal až s nástupem výkonnějších počítačů na konci 20. století.

Podobně jako u počítačových simulací i samotná metoda Monte-Carlo nachází využití v mnoha vědeckých oborech. Nepoužívá se jen při řešení simulací, ale lze ji nasadit například i na numerické integrace. Velkou oblastí aplikace je finanční modelování. Rada autorů se zabývá například problémy stanovování ceny finančních derivátů [4].

Existuje několik aplikací metody Monte-Carlo. Jednoúrovňová metoda MC nachází využití především u jednoduchých simulací, které rychle a přesně aproximují reálné řešení. Pro dosažení dostatečně přesného a nestranného odhadu střední hodnoty je nutné často vykonat mnoho simulací, to s sebou nese velkou výpočetní cenu.

Pojem *výpočetní cena* je v kontextu této práce chápán jako celkový počet výpočetních operací.

S cílem zmenšení výpočetní ceny a zachování přesnosti nalezené střední hodnoty byly vyvinuty další varianty Monte-Carlo metody.

Jednou z nich je Quasi-Monte-Carlo metoda, která nepoužívá jako vstupy do počítačové simulace náhodná data, ale místo toho jsou vstupní data generována deterministickými algoritmy, které jsou navrženy tak, aby zaručily zmenšení chyby simulace. Tento přístup nachází uplatnění především ve finančním modelování.

V případě, že je nutné použít pro simulace náhodná data, tak optimálním řešením je aplikace víceúrovňové metody Monte-Carlo (MLMC), která efektivně snižuje rozptyl střední hodnoty.

### 2.1 Jednoúrovňová metoda MC

Jednoúrovňová Monte-Carlo metoda je založena na jednoduchém principu. Cílem je získat nestranný odhad střední hodnoty  $\mathbb{E}(P(x))$ , kde  $P$  reprezentuje výsledek počítačové simulace, do které vstupuje náhodná veličina  $X$ . Odhad střední hodnoty

je vypočítán jako aritmetický průměr z hodnot  $P(x)$ , pro  $N$  nezávislých realizací  $x$  z  $X$ . Podle centrální limitní věty má rozložení průměru asymptoticky normální rozdělení:

$$\hat{P} \sim \mathcal{N}\left(\mu, \frac{\sigma^2}{N}\right), \quad (2.1)$$

kde  $\mu$  je střední hodnota a  $\sigma^2$  je rozptyl náhodné veličiny  $P$ , směrodatná odchylka průměru pak je:

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}. \quad (2.2)$$

Z rovnice 2.2 je patrné, že snížení odchylky například o jeden řád je možné dosáhnout pouze zvýšením počtu vykonání simulace o dva řády. Takový postup je neefektivní a pro složitější simulace téměř nepoužitelný. Vhodné je proto využít víceúrovňovou variantu metody Monte-Carlo, která umožňuje efektivní snížení směrodatné odchylky a rozptylu.

## 2.2 Dvouúrovňová metoda MC

Dvouúrovňová MC metoda je nejjednodušší variantou MLMC. Její princip je založen na redukci rozptylu [6]. Jsou dány náhodné veličiny  $g$  a  $f$ ,  $g$  má známou střední hodnotu  $\mathbb{E}(g)$  a dobře koreluje s  $f$ . Pak hledaný nestranný odhad  $\hat{f}$  pro  $\mathbb{E}(f)$  lze vypočítat následujícím vzorcem:

$$\hat{f} = N^{-1} \sum_{n=1}^N \left\{ f(x_n) - \lambda \left( g(x_n) - \mathbb{E}(g) \right) \right\}, \quad (2.3)$$

kde jednotlivé hodnoty  $x_n$  jsou na sobě nezávislé.  $\lambda$  je vhodná konstanta.

Obecný předpis 2.3 je možné aplikovat jako dvouúrovňovou metodu MC. Snahou je správně určit  $\mathbb{E}(P_1)$ . Existuje  $P_0$ , která aproximuje  $P_1$  a její simulace je méně výpočetně náročná. Pak lze použít  $P_0$  k výpočtu střední hodnoty  $P_1$

$$\mathbb{E}(P_1) = \mathbb{E}(P_0) + \mathbb{E}(P_1 - P_0). \quad (2.4)$$

Odtud je získán nestranný odhad střední hodnoty pro dvě úrovně:

$$\hat{P}_1 = N_0^{-1} \sum_{n=1}^{N_0} P_0(x_n) + N_1^{-1} \sum_{n=1}^{N_1} \left( P_1(x_n) - P_0(x_n) \right), \quad (2.5)$$

$N_0$  a  $N_1$  jsou počty vykonání simulací na nulté a první úrovni, do každé nově vykonávané simulace vstupují nová náhodná data  $x$ . První a druhý člen z rovnice 2.5 používají jako vstupy do simulací vzájemně nezávislé hodnoty.

V rámci druhého členu z rovnice 2.5 jsou vstupní data do  $P_0$  i  $P_1$  vzájemně závislá. Předpokládá se, že rozdíl  $P_1(x_n) - P_0(x_n)$  má malý rozptyl. Hlavní odlišností oproti obecné metodě redukce rozptylu (předpis 2.3) je to, že  $\mathbb{E}(P_0)$  není předem známá a musí být také odhadnuta.



Celková výpočetní cena  $C$  je dána součtem výpočetních cen na jednotlivých úrovních. V tomto případě

$$C = N_0 n_0 + N_1 n_1, \quad (2.6)$$

kde  $n_0$  je počet výpočetních operací  $P_0$  a  $n_1$  je počet výpočetních operací  $P_1 - P_0$ . Jestliže  $V_0$  je rozptyl  $P_0$  a  $V_1$  je rozptyl  $P_1 - P_0$ , pak celkový rozptyl je

$$V = N_0^{-1} V_0 + N_1^{-1} V_1. \quad (2.7)$$

## 2.3 Víceúrovňová metoda MC

Na stejném principu, který aplikuje dvouúrovňová metoda MC, je postavena i víceúrovňová metoda MC. Zde je dána sekvence náhodných veličin  $\{P_l\}_{l=0}^{L-1}$ , které s různou přesností aproximují  $P_L$ . S narůstajícím  $l$  se zvyšuje přesnost přiblížení  $P_l$  k  $P_L$ , ale rovněž narůstá výpočetní cena.

Střední hodnota  $P_L$  je získána postupným sečtením středních hodnot z rozdílů výsledků simulací na jednotlivých úrovních:

$$\mathbb{E}(P_L) = \mathbb{E}(P_0) + \sum_{l=1}^L \mathbb{E}(P_l - P_{l-1}). \quad (2.8)$$

Odtud lze vyjádřit následující nestranný odhad střední hodnoty:

$$\hat{P}_L = N_0^{-1} \sum_{n=1}^{N_0} P_0(x_n^0) + \sum_{l=1}^L \left\{ N_l^{-1} \sum_{n=1}^{N_l} \left( P_l(x_n^l) - P_{l-1}(x_n^l) \right) \right\}, \quad (2.9)$$

$L$  je celkový počet úrovní,  $N_l$  je počet provedení simulací na dané úrovni  $l$ . Za výpočet jedné úrovně je považována realizace  $N_l$  rozdílů  $P_l - P_{l-1}$ . Vstupní náhodná data  $x_n^l$  do jednotlivých simulací jsou pro simulace na stejné úrovni ( $P_l, P_{l-1}$ ) vzájemně závislá. Liší se počet jejich hodnot v závislosti na počtu výpočetních operací simulace. Vstupní data do simulací na odlišných úrovních jsou vzájemně nezávislé náhodné veličiny.

Jelikož jsou výsledky získané na jednotlivých úrovních také vzájemně nezávislé náhodné veličiny, tak pro celkový rozptyl  $V$  platí:

$$V = \sum_{l=0}^L \frac{V_l}{N_l}, \quad (2.10)$$

kde  $N_l$  je počet vykonání simulace na dané úrovni,  $V_l$  je rozptyl hodnot na úrovni  $l$ :

$$V_l = \mathbb{V}[P_l - P_{l-1}].$$

Výpočetní cenu na jedné úrovni je možné vyjádřit jako

$$C_l = N_l n_l,$$

$n_l$  je počet výpočetních operací simulace na úrovni  $l$ .  
Celková výpočetní cena MLMC:

$$C = \sum_{l=0}^L C_l. \quad (2.11)$$

## 2.4 Výpočet momentů pomocí MLMC

Stejně jako lze pomocí MLMC odhadnout střední hodnotu náhodné veličiny, tak je možné odhadovat také střední hodnoty vyšších momentů. Tato výhoda je využita například pro algoritmy, které slouží k rekonstrukci hustoty pravděpodobnosti a distribuční funkce (viz kapitola 3). Tyto algoritmy využívají hodnoty tzv. zobecněných momentů náhodné veličiny. Nelze hovořit o klasických momentech, protože pro výpočet těchto zobecněných momentů mohou být použité různé funkce. Platí následující rovnice

$$\mathbb{E}[\phi(X)] = \int_a^b \phi(x)\rho_X(x)dx, \quad (2.12)$$

kde  $\phi(x)$  je funkce pro výpočet zobecněných momentu a  $\rho_X(x)$  je funkce hustoty pravděpodobnosti náhodné veličiny  $X$ .

### 2.4.1 Výběr funkcí momentů

Pro výpočet zobecněných statistických momentů je důležité vybrat vhodné funkce  $\{\phi_r\}_{r=0}^R$ , kde  $R$  je o jedna menší než počet momentů. Nejpřirozenější je volit funkce, které odpovídají klasickému výpočtu momentů náhodné veličiny (n.v.):

$$\mu_k(X) = \mathbb{E}X^k, \text{ pro } k\text{-tý obecný moment n.v. } X$$

$$\mu_k(X) = \mathbb{E}(X - \mathbb{E}X)^k, \text{ pro } k\text{-tý centrální moment n.v. } X.$$

Pro lepší podmíněnost úlohy je výhodné použít centrální momenty. V dalším textu se vždy pojmem momenty označují zobecněné centrální momenty náhodné veličiny.

První volba funkce připadla na monomiály:

$$\phi_r(x) = x^r. \quad (2.13)$$

Použité jsou v podobě centrálních momentů:

$$\phi_0(x) = \mu_1 \quad (2.14)$$

$$\phi_r(x) = \phi_r(x - \mu_1), \text{ pro } r = 1, \dots, R. \quad (2.15)$$

Další možností je zvolení Fourierových funkcí:

$$\phi_0(x) = 1 \quad (2.16)$$

$$\phi_{2r-1}(x) = \sin(ty) \quad (2.17)$$

$$\phi_{2r}(x) = \cos(ty), \quad (2.18)$$

kde  $t$  se volí jako  $\lfloor (r+1)/2 \rfloor$ ,  $r = 1, \dots, R$ ,  $y = x - \mu_1$ .

## 2.5 Optimalizace MLMC

Klíčovou vlastností efektivní MLMC jsou odlišné počty vykonání simulace na jednotlivých úrovních ( $N_l$ ). Hodnoty  $N_l$  lze určit již před spuštěním MLMC. V takovém případě je ovšem téměř nemožné odhadnout je tak, aby byl nalezen výsledek s dobrým rozptylem a zároveň s co nejmenší celkovou výpočetní cenou.

Aby se dalo hovořit o efektivní MLMC, tak je nezbytné optimalizovat výpočet  $N_l$ . První možností je minimalizovat výpočetní cenu  $C$  při zadaném celkovém rozptylu  $V$  (viz sekce 2.5.1). Druhou variantou je naopak zadání výsledné výpočetní ceny  $C$  a minimalizace celkového rozptylu  $V$  (viz sekce 2.5.2). Oba tyto případy vedou na problém vázaných extrémů.

### 2.5.1 Cílový rozptyl

Snahou je najít  $N_l$  tak, aby byla pro zadaný celkový rozptyl  $V$  minimalizována výpočetní cena  $C$ .

Hledá se minimum funkce

$$C = \sum_{l=0}^L N_l n_l, \quad (2.19)$$

za podmínky

$$\sum_{l=0}^L \frac{V_l}{N_l} = V, \quad (2.20)$$

pak vyjádření Lagrangeovy funkce:

$$L(N_l) = \sum_{l=0}^L N_l n_l + \lambda \left( \sum_{l=0}^L \frac{V_l}{N_l} \right), \quad (2.21)$$

podmínka pro stacionární bod:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial N_l} &= n_l + \lambda \frac{-V_l}{N_l^2} = 0 \\ N_l^2 &= \frac{\lambda V_l}{n_l}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

dosazení do vazebné podmínky:

$$\sum_{l=0}^L \frac{V_l}{\sqrt{\frac{\lambda V_l}{n_l}}} = V, \quad (2.23)$$

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} = \frac{V}{\sum_{l=0}^L \sqrt{V_l n_l}}, \quad (2.24)$$

následně dosazením  $\lambda$  do rovnice 2.22 lze získat vzorec pro výpočet  $N_l$ :

$$N_l = \sqrt{\frac{V_l \sum_{l=0}^L \sqrt{V_l n_l}}{n_l V}}. \quad (2.25)$$

Možné je rovněž optimalizovat výpočet MLMC na základě rozptylu momentů. Pak jsou  $N_l$  určovány následovně:

$$N_l^r = \sqrt{\frac{V_l^r \sum_{l=0}^L \sqrt{V_l^r n_l}}{n_l V_r}}, \quad r = 0, \dots, R, \quad (2.26)$$

kde  $V_r$  je cílový rozptyl pro konkrétní moment,  $V_l^r$  je rozptyl  $r$ -tého momentu na úrovni  $l$ :

$$V_l^r = \mathbb{V}[\mu_l^r(x) - \mu_{l-1}^r(x)].$$

Hodnoty  $N_l$  jsou vypočítány jako maximum z  $N_l^r$

$$N_l = \max N_l^r, \quad r = 0, \dots, R. \quad (2.27)$$

Pro aplikaci nejsou známy přesné hodnoty  $V_l^r$  a používají se tak jejich odhady  $\widehat{V}_l^r$ :

$$\widehat{N}_l^r = \sqrt{\frac{\widehat{V}_l^r \sum_{l=0}^L \sqrt{\widehat{V}_l^r n_l}}{n_l V_r}}, \quad r = 0, \dots, R. \quad (2.28)$$

$$\widehat{N}_l = \max \widehat{N}_l^r, \quad r = 0, \dots, R. \quad (2.29)$$

## 2.5.2 Cílová výpočetní cena

Zde je úlohou najít  $N_l$  tak, aby byl minimalizován výsledný rozptyl  $V$  při zadané celkové výpočetní ceně  $C$ .

Oproti předchozí části 2.5.1 se hledá minimum funkce

$$V = \sum_{l=0}^L \frac{V_l}{N_l}, \quad (2.30)$$

tentokrát za podmínky

$$\sum_{l=0}^L N_l n_l = C, \quad (2.31)$$

postup řešení je analogický s variantou minimalizování celkové výpočetní ceny při zadaném cílovém rozptylu, výsledné  $N_l$  je určeno následujícím předpisem:

$$N_l = \frac{C \sqrt{\frac{V_l}{n_l}}}{\sum_{l=0}^L \sqrt{V_l n_l}}. \quad (2.32)$$

Tato varianta není v rámci tohoto textu používána, avšak vyvíjené řešení pro výpočet MLMC dokáže určovat  $N_l$  podle rovnice 2.32.

## 3 Aproximace funkce hustoty pravděpodobnosti

Pro jednoznačné určení rozdělení pravděpodobnosti náhodné veličiny je nutné získat její funkci hustoty pravděpodobnosti. Z ní je následně možné integrací vypočítat distribuční funkci. Pro nalezení přibližné hustoty lze využít více metod. V následující kapitole je popsána metoda maximální entropie. Její podrobné vysvětlení je představeno v [7]. Další přístupy k aproximaci distribuční funkce a hustoty pravděpodobnosti náhodné veličiny popisuje například Michael B. Giles [5].

### 3.1 Metoda maximální entropie

#### 3.1.1 Shannonova Entropie

Pojem entropie není ustálený, v různých oborech vědecké činnosti se lze setkat s více či méně rozdílnými definicemi tohoto pojmu. Obecně lze definovat entropii jako míru neurčitosti systému, která roste s klesajícím množstvím informace. Za pravděpodobnostní rozdělení s největší entropií je považováno normální rozdělení s danou střední hodnotou a rozptylem, naopak nejmenší entropii mají rozdělení založená na prahové funkci. Shannonova entropie [8] je pro hustotu  $\rho$  náhodného rozdělení dána následujícím předpisem:

$$S = - \int_a^b \rho(x) \ln(\rho(x)) dx. \quad (3.1)$$

#### 3.1.2 Aproximace hustoty pomocí MME

Cílem je aproximovat funkci hustoty pravděpodobnosti  $\rho$  náhodného rozdělení. Za předpokladu, že jsou známy hodnoty momentů pravděpodobnostního rozdělení a také funkce, které byly na výpočet momentů použity.

Matematicky lze tuto myšlenku zapsat následovně:

$$\int_a^b \phi_r(x) \rho(x) dx = \mu_r, \quad r = 0, \dots, R, \quad (3.2)$$

kde  $\{\mu_r\}_{r=0}^R$  jsou statistické momenty a  $\{\phi_r\}_{r=0}^R$  jsou lineárně nezávislé funkce [1] použité pro výpočet momentů.

Rovnice 3.2 může mít nekonečně mnoho řešení nebo žádné řešení. Pokud existuje více řešení, tak za nejobektivnější se považuje taková funkce hustoty pravděpodobnosti, která má minimální dodatečnou informaci, takže má maximální entropii.

Shannonova entropie pro zadanou hustotu  $\rho$  je definována

$$\mathbb{E}[-\ln(\rho(X))] = - \int_a^b \rho(x) \ln(\rho(x)) dx. \quad (3.3)$$

Získání maximální Shannonovy entropii má podobu optimalizačního problému s cíle maximalizovat

$$\begin{aligned} & - \int_a^b \rho(x) \ln(\rho(x)) dx \quad \text{za podmínky} \\ & \int_a^b \phi_r(x) \rho(x) dx = \mu_r, \quad r = 0, \dots, R. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Předpokládá se znalost přesných momentů  $\{\mu_r\}_{r=0}^R$ , ovšem v rámci aplikací jsou použité momenty  $\{\hat{\mu}_r\}_{r=0}^R$  aproximované pomocí MLMC (viz sekce 2.4).

Odhad funkce hustoty pravděpodobnosti lze vyjádřit jako:

$$\hat{\rho}_R(x) = \exp \left[ - \sum_{r=0}^R \hat{\lambda}_r \phi_r(x) \right], \quad (3.5)$$

kde  $\{\hat{\lambda}_r\}_{r=0}^R$  jsou odhady Lagrangeových multiplikátorů, které jsou získány vyřešením následující soustavy nelineárních rovnic

$$\int_a^b \phi_r(x) \exp \left[ - \sum_{s=0}^R \hat{\lambda}_s \phi_s(x) \right] dx = \hat{\mu}_r, \quad r = 0, \dots, R. \quad (3.6)$$

## 3.2 Popis algoritmu

Pro řešení výše popsaného problému nalezení nejlepší aproximace funkce hustoty pravděpodobnosti byla použita Newtonova metoda (označována také jako metoda tečen).

### 3.2.1 Newtonova metoda

Jedná se o iterační numerickou metodu, která slouží k nalezení přibližného řešení nelineárních rovnic. Je dána rovnice  $F(x) = 0$ , kde  $F(x)$  je nelineární spojitá funkce  $x$  s první a druhou derivací, která je nahrazena posloupností lineárních rovnic  $L_k(x) = 0, k = 0, 1, \dots$  takových, že jejich řešení konverguje k řešení původní rovnice  $F(x) = 0$ . Nezbytným předpokladem je znalost počáteční hodnoty  $x_0$ , která je stanovena jako hrubý odhad kořene rovnice  $F(x)$ . Dále je zvolena přesnost  $\varepsilon$  pro výsledné řešení.

V případě, že se jedná o řešení nelineární rovnice  $f(x) = 0$  v rovině, tak má Newtonova metoda podobu hledání tečen k funkci  $f(x)$ . Postup je následující:

1. Nalezení tečny funkce  $f$  v době  $[x_k, f(x_k)]$ , směrnice tečny odpovídá  $f'(x_k)$
2. Vypočtení hodnoty  $x_k$  pro další iteraci algoritmu:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}.$$

Kroky 1 a 2 se opakují dokud není nalezena hodnota  $x_k$  se stanovenou přesností  $\varepsilon$ .

Newtonova metoda je nejefektivnější metodou pro numerické řešení nelineárních rovnic, ovšem nemusí vždy konvergovat. Podrobné vysvětlení lze nalézt v [3].

Při výpočtu klasické Newtonovy metody může docházet k "přestřelení" - nová hodnota  $x_k$  je nadhodnocena. Tato situace nastává pokud je  $f'(x_k)$  blízká 0. Řešením může být volba jiného počátečního bodu, ve kterém nebude první derivace funkce  $f$  blízká nule. Ovšem způsob řešení, který se používá nejčastěji je nastavení takzvaného relaxačního koeficientu  $d \in (0, 1]$ . Výpočet nové hodnoty  $x_k$  má pak podobu:

$$x_{k+1} = x_k - d \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}.$$

Relaxační koeficient bývá obvykle na počátku stanoven na hodnotu 1. Jestliže nedochází k dobré konvergenci Newtonovy metody, tak se relaxační faktor snižuje, a to obvykle na polovinu původní hodnoty. Takto se postupuje dokud nedojde k dobré konvergenci.

### 3.2.2 Popis algoritmu metody maximální entropie

Na počátku je  $\boldsymbol{\lambda}$  empiricky stanovena jako vektor hodnot 0 o délce  $R + 1$ . Do algoritmu vstupuje rovněž vektor momentů  $\hat{\boldsymbol{\mu}}$  odhadnutých pomocí MLMC. Samotný postup Newtonovy metody je následující:

Nejprve se vypočítá vektor aproximovaných momentů

$$G_r(\boldsymbol{\lambda}) = \int_a^b \phi_r(x) \exp \left[ - \sum_{s=0}^R \lambda_s \phi_s(x) \right] dx, \quad r = 0, \dots, R, \quad (3.7)$$

$\mathbf{G}(\boldsymbol{\lambda}) = [G_0(\boldsymbol{\lambda}), \dots, G_R(\boldsymbol{\lambda})]$ . Cílem je aby hodnoty v  $\mathbf{G}(\boldsymbol{\lambda})$  odpovídaly hodnotám  $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ . Poté je vypočtena Jacobiho matice pro aktuální  $\boldsymbol{\lambda}$

$$\mathbf{H}(\boldsymbol{\lambda}) = \frac{\partial G_r(\boldsymbol{\lambda})}{\partial \lambda_s}, \quad r, s = 0, \dots, R. \quad (3.8)$$

Matice  $\mathbf{H}$  je symetrická a její prvky jsou určeny následujícím integrálem

$$h_{rs} = h_{sr} = - \int_a^b \phi_r(x) \phi_s(x) \exp \left[ - \sum_{p=0}^R \lambda_p \phi_p(x) \right] dx, \quad r, s = 0, \dots, R. \quad (3.9)$$

Posledním krokem je stanovení nových hodnot  $\boldsymbol{\lambda}$  pro následující iteraci Newtonovy metody:

$$\boldsymbol{\lambda}^{n+1} = \boldsymbol{\lambda}^n + d \mathbf{H}(\boldsymbol{\lambda}^n)^{-1} (\hat{\boldsymbol{\mu}} - \mathbf{G}(\boldsymbol{\lambda}^n)),$$

kde  $d$  je relaxační faktor.

Následně se z vypočítané funkce hustoty pravděpodobnosti integrací obdrží distribuční funkce hledané náhodné veličiny.



Popsaný algoritmus lze vyjádřit v podobě následujícího pseudokódu:

---

**Algoritmus 1:** Maximální entropie - Newtonova metoda

---

```
1 nastavení  $\phi$ , monomialy nebo Fourierovy funkce
2 nastavení integračních mezí  $(a, b)$ 
3 nastavení počtu kvadraturních bodů na  $(a, b)$ 
4 nastavení maximálního počtu kroků a tolerance
5 zvolení damping faktoru
6  $\lambda = \lambda_0$ 
7 while chyba > tolerance2 and pocet kroku < maximalni pocet kroku do
8   | výpočet  $\mathbf{G}(\lambda)$ 
9   | výpočet  $\mathbf{H}(\lambda)$ 
10  |  $d\lambda = \textit{damping} * \mathbf{H}(\lambda)^{-1}(\hat{\mu} - \mathbf{G}(\lambda))$ 
11  | chyba = 0
12  | for r in pocet momentu do
13  |   | chyba +=  $((\hat{\mu}_r - \mathbf{G}_r)/(\hat{\mu}_r + 1))^2$ 
14  |   end
15  |  $\lambda = d\lambda + \lambda$ 
16  | pocet kroku += 1
17 end
18 výpočet hustoty  $\rho$ 
```

---

K numerickému vyjádření vzdálenosti dvou distribučních funkcí je v rámci této práce zavedena aproximace  $L^2$  normy:

$$D = \|\rho_1 - \rho_2\|_{L^2(a,b)}^2 \approx \sum_{q_i} (\rho_1(q_i) - \rho_2(q_i))^2,$$

$q_i$  je rovnoměrně rozprostřené na intervalu  $(a, b)$ .

## 4 Knihovna MLMC

Výše popsaný princip fungování MLMC spolu s rekonstrukcí distribuční funkce byl implementován jako modul pro jazyk Python. Konkrétně se jedná o Python ve verzi 3.6.

Knihovna pro MLMC byla navržena tak, že je nutné vždy před spuštěním zadat celkový počet úrovní  $L$  a rozsah výpočetních operací  $(n_0, n_L)$ ,  $n_L > n_0$ . Kde  $n_0$  je počet výpočetních operací pro simulace na první úrovni. Jedná se o nejhrubší simulace, jejich výsledek má v kontextu celé MLMC největší rozptyl. Oproti tomu  $n_L$  je počet výpočetních operací pro nejmenější simulace na nejvyšší úrovni  $L$ . Na této úrovni jsou získávány nejpresnější výsledky s nejmenším rozptylem.

Jednotlivé hodnoty  $n_l$  jsou pro víceúrovňovou variantu vypočítány pomocí interpolace:

$$n_l = n_0^{(1-\frac{l}{L-1})} n_L^{\frac{l}{L-1}}, L > 1, l = 0, \dots, L - 1.$$

V závislosti na konkrétní simulaci může být místo rozsahu výpočetní operací zadána dvojice velikostí největšího a nejmenšího simulačního kroku. Takový způsob je vhodný zejména pokud se pro výpočet generuje síť konečných prvků. Zároveň je ovšem nezbytné určit pro konkrétní velikost simulačního kroku také příslušné množství výpočetních operací simulace. Bez toho by nebylo možné efektivně spouštět MLMC.

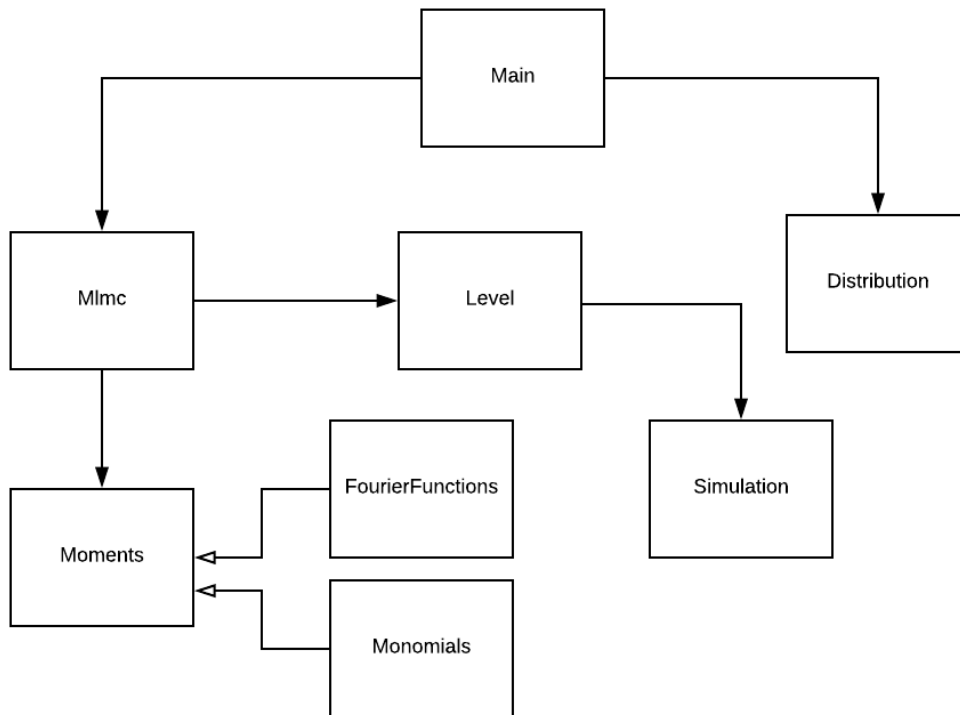
Na každé úrovni je vždy vykonán stejný počet hrubých i jemných simulací. Na první úrovni je vykonána pouze jemná simulace, hrubá simulace zde neexistuje.

Aplikovaný algoritmus dovoluje zadání pevného počtu vykonání simulací  $N_l$ . Tento přístup může být použit především pro testování a hrubé odhady výsledků na základě znalosti chování zkoumané simulace. Rovněž lze u nestabilních simulací předem odhadnout hodnoty  $N_l$  z velkého množství simulací. Takový přístup neumožňuje univerzální použití MLMC s libovolnou simulací bez znalosti jejího chování.

Knihovna umožňuje zadat cílové rozptyly zobecněných momentů. Na jejich základě se vypočítají vhodné hodnoty  $\hat{N}_l$ .

Vždy při vytvoření nové úrovně je provedeno 10 realizací příslušných simulací. To znamená, že na každé úrovni je  $N_l$  minimálně 10. Tento postup je zvolen z toho důvodu, aby bylo možné odhadnout rozptyly výsledků simulace a následně optimalizovat výpočet MLMC.

Modul je napsán způsobem, který umožňuje spouštět simulace paralelně. Tato vlastnost najde své využití zejména při realizaci náročných simulací, jejichž řešení je výpočetně náročné.



Obrázek 4.1: Diagram tříd

Diagram 4.1 ukazuje základní schéma jednotlivých tříd programu a vazeb mezi nimi. Main je hlavní třídou, ze které je spouštěna jak celá MLMC, tak i metody pro rekonstrukci distribuční funkce, které jsou ve třídě Distribution. Obě zmíněné třídy je možné obsluhovat nezávisle na sobě. Lze spouštět MLMC i bez rekonstrukce distribuční funkce. Každá úroveň má vlastní objekt, který je instancí třídy Level. Tato třída pracuje se simulacemi, každá z nich je realizována jako instance samostatné třídy Simulation. Výpočet momentů je aplikován v třídách FourierFunctions a Monomials, které dědí základní funkcionalitu od třídy Moments.

## 5 Testy pro umělou náhodnou veličinu

Správnost fungování algoritmů MLMC spolu s rekonstrukcí distribuční funkce byla nejprve otestována pro jednoduchou simulaci, která reprezentuje náhodnou veličinu s lognormálním rozdělením:

$$Y_n = \frac{1}{n_l} + Y, Y \sim LN(0; 0,5).$$

Pro tuto simulaci byl zvolen počet výpočetních operací v rozmezí od  $n_0 = 2$  do  $n_L = 100$ .

V následujících částech této kapitoly jsou otestovány přístupy k optimalizaci MLMC s použitím vypočítaných momentů, které jsou odhadnuty nejdříve pomocí monomiálů a poté prostřednictvím Fourierových funkcí. Dále je zde pro obě varianty momentů otestována metoda maximální entropie.

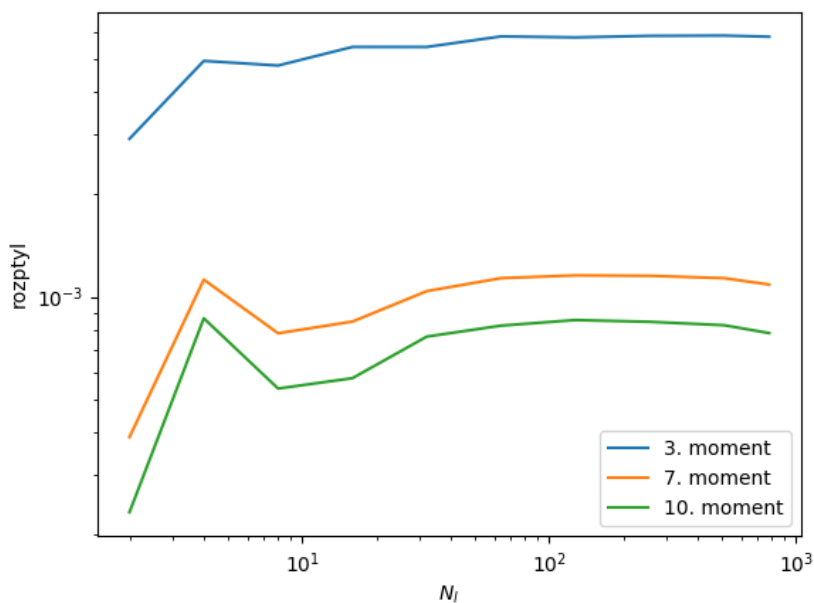
### 5.1 MLMC - odhad momentů

Cílem je získat pomocí MLMC odhad střední hodnoty ( $\widehat{Y}$ ) a také dostatečně přesné odhady dalších momentů ( $\widehat{\mu}_r$ ). Nachází se zde porovnání jednoúrovňové až pětiúrovňové metody MC. Testovanou variantou je optimalizace výpočtu MLMC při zadaném pevném rozptylu momentů (podle sekce 2.5.1). Snahou je určit  $N_l$  tak, aby byla pro zadané rozptyly momentů  $V_r$  minimalizována celková výpočetní cena  $C$ . Oproti klasickému přístupu, který využívá k této optimalizaci pouze rozptyl střední hodnoty, se zde pracuje i s vyššími momenty, které jsou tak obdrženy s dostatečnou přesností a je možné s nimi dále nakládat.

#### 5.1.1 Monomiály

V této části jsou hodnoty zvolených momentů odhadnuté pomocí funkcí monomiálů. Vzhledem k tomu, že úloha s těmito funkcemi je špatně podmíněná, tak bylo nutné nejdříve zjistit, zda se daří dobře stanovovat výchozí rozptyly momentů  $\widehat{V}_l^r$ , které se používají pro výpočet  $\widehat{N}_l$  (viz rovnice 2.28).

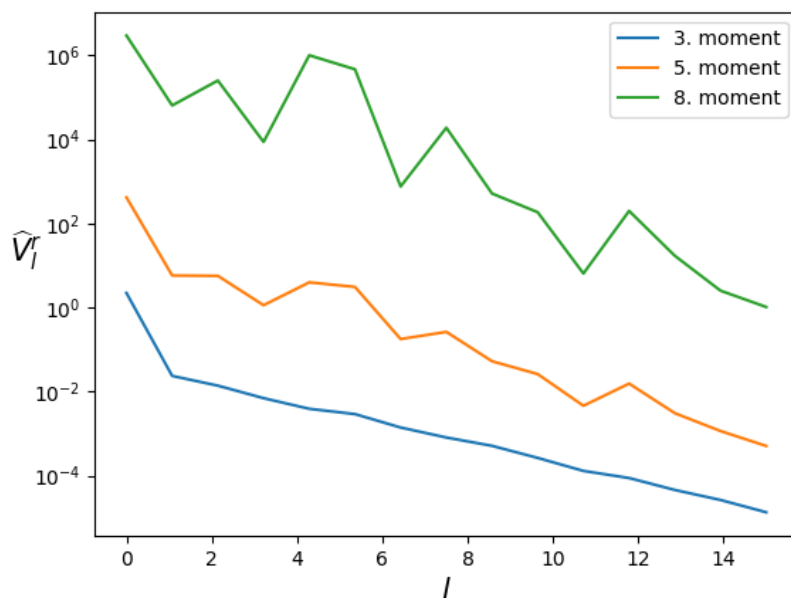
Obrázek 5.1 zobrazuje vývoj  $\widehat{V}_l^r$  podle toho z kolika opakování simulace ( $N_1$ ) je odhadnutý. Provedena byla jednoúrovňová metoda MC s pevnou volbou různě velkých  $N_1$ . Jak bylo uvedeno v části 4, tak výchozí hodnota pro  $N_1$  je stanovena na 10. Ukazuje se, že pro monomiály tento počet není dostačující a k ustálení rozptylů momentů dochází až při  $N_1 > 100$ .



Obrázek 5.1: Závislost  $\widehat{V}_l^r$  pro vybrané monomiály na počtu vzorků

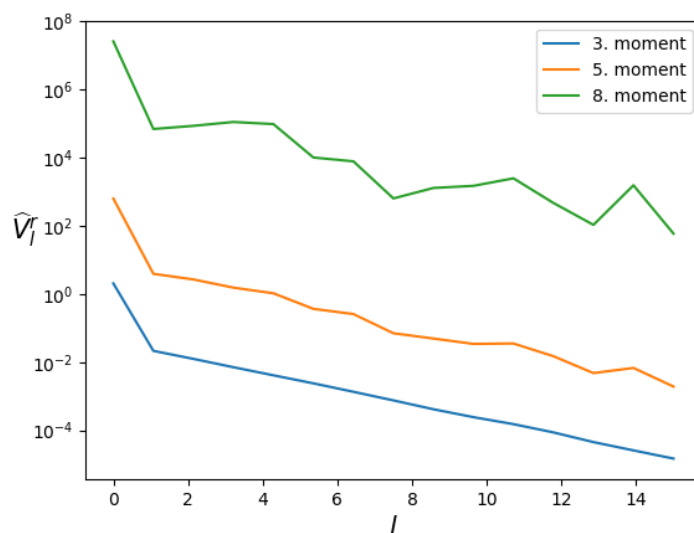
Jelikož hlavním přínosem víceúrovňové metody MC má být snižování rozptylu střední hodnoty v závislosti na rostoucí úrovni, tak je dobré tuto základní myšlenku ověřit v praxi. Na obrázku 5.2 je možné vidět jak se snižují hodnoty rozptylů vybraných momentů s narůstající úrovní. Pro tento test byla provedena patnáctiúrovňová metoda MC,  $N_l = 1000$ , pro  $l = 1, \dots, 15$ . Následně byly zjištěny pro každou úroveň odhady rozptylů jednotlivých momentů  $\widehat{V}_l^r$ .

Je patrné, že se zvyšujícím se momentem narůstá rozptyl na všech úrovních. Pro malé momenty, přibližně do  $r = 3$ , klesá rozptyl bez větších výkyvů. U vyšších momentů lze pozorovat výkyvy rozptylů mezi úrovněmi.



Obrázek 5.2: Vliv úrovní na rozptyl momentů - 1000 N

Oproti předchozímu příkladu, kde jsou rozptyly určeny z tisíce opakování, tak na obrázku 5.3 je pro stejnou úlohu zvoleno deset tisíc opakování ( $N_l = 10000$ , pro  $l = 0, \dots, 15$ ). Ukazuje se, že zvýšením počtu  $N_l$  lze dosáhnout hladkého snižování rozptylu pro více momentů než tomu bylo v předešlém případě. Konkrétně pro pátý moment je křivka vývoje rozptylu podobná křivce pro třetí moment. Naopak pro osmý moment není ani tento počet vykonání simulace dostatečný a bylo by třeba ho dále zvyšovat.



Obrázek 5.3: Vliv úrovní na rozptyl momentů - 10000 N

Z výše zobrazených grafů vyplývá, že vyšší momenty mají větší rozptyl  $\widehat{V}_l^r$ . Pro nalezení dobrého odhadu  $\widehat{V}_l^r$  je nutné simulace mnohokrát opakovat.

Lze konstatovat, že se zvyšující se úrovní dochází k očekávanému snižování rozptylu momentů. Zároveň se u vyšších momentů výrazně projevuje špatná podmíněnost úlohy při použití monomiálů. Z tohoto důvodu bylo pro další použití vybráno vždy maximálně prvních 5 momentů.

Efektivní získávání výsledků je zaručeno, pokud je zvolená některá z metod optimalizací MLMC (viz část 2.5). Jejich prostřednictvím jsou vypočítány  $\widehat{N}_l$ . V tabulce 5.1 jsou pro jednotlivé úrovně ( $L = 5$ ) a momenty ( $R = 4$ ) určeny  $\widehat{N}_l^r$ . K jejich získání byla použita optimalizace s pevně danými rozptyly momentů (podle sekce 2.5.1). Výsledky v tabulce jsou průměry z 10 opakování. Cílové rozptyly momentů byly stanoveny na:  $V_r = 0,01; r = 0, \dots, R$ .  $\widehat{N}_l$  je rovno největší hodnotě  $\widehat{N}_l^r, r = 0, \dots, R$ . Lze vidět, že touto hodnotou je vždy  $\widehat{N}_l^R$ . Tento fakt je způsoben tím že vyšší momenty mají větší rozptyly.

V důsledku tohoto zjištění lze pro některé úlohy ušetřit výpočetní výkon. Není nutné počítat rozptyly (případně i hodnoty) všech momentů, ale stačí vypočítat jen rozptyl nejvyššího momentu a na základě něj poté určit  $\widehat{N}_l$ .

Tabulka 5.1: Vliv momentů na  $\widehat{N}_l^r$

$\widehat{N}_l^r$	statistický moment ( $r$ )				
úroveň ( $l$ )	0	1	2	3	4
1	0	3132	19493	68836	204155
2	0	0	562	1750	15519
3	0	0	273	1776	7060
4	0	0	116	728	2828
5	0	0	39	240	911

Po provedení několika opakování MLMC je možné zjistit zda jsou  $\widehat{N}_l$  přesné a nebo jsou počítány s velkým rozptylem. V tabulce 5.2 jsou vypsány počty vykonání simulací na jednotlivých úrovních ( $\widehat{N}_l$ ). Jedná se o 11 realizací pětiúrovňové metody MC.  $\widehat{N}_l$  jsou stanoveny na základě pevných rozptylů momentů. Tyto rozptyly jsou obdrženy provedením výchozích 10 opakování simulací na každé úrovni. Cílové rozptyly pro všechny použité momenty:  $V_r = 0,01, r = 0, \dots, R$ .

Ukazuje se, že při použití monomiálů dochází k velkým rozdílům v rámci jednotlivých  $\widehat{N}_l$  nejen na první úrovni (viz obrázek 5.1), ale i na dalších úrovních. Možností řešení tohoto problému by bylo zvětšení počtu výchozích  $N_l$ . Tato možnost není efektivní, protože cílem je zachovávat na vyšších úrovních co nejméně realizací simulací.

Tabulka 5.2: Počet vykonání simulace

1. úroveň	2. úroveň	3. úroveň	4. úroveň	5. úroveň
1567372	7221	1017	486	673
13893	1286	121	43	14
7382	745	511	222	94
13647	167	171	52	24
58711	1017	196	1087	148
5120	220	124	103	44
705	98	21	30	10
59286	1259	277	200	40
125685	1625	471	127	160
13671	1256	597	178	80
507	194	145	6	9

Následuje přehled jednotlivých variant metod Monte-Carlo. V tabulce 5.3 se nachází porovnání jednoúrovňové až pětiúrovňové metody MC. Hodnoty  $\widehat{N}_l$  byly opět stanoveny s cílem minimalizovat  $C$  na základě zadaných  $V_r = 0,001, r = 0, \dots, 3$ . Použité byly 4 momenty. Vypočítané hodnoty v této tabulce jsou určeny jako průměr z dvaceti provedení každé MC metody.

Tabulka 5.3: Monomiály - porovnání metod MC

$n_{l-1}$	$n_l$	$\widehat{N}_l$	$\widehat{V}$	$\widehat{Y}$	$\sqrt{\widehat{V}}$	$\widehat{C}$	$\widehat{C}/n_L$
<b>Jednoúrovňová metoda</b>							
0	100	74169	0,0000505	1,1437	0,007106	7416900	74179
<b>Dvouúrovňová metoda</b>							
0	2	46155	0,0000337	1,1433	0,005805	197110	1972
2	100	1048					
<b>Trojúrovňová metoda</b>							
0	2	13513	0,0000411	1,1469	0,006411	70642	707
2	14	2194					
14	100	129					
<b>Čtyřúrovňová metoda</b>							
0	2	10544	0,0000541	1,1384	0,007355	40511	406
2	7	1628					
7	27	201					
27	100	26					
<b>Pětiúrovňová metoda</b>							
0	2	5594	0,0000809	1,1381	0,008994	22934	230
2	5	973					
5	14	242					
14	27	59					
27	100	19					



Jak je patrné ze sloupce  $\widehat{V}$ , tak výsledný rozptyl odhadu střední hodnoty  $\widehat{Y}$  dosahuje pro všechny zkoumané metody řádově nižších hodnot, než bylo zadané. To je způsobeno tím, že největší vliv na výpočet  $\widehat{N}_l$  má rozptyl nejvyššího momentu (viz tabulka 5.1). V důsledku toho dojde k provedení vyššího počtu simulací než by bylo nezbytně nutné k dosažení zadaného rozptylu pro průměr.

Sloupce  $n_{l-1}$  a  $n_l$  obsahují počet simulačních kroků hrubé respektive jemné simulace na dané úrovni  $l$ . Na první úrovni neexistuje hrubá simulace, proto se zde udává počet simulačních kroků 0.

Hodnoty ve sloupci  $\widehat{N}_l$  dobře ilustrují, jak s přibývajícím úrovní klesá příslušný počet provedení simulace. To nastává vlivem snižování rozptylu při narůstající úrovni.

Ve sloupci  $\sqrt{\widehat{V}}$  jsou zobrazeny směrodatné odchylky, které udávají průměrný rozdíl mezi jednotlivými pozorováními a  $\widehat{Y}$ .

Jednoúrovňová metoda má největší výpočetní cenu  $\widehat{C}$ . Tato cena, podle očekávání, výrazně klesá pro víceúrovňové varianty metod MC. Největší pokles je patrný mezi klasickou metodou MC a dvouúrovňovou metodou MC. Zde se ukazuje opodstatnění použití MC metod s více úrovněmi.

Efektivnost víceúrovňových metod podtrhuje poslední sloupec tabulky  $\widehat{C}/n_L$ , který znázorňuje počet jednoúrovňových metod, který by stačilo provést, pokud by klasická metoda MC dosahovala stejné přesnosti jako vykonaná víceúrovňová metoda. Jako nejefektivnější je vyhodnocena pětiúrovňová metoda MC.

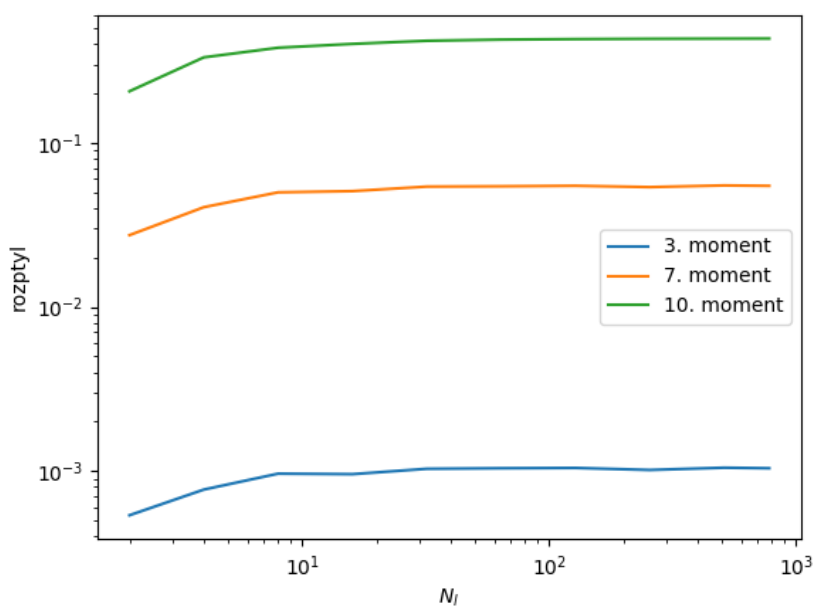
Stejně jako rozptyl střední hodnoty jsou i třetí ( $\widehat{\mu}_3$ ) a čtvrtý ( $\widehat{\mu}_4$ ) moment získány s požadovanou přesností (tabulka 5.4). Tyto momenty mají význam šikmosti, resp špičatosti rozdělení.

Tabulka 5.4: MLMC - hodnoty vyšších momentů

	$\widehat{\mu}_3$	$\widehat{V}(\widehat{\mu}_3)$	$\widehat{\mu}_4$	$\widehat{V}(\widehat{\mu}_4)$
<b>Jednoúrovňová metoda</b>	0,369146	0,000253	0,389648	0,003545
<b>Dvouúrovňová metoda</b>	0,365321	0,000100	0,390128	0,001877
<b>Tříúrovňová metoda</b>	0,363744	0,000249	0,390145	0,003930
<b>Čtyřúrovňová metoda</b>	0,368547	0,000182	0,387713	0,001423
<b>Pětiúrovňová metoda</b>	0,367132	0,000078	0,384532	0,000223
<b>Přesné hodnoty</b>	0,364696		0,385462	

## 5.1.2 Fourierovy funkce

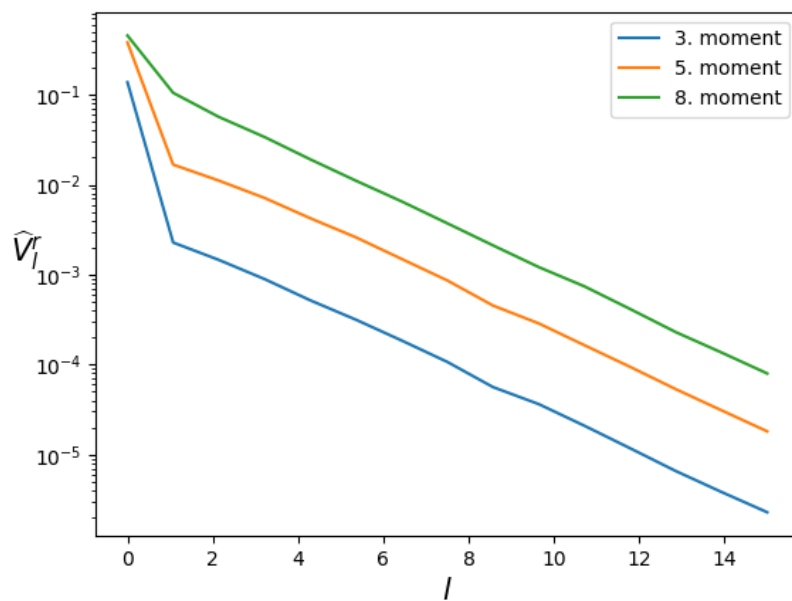
Oproti předešlé části 5.1.1 zde momenty vypočítané pomocí Fourierových funkcí neaproximují skutečné statistické momenty a nelze v nich na první pohled najít ukazatele, které charakterizují tvar rozdělení pravděpodobnosti. Přesto jsou užitečné a nachází své uplatnění například v algoritmu pro rekonstrukci distribuční funkce.



Obrázek 5.4: Závislost  $\widehat{V}_l^r$  pro vybrané Fourierovy funkce na počtu vzorků

Z obrázku 5.4, který popisuje vývoj  $\widehat{V}_l^r$  s ohledem na velikost  $N_l$ , lze vyčíst, že pro dobré stanovení  $\widehat{V}_l^r$  stačí  $N_l = 10$ . Zde se ukazuje, že rozptyl takto odhadnutých momentů má menší rozptyl než v případě monomiálů.

Obrázek 5.5 ukazuje vývoj rozptylu momentů  $\widehat{V}_l^r$  napříč úrovněmi. Realizována byla patnáctiúrovňová metoda MC,  $N_l = 1000$ , pro  $l = 1, \dots, 15$ . Stejná úloha byla řešena i pro monomiály (obrázek 5.2). Oproti nim je pro Fourierovy funkce klesání rozptylů hladké a není nutné zvyšovat výchozí  $N_l$  nebo jinak upravovat výpočet.



Obrázek 5.5: Fourierovy funkce - vliv úrovní na rozptyl momentů

V tabulce 5.5 jsou zobrazeny výsledky jednoúrovňové až pětiúrovňové metody MC. V tomto případě bylo pro optimalizace MLMC použito 10 momentů. Výsledné hodnoty jsou vypočítány stejně jako při použití monomiálů z dvaceti realizací každé MC metody.

Tabulka 5.5: Fourierovy funkce - porovnání metod MC

$n_{l-1}$	$n_l$	$\widehat{N}_l$	$\widehat{V}$	$\widehat{Y}$	$\sqrt{\widehat{V}}$	$\widehat{C}$	$\widehat{C}/n_L$
<b>Jednoúrovňová metoda</b>							
0	100	6720	0,00063816	1,1441	0,02526	672000	6720
<b>Dvouúrovňová metoda</b>							
0	2	6627	0,0002536	1,1443	0,01592	191254	1913
2	100	1780					
<b>Trojúrovňová metoda</b>							
0	2	3606	0,0001008	1,1423	0,01004	55690	557
2	14	2427					
14	100	145					
<b>Čtyřúrovňová metoda</b>							
0	2	3214	0,0001133	1,1416	0,010644	41091	411
2	7	2582					
7	27	407					
27	100	56					
<b>Pětiúrovňová metoda</b>							
0	2	2888	0,0001265	1,1442	0,011247	34224	343
2	5	2471					
5	14	627					
14	27	145					
27	100	34					

Pro cílové rozptyly všech momentů byla zvolena stejná hodnota  $V_r = 0,0001$ , pro  $r = 0, \dots, R$ . Tento rozptyl byl vybrán s ohledem na další použití vypočítaných momentů. U všech metod se podařilo řádově dosáhnout zvoleného rozptylu.

Celková výpočetní cena  $\widehat{C}$  také klesá podle předpokladů. Její největší pokles je zaznamenaný mezi jednoúrovňovou a dvouúrovňovou metodou. I v případě použití Fourierových funkcí je nejefektivnější pětiúrovňová metoda MC.

MLMC umožňuje získat dobré odhady momentů při použití monomiálů i Fourierových funkcí.

## 5.2 Testy aproximace hustoty pravděpodobnosti

Pomocí metody maximální entropie lze aproximovat funkce hustoty pravděpodobnosti, respektive distribuční funkce náhodné veličiny (viz kapitola 3). Pro řešení jsou použité zobecněné funkce momentů - monomiály, Fourierovy funkce. Hodnoty momentů jsou odhadnuté pomocí MLMC. V tomto případě se jedná konkrétně o pětiúrovňovou metodu, která byla na základě testů vyhodnocena jako nejefektivnější z použitých víceúrovňových metod MC. S ohledem na co nejpřesnější získání hodnot momentů jsou  $\widehat{N}_l$  vypočítány pro pevně zadaný rozptyl (sekce 2.5.1).

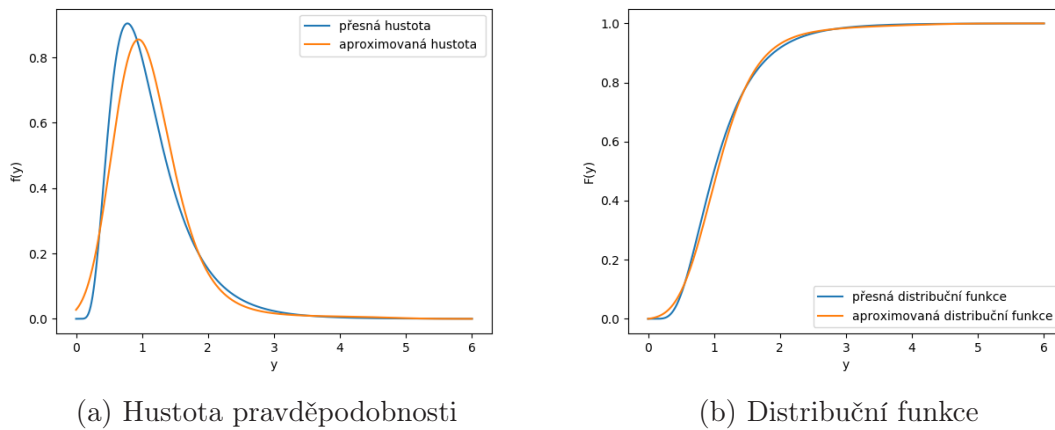
Pro použitou metodu maximální entropie je nutné vhodně stanovit optimální

počet vybraných momentů ( $= R + 1$ ), ten se liší v závislosti na funkci zobecněných momentů. Pro přesné řešení je třeba rovněž zvolit správný interval, na kterém se nachází hledaná funkce hustoty pravděpodobnosti.

### 5.2.1 Monomialy

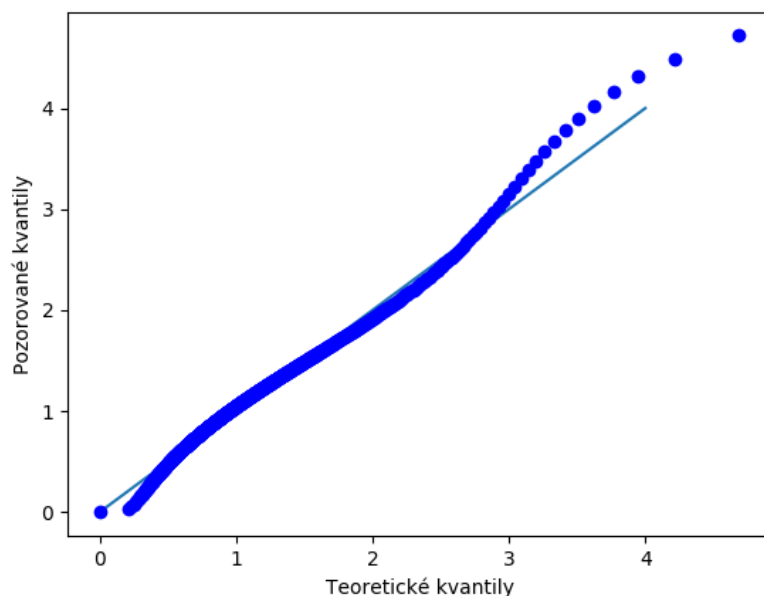
První variantou je rekonstrukce distribuční funkce na základě momentů vypočítaných pomocí monomiálů (viz část 2.13). Vybráno je prvních 5 momentů ( $R = 4$ ). Cílové rozptyly pro optimalizaci MLMC:  $V_r = 0,00001$ , pro  $r = 0, \dots, R$ . Interval, na kterém je hledána hustota, byl stanoven na  $[0, 6]$ .

Obrázek 5.6 zobrazuje získanou funkci hustoty pravděpodobnosti a distribuční funkci, pro porovnání je vykreslena také přesná křivka hustoty pravděpodobnosti a distribuční funkce. Již na první pohled je patrné, že se hustoty ani distribuční funkce zcela neshodují.



Obrázek 5.6: Aproximace distribuce  $LN(0; 0,5)$

Přesně lze tuto skutečnost znázornit na Q-Q grafu (obrázek 5.7), který zobrazuje kvantily rekonstruované distribuční funkce a přesné distribuční funkce. V případě shody těchto funkcí by byly hodnoty kvantilů v jedné přímce. To se zde neděje, takže dané distribuční funkce se neshodují.



Obrázek 5.7: Q-Q graf - monomiály

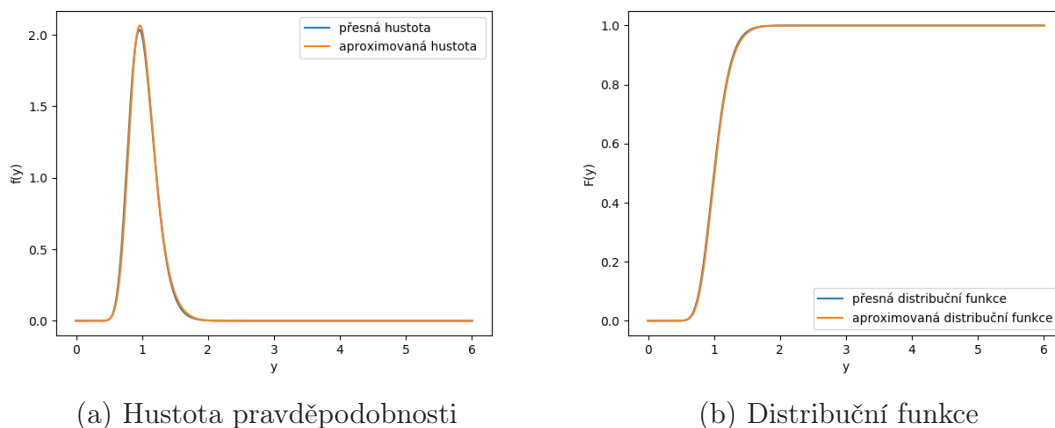
Se snahou najít přesné řešení byly otestovány různá nastavení  $R$ , rozsah intervalu integrace  $(a, b)$  nebo velikosti rozptylů jednotlivých momentů. Ani pro extrémně velká  $\hat{N}_l$  (řády milionů) nedocházelo ke zlepšení aproximace hustoty, resp. distribuční funkce. V případě, že by se projevovала lepší aproximace při použití ještě větších  $\hat{N}_l$ , tak přesto takové množství realizací je pro složitější simulace nereálné použít. Zvyšovat  $R$  je možné s ohledem na konkrétní  $\sigma$  jen do hodnoty  $R = 7$ . Pro větší  $R$  se již Jacobiho matice (viz sekce 3.2.2) blíží singulární matici.

Na základě mnoha testů lze konstatovat, že rekonstrukce hustoty pomocí funkcí monomiálů není vhodná pro všechny typy lognormálního rozdělení. Problém nastává v případech kdy roste  $\hat{\mu}_l^{R-1}$  a je velká hodnota  $\hat{V}_l^{R-1}$ . Z provedených pozorování vyplynulo, že se vzrůstajícím  $\sigma$  klesá přesnost aproximace distribuce - v závislosti na  $\sigma$  roste i  $\mu_3$  (šikmost), což je v tomto případě nejvyšší moment. V tabulce 5.6 lze vidět, že v případě realizace metody maximální entropie s použitím monomiálů jsou vzdálenosti přesné a aproximované hustoty  $D$  (viz sekce 3.2.2) odlišné s vlivem velikosti  $\mu_3$ .

Tabulka 5.6: Monomiály - vliv  $\mu_3$  na přesnost aproximace

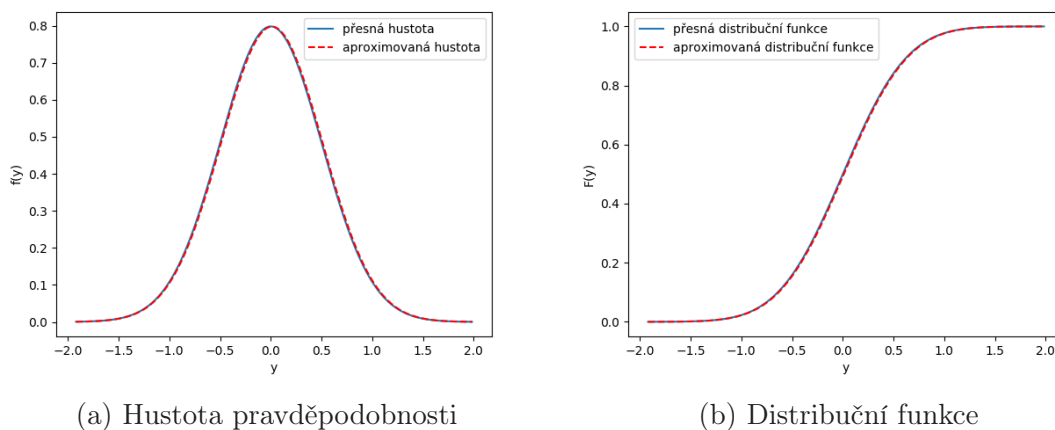
$\sigma$	$\mu_3$	$D$
0,2	0,005377	0,1598
0,4	0,281306	0,5899
0,6	1,106295	5,0008

Pro názornost je rekonstruována funkce hustoty pravděpodobnosti a distribuční funkce i pro  $Y \sim LN(0; 0,2)$  (obrázek 5.8). V tomto případě se aproximace podařila.



Obrázek 5.8: Aproximace distribuce  $LN(0; 0,2)$

Mohlo by se zdát, že se nedaří aproximovat hustoty, které jsou široké. Proto byla provedena rekonstrukce distribuce pro normální rozdělení (obrázek 5.9) se stejnými parametry jako má výchozí lognormální rozdělení,  $Y \sim N(0; 0,5)$ . Pro toto rozdělení funguje aproximace dobře a to i pro různě zvolená  $\sigma$ . Toto je dáno tím, že pro normální rozdělení je  $\mu_3 = 0$ . Tímto je ukázáno, že aproximace nezávisí přímo na tvaru hustoty, ale na konkrétních hodnotách rozptylů momentů  $V_l^r$ .

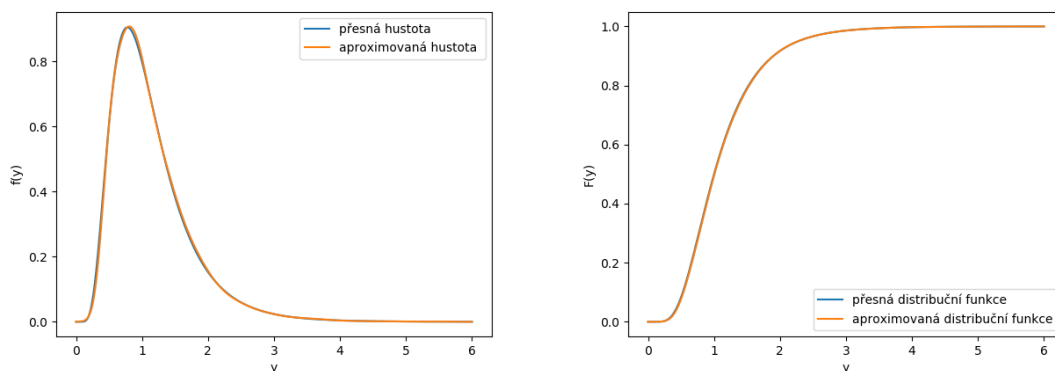


Obrázek 5.9: Aproximace distribuce  $N(0; 0,5)$

## 5.2.2 Fourierovy funkce

Lepší řešení by měly poskytnout Fourierovy funkce. Výpočet hustoty je proveden pro 20 momentů, s cílovými rozptyly  $V_r = 0,00001$ , pro  $r = 0, \dots, R$ . Interval byl stanoven stejně jako pro monomiály na  $[0, 6]$ . K těmto zvoleným parametrům se došlo na základě testování různých možností.

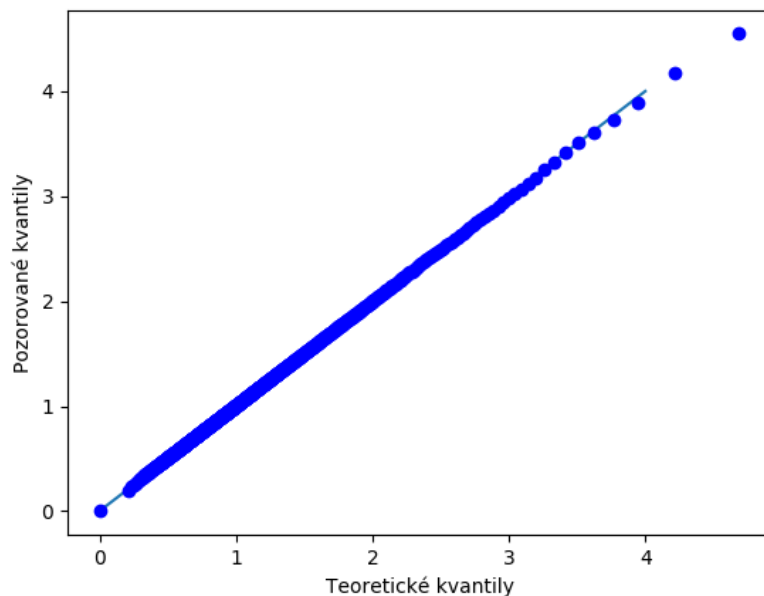
Na obrázcích 5.12 lze vidět přesnou a aproximovanou hustotu, respektive distribuční funkci. Již na první pohled je patrné, že se podařilo dobře aproximovat jak hustotu, tak distribuční funkci. Přesný závěr lze učinit na základě Q-Q grafu 5.11. Z něj je zřejmé, že hodnoty kvantilů aproximované a přesné hustoty jsou totožné.



(a) Hustota pravděpodobnosti

(b) Distribuční funkce

Obrázek 5.10: Aproximace při použití 20 momentů

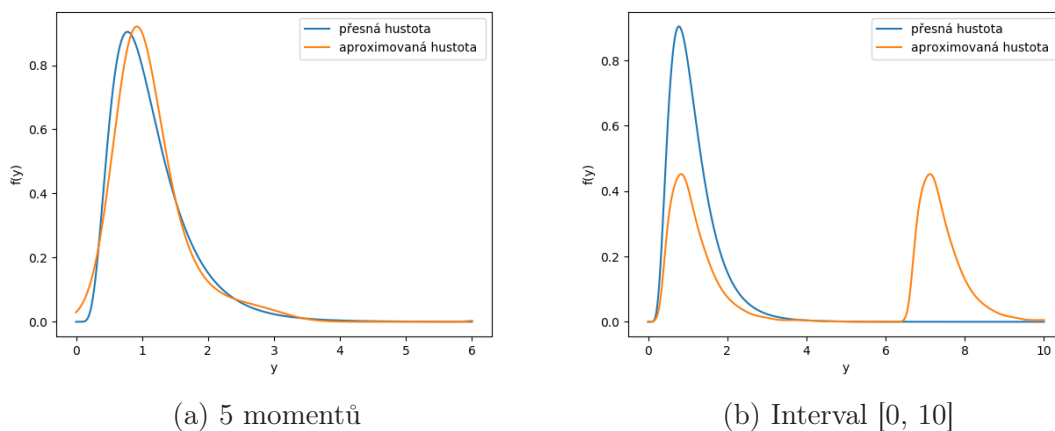


Obrázek 5.11: Q-Q graf - Fourierovy funkce

Důležitost správného zvolení  $R$  je demonstrována na obrázku 5.12a, kde bylo použito, stejně jako pro výpočet s monomiály,  $R = 4$ . Pro tento případ by výsledek vyšel velmi nepřesně. Ukazuje se také důležitost správného stanovení intervalu, na kterém se hledá funkce hustoty. Obrázek 5.12b ukazuje jak by vypadal výsledek pro



interval  $[0, 10]$ . Vlivem periodičnosti Fourierových funkcí narůstá se zvětšujícím se intervalem počet vykreslených „hustot“. Ty mají také úměrně zmenšené parametry.



Obrázek 5.12: Nevhodně zvolené parametry

Metoda maximální entropie s použitím Fourierových funkcí provádí přesnou aproximaci pro libovolný tvar hustoty pravděpodobnosti lognormálního rozdělení. V tabulce 5.7 jsou pro ilustraci vybrány tři hodnoty směrodatné odchylky  $\sigma$  a k nim vzdálenost  $D$  od přesné hustoty.  $D$  je průměr z pěti pozorování. Je jasně patrné, že šikmost, jakožto klasický statistický moment, nijak neovlivňuje  $D$ .

Tabulka 5.7: Fourierovy funkce - vliv šikmosti na přesnost

$\sigma$	šikmost	$D$
0,2	0,005377	0,002478
0,4	0,281306	0,005641
0,6	1,106295	0,003670

Z provedených testů se ukazuje, že použití Fourierových funkcí pro aproximace distribuční funkce je pro lognormální rozdělení lepší volbou než použití monomiálů.

Avšak aproximace s pomocí monomiálů nachází také své uplatnění. Vzhledem k menšímu počtu momentů, které jsou nutné pro správnou aproximaci, dokáže rychleji provádět algoritmus MME. Na druhou stranu nelze efektivně aplikovat na všechny typy tvarů hustot rozdělení pravděpodobnosti.

## 6 Aplikace při použití reálné simulace

### 6.1 Flow123d

Po otestování funkčnosti následuje nasazení MLMC a aproximace hustoty distribuční funkce při použití reálné simulace. K tomuto účelu je použit program Flow123d, který se vyvíjí na Fakultě mechatroniky, informatiky a mezioborových studií Technické univerzity v Liberci. Jedná se o simulátor toku podzemních vod a procesů transportu. Software neslouží jen k modelování dějů ve spojitém objemu horniny, ale také v puklinách a podobných plošných strukturách.

Program dále podporuje výpočty na komplexních sítích, které se skládají z jednoduchých prvků různých rozměrů. Je schopný řešit úlohy v 1 - 3 rozměrném prostoru. Podrobnou dokumentaci lze nalézt zde [2].

#### 6.1.1 Fyzikální podstata úlohy

V rámci této bakalářské práce je počítána úloha proudění ve 2D oblasti jednotkového čtverce. Jedná se o proudění podzemní vody v porézním prostředí. Řeší se následující problém:

$$-div(K(x)\nabla p) = 0, \quad (6.1)$$

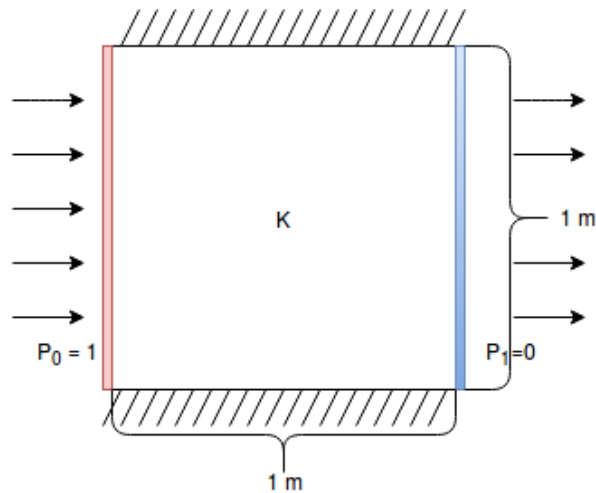
$K$  je hydraulická vodivost (vyjadřuje schopnost prostředí vést vodu, udává se jako rychlost v  $m/s$ ),  $p$  je tlak. Na horní a dolní straně oblasti je uvažován nulový tok, na levé straně je  $p = 1$  a na pravé straně oblasti je  $p = 0$ , pak

$$-K\nabla p \cdot \vec{n} = 0, \quad (6.2)$$

$\vec{n}$  je normálový vektor. Výsledný celkový průtok  $Y$  oblastí je daný integrálem:

$$Y = \int_0^1 [-K\nabla p \cdot \vec{n}](1, y) dy. \quad (6.3)$$

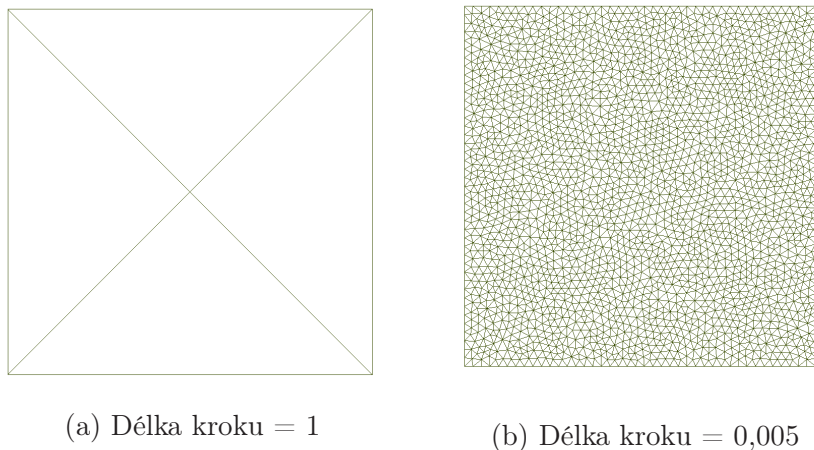
Obrázek 6.1: Náčrt řešené úlohy



Na vstupu do zkoumané oblasti je tlak roven 1, na výstupu z oblastí je tlak 0. Voda proudí oblastí ve směru od tlaku  $P_0$  do  $P_1$ . Hodnoty vodivosti  $K$  jsou modelovány jako Gaussovská náhodná pole s lognormálním rozdělením  $LN(0; 0,5)$ .

### 6.1.2 Diskretizace úlohy

Aby bylo možné výše popsany systém řešit numerickými metodami, tak je nutné jej převést ze spojitého prostředí na diskrétní model. K tomuto účelu je pomocí programu Gmsh vygenerována síť elementů. V závislosti na zvolené dimenzi prostoru jsou elementy úsečky, trojúhelníky nebo čtyřstěny. V tomto případě je řešena úloha ve 2D, takže elementy mají podobu trojúhelníků. Síť byla vytvořena na čtverci o stranách 1x1 metr. Podle stanoveného počtu simulačních kroků se liší počet elementů v síti. Na obrázku 6.2 je možné vidět příklad vytvořených sítí pro délky simulačního kroku 1 a 0,005.



Obrázek 6.2: Výpočetní síť

### 6.1.3 Spouštění úlohy

Vzhledem k náročnosti simulací, které realizuje Flow123d by bylo časově náročné spouštět tento program opakovaně na klasickém stolním počítači nebo notebooku. Přistoupilo se proto v tomto případě k realizaci celé MLMC na výpočetním clusteru Charon, který je provozován v rámci sdružení CESNET. Tento cluster nabízí celkem 400 jader (20 uzlů po 2 CPU po 10 jádrech), 96GB RAM na uzel (4,8 GB na jádro), 480GB SSD na uzel.

Cluster poskytuje možnost využití předpřipravených aplikací (modulů) s knihovnamy, které by se musely za normálních okolností samostatně instalovat. Vzhledem k tomu, že vytvořený program je napsán v programovacím jazyce Python a využívá některé knihovny, které nejsou součástí standardní distribuce tohoto jazyk (např. SciPy), tak bylo třeba na clusteru načíst modul, který nabízí všechny použité knihovny. Jako nejvhodnější byl zvolen modul python36-modules-gcc.

Spouštění úloh probíhá přes dávkový systém PBS (Portable Batch System), jedná se o moderní otevřený systém pro plánování úloh. Pro specifikaci parametrů spouštěné úlohy je vhodné vytvořit PBS skript, který se poté spouští příkazem qsub.

Lze nastavit počet procesorů a tzv. „chunks“. Chunk je dále nedělitelná množina zdrojů, které jsou přiděleny úloze na jednom fyzickém uzlu. Zde jsou vyjmenovány některé ze specifikací zdrojů, které je možné nastavit v rámci hlavičky PBS skriptu: select (počet chunků), ncpus (počet procesorů), mem (velikost přidělené paměti), nodes (počet uzlů na kterých běží úloha), walltime (maximální čas pro vykonání úlohy).

Rovněž je možné nastavit frontu, ve které bude úloha zpracovávána, v tomto případě byla nastavena fronta charon. Dále může uživatel zvolit přesměrování systémových výstupů nebo odesílání zpráv na email.

Běhy jednotlivých PBS skriptů jsou na sobě nezávislé a mohou být vykonávány paralelně. Výsledný program byl proto upraven, tak aby bylo možné jednotlivé simulace programem Flow123d spouštět nezávisle na sobě.

Svá specifika má tato úloha i pro použití MLMC. Při realizaci této metody je vždy stejná síť použita pro simulace se stejným krokem, ale na dvou odlišných úrovních. Například jemná simulace na první úrovni sdílí síť s hrubou simulací na druhé úrovni, takto lze pokračovat přes všechny použité úrovně. Jako vstupní data do hrubé a jemné simulace na stejné úrovni byla zvolena vzájemně korelovaná pole z lognormálního rozdělení  $LN(0; 0,5)$ . Korelační délka byla nastavena na 0,5.

## 6.2 Výsledky

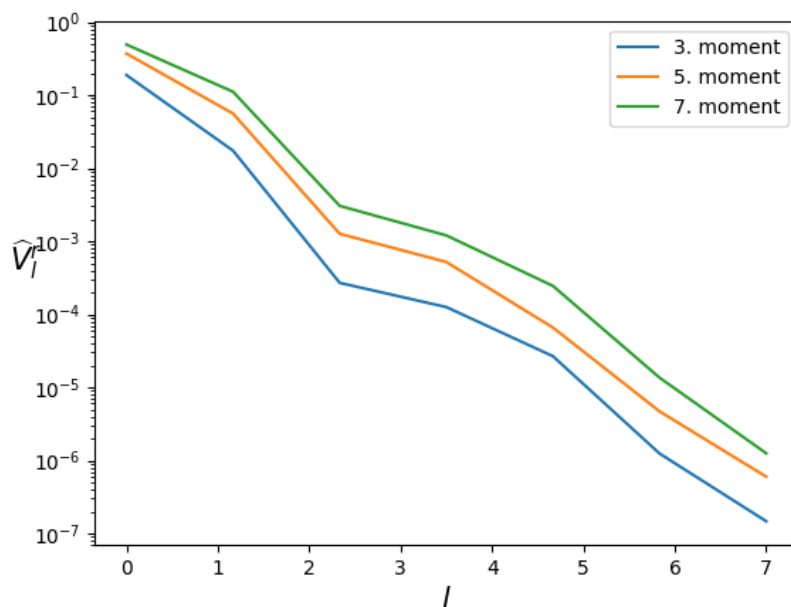
V této části textu jsou popsány výsledky použití víceúrovňové metody Monte-Carlo a metody maximální entropie pro simulace pomocí Flow123d. Pro MLMC byl zvolen rozsah délek simulačních kroků jako 1 - 0,08, to odpovídá počtu výpočetních operací  $n_0 = 4$  a  $n_L = 452$ . Jako funkce pro výpočet zobecněných momentů byly použity Fourierovy funkce. Vzhledem k tomu, že  $K$  má lognormální rozdělení a

je předpoklad, že i výsledná veličina  $Y$  bude mít logaritnicko-normální rozdělení, tak Fourierovy funkce jsou podle předešlých testů v tomto případě vhodnější než monomiály.

### 6.2.1 MLMC

Podobně jako pro testy umělé simulace (kapitola 5) jsou i zde  $\widehat{N}_l$  počítány s cílem minimalizovat výpočetní cenu při zadaných cílových rozptylech zobecněných momentů  $V_r = 0,00001$ , pro  $r = 0, \dots, 19$ . Zvoleno bylo 20 momentů z důvodů toho, že právě tento počet se jeví jako nejvhodnější pro algoritmus rekonstrukce distribuční funkce.

Na obrázku 6.3 je možné pozorovat vývoj rozptylu momentů  $\widehat{V}_l^r$  napříč úrovněmi. Provedena byla sedmiúrovňová metoda MC,  $N_l = 1000$ , pro  $l = 1, \dots, 7$ . Obdobný graf byl pořízen také pro umělou simulaci (obrázek 5.5), oproti němu je zde při stejných parametrech křivka snižování rozptylu méně hladká. Ukazuje se, že přesnost  $\widehat{V}_l^r$  závisí na použité simulaci.



Obrázek 6.3: Flow123d - vliv úrovní na rozptyl momentů

Tabulka 6.1 znázorňuje jednoúrovňovou až pětiúrovňovou metodu MC. Vzhledem k výpočetní náročnosti jsou výsledky v tabulce průměry ze 4 opakování příslušných metod.

Tabulka 6.1: Flow123d - porovnání metod MC

$n_{l-1}$	$n_l$	$\widehat{N}_l$	$\widehat{V}$	$\widehat{Y}$	$\widehat{C}$	$\widehat{C}/n_L$
<b>Jednoúrovňová metoda</b>						
0	452	66751	0,0000218	1,3424	30171452	66751
<b>Dvouúrovňová metoda</b>						
0	4	65777	0,0000382	1,3596	3613784	7995
4	452	7413				
<b>Tříúrovňová metoda</b>						
0	4	26667	0,0000671	1,3521	598852	1325
4	40	8553				
40	452	332				
<b>Čtyřúrovňová metoda</b>						
0	4	25941	0,0000785	1,3571	510568	1130
4	28	10441				
28	104	692				
104	452	94				
<b>Pětiúrovňová metoda</b>						
0	4	21370	0,0000864	1,3591	317228	702
4	16	8108				
16	40	1130				
40	124	327				
124	452	36				

Stejně jako pro předchozí umělou simulaci lognormálního rozdělení i pro tuto simulaci fungují metody MLMC podle očekávání.

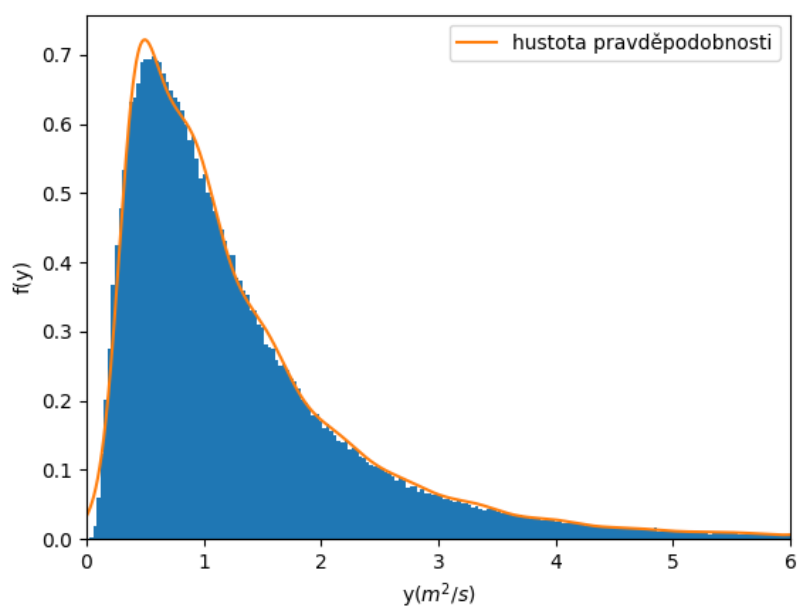
Průměrné hodnoty  $\widehat{Y}$  dosahují řádově požadovaného rozptylu. Také ostatní hodnoty vykazují stejné tendence jako tomu bylo v případě použití Fourierových funkcí pro umělou simulaci (tabulka 5.5). Výrazně nejefektivnější je pětiúrovňová metoda MC.

Na základě provedených pozorování  $\widehat{Y} \doteq 1,35 \text{ m}^2/s$ .

### 6.2.2 Aproximace distribuční funkce

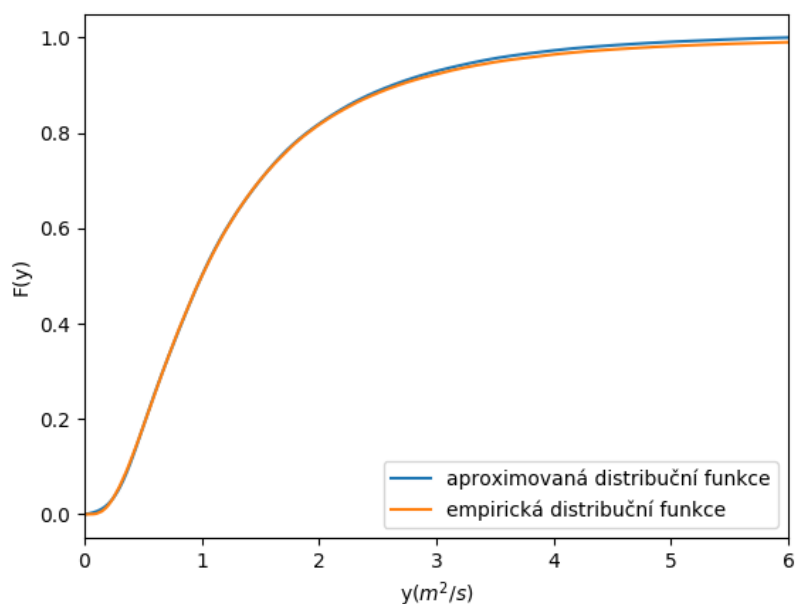
Počet momentů pro aproximaci distribuční funkce byl po otestování více variant stanoven na 20. Cílové rozptyly:  $V_r = 0,00001$ , pro  $r = 0, \dots, 19$ . Na základě hodnot momentů vygenerovaných pomocí MLMC byl rekonstruován průběh funkce hustoty pravděpodobnosti a distribuční funkce.

Obrázek 6.4 ukazuje vypočítanou hustotu pravděpodobnosti a histogram z výsledků jednoúrovňové metody MC ( $N = 310000$ ,  $n = 452$ ). Je zřejmé, že aplikovaná metoda pro aproximaci hustoty, v tomto případě, neposkytuje přesné řešení. Nachází se zde hodnoty menší než nula, takové hodnoty nemohou, z fyzikální podstaty úlohy, nastat. To potvrzuje také zobrazený histogram.

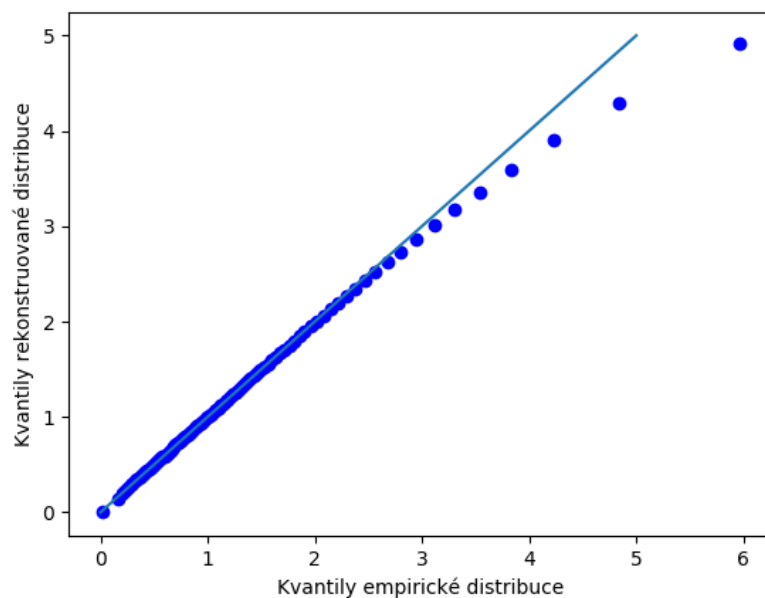


Obrázek 6.4: Hustota pravděpodobnosti

Obrázek 6.5 znázorňuje aproximovanou distribuční funkci (získanou z hustoty na obrázku 6.4) a empirickou distribuční funkci z výše zmíněné jednoúrovňové metody MC. Obě distribuční funkce jsou na značné části zobrazeného intervalu velmi podobné (viz Q-Q graf 6.6). Tvar empirické distribuční funkce je ovlivněn, přibližně od hodnoty  $y = 3$ , zmenšujícím se počtem pozorování.



Obrázek 6.5: Aproximovaná a empirická distribuční funkce



Obrázek 6.6: Q-Q graf - porovnání kvantilů empirické a aproximované distribuce

Tabulka 6.2 představuje vybrané kvantily  $x_p$  aproximované distribuční funkce a kvantily  $y_p$  empirické distribuční funkce.

Tabulka 6.2: Kvantily aproximované a empirické distribuční funkce

$p$	0,25	0,4	0,5	0,6	0,75
$x_p$	0,5922	0,8254	0,9979	1,2090	1,6655
$y_p$	0,5941	0,8227	0,9995	1,2117	1,6736

K získání přesné hustoty pravděpodobnosti bude potřeba dále vyvíjet algoritmus pro rekonstrukci hustoty a distribuční funkce (sekce 3.2.2). Možností jak dosáhnout zlepšení řešení by mohlo být zohlednění intervalu hodnot, kterých může daná náhodná veličina nabývat. V tomto případě by bylo určeno, že hodnoty mohou být pouze kladné.



## 7 Závěr

Tato práce se zabývala rekonstrukcí distribuční funkce náhodné veličiny se znalostí momentů odhadnutých pomocí MLMC. Navržený algoritmus byl aplikován na úlohu proudění podzemní vody.

Klasický přístup optimalizace výpočtu MLMC, který pro určení  $N_l$  využívá pouze rozptyl střední hodnoty, byl rozšířen i na použití rozptylů dalších momentů. Aplikovány byly tzv. zobecněné momenty, jejichž hodnoty jsou vypočítány pomocí monomiálů nebo Fourierových funkcí. Získané zobecněné momenty byly použité pro algoritmy rekonstrukce funkce hustoty pravděpodobnosti a distribuční funkce.

Na základě provedených zkoumání bylo zjištěno, že víceúrovňová metoda Monte-Carlo poskytuje dobré odhady středních hodnot, a to za nižší výpočetní cenu, než je tomu u jednoúrovňové metody MC. Přitom přesnost odhadů je velice podobná. Z aplikovaných metod byla jako nejefektivnější vyhodnocena pětiúrovňová metoda MC.

Podařilo se zjistit, že funkce monomiálů způsobují špatnou podmíněnost zkoumaných úloh, protože vyšší momenty mají velký rozptyl. Při použití Fourierových funkcí tento problém nenastává.

Správnost fungování algoritmů rekonstrukce distribuční funkce byla nejdříve otestována pro umělou simulaci lognormálního rozdělení. Zjistilo se, že pro toto rozdělení není vhodné aproximovat distribuční funkci pomocí monomiálů. S použitím Fourierových funkcí se dosáhlo velice dobrého přiblížení k přesné distribuční funkci. Optimální počet použitých momentů byl stanoven na 20.

Následná aplikace MLMC s reálnou simulací proudění podzemní vody byla provedena pomocí programu Flow123d. Cílem bylo zjistit kolik vody vyteče za jednotku času ze stanovené 2D oblasti jednotkového čtverce. Na této oblasti byla náhodně vygenerována hydraulická vodivost. Náhodná data byla v rámci jedné úrovně vzájemně korelovaná. Výsledný výtok je  $1,35 \text{ m}^2/\text{s}$ .

Rekonstruovaná funkce hustoty pro úlohu proudění nebyla určena zcela přesně. Objevují se zde hodnoty menší než 0, které nejsou z fyzikální podstaty úlohy, možné. Ukázalo se, že pro specifické případy bude nutné upravit algoritmus aproximace distribuce s ohledem na předpokládaný rozsah hodnot a parametry rozdělení náhodné veličiny. Výsledná distribuční funkce byla v porovnání s empirickou distribuční funkcí obdržena téměř shodně.

## Literatura

- [1] BIERIG, Claudio a Alexey CHERNOV. Approximation of probability density functions by the Multilevel Monte Carlo Maximum Entropy method. *Journal of Computational Physics*. 2016, **314**, 661-681. DOI: 10.1016/j.jcp.2016.03.027. ISSN 00219991. Dostupné také z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999116001790>
- [2] BŘEZINA, Jan, Jan STEBEL, David FLANDERKA, Pavel EXNER a Jan HYBŠ. *Flow123d: User Guide and Input Reference*. Liberec, 2018. Dostupné také z: [http://flow.nti.tul.cz/packages/2.2.0\\_release/flow123d\\_2.2.0\\_doc.pdf](http://flow.nti.tul.cz/packages/2.2.0_release/flow123d_2.2.0_doc.pdf)
- [3] FELCMAN, Jiří. *Numerická matematika*. 1. Praha: KNM PRESS, 2017.
- [4] GILES, Michael B. a Yuan XIA. Multilevel Monte Carlo for exponential Lévy models. *Finance and Stochastics*. 2017, **21**(4), 995-1026. DOI: 10.1007/s00780-017-0341-7. ISSN 0949-2984. Dostupné také z: <http://link.springer.com/10.1007/s00780-017-0341-7>
- [5] GILES, Michael B., Tigran NAGAPETYAN a Klaus RITTER. Multilevel Monte Carlo Approximation of Distribution Functions and Densities. *SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification*. 2015, **3**(1), 267-295. DOI: 10.1137/140960086. ISSN 2166-2525. Dostupné také z: <http://epubs.siam.org/doi/10.1137/140960086>
- [6] GILES, Michael B. Multilevel Monte Carlo methods. *Acta Numerica*. 2015, **24**, 259-328. DOI: 10.1017/S096249291500001X. ISSN 0962-4929. Dostupné také z: [http://www.journals.cambridge.org/abstract\\_S096249291500001X](http://www.journals.cambridge.org/abstract_S096249291500001X)
- [7] GOU, Wenhui. *Estimating Value-at-Risk using Multilevel Monte Carlo Maximum Entropy method*. Oxford, 2016. Diplomová práce. University of Oxford.
- [8] LOMBARDI, Olimpia, Federico HOLIK a Leonardo VANNI. What is Shannon information?. *Synthese*. 2016, **193**(7), 1983-2012. DOI: 10.1007/s11229-015-0824-z. ISSN 0039-7857. Dostupné také z: <http://link.springer.com/10.1007/s11229-015-0824-z>