

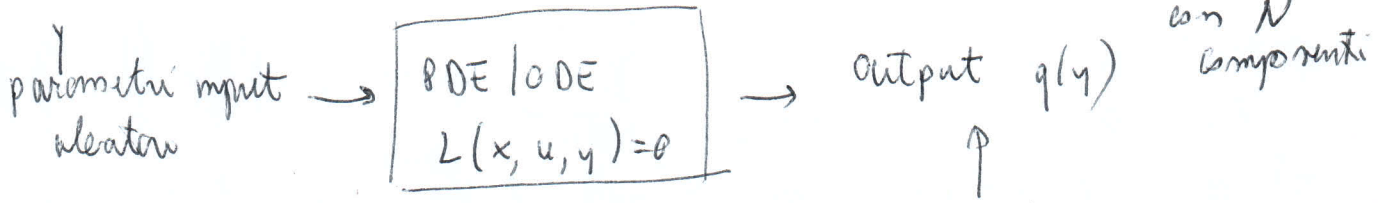
introduzione  
I

problema da dove vengono i parametri di input? Quanto bene li conosciamo?

- errori di misura / produzione
- intrinseca variabilità (vento / pioggia / terremoto ...)
- non misurabilità / misurabilità "inversa"

quindi non posso assumere di conoscere esattamente gli input

↓  
descrizione tramite variabili aleatorie degli input (y nel seguito)  
↑  
vettore aleatorio con N componenti



analisi tipiche per  $q(y)$ .

- 1 → media / varianza / probability density function (pdf) di  $q(y)$ ?
- 2 →  $P(q \geq q_0) = ?$  (probabilità di "rottura")
- 3 → supponendo di avere delle misure di  $q$ , quale è stato il valore di  $y$  che le ha generate? oppure, quale è la pdf di  $y$  compatibile coi dati?

~~queste~~ 1, 2 sono domande di "Forward Uncertainty Quantification"  
3 è il setting della "Inverse Uncertainty Quantification"

aspetti chiave

- 1) se dovremo risolvere numerose PDE, corrispondenti a differenti "scenari" (= valori di  $y$ ) ⇒ costoso!!
- 2) quante componenti ha il vettore  $y$ ? Se  $N$  è grande il problema è complesso "curse of dimensionality"

## Esempi

- 1) "I brocchi nel forno"
- 2) Navier-Stokes / scorrimento di fluidi
- 3) Shock in tubi
- 4) Compressore gascosimico
- 5) Problema di Darcy / Pozzo di estrazione

## richiami di probabilità - II

dato un vettore aleatorio a  $N$  componenti,  $\vec{y} \in \Gamma \subset \mathbb{R}^N$

1) pdf congiunta ~~è~~  $e$  è tale  $P(y_1 \leq a_1; y_2 \leq a_2; \dots; y_N \leq a_N) = \int_{-\infty}^{a_1} \int_{-\infty}^{a_2} \dots \int_{-\infty}^{a_N} p(\vec{y}) d\vec{y}$

2) le componenti di  $\vec{y}$  sono indipendenti se e solo se

$$p(\vec{y}) = \prod_{n=1}^N p_n(y_n) \Leftrightarrow P(y_1 \leq a_1; y_2 \leq a_2; \dots) = \prod_{n=1}^N P(y_n \leq a_n)$$

3) la media di  $y_i$  è  $E[y_i] = \int_{\Gamma} y_i p(\vec{y}) dy_1 \dots dy_N$

4) Varianza di  $y_i$  è  $Var[y_i] = E[(y_i - E[y_i])^2] = E[y_i^2] - (E[y_i])^2$   
dev. standard di  $y_i$  è  $std[y_i] = \sqrt{Var[y_i]}$

5) detta  $m_i = E[y_i]$ ,  $m_j = E[y_j]$ , la ~~correlazione~~ <sup>covarianza</sup> di  $y_i$  e  $y_j$  è  
 $Cov(y_i, y_j) = E[(y_i - m_i)(y_j - m_j)]$  (quindi  $Cov(y_i, y_i) = Var[y_i]$ )

- se  $Cov(y_i, y_j) = 0 \Rightarrow y_i, y_j$  sono scorrelate

- se  $y_i, y_j$  sono indipendenti  $\Rightarrow y_i, y_j$  sono scorrelate (ma  $\Leftarrow$  non è vero in generale)

6) quantità di interesse per UQ

1)  $E[q] = \int_{\Gamma} q(\vec{y}) p(\vec{y}) dy_1 \dots dy_N$   $\leftarrow$   $\int$  è un integrale su  $\mathbb{R}^N$   
completo se  $N \gg 1$

2)  $Var[q] = \dots$

3) ~~pdf~~  $f_q(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{P(q \leq t + \epsilon) - P(q \leq t)}{\epsilon}$   
↑  
prob. density function di  $q$

(tecnica del valore medio)

a)  $P(q > q_c) = \int_{q_0}^{\infty} \rho_q(\vec{t}) d\vec{t}$  (se ~~q > q\_c~~  $P(q > q_c) \approx 0$  si parla di "rare event") 2

7) Variabili aleatorie che usiamo

$y \sim U(a, b)$  v.a. uniforme:  $\rho_y(t) = \frac{1}{b-a}$ ,  $E[y] = \frac{a+b}{2}$ ,  $Var[y] = \frac{(b-a)^2}{12}$

$y \sim N(\mu, \sigma^2)$  v.a. gaussiana:  $\rho_y(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2}(\frac{t-\mu}{\sigma})^2}$ ,  $E[y] = \mu$ ,  $Var[y] = \sigma^2$

$y = e^z$ ,  $z \sim N(\mu, \sigma^2)$ ;  $y$  è v.a. "log-normale"

Esempio guida-III applications: - flusso in mezzi porosi (Darcy)  
- Finanza (Black & Scholes)  
- trasporto di inquinanti

$$\begin{cases} (a u')' = f & \text{in } x \in (0, 1) \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

$q(y) = \int_0^1 u(x, y) dy$

media in spazio della soluzione,

DIFFERENZE FINITE: metodo dei trapezi

$a = a(x, \vec{y})$ : coefficiente di diffusione dipende da variabili aleatorie

calcolo di  $q$  a  $\vec{y}$  fissato  
METODO FEM:  $q = \int u dx = \int u \cdot 1 dx =$

$= (\sum u_i \varphi_i) (\sum 1 \varphi_j) =$

$= \sum_{i,j} (u_i \cdot 1) \int \varphi_i \varphi_j = \vec{u}^T \mathbf{M} \vec{1}$   
soluzioni FEM  $\vec{u}$  matrice di massa  $\mathbf{M}$

Esemp:

1) materiale sperimentale, conosco a solo tramite misure.

~~$a = \sigma$~~   $a = y$   $y \sim U(a, b)$  oppure

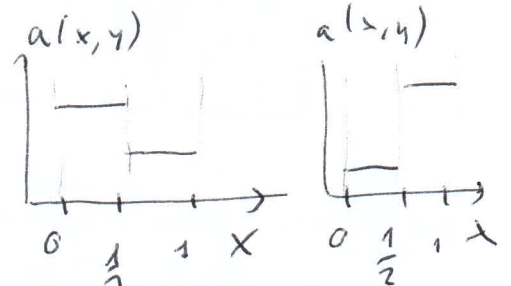
$y \sim e^z$  (garantisce maggiore variabilità, e preserva

la proprietà fisica  $a > 0$ ;

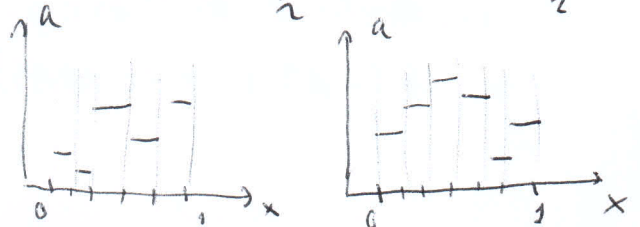
non sarebbe vero per  $y \sim N(\mu, \sigma^2)$ )

2) Materiale composto

$a(x, \vec{y}) = \begin{cases} y_1 & \text{se } x < 0,5, y_1 \sim U(a, b) \\ y_2 & \text{se } x > 0,5, y_2 \sim U(c, d) \end{cases}$



$a(x, \vec{y}) = \begin{cases} y_1 & \text{se } x < \frac{1}{N} \\ y_2 & \text{se } \frac{x}{N} < x < \frac{2}{N} \\ \vdots \\ y_N & \text{se } \frac{N-1}{N} < x < 1 \end{cases}$





### 3) Campo aleatorio

- materiale composito con  $N \rightarrow \infty$ :
- In ogni punto  $x$  c'è una variabile aleatoria
  - 2 punti  $x_1, x_2$  sono "correlati", ~~addirittura~~ solitamente e la correlazione dipende da  $|x_2 - x_1|$  (più sono distanti, più i valori sono debolmente influenzati a vicenda)

Una buona espressione per questo caso è una serie di Fourier

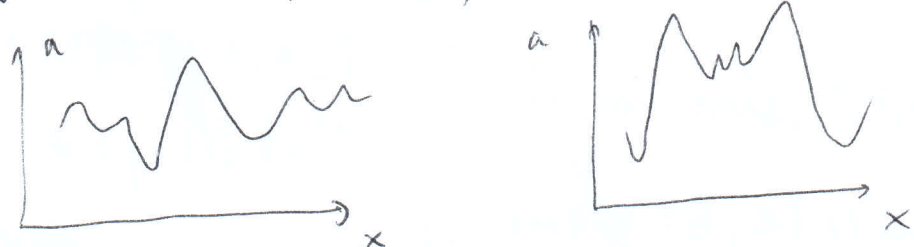
$$a(x, \bar{y}) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \left[ \gamma_{2k} \cos(k\pi x) + \gamma_{2k+1} \sin(k\pi x) \right]$$

$C_k \rightarrow 0$

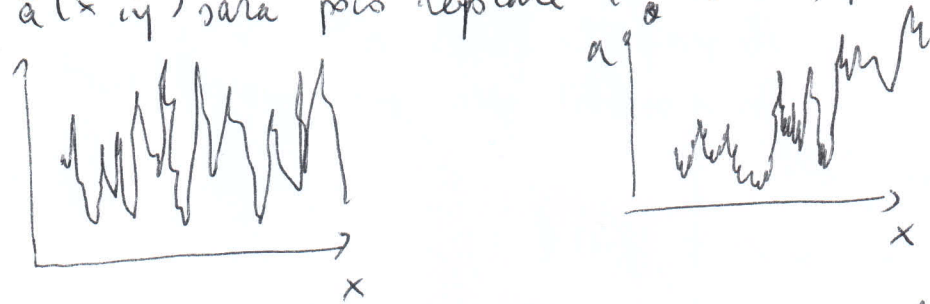
$\gamma_{2k} \text{ indep } \gamma_{2k+1}$

→ i coefficienti dell'espansione sono delle variabili aleatorie  
 ( $C_k$  numeri, moltiplicati per  $\gamma_{2k}, \gamma_{2k+1}$ ) con varianza  $\rightarrow 0$   
~~se~~ se  $k \rightarrow \infty$

→ se  $C_k \rightarrow 0$  velocemente, poche frequenze ( $k\pi$ ) hanno un contributo significativo nell'espansione, e  $a(x, \bar{y})$  sarà "liscia", cioè a  $\bar{y}$  fisso,  $a(x, \bar{y})$  è regolare ( $a \in C^k(0,1), k \gg 1$ )



→ se  $C_k \rightarrow 0$  lentamente, molte frequenze sono significative e  $a(x, \bar{y})$  sarà poco regolare (al limite, potrebbe essere  $C^0$  ma non  $C^1$ )



problema (non discutiamo qui) quale è la mesh giusta per risolvere in maniera adeguatamente accurata (±) se  $a(x, \bar{y})$  è poco regolare?

# metodo Monte Carlo-IV

(3)

È il metodo più semplice (e "disformato") per risolvere il problema di UQ (che ricordiamo essere: calcolare  $E[q(y)]$ , con  $q(y) = \int_a^b f(x)$ , a soluzione di (1)).

Algoritmo:

- 1) Fmo mesh in spazio,  $h \neq$
- 2) Scelgo in campione casuale di valori di  $\bar{y}$ , rispettando la distribuzione (pdf) delle componenti:  $\bar{y}_1 \dots \bar{y}_m$
- 3) ~~risolvo~~ risolvo la PDE per ciascun ~~caso~~ elemento del campione:  
 $y_1 \rightarrow u_1$ ;  $y_2 \rightarrow u_2$  ...
- 4) Calcolo la media aritmetica:

$$E[q] \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M q(\bar{y}_i)$$

Nota importante: il campione  $\bar{y}_1 \dots \bar{y}_m$  è casuale! quindi ripetendo la procedura otterrò un valore diverso. Il risultato Monte Carlo quindi è una variabile aleatoria a sua volta. La speranza è che se  $M \rightarrow \infty$ , diverse esecuzioni diano risultati "non troppo diversi".

Stima dell'errore: sarà appunto una stima "in probabilità", cioè se  $M \rightarrow \infty$  le varie ~~re~~ ripetizioni delle procedure daranno risultati che tendono a raggrupparsi attorno al risultato esatto, cioè  $\text{Prob}(\text{Error} > \epsilon) \rightarrow 0$

definisco  $Q_{MC} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M q(\bar{y}_i)$

$$\text{Prob}(\lim_{M \rightarrow \infty} Q_{MC} = \mu) = 1$$

Per la legge dei grandi numeri  $Q_{MC} \rightarrow E[q]$

per il teorema centrale del limite,

$$Q_{MC} \sim N(E[q], \frac{\text{Var}[q]}{M})$$

quindi

$$|Q_{MC} - E[q]| \sim \text{standard dev. di } Q_{MC} - E[q]$$

$$\sim \frac{\sigma}{\sqrt{M}} \quad \text{(quanto impreciso)}$$

Due ho sfruttato le proprietà che per una variabile aleatoria gaussiana, il 99.7% dei valori sono inclusi nell'intervallo  $\text{media} \pm 3 \text{ deviazioni standard}$ , quindi

$$Q_{MC} \sim N\left(\mathbb{E}[g], \frac{\text{Var}[g]}{M}\right) \Rightarrow \left(Q_{MC} - \mathbb{E}[g]\right) \sim N\left(0, \frac{\text{Var}[g]}{M}\right)$$

$$\Rightarrow \text{i valori di } \left(Q_{MC} - \mathbb{E}[g]\right) \text{ sono } 0 \pm 3 \sqrt{\frac{\text{Var}[g]}{M}}$$

### Vantaggi MC

- 1) Facile da implementare
- 2) Riutilizzo il software per risolvere (1) senza modifiche
- 3) Le PDE si possono risolvere in parallelo
- 4) ~~Il~~ l'errore non dipende dal numero di variabili aleatorie  $N$

### Svantaggi

- 1) convergenza lenta!  $E_M \sim 1/\sqrt{M}$

### Miglioramenti proposti

- Quasi-Monte-Carlo
- Latin Hypercube Sampling
- Control Variates
- Multi-Level Monte Carlo
- Multi-Index Monte Carlo



# Quadratura gaussiana - V

(4)

ripartiamo dal caso  $N=1$  ( $y$  è una variabile scalare).

Sfruttiamo il fatto che il calcolo della media è di fatto un integrale

$$\mathbb{E}[q] = \int_{\Gamma} q(y) p(y) dy \Rightarrow \text{approssimazione con formula gaussiana.}$$

a) considero i polinomi ortogonali rispetto a  $p(y)$ , cioè

$$\{R_0, R_1, R_2, \dots\} \text{ t.c. } \int_{\Gamma} R_i^{(y)} R_j^{(y)} p(y) dy = \begin{cases} 1 & \text{se } i=j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases} = \delta_{ij}$$

b) sono  $\{y_1, \dots, y_M\}$  gli zeri del polinomio  $R_M(y)$

c) calcolo l'approssimazione polinomiale di Lagrange di  $q(y)$  sui punti  $\{y_1, \dots, y_M\}$ , cioè; definisco  ~~$L_k(y) = \prod_{j \neq k} \frac{y - y_j}{y_j - y_k}$~~

$$L_k(y) = \prod_{j \neq k} \frac{y - y_j}{y_j - y_k} \quad (\text{polinomio di Lagrange, } L_k(y_j) = \delta_{jk})$$

$$\text{e approssimo } q(y) \approx \sum_{k=1}^M q(y_k) L_k(y)$$

d) approssimo l'integrale di  $q$  con l'integrale dell'approssimazione di Lagrange

$$\mathbb{E}[q(y)] = \int_{\Gamma} q(y) p(y) dy \approx \int_{\Gamma} \sum_{k=1}^M q(y_k) L_k(y) p(y) dy =$$

$$= \sum_{k=1}^M q(y_k) \underbrace{\int_{\Gamma} L_k(y) p(y) dy}_{w_k} = Q_G$$

$w_k$  peso di quadratura.

Si calcola 1 volta sola, e poi si salva in una "tabella".





più precisamente

(5)

$$|Q_q - \mathbb{E}[q]| \leq C \left( \sum_{i=1}^{\infty} M_i^{-\kappa} \right) \leq C (M_1^{-\kappa} + M_2^{-\kappa} + M_3^{-\kappa} + \dots)$$

gli errori in ciascuna direzione si sommano

$$\leq C M^{-\frac{\kappa}{N}}$$

assumendo che  $M_1, M_2, M_3, \dots$  siano "simili" e che  $M = \prod_{i=1}^N M_i$  sia la cardinalità delle griglie cartesiane

$$\leq (c \text{ se } f \in C^\infty(\Gamma)) \leq C e^{-\frac{\kappa}{\sqrt{M}}}$$

~~vedi programma~~

In alternativa, si può riferirsi

Inoltre, mentre MC è "granulare" (non scegliere esattamente M) per griglie tensori non obbligato a scegliere multipli di M...

Urgono miglioramenti, questo metodo è fattibile per  $N > 405$  (ricordate 1 punto = 1 PDE da risolvere)

### Sparse grid quadrature - VI

Fissiamo  $N=2$  per comodità. Voglio calcolare  $\mathbb{E}[q] = \int_{\Gamma} q(x) \rho(y) dy$

Sia  $\mathcal{G}(i_1, i_2)$  una griglia di quadratura cartesiana (come sopra),

con  $m(i_1) \times m(i_2)$  punti.  $i_1, i_2$  si dicono "livelli di quadratura",

$i_1 = 1, 2, 3, \dots$   $i_2 = 1, 2, 3, \dots$  e  $m(i)$  è il numero di punti di quadratura

al livello  $i$ , ad esempio  $m(i) = i$  (aggiungo 1 punto)

$m(i) = 1 + 2^{i-1}$  (raddoppio il numero di punti)  
cioè metto 1 punto che come 2

Idea sparse grid: più consist.

1) considero  $Q_{i_1, i_2}$  ~~con  $i_1, i_2$~~

2) scompongo  $Q_{i_1, i_2}$  in componenti "indipendenti"

3) Scarto le componenti che "rendono meno" (cioè, sono costose da calcolare e migliorano di poco l'approssimazione di  $\mathbb{E}[q]$ )

es: 
$$\begin{aligned} Q_{2,2} &= Q_{1,1} - Q_{11} \\ &+ Q_{21} - Q_{21} \\ &+ Q_{12} - Q_{12} \\ &+ Q_{11} - Q_{11} \\ &+ Q_{22} \end{aligned}$$

(riservo scambiando l'ordine)

$$\underline{=} Q_{11}$$

$$+ Q_{21} - Q_{11}$$

$$+ Q_{12} - Q_{11}$$

$$+ (Q_{22} - Q_{21}) - (Q_{12} - Q_{11})$$

= quadratura di base

+ correzione solo su  $y_1$

+ correzione solo su  $y_2$

+ correzione "mista" su  $y_1$  e  $y_2$

Ipotesi cruciale se  $q$  è liscia, cioè  $q \in C^k(\Gamma)$ ,  $k \gg 1$ ,

la correzione mista è trascurabile (è il "prodotto di due correzioni già piccole a loro volta")  $\Rightarrow$

Alora

6

$$\begin{aligned}
 Q_{22} &\approx Q_{11} \\
 &+ Q_{21} - Q_{11} \\
 &+ Q_{12} - Q_{11} \\
 &= Q_{21} + Q_{12} - Q_{11}
 \end{aligned}$$

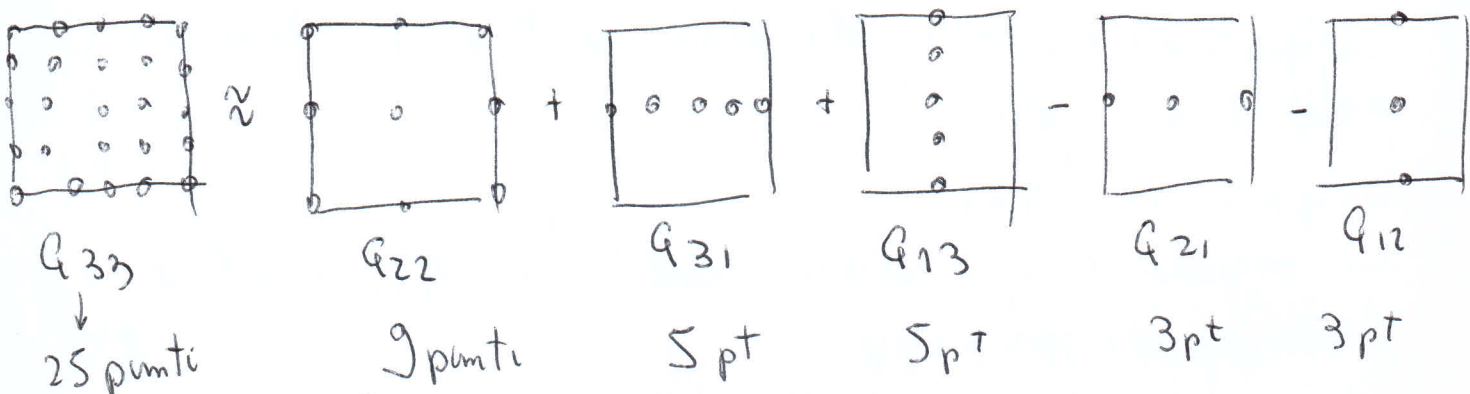
così, approssimo  $Q_{22}$  (quadratura raffinata in entrambe le direzioni  $y_1$  e  $y_2$ ) con una combinazione lineare di più quadrature, tutte meno raffinate (cf estrapolazione di Richardson)

In particolare, se una direzione è raffinata, l'altra non lo è.

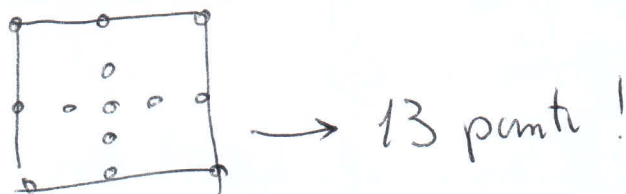
Con un procedimento analogo, si ~~trova~~ ricava una approssimazione per  $Q_{33}$

$$Q_{33} \approx Q_{22} + Q_{31} + Q_{13} - Q_{21} - Q_{12}$$

Ad esempio, se  $m(1)=1$ ,  $m(2)=3$ ,  $m(3)=5$ ,  $m(4)=9$  (raffinamento doppio, aggiungo 1 punto fra ogni 2), ho



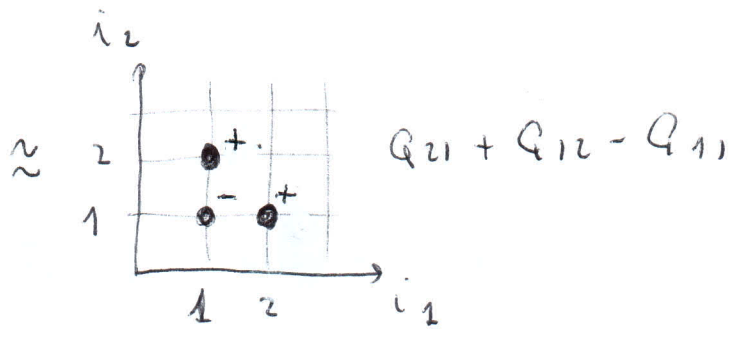
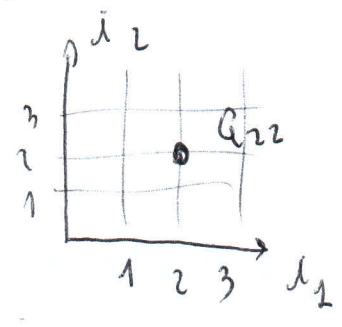
~~dei~~ dei punti sono in comune! ottengo ~~meno~~ questa soglia di calcolo



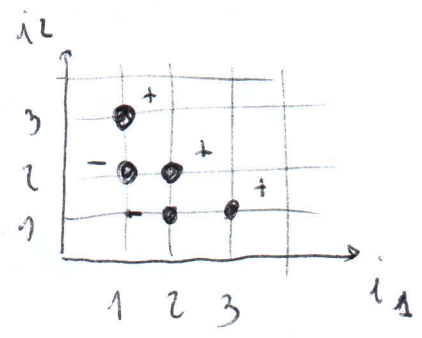
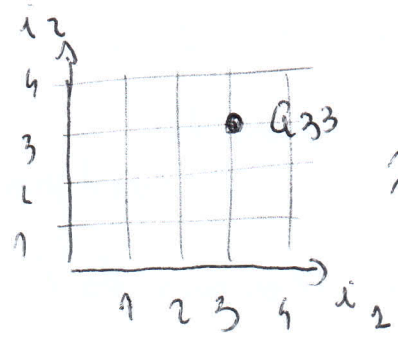
lo stesso meccanismo consente comunque di risparmiare punti anche se nessun punto ~~è~~ è in comune (ma non se  $N=2$  e  $i \neq 1$ )



In generale, posso fare dei diagrammi nel piano  $(i_1, i_2)$  per confrontare formule di quadratura:

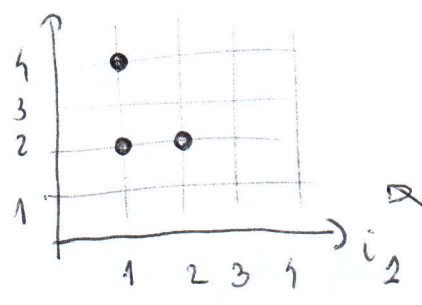
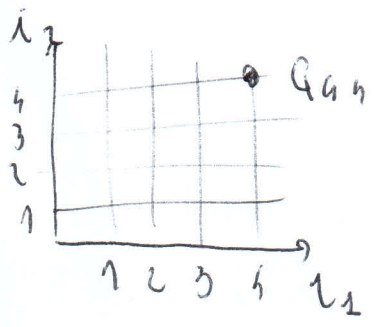


$$Q_{21} + Q_{12} - Q_{11}$$



$$Q_{13} + Q_{22} + Q_{31} - Q_{11} - Q_{12}$$

si possono costruire anche approssimazioni più "strane", in funzione della forma e regolarità di  $q(x)$  (tramite algoritmi ad hoc)



$$Q_{14} - Q_{12} + Q_{22}$$

In particolare, degli algoritmi adattivi procedo per "tentativi ed errore":

- ① → parto da  $Q_{11}$
- ② → aggiungo le quadrature "vicine" ( $Q_{12}, Q_{21}$  ma le riuso di  $Q_{11}$ )
- ③ → se errore < toll. stop altrimenti
  - ④ selep la quadratura migliore
  - ⑤ ritorno a ②

conclusione ho una formula di quadratura: simile in efficacia a quelle gaussiane (se  $q$  è regolare!) ma che usa meno punti  $\Rightarrow$  meno PDE da calcolare!  
 ↳ la crescita del # punti è meno che esponenziale

1) una costruzione di tipo sparse grid vale anche per costruire una approssimazione polinomiale "Lagrangeana":

$$q(y) \approx \sum_{i=1}^m q(y_i) L_i(y) \quad (\star)$$

con cui posso prevedere il valore di  $q(y)$

senza risolvere una nuova PDE.  $u$

2) esistono altre tecniche analoghe

→ Polynomial Chaos Expansion (PCE)

→ Reduced Basis Method (RB)

→ Proper orthogonal decomposition / principal component analysis (POD / PCA)

3) non abbiamo parlato del calcolo di

$P(u > u_0)$  (probabilità di rottura)

e del problema inverso (calcolare la pdf di  $y$  consistente con le osservazioni sperimentali di  $u$ )

Entrambe le operazioni si possono fare "facilmente" con approssimazioni sparse grid

4) Si possono calcolare anche le sensibilità, cioè scomporre la variabilità totale di  $q$  nelle quote imputabili a ciascun parametro  $y_i$

con Monte Carlo  
 Campionare l'approssimazione sparsa  $(\star)$  è molto più veloce che risolvere le PDE corrispondenti.