Výpočtové přístupy k inverzním problémům z inženýrské praxe

Jiří Vala[1]

[1]Vysoké učení technické v Brně, Fakulta stavební,
Ústav matematiky a deskriptivní geometrie, e-mail *vala.j@fce.vutbr.cz*

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ
FAKULTA STAVEBNÍ

Programy a algoritmy numerické matematiky 17,
Dolní Maxov 9. června 2014

Obsah

Modelový problém z klasické termomechaniky:

- zachování skalární veličiny $u \in L^2(I, V)$, $V := W^{1,2}(\Omega)$ pro souřadnice $x = (x_1, x_2, x_3) \in \Omega$ v R^3 a čas $t \in I := [0, \varsigma]$
  $\dot{\varepsilon}(u) + \nabla \cdot \eta(u) = f$ na $I \times \Omega$
  $\eta : L^2(I, V) \to L^2(I, V)$ $\qquad f \in L^2(I, H),\ H := L^2(\Omega)$
  $\varepsilon : W^{1,2}(I, H) \to W^{1,2}(I, H)$
- okrajové podmínky Neumannnova typu pro $\Gamma_c \in \Gamma := \partial\Omega$
  $\eta(u) \cdot \nu = g$ na $I \times \Gamma_c$ $\qquad g \in L^2(I, L^2(\Gamma_c))$
- okrajové podmínky Robinova typu pro $\Gamma_i = \Gamma \setminus \Gamma_c$
  $\eta(u) \cdot \nu + \psi(u, u_a) = 0$ na $I \times \Gamma_i$
  $\psi : L^2(I, V \times L^4(\Gamma_c)) \to L^2(I, L^2(\Gamma_i))$ $\quad u_a \in L^2((I, L^4(\Gamma_c))$
- počáteční podmínky
  $u(., 0) = 0$ na Ω
- oblíbené inženýrské linearizace
  $\dot{\varepsilon}(u) = \varepsilon'(u)\dot{u} \approx \kappa\dot{u}$, $\kappa \in L^\infty(\Omega)$
  $\eta(u) = \nabla\beta(u) = \beta'(u)\nabla(u) \approx \lambda\nabla u$, $\lambda \in L^\infty(\Omega)$ (Fourier, Fick, ...)
  $\psi(u, u_a) \approx \gamma(u - u_a)$, $\gamma \in L^2(\Gamma_i)$

Modelový problém z klasické termomechaniky:

- zachování skalární veličiny $u \in L^2(I, V)$, $V := W^{1,2}(\Omega)$ pro souřadnice $x = (x_1, x_2, x_3) \in \Omega$ v R^3 a čas $t \in I := [0, \varsigma]$
  $\dot{\varepsilon}(u) + \nabla \cdot \eta(u) = f$ na $I \times \Omega$
  $\eta : L^2(I, V) \to L^2(I, V)$ $\quad f \in L^2(I, H)$, $H := L^2(\Omega)$
  $\varepsilon : W^{1,2}(I, H) \to W^{1,2}(I, H)$
- okrajové podmínky Neumannnova typu pro $\Gamma_c \in \Gamma := \partial\Omega$
  $\eta(u) \cdot \nu = g$ na $I \times \Gamma_c$ $\quad g \in L^2(I, L^2(\Gamma_c))$
- okrajové podmínky Robinova typu pro $\Gamma_i = \Gamma \setminus \Gamma_c$
  $\eta(u) \cdot \nu + \psi(u, u_a) = 0$ na $I \times \Gamma_i$
  $\psi : L^2(I, V \times L^4(\Gamma_c)) \to L^2(I, L^2(\Gamma_i))$ $\quad u_a \in L^2((I, L^4(\Gamma_c))$
- počáteční podmínky
  $u(., 0) = 0$ na Ω
- oblíbené inženýrské linearizace
  $\dot{\varepsilon}(u) = \varepsilon'(u)\dot{u} \approx \kappa\dot{u}$, $\kappa \in L^\infty(\Omega)$
  $\eta(u) = \nabla\beta(u) = \beta'(u)\nabla(u) \approx \lambda\nabla u$, $\lambda \in L^\infty(\Omega)$ (Fourier, Fick, ...)
  $\psi(u, u_a) \approx \gamma(u - u_a)$, $\gamma \in L^2(\Gamma_i)$

Modelový problém z klasické termomechaniky:

- zachování skalární veličiny $u \in L^2(I,V)$, $V := W^{1,2}(\Omega)$ pro souřadnice $x=(x_1,x_2,x_3)\in\Omega$ v R^3 a čas $t \in I := [0,\varsigma]$
  $\dot{\varepsilon}(u) + \nabla\cdot\eta(u) = f$ na $I\times\Omega$
  $\eta: L^2(I,V)\to L^2(I,V)$ $\qquad f\in L^2(I,H),\ H := L^2(\Omega)$
  $\varepsilon: W^{1,2}(I,H)\to W^{1,2}(I,H)$
- okrajové podmínky Neumannnova typu pro $\Gamma_c \in \Gamma := \partial\Omega$
  $\eta(u)\cdot\nu = g$ na $I\times\Gamma_c$ $\qquad g\in L^2(I,L^2(\Gamma_c))$
- okrajové podmínky Robinova typu pro $\Gamma_i = \Gamma\setminus\Gamma_c$
  $\eta(u)\cdot\nu + \psi(u,u_a) = 0$ na $I\times\Gamma_i$
  $\psi: L^2(I,V\times L^4(\Gamma_c))\to L^2(I,L^2(\Gamma_i))$ $\quad u_a\in L^2((I,L^4(\Gamma_c))$
- počáteční podmínky
  $u(.,0)=0$ na Ω
- oblíbené inženýrské linearizace
  $\dot{\varepsilon}(u) = \varepsilon'(u)\dot{u}\approx\kappa\dot{u},\ \kappa\in L^\infty(\Omega)$
  $\eta(u) = \nabla\beta(u) = \beta'(u)\nabla(u)\approx\lambda\nabla u,\ \lambda\in L^\infty(\Omega)$ (Fourier, Fick, ...)
  $\psi(u,u_a)\approx\gamma(u-u_a),\ \gamma\in L^2(\Gamma_i)$

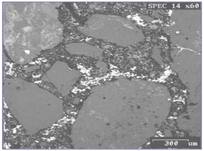
Modelový problém z klasické termomechaniky:

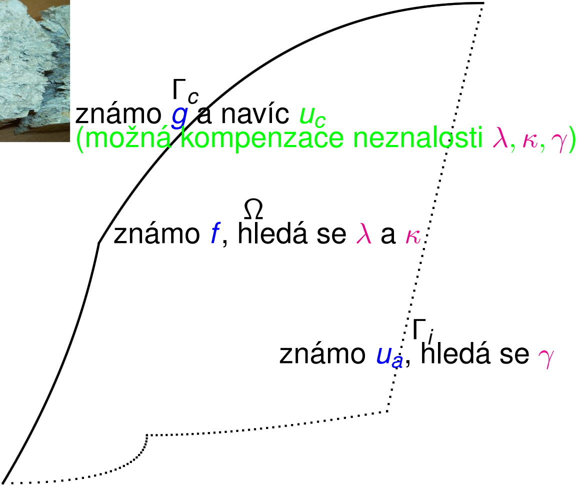
- zachování skalární veličiny $u \in L^2(I, V)$, $V := W^{1,2}(\Omega)$ pro souřadnice $x = (x_1, x_2, x_3) \in \Omega$ v R^3 a čas $t \in I := [0, \varsigma]$
  $\dot{\varepsilon}(u) + \nabla \cdot \eta(u) = f$ na $I \times \Omega$
  $\eta : L^2(I, V) \to L^2(I, V)$ $\quad f \in L^2(I, H),\ H := L^2(\Omega)$
  $\varepsilon : W^{1,2}(I, H) \to W^{1,2}(I, H)$
- okrajové podmínky Neumannnova typu pro $\Gamma_c \in \Gamma := \partial\Omega$
  $\eta(u) \cdot \nu = g$ na $I \times \Gamma_c$ $\quad g \in L^2(I, L^2(\Gamma_c))$
- okrajové podmínky Robinova typu pro $\Gamma_i = \Gamma \setminus \Gamma_c$
  $\eta(u) \cdot \nu + \psi(u, u_a) = 0$ na $I \times \Gamma_i$
  $\psi : L^2(I, V \times L^4(\Gamma_c)) \to L^2(I, L^2(\Gamma_i))$ $\quad u_a \in L^2((I, L^4(\Gamma_c))$
- počáteční podmínky
  $u(., 0) = 0$ na Ω
- oblíbené inženýrské linearizace
  $\dot{\varepsilon}(u) = \varepsilon'(u)\dot{u} \approx \kappa\dot{u},\ \kappa \in L^\infty(\Omega)$
  $\eta(u) = \nabla\beta(u) = \beta'(u)\nabla(u) \approx \lambda\nabla u,\ \lambda \in L^\infty(\Omega)$ (Fourier, Fick, ...)
  $\psi(u, u_a) \approx \gamma(u - u_a),\ \gamma \in L^2(\Gamma_i)$

Modelový problém z klasické termomechaniky:

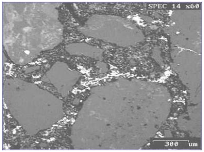
- zachování skalární veličiny $u \in L^2(I, V)$, $V := W^{1,2}(\Omega)$ pro souřadnice $x = (x_1, x_2, x_3) \in \Omega$ v R^3 a čas $t \in I := [0, \varsigma]$
  $\dot{\varepsilon}(u) + \nabla \cdot \eta(u) = f$ na $I \times \Omega$
  $\eta : L^2(I, V) \to L^2(I, V)$ $\quad f \in L^2(I, H),\ H := L^2(\Omega)$
  $\varepsilon : W^{1,2}(I, H) \to W^{1,2}(I, H)$
- okrajové podmínky Neumannnova typu pro $\Gamma_c \in \Gamma := \partial\Omega$
  $\eta(u) \cdot \nu = g$ na $I \times \Gamma_c$ $\quad g \in L^2(I, L^2(\Gamma_c))$
- okrajové podmínky Robinova typu pro $\Gamma_i = \Gamma \setminus \Gamma_c$
  $\eta(u) \cdot \nu + \psi(u, u_a) = 0$ na $I \times \Gamma_i$
  $\psi : L^2(I, V \times L^4(\Gamma_c)) \to L^2(I, L^2(\Gamma_i))$ $\quad u_a \in L^2((I, L^4(\Gamma_c))$
- počáteční podmínky
  $u(., 0) = 0$ na Ω
- oblíbené inženýrské linearizace
  $\dot{\varepsilon}(u) = \varepsilon'(u)\dot{u} \approx \kappa\dot{u},\ \kappa \in L^\infty(\Omega)$
  $\eta(u) = \nabla\beta(u) = \beta'(u)\nabla(u) \approx \lambda\nabla u,\ \lambda \in L^\infty(\Omega)$ (Fourier, Fick, ...)
  $\psi(u, u_a) \approx \gamma(u - u_a),\ \gamma \in L^2(\Gamma_i)$

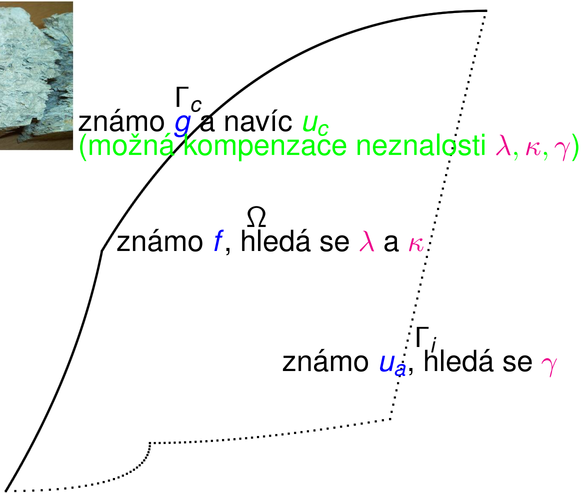
Zjednodušené schéma geometrické konfigurace:





Zjednodušené schéma geometrické konfigurace:





Označení skalárních součinů v $L^2(I, .)$:

$(\phi, \widetilde{\phi}) := \int_I \int_\Omega \phi(x)\widetilde{\phi}(x)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}t$, $(\nabla\phi, \nabla\widetilde{\phi}) := \int_I \int_\Omega \nabla\phi(x) \cdot \nabla\widetilde{\phi}(x)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}t$

$\langle\phi, \widetilde{\phi}\rangle := \int_I \int_\Gamma \phi(x)\widetilde{\phi}(x)\,\mathrm{d}s(x)\,\mathrm{d}t$, $\langle\phi, \widetilde{\phi}\rangle_i$, $\langle\phi, \widetilde{\phi}\rangle_c$ totéž s Γ_i ,Γ_c namísto Γ

Fyzikální procesy ve stavebním inženýrství:

- šíření tepla (vedením, přestupem, zářením)
- proudění vzduchu
- šíření vlhkosti v pórovitém prostředí
- přenos solí, kontaminantů apod.
- chemické reakce (tuhnoucí silikátové směsi, karbonatace, . . .)
- skupenské a fázové přeměny
- mechanické přetváření (elasticita, plasticita, creep, porušení, . . .)

Fyzikální procesy ve stavebním inženýrství:

- šíření tepla (vedením, přestupem, zářením)
- proudění vzduchu
- šíření vlhkosti v pórovitém prostředí
- přenos solí, kontaminantů apod.
- chemické reakce (tuhnoucí silikátové směsi, karbonatace, ...)
- skupenské a fázové přeměny
- mechanické přetváření (elasticita, plasticita, creep, porušení, ...)

Termodynamické principy zachování:

- hmotnosti (rovnice kontinuity) – proměnná hustota
- (lineární a úhlové) hybnosti (Naviérovy - Stokesovy rovnice, různá pojetí kontinua: Boltzmann, Cosseratové aj.) – proměnné složky rychlostí vůči výchozí geometrické konfiguraci
- energie, resp. entalpie (Fourierova rovnice) – proměnná teplota
- (víceméně empirické) konstitutivní vztahy pro ostatní veličiny

Příklady spolupůsobení fyzikálních procesů:

- model přenosu tepla a vlhkosti [A. V. Lykov (Luikov), 1964]:
  – 2 evoluční rovnice pro teplotu $\tau(x,t)$ a vlhkostní obsah $\omega(x,t)$
  $$\dot\tau = \Delta\tau + \mathcal{K}\dot\omega, \quad \dot\omega = \mathcal{L}\Delta\omega + \mathcal{L}\mathcal{P}\Delta\tau$$
  – 3 empirické konstanty:
  Lykovovo číslo $\mathcal{L}$, Posnovovo číslo $\mathcal{P}$, Kossovičovo číslo $\mathcal{K}$
- mírné zobecnění:
  $$\eta_\tau = (.)\nabla\tau + (.)\nabla\omega \ \text{(Dufour)}, \quad \eta_\omega = (.)\nabla\tau + (.)\nabla\omega \ \text{(Soret)}$$
- model tuhnutí betonové směsi [D. Gawin, 2004]:
  – až 20 evolučních rovnic pro veličiny vztažené ke 4 fázím
  – zachování hmotnosti, hybnosti a energie
  – směs ve skupenství tuhém, kapalném a plynném, suchý vzduch
  – konstitutivní vztahy algebraické, efektivní hodnoty z teorie směsí
  – stupeň hydratace (podíl fází) z obyčejné diferenciální rovnice
- alternativní modely: homogenizace materiálových charakteristik a formulace na makro-, meso- i mikroúrovních (metoda nejmenších čtverců, škálová homogenizace, . . .)

Příklady spolupůsobení fyzikálních procesů:

- model přenosu tepla a vlhkosti [A. V. Lykov (Luikov), 1964]:
  – 2 evoluční rovnice pro teplotu $\tau(x,t)$ a vlhkostní obsah $\omega(x,t)$

$$\dot{\tau} = \Delta\tau + \mathcal{K}\dot{\omega}, \quad \dot{\omega} = \mathcal{L}\Delta\omega + \mathcal{L}\mathcal{P}\Delta\tau$$

  – 3 empirické konstanty:
  Lykovovo číslo $\mathcal{L}$, Posnovovo číslo $\mathcal{P}$, Kossovičovo číslo $\mathcal{K}$
- mírné zobecnění:

$$\eta_\tau = (.)\nabla\tau + (.)\nabla\omega \ \ \text{(Dufour)}, \quad \eta_\omega = (.)\nabla\tau + (.)\nabla\omega \ \ \text{(Soret)}$$

- model tuhnutí betonové směsi [D. Gawin, 2004]:
  – až 20 evolučních rovnic pro veličiny vztažené ke 4 fázím
  – zachování hmotnosti, hybnosti a energie
  – směs ve skupenství tuhém, kapalném a plynném, suchý vzduch
  – konstitutivní vztahy algebraické, efektivní hodnoty z teorie směsí
  – stupeň hydratace (podíl fází) z obyčejné diferenciální rovnice
- alternativní modely: homogenizace materiálových charakteristik a formulace na makro-, meso- i mikroúrovních (metoda nejmenších čtverců, škálová homogenizace, ...)

Příklady spolupůsobení fyzikálních procesů:

- model přenosu tepla a vlhkosti [A. V. Lykov (Luikov), 1964]:
  – 2 evoluční rovnice pro teplotu $\tau(x,t)$ a vlhkostní obsah $\omega(x,t)$
  $$\dot{\tau} = \Delta\tau + \mathcal{K}\dot{\omega}, \quad \dot{\omega} = \mathcal{L}\Delta\omega + \mathcal{L}\mathcal{P}\Delta\tau$$
  – 3 empirické konstanty:
  Lykovovo číslo $\mathcal{L}$, Posnovovo číslo $\mathcal{P}$, Kossovičovo číslo $\mathcal{K}$
- mírné zobecnění:
  $$\eta_\tau = (.)\nabla\tau + (.)\nabla\omega \ \text{(Dufour)}, \quad \eta_\omega = (.)\nabla\tau + (.)\nabla\omega \ \text{(Soret)}$$
- model tuhnutí betonové směsi [D. Gawin, 2004]:
  – až 20 evolučních rovnic pro veličiny vztažené ke 4 fázím
  – zachování hmotnosti, hybnosti a energie
  – směs ve skupenství tuhém, kapalném a plynném, suchý vzduch
  – konstitutivní vztahy algebraické, efektivní hodnoty z teorie směsí
  – stupeň hydratace (podíl fází) z obyčejné diferenciální rovnice
- alternativní modely: homogenizace materiálových charakteristik a formulace na makro-, meso- i mikroúrovních (metoda nejmenších čtverců, škálová homogenizace, ...)

Příklady spolupůsobení fyzikálních procesů:

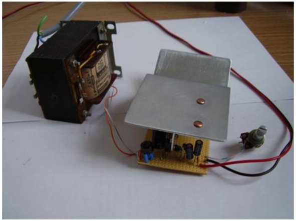
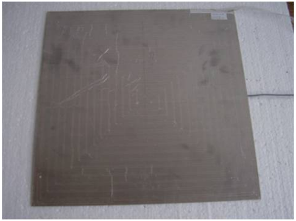
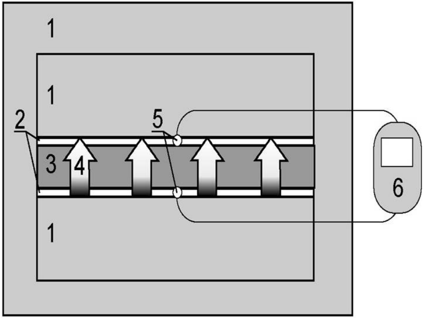
- model přenosu tepla a vlhkosti [A. V. Lykov (Luikov), 1964]:
  – 2 evoluční rovnice pro teplotu $\tau(x, t)$ a vlhkostní obsah $\omega(x, t)$

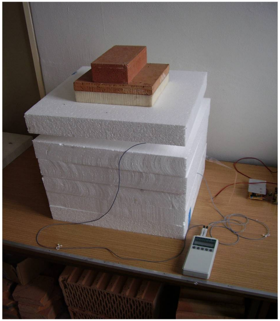
  $$\dot{\tau} = \Delta\tau + \mathcal{K}\dot{\omega}, \quad \dot{\omega} = \mathcal{L}\Delta\omega + \mathcal{L}\mathcal{P}\Delta\tau$$

  – 3 empirické konstanty:
  Lykovovo číslo $\mathcal{L}$, Posnovovo číslo $\mathcal{P}$, Kossovičovo číslo $\mathcal{K}$
- mírné zobecnění:

  $$\eta_\tau = (.)\nabla\tau + (.)\nabla\omega \;\; \text{(Dufour)}, \quad \eta_\omega = (.)\nabla\tau + (.)\nabla\omega \;\; \text{(Soret)}$$
- model tuhnutí betonové směsi [D. Gawin, 2004]:
  – až 20 evolučních rovnic pro veličiny vztažené ke 4 fázím
  – zachování hmotnosti, hybnosti a energie
  – směs ve skupenství tuhém, kapalném a plynném, suchý vzduch
  – konstitutivní vztahy algebraické, efektivní hodnoty z teorie směsí
  – stupeň hydratace (podíl fází) z obyčejné diferenciální rovnice
- alternativní modely: homogenizace materiálových charakteristik a formulace na makro-, meso- i mikroúrovních (metoda nejmenších čtverců, škálová homogenizace, . . .)

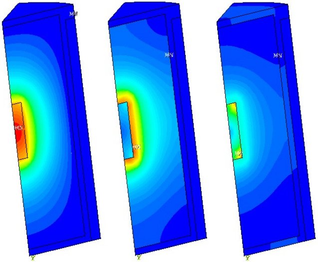
Ukázka měření tepelné vodivosti a kapacity metodou topné desky:



Zjišťování tepelné vodivosti a kapacity pomocí topného válce:

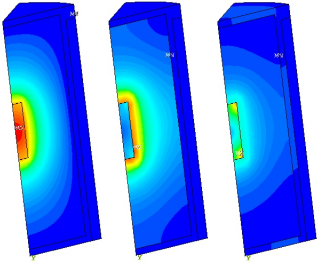
tepelné zásobníky pro pokročilé solární technologie (projekt TA ČR), šamotové žáruvzdorné vyzdívky aj.



τ $\nabla\tau$ $\eta(\tau)$

Zjišťování tepelné vodivosti a kapacity pomocí topného válce:

tepelné zásobníky pro pokročilé solární technologie (projekt TA ČR), šamotové žáruvzdorné vyzdívky aj.



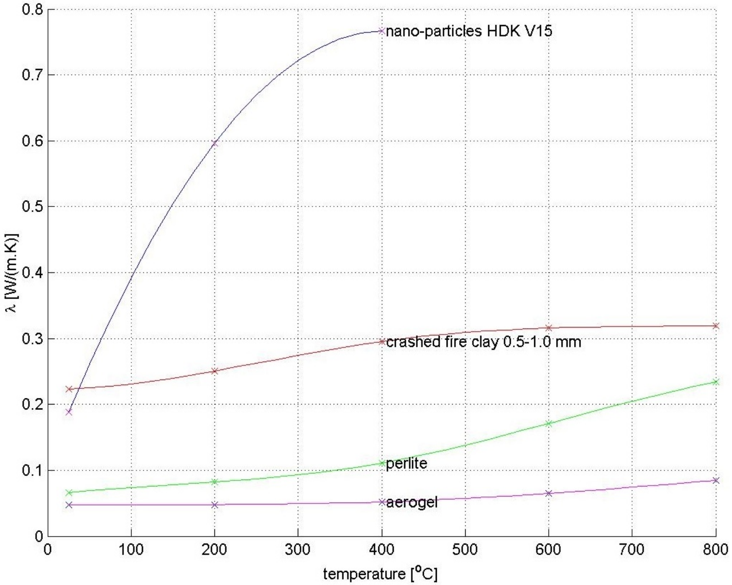
τ $\nabla\tau$ $\eta(\tau)$

Geometrická zjednodušení vedoucí k redukci dimenze:

- metoda topné desky (*hot plate*) – popis v kartézské soustavě
- metoda topného drátu (*hot wire*) – popis v cylindrické soustavě
- metoda topné koule (*hot ball*) – popis ve sférické soustavě

analytická řešení → řady funkcí erf, erfc → řady Besselových funkcí → metoda hraničních integrálů (okrajových prvků)

Zjištěná závislost tepelné vodivosti izolačních zásypů na teplotě:



Formální definice funkcionálů [N. Zabaras, 2004; B. Jin a J. Zou, 2008]:

$$F(\vartheta, u, v) = (\kappa\dot{u}, v) + (\lambda\nabla u, \nabla v) + \langle\gamma, uv\rangle_i - (f, v) - \langle g, v\rangle_c - \langle\gamma, u_a v\rangle_i$$

$$G(u) = \tfrac{1}{2}\langle w, (u - u_c)^2\rangle_c, \text{ váha } w \in L^2(\Gamma_c)$$

soubor neznámých parametrů $\vartheta = (\gamma, \lambda, \kappa)$

$u, v \in L^2(I, V)$ pro $V = W^{1,2}(\Omega)$,
tedy též $u, v \in L^2(I, L^4(\Gamma))$ a $uv \in L^2(I, L^2(\Gamma))$

Formální definice funkcionálů [N. Zabaras, 2004; B. Jin a J. Zou, 2008]:

$$F(\vartheta, u, v) = (\kappa \dot{u}, v) + (\lambda \nabla u, \nabla v) + \langle \gamma, uv \rangle_i - (f, v) - \langle g, v \rangle_c - \langle \gamma, u_a v \rangle_i$$

$$G(u) = \tfrac{1}{2} \langle w, (u - u_c)^2 \rangle_c, \text{ váha } w \in L^2(\Gamma_c)$$

soubor neznámých parametrů $\vartheta = (\gamma, \lambda, \kappa)$

$u, v \in L^2(I, V)$ pro $V = W^{1,2}(\Omega)$,

tedy též $u, v \in L^2(I, L^4(\Gamma))$ a $uv \in L^2(I, L^2(\Gamma))$

Nutno používat (pro dostatečně regulární oblasti Ω):

- Sobolevovy věty o (kompaktním) vnoření
- věty o stopách
- Friedrichsovu - Poincarého nerovnost
- Laxovu - Milgramovu větu (případně její zobecnění)
- vlastnosti Rotheho posloupností abstraktních funkcí (spojité a diskrétní Gronwallovo lemma, Gelfandovo vnoření, ...)
- Aubinovo - Lionsovo lemma pro abstraktní funkce

Přímý problém (*direct problem*):

- slabá formulace:
  – pevné ϑ a $u_0 = 0$
  – hledáme u tak, aby $F(\vartheta, u, v) = 0$ pro libovolné v, tj.
$$(\kappa\dot{u}, v) + (\lambda\nabla u, \nabla v) + \langle\gamma, (u - u_a)v\rangle_i = (f, v) + \langle g, v\rangle_c$$
- silná formulace z Greenovy - Ostrogradského věty
$$(\kappa\dot{u} - \nabla\cdot(\lambda\nabla u) - f, v) = \langle\gamma(u_a - u) - \lambda\nabla u\cdot\nu, v\rangle_i + \langle g - \lambda\nabla u\cdot\nu, v\rangle_c$$
- obrácené použití Greenovy - Ostrogradského věty, např. pro fundamentální řešení $v_*(x, y) = -1/(4\pi|x - y|)$ rovnice $\Delta v_*(x, y) = 4\pi\delta(x - y)$ lokálně pro $y \in \Omega$ namísto $v(x, t)$ pro pevná $t \in I$
$$(\kappa\dot{u}, v) - (\beta(u), \Delta v) = (f, v) + \langle\gamma, (u - u_a)v\rangle_i + \langle g, v\rangle_c - \langle\beta(u), \nabla v\cdot\nu\rangle$$
- možné obecnější počáteční podmínky (rovnovážný stav): $f - f_0$, $g - g_0$, $u_a - u_{a0}$ a $u - u_0$ namísto f, g, u_a a u (též pro citlivostní a sdružený problém)

Přímý problém (*direct problem*):

- slabá formulace:
  – pevné ϑ a $u_0 = 0$
  – hledáme u tak, aby $F(\vartheta, u, v) = 0$ pro libovolné v, tj.
$$\begin{aligned}(\kappa\dot{u}, v) + (\lambda\nabla u, \nabla v) + \langle\gamma, (u - u_a)v\rangle_i \\ = (f, v) + \langle g, v\rangle_c\end{aligned}$$
- silná formulace z Greenovy - Ostrogradského věty
$$\begin{aligned}(\kappa\dot{u} - \nabla\cdot(\lambda\nabla u) - f, v) \\ = \langle\gamma(u_a - u) - \lambda\nabla u\cdot\nu, v\rangle_i + \langle g - \lambda\nabla u\cdot\nu, v\rangle_c\end{aligned}$$
- obrácené použití Greenovy - Ostrogradského věty, např. pro fundamentální řešení $v_*(x, y) = -1/(4\pi|x - y|)$ rovnice $\Delta v_*(x, y) = 4\pi\delta(x - y)$ lokálně pro $y \in \Omega$ namísto $v(x, t)$ pro pevná $t \in I$
$$\begin{aligned}(\kappa\dot{u}, v) - (\beta(u), \Delta v) \\ = (f, v) + \langle\gamma, (u - u_a)v\rangle_i + \langle g, v\rangle_c - \langle\beta(u), \nabla v\cdot\nu\rangle\end{aligned}$$
- možné obecnější počáteční podmínky (rovnovážný stav): $f - f_0$, $g - g_0$, $u_a - u_{a0}$ a $u - u_0$ namísto f, g, u_a a u (též pro citlivostní a sdružený problém)

Přímý problém (*direct problem*):

- slabá formulace:
  – pevné ϑ a $u_0 = 0$
  – hledáme u tak, aby $F(\vartheta, u, v) = 0$ pro libovolné v, tj.
  $$\begin{aligned}(\kappa\dot{u}, v) + (\lambda\nabla u, \nabla v) + \langle\gamma, (u - u_a)v\rangle_i \\ = (f, v) + \langle g, v\rangle_c\end{aligned}$$
- silná formulace z Greenovy - Ostrogradského věty
  $$\begin{aligned}(\kappa\dot{u} - \nabla\cdot(\lambda\nabla u) - f, v) \\ = \langle\gamma(u_a - u) - \lambda\nabla u\cdot\nu, v\rangle_i + \langle g - \lambda\nabla u\cdot\nu, v\rangle_c\end{aligned}$$
- obrácené použití Greenovy - Ostrogradského věty, např. pro fundamentální řešení $v_*(x, y) = -1/(4\pi|x - y|)$ rovnice $\Delta v_*(x, y) = 4\pi\delta(x - y)$ lokálně pro $y \in \Omega$ namísto $v(x, t)$ pro pevná $t \in I$
  $$\begin{aligned}(\kappa\dot{u}, v) - (\beta(u), \Delta v) \\ = (f, v) + \langle\gamma, (u - u_a)v\rangle_i + \langle g, v\rangle_c - \langle\beta(u), \nabla v\cdot\nu\rangle\end{aligned}$$
- možné obecnější počáteční podmínky (rovnovážný stav): $f - f_0$, $g - g_0$, $u_a - u_{a0}$ a $u - u_0$ namísto f, g, u_a a u (též pro citlivostní a sdružený problém)

Přímý problém (*direct problem*):

- slabá formulace:
  – pevné ϑ a $u_0 = 0$
  – hledáme u tak, aby $F(\vartheta, u, v) = 0$ pro libovolné v, tj.
$$(\kappa\dot{u}, v) + (\lambda\nabla u, \nabla v) + \langle\gamma, (u - u_a)v\rangle_i = (f, v) + \langle g, v\rangle_c$$
- silná formulace z Greenovy - Ostrogradského věty
$$(\kappa\dot{u} - \nabla\cdot(\lambda\nabla u) - f, v) = \langle\gamma(u_a - u) - \lambda\nabla u\cdot\nu, v\rangle_i + \langle g - \lambda\nabla u\cdot\nu, v\rangle_c$$
- obrácené použití Greenovy - Ostrogradského věty, např. pro fundamentální řešení $v_*(x, y) = -1/(4\pi|x - y|)$ rovnice $\Delta v_*(x, y) = 4\pi\delta(x - y)$ lokálně pro $y \in \Omega$ namísto $v(x, t)$ pro pevná $t \in I$
$$(\kappa\dot{u}, v) - (\beta(u), \Delta v) = (f, v) + \langle\gamma, (u - u_a)v\rangle_i + \langle g, v\rangle_c - \langle\beta(u), \nabla v\cdot\nu\rangle$$
- možné obecnější počáteční podmínky (rovnovážný stav): $f - f_0$, $g - g_0$, $u_a - u_{a0}$ a $u - u_0$ namísto f, g, u_a a u (též pro citlivostní a sdružený problém)

Citlivostní problém (*sensitivity problem*):

- slabá formulace:
  – pevné ϑ, $\widetilde{\vartheta}$ a $u_0 = 0$
  – hledáme $\widetilde{u}$ tak, aby $DF(\vartheta, u, v, \widetilde{\vartheta}, \widetilde{u}, o) = 0$ pro libovolné v, tj.

$$(\kappa\dot{\widetilde{u}}, v) + (\lambda\nabla\widetilde{u}, \nabla v) + \langle\gamma, \widetilde{u}v\rangle_i$$
$$= \langle\widetilde{\gamma}, (u_a - u)v\rangle_i - (\widetilde{\lambda}\nabla u, \nabla v) - (\widetilde{\kappa}\dot{u}, v)$$

- silná formulace z Greenovy - Ostrogradského věty

$$(\kappa\dot{\widetilde{u}} - \nabla\cdot(\lambda\nabla\widetilde{u}) - \nabla\cdot(\widetilde{\lambda}\nabla u), v)$$
$$= \langle\widetilde{\gamma}(u_a - u) - \gamma\widetilde{u} - \lambda\nabla\widetilde{u}\cdot\nu - \widetilde{\lambda}\nabla u\cdot\nu, v\rangle_i$$
$$- \langle\lambda\nabla\widetilde{u}\cdot\nu + \widetilde{\lambda}\nabla u\cdot\nu, v\rangle_c$$

- obrácené použití Greenovy - Ostrogradského věty

$$(\kappa\dot{\widetilde{u}}, v) - (\beta(\widetilde{u}) + \widetilde{\beta}(u), \Delta v) + \langle\gamma, \widetilde{u}v\rangle_i$$
$$= \langle\widetilde{\gamma}, (u_a - u)v\rangle_i - \langle\widetilde{\kappa}\dot{u}, v\rangle - \langle\beta(\widetilde{u}) + \widetilde{\beta}(u), \nabla v\cdot\nu\rangle$$

Citlivostní problém (*sensitivity problem*):

- slabá formulace:
  – pevné ϑ, $\widetilde{\vartheta}$ a $u_0 = 0$
  – hledáme $\widetilde{u}$ tak, aby $DF(\vartheta, u, v, \widetilde{\vartheta}, \widetilde{u}, o) = 0$ pro libovolné v, tj.

$$(\kappa\dot{\widetilde{u}}, v) + (\lambda\nabla\widetilde{u}, \nabla v) + \langle\gamma, \widetilde{u}v\rangle_i$$
$$= \langle\widetilde{\gamma}, (u_a - u)v\rangle_i - (\widetilde{\lambda}\nabla u, \nabla v) - (\widetilde{\kappa}\dot{u}, v)$$

- silná formulace z Greenovy - Ostrogradského věty

$$(\kappa\dot{\widetilde{u}} - \nabla\cdot(\lambda\nabla\widetilde{u}) - \nabla\cdot(\widetilde{\lambda}\nabla u), v)$$
$$= \langle\widetilde{\gamma}(u_a - u) - \gamma\widetilde{u} - \lambda\nabla\widetilde{u}\cdot\nu - \widetilde{\lambda}\nabla u\cdot\nu, v\rangle_i$$
$$- \langle\lambda\nabla\widetilde{u}\cdot\nu + \widetilde{\lambda}\nabla u\cdot\nu, v\rangle_c$$

- obrácené použití Greenovy - Ostrogradského věty

$$(\kappa\dot{\widetilde{u}}, v) - (\beta(\widetilde{u}) + \widetilde{\beta}(u), \Delta v) + \langle\gamma, \widetilde{u}v\rangle_i$$
$$= \langle\widetilde{\gamma}, (u_a - u)v\rangle_i - \langle\widetilde{\kappa}\dot{u}, v\rangle - \langle\beta(\widetilde{u}) + \widetilde{\beta}(u), \nabla v\cdot\nu\rangle$$

Citlivostní problém (*sensitivity problem*):

- slabá formulace:
  – pevné ϑ, $\widetilde{\vartheta}$ a $u_0 = 0$
  – hledáme $\widetilde{u}$ tak, aby $DF(\vartheta, u, v, \widetilde{\vartheta}, \widetilde{u}, o) = 0$ pro libovolné v, tj.

$$(\kappa\dot{\widetilde{u}}, v) + (\lambda\nabla\widetilde{u}, \nabla v) + \langle\gamma, \widetilde{u}v\rangle_i$$
$$= \langle\widetilde{\gamma}, (u_a - u)v\rangle_i - (\widetilde{\lambda}\nabla u, \nabla v) - (\widetilde{\kappa}\dot{u}, v)$$

- silná formulace z Greenovy - Ostrogradského věty

$$(\kappa\dot{\widetilde{u}} - \nabla\cdot(\lambda\nabla\widetilde{u}) - \nabla\cdot(\widetilde{\lambda}\nabla u), v)$$
$$= \langle\widetilde{\gamma}(u_a - u) - \gamma\widetilde{u} - \lambda\nabla\widetilde{u}\cdot\nu - \widetilde{\lambda}\nabla u\cdot\nu, v\rangle_i$$
$$- \langle\lambda\nabla\widetilde{u}\cdot\nu + \widetilde{\lambda}\nabla u\cdot\nu, v\rangle_c$$

- obrácené použití Greenovy - Ostrogradského věty

$$(\kappa\dot{\widetilde{u}}, v) - (\beta(\widetilde{u}) + \widetilde{\beta}(u), \Delta v) + \langle\gamma, \widetilde{u}v\rangle_i$$
$$= \langle\widetilde{\gamma}, (u_a - u)v\rangle_i - \langle\widetilde{\kappa}\dot{u}, v\rangle - \langle\beta(\widetilde{u}) + \widetilde{\beta}(u), \nabla v\cdot\nu\rangle$$

Sdružený problém (*adjoint problem*):

- slabá formulace:
  – pevné ϑ a $u_\varsigma = 0$
  – hledáme v tak, aby $DF(\vartheta, u, v, o, \widetilde{u}, o) = DG(u, \widetilde{u})$ pro u z přímého problému a libovolné $\widetilde{u}$, tj.

$$-(\kappa\widetilde{u}, \dot{v}) + (\lambda\nabla\widetilde{u}, \nabla v) + \langle\gamma, \widetilde{u}v\rangle_i = \langle w, (u - u_c)\widetilde{u}\rangle_c$$

- silná formulace z Greenovy - Ostrogradského věty

$$-(\widetilde{u}, \kappa\dot{v} + \nabla\cdot(\lambda\nabla v)) = \langle\widetilde{u}, w(u - u_c) - \lambda\nabla v\cdot\nu,\rangle_c - \langle\widetilde{u}, \gamma v + \lambda\nabla v\cdot\nu\rangle_i$$

- obrácené použití Greenovy - Ostrogradského věty

$$-(\widetilde{u}, \kappa\dot{v}) - (\Delta\beta(\widetilde{u}), v) + \langle\gamma, \widetilde{u}v\rangle_i = \langle w, (u - u_c)\widetilde{u}\rangle_c - \langle\nabla\beta(\widetilde{u})\cdot\nu, v\rangle$$

- kombinace $\widetilde{u}$ z citlivostního a v ze sdruženého problému

$$\langle w, (u - u_c)\widetilde{u}\rangle_c = \langle\widetilde{\gamma}, (u_a - u)v\rangle_i - (\widetilde{\lambda}\nabla u, \nabla v) - (\widetilde{\kappa}\dot{u}, v)$$

lze přirozeně zavést $J(\vartheta) := \int_I G(u)\,\mathrm{d}t$

Sdružený problém (*adjoint problem*):

- slabá formulace:
  – pevné ϑ a $u_\varsigma = 0$
  – hledáme v tak, aby $DF(\vartheta, u, v, o, \tilde{u}, o) = DG(u, \tilde{u})$
  pro u z přímého problému a libovolné $\tilde{u}$, tj.

$$-(\kappa\tilde{u}, \dot{v}) + (\lambda\nabla\tilde{u}, \nabla v) + \langle\gamma, \tilde{u}v\rangle_i$$
$$= \langle w, (u - u_c)\tilde{u}\rangle_c$$

- silná formulace z Greenovy - Ostrogradského věty

$$-(\tilde{u}, \kappa\dot{v} + \nabla\cdot(\lambda\nabla v))$$
$$= \langle\tilde{u}, w(u - u_c) - \lambda\nabla v\cdot\nu, \rangle_c - \langle\tilde{u}, \gamma v + \lambda\nabla v\cdot\nu\rangle_i$$

- obrácené použití Greenovy - Ostrogradského věty

$$-(\tilde{u}, \kappa\dot{v}) - (\Delta\beta(\tilde{u}), v) + \langle\gamma, \tilde{u}v\rangle_i$$
$$= \langle w, (u - u_c)\tilde{u}\rangle_c - \langle\nabla\beta(\tilde{u})\cdot\nu, v\rangle$$

- kombinace $\tilde{u}$ z citlivostního a v ze sdruženého problému

$$\langle w, (u - u_c)\tilde{u}\rangle_c = \langle\tilde{\gamma}, (u_a - u)v\rangle_i - (\tilde{\lambda}\nabla u, \nabla v) - (\tilde{\kappa}\dot{u}, v)$$

lze přirozeně zavést $J(\vartheta) := \int_I G(u)\,\mathrm{d}t$

Sdružený problém (*adjoint problem*):

- slabá formulace:
  – pevné ϑ a $u_\varsigma = 0$
  – hledáme v tak, aby $DF(\vartheta, u, v, o, \tilde{u}, o) = DG(u, \tilde{u})$ pro u z přímého problému a libovolné $\tilde{u}$, tj.

$$-(\kappa\tilde{u}, \dot{v}) + (\lambda\nabla\tilde{u}, \nabla v) + \langle\gamma, \tilde{u}v\rangle_i = \langle w, (u - u_c)\tilde{u}\rangle_c$$

- silná formulace z Greenovy - Ostrogradského věty

$$-(\tilde{u}, \kappa\dot{v} + \nabla\cdot(\lambda\nabla v)) = \langle\tilde{u}, w(u - u_c) - \lambda\nabla v\cdot\nu,\rangle_c - \langle\tilde{u}, \gamma v + \lambda\nabla v\cdot\nu\rangle_i$$

- obrácené použití Greenovy - Ostrogradského věty

$$-(\tilde{u}, \kappa\dot{v}) - (\Delta\beta(\tilde{u}), v) + \langle\gamma, \tilde{u}v\rangle_i = \langle w, (u - u_c)\tilde{u}\rangle_c - \langle\nabla\beta(\tilde{u})\cdot\nu, v\rangle$$

- kombinace $\tilde{u}$ z citlivostního a v ze sdruženého problému

$$\langle w, (u - u_c)\tilde{u}\rangle_c = \langle\tilde{\gamma}, (u_a - u)v\rangle_i - (\tilde{\lambda}\nabla u, \nabla v) - (\tilde{\kappa}\dot{u}, v)$$

lze přirozeně zavést $J(\vartheta) := \int_I G(u)\,\mathrm{d}t$

Sdružený problém (*adjoint problem*):

- slabá formulace:
  – pevné ϑ a $u_\varsigma = 0$
  – hledáme v tak, aby $DF(\vartheta, u, v, o, \widetilde{u}, o) = DG(u, \widetilde{u})$
  pro u z přímého problému a libovolné $\widetilde{u}$, tj.

$$
\begin{aligned}
-(\kappa\widetilde{u}, \dot{v}) + (\lambda\nabla\widetilde{u}, \nabla v) + \langle\gamma, \widetilde{u}v\rangle_i \\
= \langle w, (u - u_c)\widetilde{u}\rangle_c
\end{aligned}
$$

- silná formulace z Greenovy - Ostrogradského věty

$$
\begin{aligned}
&-(\widetilde{u}, \kappa\dot{v} + \nabla\cdot(\lambda\nabla v)) \\
=\ &\langle\widetilde{u}, w(u - u_c) - \lambda\nabla v\cdot\nu,\rangle_c - \langle\widetilde{u}, \gamma v + \lambda\nabla v\cdot\nu\rangle_i
\end{aligned}
$$

- obrácené použití Greenovy - Ostrogradského věty

$$
\begin{aligned}
-(\widetilde{u}, \kappa\dot{v}) - (\Delta\beta(\widetilde{u}), v) + \langle\gamma, \widetilde{u}v\rangle_i \\
= \langle w, (u - u_c)\widetilde{u}\rangle_c - \langle\nabla\beta(\widetilde{u})\cdot\nu, v\rangle
\end{aligned}
$$

- kombinace $\widetilde{u}$ z citlivostního a v ze sdruženého problému

$$
\langle w, (u - u_c)\widetilde{u}\rangle_c = \langle\widetilde{\gamma}, (u_a - u)v\rangle_i - (\widetilde{\lambda}\nabla u, \nabla v) - (\widetilde{\kappa}\dot{u}, v)
$$

lze přirozeně zavést $J(\vartheta) := \int_I G(u)\,\mathrm{d}t$

Výpočtový algoritmus:

- zde (pro jednoduchost) jen $J_*(\gamma) := J(\vartheta)$ speciálně s $\vartheta = (\gamma, o, o)$
- odhad γ^0, dále iterace γ^k pro $k \in \{1, 2, \dots\}$
- gradienty $\mathcal{G}^k = (u^k(\gamma^k) - u_a)v^k$
- diferenciály $DJ_*(\gamma^k, \tilde{\gamma}^k) = \langle \tilde{\gamma}^k, \mathcal{G}^k \rangle_i$
  $D^2 J_*(\gamma^k, \tilde{\gamma}^k, \tilde{\gamma}^k) = \langle w, \tilde{u}(\gamma^k, \tilde{\gamma}^k)^2 \rangle_c$
- metoda sdružených gradientů
  (pro γ konstantní na Γ_i degeneruje v Newtonův algoritmus)
  $\gamma^{k+1} = \gamma^k + a^k \tilde{\gamma}^k$
  $\tilde{\gamma}^k = b^k \tilde{\gamma}^{k-1} - \mathcal{G}^k$, speciálně $\tilde{\gamma}^0 = 0$ (b^1 nepotřebujeme)
  $a^k = -DJ_*(\gamma^k, \tilde{\gamma}^k) / D^2 J_*(\gamma^k; \tilde{\gamma}^k; \tilde{\gamma}^k)$ (minimum na přímce)
  $b^k = \langle \mathcal{G}^k, \mathcal{G}^k \rangle_i / \langle \mathcal{G}^{k-1}, \mathcal{G}^{k-1} \rangle_i$ nebo (Fletcher - Reeves)
  $b^k = \langle \mathcal{G}^k, \mathcal{G}^k \rangle_i / \langle \tilde{\gamma}^{k-1}, \mathcal{G}^k - \mathcal{G}^{k-1} \rangle_i, \dots$ (Dai - Yuan)
- strategie výpočtu: volba počtu iterací pro γ^k, λ^k a κ^k
  (nutné zobecenění, pro λ^k a κ^k dosud asi málo dat)

Stochastická zobecnění:

- prostory abstraktních funkcí typu $L^2(\Theta, I, \mathcal{S})$ namísto $L^2(I, \mathcal{S})$, za S se dosadí V, $L^2(\Omega)$ apod.
- prostor elementárních jevů Θ opatřený σ-algebrou, pravděpodobnostní míra P
- optimalizační funkcionál s novým parametrem $\theta \in \Theta$
  $J_*(\gamma) = \frac{1}{2} \int_\Theta \int_I \int_{\Gamma_c} w(x,\theta)(u(x,t,\theta) - u_c(x,t,\theta))^2 \,\mathrm{d}s(x)\,\mathrm{d}t\,\mathrm{d}P$

Stochastická zobecnění:

- prostory abstraktních funkcí typu $L^2(\Theta, I, \mathcal{S})$ namísto $L^2(I, \mathcal{S})$, za S se dosadí V, $L^2(\Omega)$ apod.
- prostor elementárních jevů Θ opatřený σ-algebrou, pravděpodobnostní míra P
- optimalizační funkcionál s novým parametrem $\theta \in \Theta$ $J_*(\gamma) = \frac{1}{2} \int_\Theta \int_I \int_{\Gamma_c} w(x,\theta)(u(x,t,\theta) - u_c(x,t,\theta))^2 \,\mathrm{d}s(x)\,\mathrm{d}t\,\mathrm{d}P$

Možné přístupy:

- reprezentace nejistot: spektrální rozklad Karhunena - Loèveho, resp. rozklad založený na polynomiálním chaosu s Hermitovými polynomy, stochastická metoda konečných prvků
- bayesovský přístup, markovské řetězce, simulace Monte Carlo
- Sobolovy citlivostní indexy, opět simulace Monte Carlo . . .

Stochastická zobecnění:

- prostory abstraktních funkcí typu $L^2(\Theta, I, \mathcal{S})$ namísto $L^2(I, \mathcal{S})$, za S se dosadí V, $L^2(\Omega)$ apod.
- prostor elementárních jevů Θ opatřený σ-algebrou, pravděpodobnostní míra P
- optimalizační funkcionál s novým parametrem $\theta \in \Theta$
  $J_*(\gamma) = \frac{1}{2} \int_\Theta \int_I \int_{\Gamma_c} w(x,\theta)(u(x,t,\theta) - u_c(x,t,\theta))^2 \,\mathrm{d}s(x)\,\mathrm{d}t\,\mathrm{d}P$

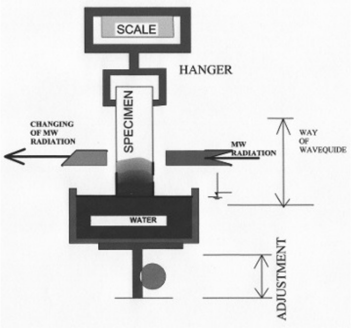
Možné přístupy:

- reprezentace nejistot: spektrální rozklad Karhunena - Loèveho, resp. rozklad založený na polynomiálním chaosu s Hermitovými polynomy, stochastická metoda konečných prvků
- bayesovský přístup, markovské řetězce, simulace Monte Carlo
- Sobolovy citlivostní indexy, opět simulace Monte Carlo . . .

Společné nepříjemnosti:

- nedostatečné či komplikované nástroje funkcionální analýzy (věty o vnoření aj.) pro existenci řešení, konvergenci posloupností apod.
- umělé regularizace pro algoritmizaci [A. N. Tichonov, 1977]
- absence vhodného aplikačního softwaru

Měření kapilární vodivosti pórovitých materiálů:



- přímo zjistitelné vlhkostní toky $\eta(u) \cdot \nu$ na hranici vzorku
- rozložení vlhkosti u v materiálu:
  – přímý destruktivní test: vážením, jen pro celý vzorek, k dispozici musí být série zaměnitelných vzorků
  – nepřímý nedestruktivní test, např. mikrovlnnou technikou, mění se elektrická permitivita, resp. magnetická permeabilita při obsazování pórů vodou, nutná kalibrace

Užitečné transformace a substituce:

- entalpická a Kirchhoffova transformace

  $\kappa(u)\dot{u} - \nabla\cdot(\lambda(u)\nabla u) = \dots$

  $\hat{\kappa}(u(r)) := \int_0^r \kappa(\rho)\,\mathrm{d}\rho,\ \ \hat{\lambda}(u(r)) := \int_0^r \lambda(\rho)\,\mathrm{d}\rho,\ \ \beta(u) := \hat{\lambda}(\hat{\kappa}^{-1}(u))$

  $\dot{U} - \Delta\beta(U) = \dots$ pro entalpii $U := \widehat{\kappa}(u)$

  dále (pro jednoduchost) jen $\kappa(u) \equiv 1$, $f \equiv 0$ a Γ_i prázdná

- úpravy pro dostatečně hladká $\beta(.)$

  $\nabla\beta(u) = \beta'(u)\nabla(u) = \lambda(u)\nabla u$

  $\Delta\beta(u) = \nabla\cdot\nabla\beta(u) = \nabla\cdot(\lambda(u)\nabla u) = \lambda'(u)\nabla u\cdot\nabla u + \lambda(u)\Delta u$

Užitečné transformace a substituce:

- entalpická a Kirchhoffova transformace

  $\kappa(u)\dot{u} - \nabla \cdot (\lambda(u)\nabla u) = \dots$

  $\hat{\kappa}(u(r)) := \int_0^r \kappa(\rho)\,\mathrm{d}\rho, \;\; \hat{\lambda}(u(r)) := \int_0^r \lambda(\rho)\,\mathrm{d}\rho, \;\; \beta(u) := \hat{\lambda}(\hat{\kappa}^{-1}(u))$

  $\dot{U} - \Delta\beta(U) = \dots$ pro entalpii $U := \widehat{\kappa}(u)$

  dále (pro jednoduchost) jen $\kappa(u) \equiv 1$, $f \equiv 0$ a Γ_i prázdná

- úpravy pro dostatečně hladká $\beta(.)$

  $\nabla\beta(u) = \beta'(u)\nabla(u) = \lambda(u)\nabla u$

  $\Delta\beta(u) = \nabla \cdot \nabla\beta(u) = \nabla \cdot (\lambda(u)\nabla u) = \lambda'(u)\nabla u \cdot \nabla u + \lambda(u)\Delta u$

Praktické požadavky na efektivní výpočet:

- $u \approx u_*$ na $\Omega_* \subseteq \Omega$, $\mathrm{meas}(\Omega_*) > 0$ (zajištění dostatku dat)
- zavedení $G(u) = \frac{1}{2}(u - u_*, w(u - u_*))$, váha $w \in L^\infty(\Omega)$ (nulová vně Ω_*)
- lokální odhady $\beta(.)$ či $\lambda(.)$ vycházející z přímé formulace problému

Přímý problém:

- slabá formulace:
  – pevné β a $u_0 = 0$
  – hledáme u tak, aby $F(\beta, u, v) = 0$ pro libovolné v, tj.
  $$(\dot{u}, v) + (\nabla\beta(u), \nabla v) = \langle g, v\rangle$$
- silná formulace z Greenovy - Ostrogradského věty
  $$(\dot{u} - \Delta\beta(u), v) = \langle g - \nabla\beta(u)\cdot\nu, v\rangle$$
  $$(\dot{u} - \lambda'(u)\nabla u\cdot\nabla u - \lambda(u)\Delta u, v) = \langle g - \nabla\beta(u)\cdot\nu, v\rangle$$
- obrácené použití Greenovy - Ostrogradského věty
  $$(\dot{u}, v) - (\beta(u), \Delta v) = \langle g, v\rangle - \langle\beta(u), \nabla v\cdot\nu\rangle$$

Přímý problém:

- slabá formulace:
  – pevné β a $u_0 = 0$
  – hledáme u tak, aby $F(\beta, u, v) = 0$ pro libovolné v, tj.
  $$(\dot{u}, v) + (\nabla\beta(u), \nabla v) = \langle g, v\rangle$$
- silná formulace z Greenovy - Ostrogradského věty
  $$\begin{aligned}(\dot{u} - \Delta\beta(u), v) &= \langle g - \nabla\beta(u)\cdot\nu, v\rangle\\ (\dot{u} - \lambda'(u)\nabla u\cdot\nabla u - \lambda(u)\Delta u, v) &= \langle g - \nabla\beta(u)\cdot\nu, v\rangle\end{aligned}$$
- obrácené použití Greenovy - Ostrogradského věty
  $$(\dot{u}, v) - (\beta(u), \Delta v) = \langle g, v\rangle - \langle\beta(u), \nabla v\cdot\nu\rangle$$

Rozklady $\beta(.)$:

- obvyklý: $\beta(u) = c_i\beta_i(u)$, součet přes $i \in \{1, 2, \ldots\}$ pro známá $\beta_i(.)$
- alternativní [J. Drchalová a R. Černý, 1998; R. Černý a kol., 2010]
  $$M_i := \{(x,t) \in \Omega\times I : \overline{\lambda}_{i-1} \le \lambda(u(x,t)) \le \overline{\lambda}_i\}$$
  $$\lambda_i(u) := (\overline{\lambda}_{i-1} + \overline{\lambda}_i)/2,\ \ c_i := \operatorname{meas} M_i$$

Klasické jednorozměrné odhady průběhu $\lambda(.)$ na polopřímce:

- transformace $y = x/(2\sqrt{t})$ [L. Boltzmann, 1894]
  pro speciální okrajové podmínky [C. Matano, 1933]

$$\lambda(u(x,t)) = \frac{1}{2tu'_x(x,t)} \int_x^\infty \xi u'_\xi(\xi,t)\,\mathrm{d}\xi$$

  (speciálně pro konstatní λ stačí pro analytické řešení
  např. Laplacova či Fourierova transformace)

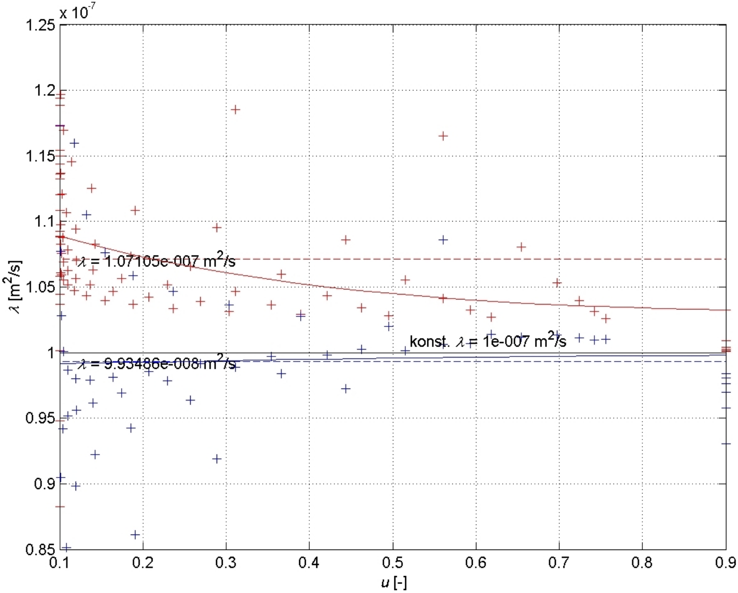
- třetí integrační metoda [H. Stenlund, 2011]

$$\lambda(u(x,t)) = -\frac{1}{u'_x(x,t)} \int_x^\infty \dot{u}(\xi,t)\,\mathrm{d}\xi$$

- úprava odstraňující nevlastní integrál [J. Vala a P. Jarošová, 2013]
  díky přímo měřenému okrajovému toku g

$$\lambda(u(x,t)) = \frac{1}{u'_x(x,t)} \left(\int_0^x \dot{u}(\xi,t)\,\mathrm{d}\xi - g(t) \right)$$

Srovnání algoritmu Matanova a nově navrženého pro testovací údaje:



Obecné odhady průběhu $\beta(.)$ či $\lambda(.)$:

- druhá integrační metoda [H. Stenlund, 2011]

  $(\dot{u} - \lambda'(u)\nabla u \cdot \nabla u - \lambda(u)\Delta u, v) = \ldots$
  pro $v = \delta(x-\xi)\delta(t-\iota)$, $\xi \in \Omega$, $\iota \in I$:

  zbude jen $\lambda'(u)\nabla u \cdot \nabla u + \lambda(u)\Delta u = \dot{u}$ na $\Omega \times I$,
  řeší se lokálně jako lineární obyčejná diferenciální rovnice
  (na rozdíl od přímé nelineární úlohy)
- první integrační metoda [H. Stenlund, 2011]

  $(\dot{u}, v) - (\beta(u), \Delta v) = \ldots$ pro $v(x,t) = v_*(x,\xi)\delta(t-\iota)$:

  integrováním pak lokálně vychází
  $$\beta(u(x,t)) = -\frac{1}{4\pi}\int_\Omega \frac{\dot{u}(\xi,t)}{|x-\xi|}\,\mathrm{d}\xi$$
- metoda dvojného integrování [R. Černý a kol., 2010]

  $(\dot{u} - \nabla\cdot(\lambda(u)\nabla(u)), v) = \ldots$ pro $v = \delta(x-\xi)\delta(t-\iota)$, $\xi \in \Omega$,
  $\iota \in I$:

  analýzou izohyperploch $u(x,t)$ na $\Omega \times I$ se zjistí M_i, $i \in \{1,2,\ldots\}$,
  pro určení c_i nutno integrovat přes $\Omega \times I$

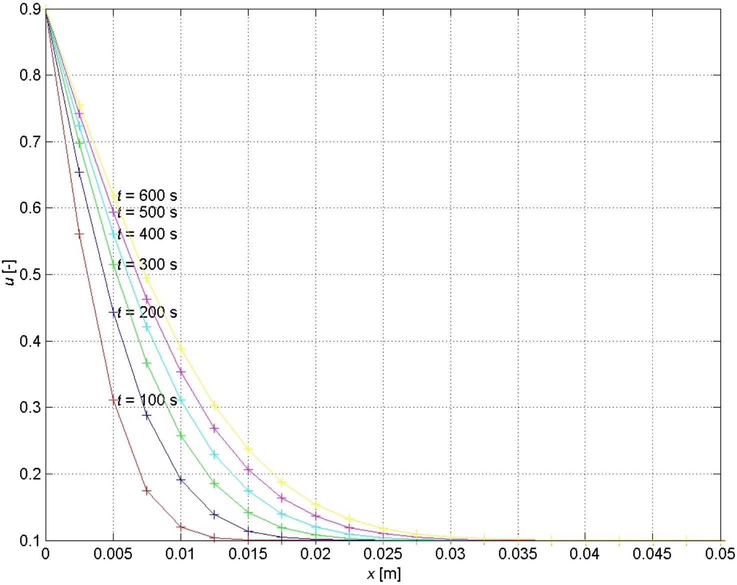
Přímý, citlivostní a sdružený problém (ve slabé formulaci):

- přímý problém:
  – pevné $c := (c_1, c_2, \ldots)$ a $u_0 = 0$
  – hledáme u tak, aby $F(c, u, v) = 0$ pro libovolné v, tj.
  $$(\dot{u}, v) + (\nabla\beta_i(u), \nabla v)c_i = \langle g, v\rangle$$
- citlivostní problém:
  – pevné c, $\widetilde{c}$ a $u_0 = 0$
  – hledáme $\widetilde{u}$ tak, aby $DF(c, u, v, \widetilde{c}, \widetilde{u}, o) = 0$ pro libovolné v, tj.
  $$(\dot{\widetilde{u}}, v) + (\nabla\beta_i(\widetilde{u}), \nabla v)c_i = (\nabla\beta_i(u), \nabla v)\widetilde{c}_i$$
- sdružený problém:
  – pevné c a $u_\varsigma = 0$
  – hledáme v tak, aby $DF(c, u, v, o, \widetilde{u}, o) = DG(u, \widetilde{u})$
  pro u z přímého problému a libovolné $\widetilde{u}$, tj.
  $$-(\widetilde{u}, \dot{v}) + (\nabla\beta_i(\widetilde{u}), \nabla v)c_i = (w(u - u_*), \widetilde{u})$$
- kombinace $\widetilde{u}$ z citlivostního a v ze sdruženého problémm
  $$(\nabla\beta_i(u), \nabla v)\widetilde{c}_i = (w(u - u_*), \widetilde{u}), \qquad J(c) := G(u)$$

Výpočtový algoritmus:

- odhad c^0, dále iterace c^k pro $k \in \{1, 2, \dots\}$
- gradienty $\mathcal{G}^k = (u^k(c^k) - u_*)v^k$
- diferenciály $DJ_*(c^k, \tilde{c}^k) = (\tilde{c}^k, w\mathcal{G}^k)$
  $$D^2J_*(c^k, \tilde{c}^k, \tilde{c}^k) = (w\tilde{u}(c^k, \tilde{c}^k), \tilde{u}(c^k, \tilde{c}^k))$$
- metoda sdružených gradientů
  $$c^{k+1} = c^k + a^k\tilde{c}^k$$
  $$\tilde{c}^k = b^k\tilde{c}^{k-1} - \mathcal{G}^k, \quad \text{speciálně } \tilde{c}^0 = 0 \quad (b^1 \text{ nepotřebujeme})$$
  $$a^k = -DJ_*(c^k, \tilde{c}^k)/D^2J_*(c^k; \tilde{c}^k; \tilde{c}^k) \qquad \text{(minimum na přímce)}$$
  $$b^k = (w\mathcal{G}^k, \mathcal{G}^k)/(w\mathcal{G}^{k-1}, \mathcal{G}^{k-1}) \text{ nebo} \quad \text{(Fletcher - Reeves)}$$
  $$b^k = (w\mathcal{G}^k, \mathcal{G}^k)/(w\tilde{\gamma}^{k-1}, \mathcal{G}^k - \mathcal{G}^{k-1}), \dots \text{ (Dai - Yuan)}$$

Simulace vývoje obsahu vlhkosti v materiálu:



Děkuji všem dosud bdělým účastníkům semináře za pozornost.

Dotazy a připomínky jsou vítány.