



**České vysoké učení technické v Praze  
Fakulta stavební**

Studentská vědecká a odborná činnost  
Akademický rok 2011/2012

## **Návrhy experimentů pro stochastickou citlivostní analýzu**

Jméno a příjmení studenta, ročník, obor:

Eliška Janouchová, 4. r., C

Vedoucí práce:

Ing. Anna Kučerová, Ph.D.

Katedra / Ústav:

Katedra mechaniky

## Obsah

Abstrakt .....	3
Abstract .....	3
1 Úvod .....	4
2 Návrh experimentů .....	5
2.1 Požadované vlastnosti DoE .....	5
2.1.1 Rozprostření návrhu .....	5
2.1.2 Promítací vlastnost .....	5
2.1.3 Ortogonalita .....	6
2.1.4 Pravděpodobnostní rozdělení .....	6
2.2 Metody tvoření návrhů .....	6
2.2.1 Zrnitost vs. Kvalita .....	6
2.2.2 Deterministické vs. stochastické metody .....	7
3 Přehled kritérií .....	8
3.1 Rovnoměrné pokrytí návrhu .....	9
3.1.1 Kritérium minimální potenciální energie Audze-Eglais .....	9
3.1.2 Maximin .....	9
3.1.3 $ML_2$ diskrepance .....	9
3.1.4 D-optimalita .....	10
3.2 Ortogonalita návrhu .....	10
3.2.1 Korelace .....	10
3.2.2 Číslo podmíněnosti .....	11
4 Vzájemné vlastnosti optimálních návrhů .....	12
5 Promítací vlastnosti .....	14
6 Minimální vzdálenosti .....	15
7 Citlivostní analýza na sadě matematických funkcí .....	16
8 Závěr .....	18
Literatura .....	19

## Abstrakt

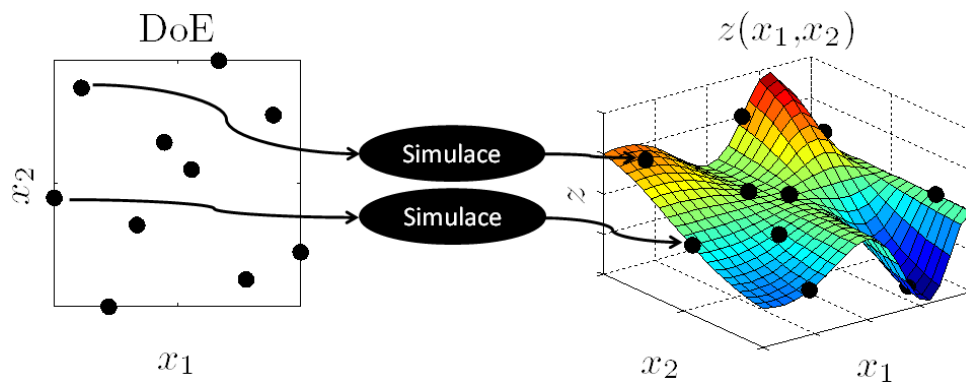
V dnešní době jsou numerické modely stavebních konstrukcí stále přesnější, složitější a samozřejmě také výpočetně náročnější. Navzdory růstu výpočetní kapacity moderních počítačů je průzkum vlastností numerického modelu stále obtížný. Citlivostní analýza představuje základní nástroj pro stanovení citlivosti odezvy modelu na změnu hodnot jeho parametrů. Jedním velmi rozšířeným postupem je určení citlivosti na základě množiny simulací vyhodnocených pro různé vektory vstupních parametrů neboli pro skupinu bodů v tzv. návrhovém prostoru. Citlivost je poté stanovena jako korelace mezi zvoleným vstupním parametrem a odezvou modelu. V tomto případě závisí přesnost v odhadu citlivosti na volbě polohy a počtu návrhových bodů, tzv. návrhu experimentů (z angl. *design of experiments*). Získaný odhad citlivosti z vytvořeného návrhu experimentů nemusí být dostatečně přesný, jelikož návrh neobsahuje dostatečné množství návrhových bodů. Pro zvýšení přesnosti lze do stávajícího návrhu experimentů postupně přidávat další body. Přesnost a důvěryhodnost výsledků získaných pomocí návrhu experimentů ovšem nezávisí jen na počtu bodů, ale velkou roli hrají i pozice jednotlivých bodů. Existují různé metody pro stanovení vhodného rozmístění návrhových bodů, jednou z nich je optimalizace kritérií, která zaručují určité požadované vlastnosti návrhu. Cílem této práce je shrnout a porovnat dostupná kritéria, jejichž optimalizací jsou získávány návrhy experimentů vhodné pro citlivostní analýzu.

## Abstract

Nowadays, the numerical models of real-world structures are more precise, more complex and, of course, more time-consuming. Despite the growth of a computational effort, the exploration of model behavior remains a complex task. The sensitivity analysis is a basic tool for investigating the sensitivity of the model to its inputs. A widely used strategy to assess the sensitivity is based on a finite set of simulations for given sets of input parameters, i.e. points in the design space. An estimate of the sensitivity can be obtained by computing correlations between the input parameters and the chosen response of the model. The accuracy of the sensitivity prediction depends on the choice of the position and the number of design points called the design of experiments. Moreover, once the design of experiments is created, the obtained sensitivity prediction may be inaccurate because of the insufficient number of design points. To improve the prediction, new design points can be sequentially added into the existing design. The accuracy and reliability of the results obtained by the design of experiments does not depend only on the number of the points, but the great influence have also their positions. There are several different methods for generating the appropriate positions of design points. One of them is optimization of criteria ensuring the required design properties. The aim of this thesis is to review and compare available criteria determining the design of experiments suitable for sampling-based sensitivity analysis.

# 1 Úvod

Citlivostní analýza (SA z angl. *sensitivity analysis*) představuje důležitý nástroj pro studium vlastností komplexních systémů. Tvoří nezbytnou součást inverzní analýzy [16], je využívána při modelování ploch odezvy [9] nebo při analýze nejistot [8]. Konkrétně se zabývá zhodnocením vlivu jednotlivých parametrů zkoumaného modelu na jeho odezvu. Do dnešní doby bylo navrženo mnoho různých postupů pro vyhodnocení SA, jejichž podrobný přehled je uveden např. v [20]. Tato práce je zaměřena na velmi rozšířenou stochastickou citlivostní analýzu (SSA z angl. *sampling-based sensitivity analysis*), která patří mezi tzv. globální SA a spočívá ve vyhodnocení korelace mezi vstupem a výstupem modelu na základě množiny numerických simulací [9]. Příslušné vstupní parametry těchto simulací zároveň představují souřadnice návrhových bodů, které tvoří tzv. návrh experimentů (DoE). Princip DoE a vyhodnocení simulací je na Obr. 1. Pro výpočet korelace je použit Spearmanův koeficient pořadové korelace (SRCC), který je schopen zachytit nelineární, avšak monotónní závislost.



Obr. 1: Princip návrhu experimentů a vyhodnocení simulací.

V případě výpočetně náročných numerických modelů je počet simulací, které mohou být použity pro SSA, velmi omezen, jelikož tyto simulace jsou ve většině případů velmi časově náročné. Náhodně zvolená množina bodů může být zcela nevhodná pro vyhodnocení SSA a výsledný odhad citlivosti nemusí vůbec odpovídat skutečnosti. Proto je nutné vybírat vstupní parametry neboli souřadnice návrhových bodů velmi opatrně. Návrh experimentů je tedy souborem vstupních parametrů pro určitý počet simulací.

Důležitou otázkou při tvorbě DoE je umístění návrhových bodů, které může výrazně ovlivnit potřebný počet návrhových bodů. Pokud se bude jednat o náhodně rozprostřené body, je nutné takových bodů zvolit velké množství, aby odhad chování modelu byl důvěryhodný. Existují ale sofistikovanější způsoby výběru pozic návrhových bodů, které umožňují snížit velikost návrhu. Jedním z nich je optimalizace vhodného kritéria nebo více kritérií, která zajišťují určité vlastnosti návrhu experimentů jako je například rovnoměrné rozprostření návrhových bodů.

Cílem této práce je tedy vytvoření přehledu požadovaných vlastností DoE, jejich způsobů generování a kritérií pro jejich optimalizaci, která jsou dostupná v literatuře. Práce se zaměří na porovnání vlastností optimálních návrhů těchto kritérií. Optimální návrhy se aplikují pro vyhodnocení citlivostní analýzy teoretických matematických funkcí. Ze získaných výsledků se stanoví nejvíce vhodné kritérium pro definování návrhů experimentů použitelných pro citlivostní analýzu.

## 2 Návrh experimentů

Návrh neboli plánování experimentů je běžnou součástí průzkumů či vědeckého bádání, ať už jde o laboratorní či počítačem simulované experimenty. Velmi důležitý je v obou případech vhodný výběr vstupních parametrů (nazývaných též proměnné nebo faktory) a správný způsob vyhodnocení získaných výstupních dat (nazývaných též odezvy).

### 2.1 Požadované vlastnosti DoE

Mnoho fyzikálních experimentů je v dnešní době modelováno pomocí počítačových simulací. Využití počítačových modelů přináší několik výhod jako je například úspora lidské práce a materiálu, možnost protahování či zkracování průběhu zkoumaného jevu v čase. Více informací o počítačových simulacích lze najít v [2]. Důležitým faktem je odstranění náhodné chyby, která je běžnou součástí fyzikálních experimentů. Při studování deterministických modelů, na které se zaměřuje tato práce, to znamená, že výstupy modelu jsou pro stejnou sadu vstupních parametrů vždy shodné. Z toho lze udělat závěr, že zatímco v případě návrhu fyzikálních experimentů bývá vhodné experiment opakovat pro stejné nastavení jeho parametrů, opakování počítačových simulací se stejnými hodnotami vstupních parametrů je zcela zbytečné, jinými slovy návrhové body se stejnou či velmi blízkou polohou v návrhovém prostoru jsou informačně bezcenné.

#### 2.1.1 Rozprostření návrhu

První ze základních požadovaných vlastností DoE je rozprostření (angl. *space-filling property*) návrhových bodů po celém návrhovém prostoru takovým způsobem, aby přinášel co nejvíce informací o chování modelu v závislosti na změně posuzovaných parametrů. Jelikož před samotným provedením simulací je v provedených testech znám pouze počet parametrů a jejich definiční obor či pravděpodobnostní rozdělení, samotný model je uvažován jako tzv. černá skříňka (častěji užívaný anglický výraz *black box*), není stanovení vyhovujícího rozmístění bodů zcela jednoduché.

#### 2.1.2 Promítací vlastnost

Další vlastností DoE zmiňovanou v literatuře [3,5] je promítání (z angl. *projection*, nazýváno také *projective property* nebo *non-collapsing property*). Návrh má dobré promítací vlastnosti, pokud se hodnoty jednotlivých parametrů v návrhu neopakují. Příkladem těchto návrhů, který je v této práci zohledněn, jsou návrhy dodržující podmínky Latin Hypercube Sampling (LHS), o kterých se pojednává v následující kapitole. Důležitost a vliv této vlastnosti se projeví především v případě, kdy se nejprve uvažovaný počet parametrů, pro který byl vytvořen návrh, následně snižuje. Důvodem může být vyhodnocení, že některý parametr nemá na chování modelu významný vliv. Tato fáze plánování experimentů se nazývá prověřování (z angl. *screening*). Jde o prověření původně velkého počtu parametrů z hlediska jejich významnosti a následnou redukci počtu parametrů na přijatelné množství, pro které budou provedeny experimenty pro hlubší prozkoumání chování modelu. Vyřazení nevýznamného parametru znamená odebrání příslušné souřadnice návrhových bodů, tím dojde ke snížení počtu dimenzí návrhového prostoru. V případě rovnosti všech zbylých souřadnic některých bodů dochází k duplicitě bodů, a tak k plýtvání výpočetního času.

### 2.1.3 Ortogonalita

Uspořádání návrhových bodů by dále mělo být takové, aby byly souřadnice bodů ortogonální nebo aspoň téměř ortogonální, jelikož v mnohých případech nelze úplné ortogonalitu návrhu dosáhnout. Ortogonalita návrhu zaručuje nezávislost jednotlivých parametrů a může být například vyjádřena pomocí korelačních koeficientů. Ortogonální návrhy nevnáší uměle vytvořený vztah mezi jednotlivé parametry, který by mohl být mylně detekován při špatně zvolených souřadnicích návrhových bodů. Tento základní požadavek může být v některých případech pozměněn, jsou-li parametry na sobě nějakým způsobem závislé, pak lze tuto závislost zohlednit předepsáním určité hodnoty korelace.

### 2.1.4 Pravděpodobnostní rozdělení

U návrhu experimentů je také důležité, aby bylo dodrženo předepsané pravděpodobnostního rozdělení. Ovšem pouze některé metody generování DoE umožňují zohlednit jiná rozdělení, než je rovnoměrné. Vytvoření návrhu některými metodami je dokonce podmíněno znalostí hodnot dolních a horních mezí intervalů, na kterých jsou jednotlivé parametry definovány, ale tyto hodnoty nejsou ve všech případech k dispozici. Při dodržení předepsaného pravděpodobnostního rozdělení jsou pozice návrhových bodů voleny tak, aby návrhový prostor pokrývaly co nejvhodněji z hlediska dostupných informací o zkoumaných parametrech.

Následující vlastnosti návrhů jsou již závislé na konkrétně řešeném problému. Jak už bylo zmíněno, známé hodnoty před generováním DoE jsou počet parametrů a příslušné definiční obory. Pokud jsou parametry definované na spojitém intervalu, optimalizace pozic návrhových bodů je velmi náročná, a proto se běžně spojitý návrhový prostor diskretizuje pro její zjednodušení. Diskretizace se provádí dle předepsaného pravděpodobnostního rozdělení. V případě diskrétního prostoru se předepsané rozdělení dodržuje pomocí četnosti výskytu konkrétních hodnot parametrů. V této práci je ve všech testech uvažováno rovnoměrné rozdělení. Pro diskrétně definované parametry je dále důležitým faktorem, zda se počty přípustných hodnot jednotlivých parametrů navzájem shodují, nebo zda se liší. Pro rozdílné velikosti definičních oborů parametrů jde o tzv. *smíšené návrhy* (z angl. *mixed designs*).

## 2.2 Metody tvoření návrhů

### 2.2.1 Zrnitost vs. Kvalita

Při tvorbě návrhů je velmi důležitá i volba počtu návrhových bodů. Autoři v [5] zmiňují vlastnost DoE nazvanou zrnitost (angl. *granularity*), která popisuje v jak velkých množstvích jsou body přidávány do návrhu. Vhodnější je postupné přidávání co nejmenšího počtu bodů - jemně zrnité návrhy, kdy se lze vyhnout stavu s nedostačným či zbytečně velkým počtem výsledných návrhových bodů. Na druhou stranu dodržení tohoto postupu má za následek zhoršení kvality návrhu. Proto by bylo z hlediska dosažené kvality návrhu lepší přidávat naráz více návrhových bodů. Volba konkrétního postupu není lehkou otázkou a tento problém zůstává stále nedořešen.

Dle způsobu určení počtu návrhových bodů lze návrhy rozdělit do skupin:

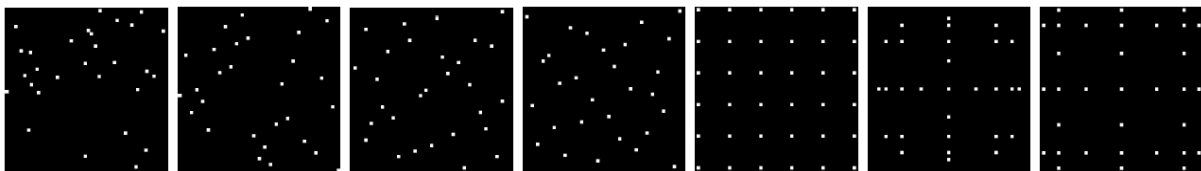
- *jednorázově generované návrhy*, kdy počet návrhových bodů i jejich souřadnice jsou stanoveny před provedením simulací,

- *sekvenční návrhy*, při kterých je vyhodnocena odezva modelu pro výchozí návrh (získaný jednorázovým generováním) a následně je přidán potřebný počet dalších návrhových bodů pro zpřesnění výsledků,
- *plně sekvenční návrhy*, kdy je v každém kroku přidáván do návrhu právě jeden bod.

Při sekvenčním doplňování lze vytvářet tzv. *vnořené návrhy* (z angl. *nested designs*), kdy se výsledný návrh skládá z více menších doplňujících se návrhů [6].

## 2.2.2 Deterministické vs. stochastické metody

Metody generování DoE mohou být rozděleny na dvě základní skupiny dle samotného způsobu definování návrhu. První skupinou jsou metody deterministické, které pevně stanovují umístění návrhových bodů dle konkrétních matematických vztahů. Při tvorbě návrhů tímto postupem je předem pevně stanoven počet návrhových bodů. Příslušné návrhy mají jasně danou strukturu na rozdíl od návrhů generovaných stochastickým postupem, kdy velkou roli hraje náhodnost. U druhého typu návrhů není zcela zaručena kvalita návrhu, ale metoda umožňuje variabilitu vzhledem ke změně počtu návrhových bodů i v průběhu provádění experimentů. Stochastické metody tedy umožňují zvolit libovolný stupeň zrnitosti návrhu. Příklady různých typů návrhů ve dvoudimenzionálním prostoru jsou na Obr. 2.



Obr. 2: Příklady stochastických návrhů: náhodný (a), LHS (b), optimální (c) a optimální LHS (d); příklady deterministických návrhů: faktoriální (e), řídká mřížka GQU (f) a řídká mřížka KPU (g).

### Optimální návrhy

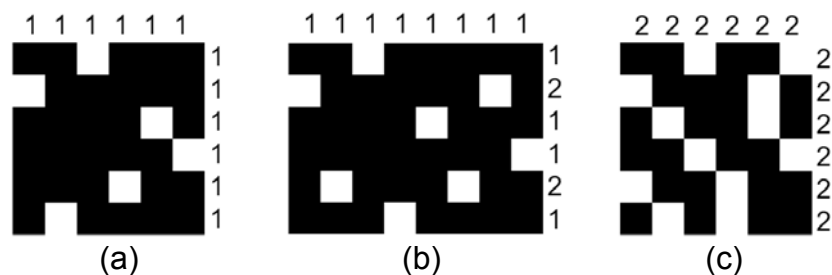
Jedním z typů návrhů jsou *návrhy optimální*. Jde o návrhy získané optimalizací pozic návrhových bodů vzhledem ke kritériím, která specifikují vlastnosti generovaného návrhu. Optimální návrhy nemají jasně dané schéma rozložení bodů, jde o stochasticky získávané návrhy. Existují různá kritéria optimality, která upřednostňují různé vlastnosti návrhu. Tato práce se věnuje kritériím zaměřeným na rovnoměrné rozložení návrhu a ortogonalitu. Zkoumaná kritéria jsou představena v následující kapitole. Samozřejmě jde pouze o výběr několika z mnoha kritérií. Některá další jsou uvedena například v [2,3]. Optimální návrhy mohou být získávány buď na základě samotné optimalizace kritéria bez jakéhokoliv dalšího omezení, tímto způsobem se obdrží tzv. *volné návrhy*, nebo může návrh například podléhat podmínkám LHS. U optimálních návrhů se dále zkoumají i jejich promítací vlastnosti, které přímo nespécifikuje žádné ze zvolených kritérií, ale například samotná definice LHS stanovuje příslušným návrhům ty nejlepší promítací vlastnosti.

### LHS návrhy

Pro zjednodušení optimalizace se návrhy běžně optimalizují podle podmínek Latin Hypercube Sampling s vytvořením tzv. *LHS návrhů* [17], které jsou speciálním případem částečně faktoriálních návrhů. Metoda LHS umožňuje vytvořit předepsaná pravděpodobnostní rozdělení hodnot jednotlivých parametrů a může být efektivně aplikovaná v analýze nejistot [8]. LHS návrhy jsou často používané pro jejich časo-

vou nenáročnost, která ovšem plyne z jejich omezení. Spojitý prostor je při tvorbě LHS návrhu nejprve rozdělen tak, že definiční obor každé proměnné je rozdělen na úseky, jejichž počet se rovná zvolenému počtu návrhových bodů. LHS návrh pak do každého intervalu každé proměnné umístí právě jeden bod. Zvolená hodnota je buď náhodná, ale častěji předepsaná do středu intervalu. V rámci následné optimalizace je možné pouze proházovat odpovídající souřadnice dvou bodů tak, aby bylo stále dodrženo omezení jednoho bodu na interval. Prohledávaný prostor je dodržováním LHS podmínek z hlediska optimalizace významně redukován, a proto je možné najít dobré řešení i v případě většího počtu proměnných a návrhových bodů. Ovšem není výjimkou, že tato významná redukce může mít za následek vyloučení nejlepších řešení z hlediska použití pro SSA.

V případě diskrétního prostoru je možné použít LHS návrh bez jakýchkoli modifikací pouze v případě, kdy počet přípustných hodnot všech proměnných je roven sobě navzájem a zároveň počtu požadovaných návrhových bodů. V situaci, kdy jednotlivé proměnné dosahují různého počtu přípustných hodnot nebo se liší od počtu návrhových bodů, už není možné použít LHS návrh v jeho původní podobě, ale je nutné provést určitou modifikaci. Pokud se počet přípustných hodnot neboli počet intervalů rovná násobkům každého z nich, lze snadno předepsat počet návrhových bodů objevujících se v každém intervalu tak, aby byla zachována homogenita výsledných návrhů. Příklad tohoto modifikovaného návrhu je na Obr. 3c s uvedenými počty bodů pro každý řádek a sloupec.



Obr. 3: Klasický LHS (a), smíšený LHS (b) a modifikovaný LHS (c) návrh.

V ostatních případech lze předepsat pouze minimální počet bodů pro každý interval [23]. V dále prezentovaných numerických experimentech byly generovány LHS návrhy, kdy počet bodů odpovídal počtu přípustných hodnot jedné zvolené proměnné a před vyhodnocením kritéria byly souřadnice bodů s odlišným počtem přípustných hodnot jednoduše zaokrouhleny na odpovídající hodnoty. Díky tomuto zvolenému postupu bylo možno porovnat LHS nebo mLHS (z angl. *mixed LHS*) návrhy s návrhy obdržené optimalizací bez omezujících podmínek, aby byl prozkoumán vliv LHS podmínky na charakter návrhu a jeho vhodnosti pro citlivostní analýzu.

### 3 Přehled kritérií

V této části jsou představena jednotlivá studovaná kritéria, která jsou v dostupné literatuře nejčastěji uváděna. Pro přehlednost lze kritéria rozdělit do dvou hlavních skupin podle charakteristiky návrhů, které jsou daným kritériem upřednostňovány. Nejvíce upřednostňovanými jsou:

- rovnoměrné pokrytí (*space-filling*) návrhového prostoru, které je nezbytné pro zachycení významu parametrů modelu v celém jeho definičním oboru,



- ortogonalita návrhu, která je důležitá pro nezávislé posouzení vlivu jednotlivých parametrů.

Z hlediska konkrétního využití návrhu mohou být kladeny další základní požadavky, které jsou pro daný případ vhodnější. Nicméně pro případ SSA nejsou zformulovány žádné speciální požadavky, proto se tato práce zaměří na obecně požadované charakteristiky návrhů.

### 3.1 Rovnoměrné pokrytí návrhu

Tato práce zahrnuje studium čtyř známých kritérií, která hodnotí návrh z hlediska jeho rozložení v návrhovém prostoru.

#### 3.1.1 Kritérium minimální potenciální energie Audze-Eglais

Kritérium Audze-Eglais (AE) [1,22] je založeno na následující fyzikální analogii: body tvořící systém o jednotkové hmotnosti na sebe navzájem působí silami tak, že systém má určitou potenciální energii  $U$ . Pokud se body uvolní ze své původní pozice, tak se hýbou. Rovnováha je dosaženo tehdy, když je potenciální energie systému minimální. Pokud je velikost sil nepřímo úměrná druhé mocnině vzdálenosti jednotlivých bodů, pak je minimalizováním potenciální energie

$$E^{AE} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{L_{ij}^2} \quad (1)$$

dosaženo rovnoměrného rozložení bodů.  $L_{ij}$  je euklidovská vzdálenost mezi body  $i$  a  $j$  ( $i \neq j$ ) a  $n$  je počet návrhových bodů.

#### 3.1.2 Maximin

Dalším kritériem upřednostňující rovnoměrné rozprostření návrhu je Maximin (*Euclidean maximin distance* - EMM) [14], jehož hodnota je pro daný návrh definována jako minimální vzdálenost ze vzájemných vzdáleností všech návrhových bodů. Jelikož platí, že čím větší vzdálenost je mezi jednotlivými body, tím lépe, minimalizujeme její zápornou hodnotu. To znamená, že každé dva návrhové body jsou od sebe vzdáleny minimálně  $E^{EMM}$  (2). Hodnoty  $L_{ij}$  jsou opět euklidovské vzdálenosti mezi  $n$  návrhovými body.

$$E^{EMM} = \min\{\dots, L_{ij}, \dots\}, i = 1 \dots n, j = (i + 1) \dots n \quad (2)$$

#### 3.1.3 $ML_2$ diskrepance

Modifikovaná  $L_2$  diskrepance ( $ML_2$ ) je kritérium používané místo časově náročnější původní  $L_\infty$  diskrepance [4], která se užívá pro přesné vyhodnocování kvadratických vzorců s více proměnnými. Její hodnota se získá ze vzorce

$$E^{ML_2} = \left(\frac{4}{3}\right)^k - \frac{2^{(1-k)}}{n} \sum_{d=1}^n \prod_{i=1}^k (3 - x_{di}^2) + \frac{1}{n^2} \sum_{d=1}^n \sum_{j=1}^n \prod_{i=1}^k [2 - \max(x_{di}, x_{ji})], \quad (3)$$

kde  $k$  je počet vstupních parametrů, tj. dimenze návrhového prostoru a  $n$  je opět počet bodů v návrhu.  $x_{di}$  a  $x_{ji}$  jsou  $i$ -té souřadnice  $d$ -tého a  $j$ -tého bodu, které jsou normalizovány tak, aby ležely na intervalu  $\langle 0;1 \rangle$ . Jelikož vyhodnocení diskrepance je pro velké návrhy časově náročné, byly vyvinuty některé efektivní algoritmy [7]. Menší hodnoty  $ML_2$  vyjadřují rovnoměrnější rozložení bodů.

### 3.1.4 D-optimalita

Kritérium D-optimality (Dopt) bylo navrženo Kirsten Smithovou roku 1918 [21] jako průkopnická práce v oboru DoE pro polynomiální regresní analýzu. Kritérium minimalizuje odchylku spojenou s odhadem koeficientů regresního modelu buď minimalizováním determinantu disperzní matice  $(Z^T Z)^{-1}$  nebo maximalizováním informační matice  $A = (Z^T Z)$ . Aby se při optimalizaci, kdy jsou všechna kritéria minimalizována, nemusela vytvářet inverzní informační matice, lze minimalizovat zápornou hodnotu determinantu informační matice, tzn.

$$E^{Dopt} = -\det(Z^T Z), \quad (4)$$

Kde  $Z$  je matice s vyhodnocenými regresními polynomiálními členy v návrhových bodech. V případě polynomiální regrese druhého řádu a dvoudimenzionálního návrhového prostoru může mít například následující podobu

$$Z = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & x_{11}^2 & x_{12}^2 & x_{11}x_{12} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & x_{21}^2 & x_{22}^2 & x_{21}x_{22} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & x_{n1}^2 & x_{n2}^2 & x_{n1}x_{n2} \end{bmatrix}, \quad (5)$$

přičemž počet sloupců matice  $Z$  je omezen počtem bodů v návrhu. Pokud je počet sloupců větší než  $n-1$ , kde  $n$  je počet bodů, stane se matice  $A$  singulární. D-optimální návrhy získané tímto postupem však někdy obsahují duplicitní body, které nemají žádnou informační hodnotu vzhledem k aproximaci odezvy modelu, a proto je vhodné jejich výskyt eliminovat. Za tímto účelem navrhli autoři Hofwing a Strömberg [10] bayesovskou modifikaci popsaného postupu, která byla v této práci aplikována.

## 3.2 Ortogonalita návrhu

Mezi nejznámější způsoby jak ohodnotit ortogonalitu návrhu patří následující dva přístupy. První z nich je založen na korelaci mezi souřadnicemi návrhových bodů a druhý používá číslo podmíněnosti.

### 3.2.1 Korelace

Pomocí korelace [11] lze vyjádřit závislost vztahu mezi náhodnými proměnnými. Lineární vztah je možné vyjádřit pomocí Pearsonova korelačního koeficientu, zatímco nelineární závislost je do jisté míry možné zachytit výpočtem Spearmanova či Kendallova koeficientu pořadové korelace.

#### Pearsonův korelační koeficient

Pearsonův korelační koeficient (*Pearson product-moment correlation coefficient* - PMCC) proměnných  $x_i$  a  $x_j$  je definován jako podíl kovariance daných proměnných a součinu jejich směrodatných odchylek, tj.

$$c_{ij} = \frac{\text{Cov}(x_i, x_j)}{\sigma_{x_i} \sigma_{x_j}} = \frac{\sum_{a=1}^n (x_{ai} - \bar{x}_i)(x_{aj} - \bar{x}_j)}{\sqrt{\sum_{a=1}^n (x_{ai} - \bar{x}_i)^2 (x_{aj} - \bar{x}_j)^2}}, \quad (6)$$

kde  $\bar{x}_i = \frac{1}{n} \sum_{a=1}^n x_{ai}$  a  $\bar{x}_j = \frac{1}{n} \sum_{a=1}^n x_{aj}$ .

Korelační koeficient nabývá hodnot  $\langle -1;1 \rangle$  a pro hledání optimálního rozložení bodů je rozhodující absolutní hodnota korelačního koeficientu, při jejíž minimalizaci se soubor bodů stává stále více ortogonálním.

V případě více proměnných dostáváme multidimenzionální návrhový prostor a korelační koeficienty se musí spočítat pro všechny dvojice parametrů. Pokud je počet parametrů  $k$ , výsledkem je symetrická korelační matice o rozměrech  $k \times k$ .

Pokud je DoE ortogonální, shoduje se korelační matice  $C$  s maticí jednotkovou. Pro obdržení ortogonálního návrhu lze minimalizovat maximum  $c_{ij}$  jako v [4] nebo součet druhých mocnin prvků nad hlavní diagonálou  $C$  jako v inženýrských softwarech [18,19] stejně jako v prezentovaných výsledcích, tzn.

$$E^{PMCC} = \sqrt{\sum_{i=1}^k \sum_{j=i+1}^k c_{ij}^2} \quad (7)$$

### Spearmanův koeficient pořadové korelace

Spearmanův koeficient pořadové korelace (*Spearman's rank correlation coefficient* - SRCC) se počítá velmi podobně jako Pearsonův korelační součinitel s tím rozdílem, že původní hodnoty jsou seřazeny a koeficient se v tomto případě počítá ze získaných pořadí podle vzorce (8), kde  $r(x_{ai})$  a  $r(x_{aj})$  vyjadřují pořadí hodnoty  $x_{ai}$ , respektive  $x_{aj}$ .

$$\rho_{ij} = 1 - \frac{6 \sum_{a=1}^n (r(x_{ai}) - r(x_{aj}))^2}{n(n^2 - 1)} \quad (8)$$

Pro více proměnných může být ortogonalita návrhu dosažena podobně jako (7).

### Kendallův koeficient pořadové korelace

Pokud se dvojice hodnot jednotlivých proměnných rozdělí na vzájemně si odpovídající ( $T_{c,ij}$ ), tedy dvojice s pozitivní korelací, a na ty, které si odporují ( $T_{d,ij}$ ) s negativní korelací, pak Kendallův koeficient pořadové korelace (*Kendall's rank correlation coefficient* - KRCC) má tvar

$$\tau_{ij} = \frac{T_{c,ij} - T_{d,ij}}{n(n-1)/2}. \quad (9)$$

Výraz  $n(n-1)/2$  se rovná počtu všech dvojic.

Ortogonalní návrh s více parametry lze opět získat obdobně jako (7).

## 3.2.2 Číslo podmíněnosti

Dalším kritériem, které se zaměřuje na ortogonalitu návrhu, je číslo podmíněnosti (*conditional number* - CN). CN je běžně užíváno v lineární algebře pro vyšetřování podmíněnosti lineárních systémů [4]. V této práci se používá číslo podmíněnosti  $X^T X$ , kde  $X$  je matice souřadnic návrhových bodů, které se říká návrhová matice

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix} \quad (10)$$

kde  $n$  je počet návrhových bodů a  $k$  je dimenze návrhového prostoru. Hodnoty ve sloupcích matice  $X$  jsou normovány na interval  $\langle -1;1 \rangle$ . Číslo podmíněnosti je definováno jako

$$E^{CN} = \text{cond}(X^T X) = \frac{\lambda_1}{\lambda_n}, \quad (11)$$

kde  $\lambda_1$  a  $\lambda_n$  jsou největší a nejmenší vlastní čísla získaná pro  $X^T X$ , tedy  $E^{CN}$  je větší nebo rovno jedné. Velké číslo podmíněnosti poukazuje na to, že řešení může být špatně podmíněné. Hodnoty blízké jedné odpovídají více ortogonálnímu návrhu. Optimálním řešením je tedy umístění bodů, kterému bude odpovídat co nejmenší číslo podmíněnosti.

## 4 Vzájemné vlastnosti optimálních návrhů

V této kapitole bylo provedeno přezkoumání kvality optimálních návrhů s ohledem na ostatní kritéria. Návrhy definované konkrétním kritériem, které zaručuje jeho dobré rozprostření nebo ortogonalitu, nemusí nutně dosahovat špatných výsledků z hlediska jiných kritérií. Pro testování vzájemných vlastností byly zvoleny tři různé situace se 7, 10 a 13 návrhovými body, které byly umísťovány do čtvercového diskrétního prostoru. Definiční obor první proměnné obsahuje vždy 10 diskrétních hodnot, druhá proměnná může nabývat 7, 10 nebo 13 hodnot podle konkrétního počtu návrhových bodů.

Optimalizace jednotlivých kritérií proběhla metodou simulovaného žíhání [15]. Tato metoda byla vybrána pro menší časovou náročnost a lepší odolnost proti uvíznutí v lokálních extrémech. Studium a implementace komplexnějších optimalizačních algoritmů vhodných pro řešení uvedených diskrétních úloh nejsou předmětem této práce.

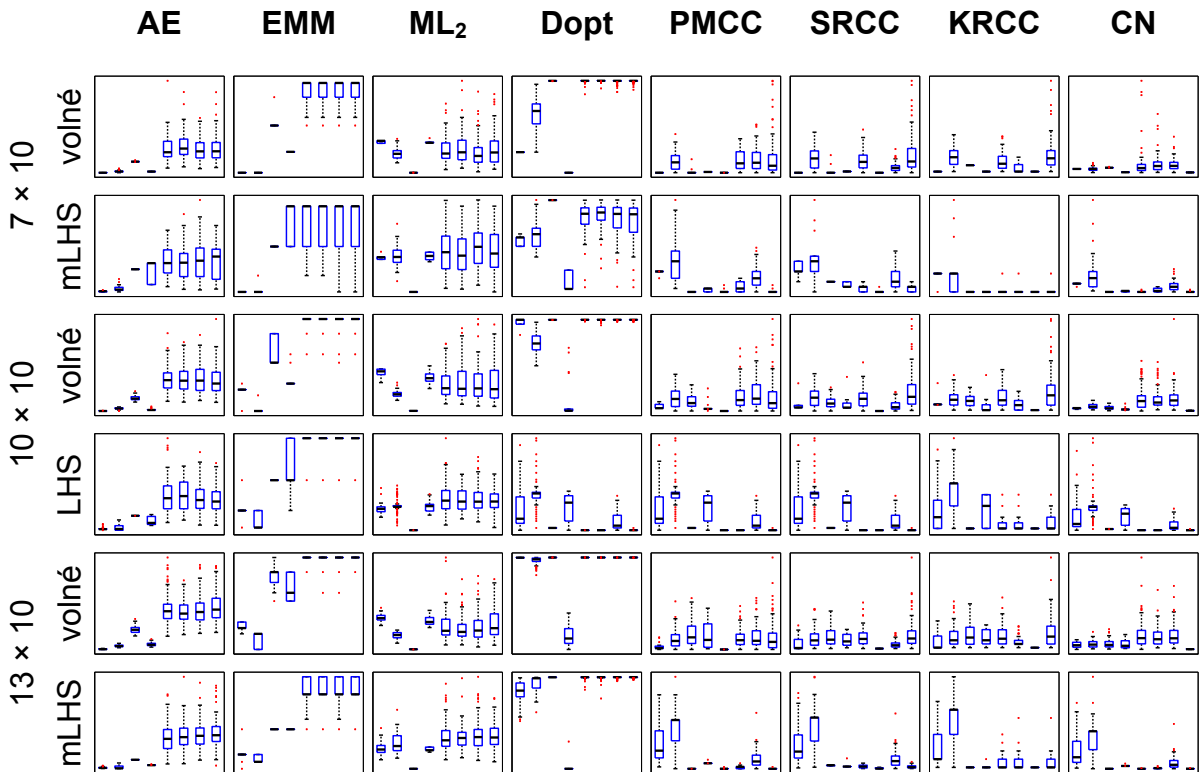
Optimalizační proces se mírně liší pro neomezené a pro LHS návrhy. Zatímco v prvním případě se v každém iteračním kroku algoritmu vybere návrhový bod a přemístí se do náhodně zvolené volné pozice, v druhém případě algoritmus vybírá náhodně dva body a poté prohodí jejich náhodně vybrané souřadnice. Akceptování nového řešení je závislé na pravděpodobnosti určenou Metropolisovým kritériem

$$P = \exp\left(\frac{f_p - f_n}{T}\right) \geq U, \quad (12)$$

Kde  $f_p$  a  $f_n$  jsou hodnoty kritéria pro původní, respektive nové řešení.  $T$  označuje teplotu systému, která je původně nastavena na  $T_{\max} = 10^{-3}$  a postupně je snižována násobením konstantou  $T_{\text{mult}} = (T_{\max} / 10^{-6})^{1/100}$ . Teplotní hladina se snižuje po každých  $\text{count} = \text{iter}_{\max}/10$  iteracích nebo dříve, když počet přijatých řešení  $\text{succ}$  při dané teplotě dosáhne hodnoty  $\text{iter}_{\max}/100$ . Celkový počet iterací byl  $\text{iter}_{\max} = 10^6$ .

Výsledné návrhy nemusí být vždy globálním optimem, ale tato skutečnost, kdy dochází k častějšímu padání do lokálních extrémů, také poukazuje na nedokonalost daného kritéria. Proto byly výsledky získané simulovaným žíháním dostačující.

Celkově bylo získáno 100 optimálních návrhů každého kritéria, které byly ukládány a následně ohodnoceny všemi zbývajících kritérii. Pro grafické znázornění statistického rozložení výsledků byly použity krabicové grafy (angl. *boxplot*), viz. Obr. 4. V rámci sloupců každý obdélník obsahuje grafy s výsledným rozložením hodnot příslušného kritéria, kterým byl ohodnocen jeho vlastní optimální návrh i optimální návrhy ostatních kritérií. Grafy s hodnotami náležitými návrhům jednotlivých kritérií jsou v obdélnících seřazeny stejným způsobem jako ve sloupcích: AE, EMM,  $ML_2$ , Dopt, PMCC, SRCC, KRCC a CN. V závislosti na hodnotách konkrétního kritéria se mění v jednotlivých grafech měřítko. Grafy jsou po řadách uspořádány vzhledem k velikosti návrhového prostoru a typu omezení návrhů. Všechna kritéria jsou minimalizována, a tedy menších hodnot dosahují lepší návrhy.



Obr. 4: Krabicové grafy s výsledky vzájemných vlastností optimálních návrhů uspořádané ve sloupcích podle hodnotícího kritéria.

Z uvedených krabicových grafů se vzájemnými hodnotami všech kritérií lze dojít k následujícím závěrům:

Minimalizování neortogonality není obtížné. Dosvědčují to výsledné návrhy optimalizované z hlediska dobrého rozprostření návrhu, které jsou často téměř ortogonální. Ovšem rozprostření návrhů, pro které byla použita kritéria hodnotící ortogonalitu, není rovnoměrné, a tedy tyto návrhy špatně pokrývají návrhový prostor.

Podobné vlastnosti mají návrhy kritérií AE a EMM. Kvalita jejich návrhů je vzhledem k oběma kritériím dobrá, ale horších vlastností dosahují při ohodnocení kritérii  $ML_2$  a Dopt. Optimální AE návrhy jsou trochu méně ortogonální a v případě LHS návrhů se jejich ortogonalita ještě zhoršuje, k čemuž dochází i u optimálních LHS návrhů kritéria EMM.

Kritérium  $ML_2$  definuje návrhy průměrné až horší kvality s ohledem na všechna ostatní kritéria hodnotící pokrytí návrhového prostoru, ovšem jejich míra ortogonality je dobrá. Při použití LHS podmínek se míra ortogonality návrhů ještě zvyšuje.

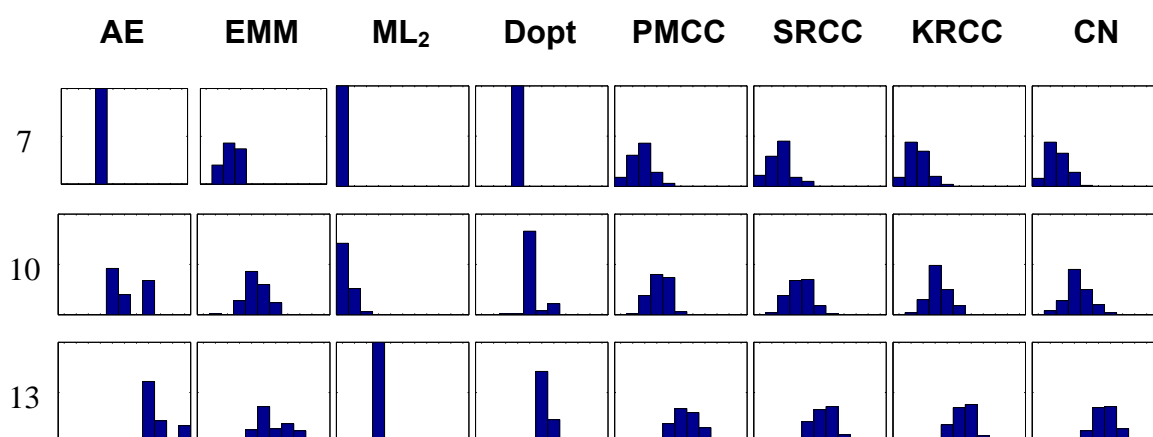
D-optimální je ojedinělým kritériem, jelikož všechny optimální návrhy ostatních kritérií nejsou zdaleka D-optimální. Na druhou stranu D-optimální návrhy mají velmi dobré vlastnosti z hlediska kritéria AE a průměrné s ohledem na kritéria EMM a  $ML_2$ . Tyto vlastnosti se mírně zhoršují při dodržování LHS podmínek. Účinek aplikování LHS podmínek na ortogonalitu D-optimálních návrhů není zřejmý. V případě s 10 návrhovými body se při použití LHS podmínek ortogonalita návrhu zhoršuje, naopak při 13 návrhových bodech dochází ke zlepšení. V zásadě D-optimální návrhy dosahují dobré až velmi dobré míry ortogonality.

Při optimalizaci všech kritérií zaměřených na ortogonalitu (PMCC, SRCC, KRCC a CN) jsou výsledné návrhy velmi špatně rozprostřeny po návrhovém prostoru a tento nedostatek se jen mírně snižuje při použití LHS podmínek. Zajímavé je, že

tyto návrhy nejsou dobře ohodnoceny dokonce ani ostatními kritérii hodnotícími ortogonalitu návrhu.

## 5 Promítací vlastnosti

V případě LHS návrhů jsou promítací vlastnosti jasně dány, jelikož se v těchto návrzích jednotlivé hodnoty parametrů neopakují. Pro posouzení promítacích vlastností volných optimálních návrhů byl původně dvoudimenzionální návrh promítnut do jedné dimenze, vždy byly odebírány hodnoty parametru s měnícím se definičním oborem. Každý návrhový bod je v tuto chvíli definován pouze jednou souřadnicí v hodnotách od 1 do 10. Dobré promítací vlastnosti má takový návrh, který po promítnutí obsahuje minimum duplicitních bodů. Při počtu 7 a 10 přípustných hodnot odebraného parametru může návrh po promítnutí zůstat bez duplicitních bodů, ale v případě 13 přípustných hodnot je minimální počet překrývajících se bodů tři.



Obr. 5: Četnosti promítnutých návrhů s příslušným počtem zbytečných simulací.

Výsledky jsou zobrazeny v podobě histogramů (viz. Obr. 5), které ukazují četnost optimálních návrhů kritéria příslušícího k danému sloupci pro konkrétní počet návrhových bodů bez informační hodnoty neboli počet zbytečných simulací. Osa četnosti je v mezích 1 až 100 a počet zbytečných simulací na vodorovné ose 0 až 10. V řádcích jsou histogramy uspořádány podle původního rozsahu odebraného parametru. Pro zvýšení transparentnosti výsledků jsou v Tab. 1 připojeny průměrné počty zbytečných simulací připadající na jeden návrh.

Tab. 1 Průměrný počet zbytečných simulací.

	AE	EMM	ML <sub>2</sub>	Dopt	PMCC	SRCC	KRCC	CN
7	3,00	2,17	0,00	3,00	1,71	1,67	1,52	1,56
10	5,22	4,37	0,32	4,23	3,22	3,33	3,24	3,29
13	7,73	5,81	3,00	5,20	5,42	5,32	5,35	5,57
celkem	<b>5,32</b>	<b>4,12</b>	<b>1,11</b>	<b>4,14</b>	<b>3,45</b>	<b>3,44</b>	<b>3,37</b>	<b>3,47</b>

Z uvedených výsledků je patrné prvenství optimálních návrhů kritéria ML<sub>2</sub>, které po průmětu do prostoru s menším počtem dimenzí obsahují nejméně duplicitních

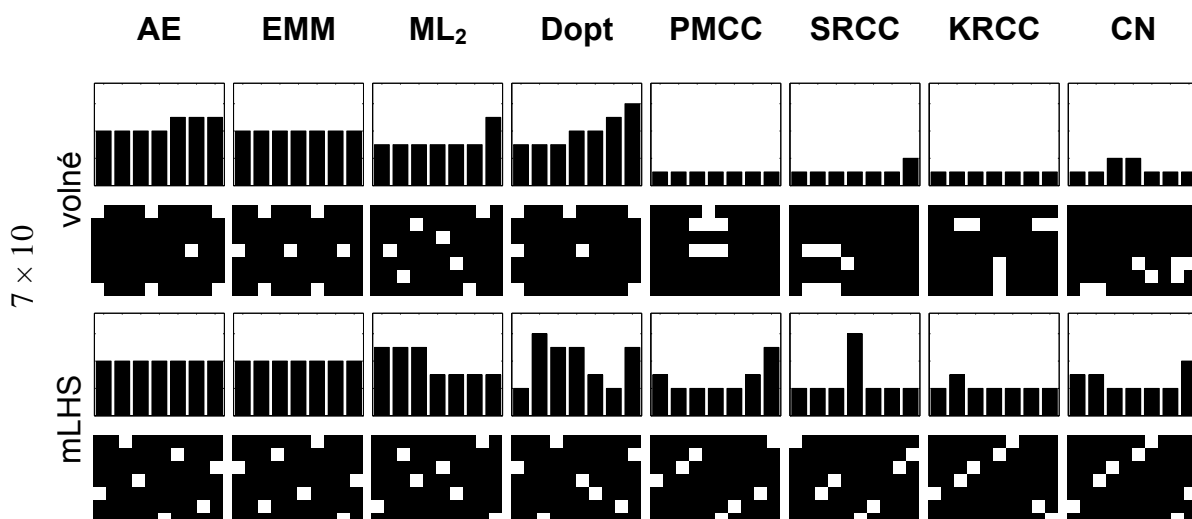
bodů, v případě 7 a 13 přípustných hodnot odebraného parametru dokonce naprosté minimum. Kritérium  $ML_2$  tedy definuje návrhy mající nejlepší promítací vlastnosti ze všech zkoumaných optimálních návrhů. Navzájem velmi podobných výsledků dosáhly optimální návrhy všech kritérií hodnotící ortogonalitu, které se společně řadí na druhé místo. Optimální návrhy kritérií EMM a Dopt nemají dobré promítací vlastnosti a zcela nejhorších výsledků dosáhly optimální návrhy kritéria AE, u kterých se po promítnutí překrývá v průměru více než polovina návrhových bodů.

## 6 Minimální vzdálenosti

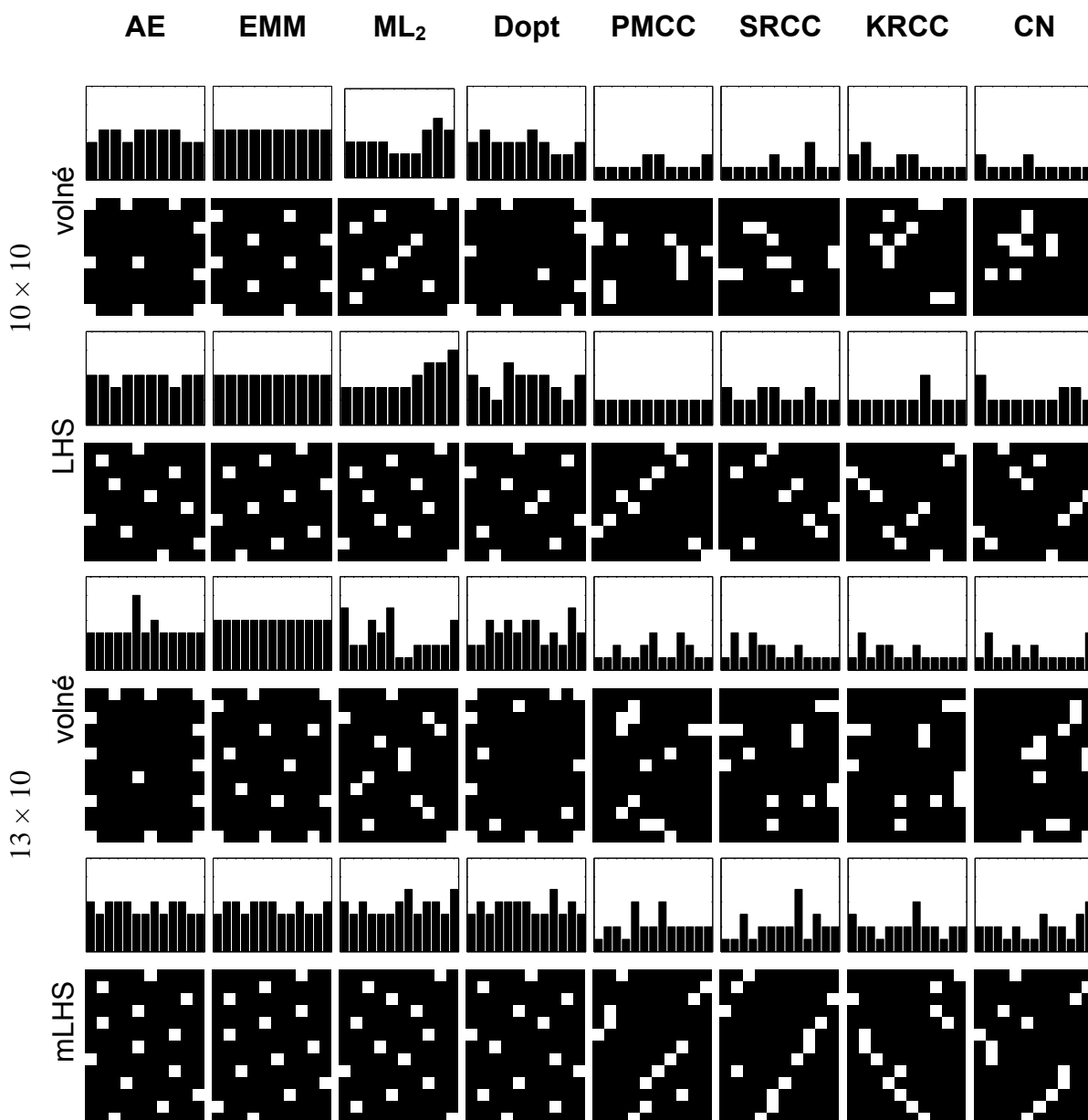
Jelikož blízké body v návrhu jsou v určité míře redundantní z hlediska informace, kterou přináší o zkoumaném modelu, je cílem vytvořit návrh, kde budou body od sebe v co největší vzdálenosti. Toto hledisko sice úzce souvisí s kritérii hodnotícími rozprostřenost návrhu, ale žádné kritérium není formulováno tak, aby toto hledisko hodnotilo přímo. Proto jsou následně uvedeny výsledky z hlediska minimálních vzájemných vzdáleností bodů.

Ze získaných optimálních návrhů byly vybrány ty, které měly nejmenší součet minimálních vzdáleností s cílem ukázat nejhorší výsledek, který jednotlivá kritéria hodnotí jako optimální. Vzdálenosti se stanovily pro všechny kombinace bodů a pro každý bod se uvažovalo minimum ze všech vzdáleností k ostatním bodům. Tyto hodnoty jsou vyneseny ve sloupcových grafech na Obr. 6a a 6b, kde je vždy připojen i odpovídající optimální návrh v grafické podobě.

V tomto testu nebyly příliš úspěšné korelační koeficienty PMCC, SRCC a KRCC a číslo podmíněnosti, které v průměru dosahují nejmenších hodnot minimálních vzdáleností, což vede k větším shlukům bodů, v některých případech k sobě body přímo přiléhají. Tuto vadu zmírňuje použití LHS podmínky. Lepšího rozprostření bodů a tudíž i větších hodnot minimálních vzdáleností dosahují kritéria Dopt a  $ML_2$ . Nejlepšími výsledky se dle očekávání pyšní kritéria AE a EMM, jejichž optimální návrhy na první pohled dobře pokrývají návrhový prostor, o čemž také vypovídají vyrovnané hodnoty minimálních vzdáleností, které v průměru dosahují největších hodnot.



Obr. 6a: Optimální návrhy a odpovídající sloupcové grafy minimálních vzdáleností.



Obr. 6b: Optimální návrhy a odpovídající sloupcové grafy minimálních vzdáleností.

## 7 Citlivostní analýza na sadě matematických funkcí

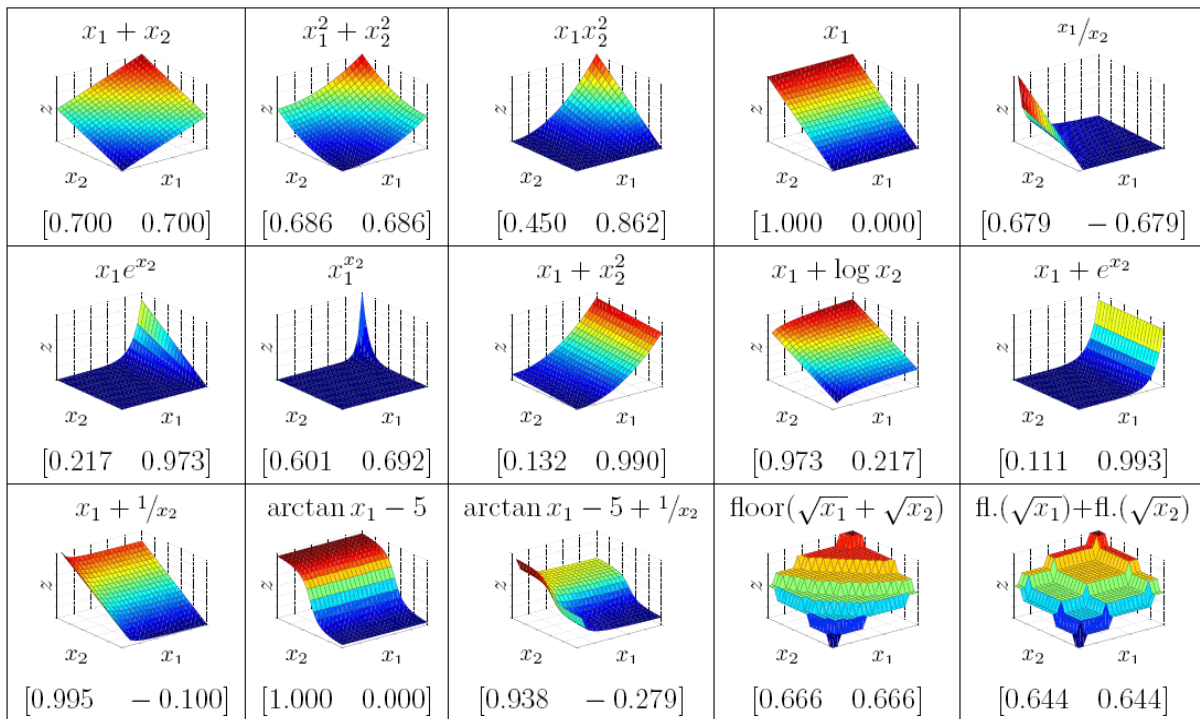
Mezi první kroky při formulaci meta-modelu patří stanovení důležitých parametrů s významným vlivem na odezvu zkoumaného modelu. Toto se běžně provádí pomocí citlivostní analýzy, ve které je vhodné použití SRCC pro jeho velmi dobrou schopnost určit vztah mezi vstupními a výstupními hodnotami nelineárních monotónních modelů [9]. Pokud máme numerický model  $z = f(x_1, x_2, \dots, x_k)$  s odezvou modelu  $z$  a parametry  $x_i$ , vliv parametru  $x_i$  na odezvu modelu  $z$  lze ohodnotit Spearmanovým koeficientem pořadové korelace  $\rho_{x_i, z}$  podle

$$\rho_{x_i, z} = 1 - \frac{6 \sum_{a=1}^n (r(x_{ai}) - r(z_a))^2}{n(n^2 - 1)}, \quad (13)$$



kde  $x_{a,i}$  jsou hodnoty parametrů modelu odpovídající bodům DoE a  $z_a$  jsou hodnoty odezvy modelu odpovídající těmto parametrům. Hodnotám  $x_{a,i}$  a  $z_a$  náleží pořadí  $r(x_{a,i})$  a  $r(z_a)$ , ze kterých je počítána příslušná citlivost.

Z tohoto důvodu se další zkoumání kritérií zaměří na schopnost optimálních návrhů stanovit SRCC mezi každým parametrem a modelovou odezvou. Jelikož většina numerických modelů v inženýrské praxi splňuje podmínku monotónního vztahu mezi modelovými parametry a odezvou modelu, byla pro porovnání vhodnosti optimálních návrhů pro stochastickou citlivostní analýzu zvolena sada nelineárních monotónních funkcí. Bylo uvažováno několik jednoduchých modelů se dvěma diskrétními parametry, jeden parametr může nabývat vždy 10 možných hodnot, zatímco velikost definičního oboru druhého parametru se mění ve třech variantách a to na 7, 10 a 13 možných hodnot. Na Obr. 7 jsou uvedeny tvary vybraných modelů v čtvercovém prostoru  $10 \times 10$  a dále jsou připojeny odpovídající hodnoty citlivosti vyjádřené pomocí SRCC a obdržené pro plný neboli plně faktoriální návrh čítající všech 100 bodů.



Obr. 7: Tvary 15 funkcí pro citlivostní analýzu s odpovídajícími hodnotami korelací mezi vstupními a výstupními hodnotami.

Citlivostní analýza byla provedena pro všechny získané optimální návrhy. Byly vypočteny rozdíly mezi korelacemi  $\tilde{\rho}$  získanými optimálními návrhy a korelacemi  $\rho$  získanými plným návrhem. Výslednou chybu  $\varepsilon$  v odhadu citlivosti pro danou funkci, jejíž průměrná a maximální hodnota je uvedena v Tab. 2, tvoří průměrný rozdíl mezi každým parametrem a odezvou modelu získanou pro optimální a plný návrh, tj.

$$\varepsilon = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k |\tilde{\rho}_{x_i, z} - \rho_{x_i, z}|. \quad (14)$$

Tab. 2 Průměrné a maximální chyby v predikci citlivosti teoretických modelů pro základní optimální návrhy.

		<b>AE</b>	<b>EMM</b>	<b>ML<sub>2</sub></b>	<b>Dopt</b>	<b>PMCC</b>	<b>SRCC</b>	<b>KRCC</b>	<b>CN</b>
		$\mu$ max	$\mu$ max	$\mu$ max	$\mu$ max	$\mu$ max	$\mu$ max	$\mu$ max	$\mu$ max
volné	7 × 10	6,7 18,0	8,5 34,5	8,4 36,3	7,8 41,2	10,5 59,3	9,7 60,8	9,4 51,8	12,2 76,6
	10 × 10	5,9 32,0	6,2 29,4	5,1 20,5	4,5 33,6	8,4 51,4	7,3 48,5	7,5 46,5	8,6 59,9
	13 × 10	5,3 30,8	4,7 24,9	4,6 20,8	4,8 29,7	6,8 47,1	5,6 37,0	6,1 39,9	6,9 39,6
	celkem	<b>6,0 32,0</b>	<b>6,5 34,5</b>	<b>6,0 36,3</b>	<b>5,7 41,2</b>	<b>8,6 59,3</b>	<b>7,5 60,8</b>	<b>7,7 51,8</b>	<b>9,2 76,6</b>
LHS	7 × 10	9,0 20,6	11,9 37,3	8,5 20,8	7,0 21,9	7,6 37,3	7,4 39,1	8,8 40,5	7,9 42,9
	10 × 10	6,7 28,9	9,8 31,1	4,5 11,2	6,8 20,3	5,5 31,4	5,8 28,4	5,6 33,0	5,3 30,7
	13 × 10	5,2 20,0	8,7 22,5	3,3 8,9	2,8 11,6	4,4 22,7	4,3 24,9	4,9 32,2	4,6 29,1
	celkem	<b>7,0 28,9</b>	<b>10,1 37,3</b>	<b>5,4 20,8</b>	<b>5,5 21,9</b>	<b>5,8 37,3</b>	<b>5,8 39,1</b>	<b>6,4 40,5</b>	<b>5,9 42,9</b>

Z uvedených výsledků citlivostní analýzy na teoretických modelech lze udělat následující závěry:

- Nejlepších výsledků dosahují optimální LHS návrhy kritérií ML<sub>2</sub> a Dopt a to nejen z hlediska průměrně dosažených chyb v predikci citlivosti, ale i pro jejich malou odchylku.
- D-optimální volné návrhy mají také velmi dobré výsledky ale s velkou odchylkou. Volné návrhy kritéria ML<sub>2</sub> jsou trochu horší v průměrných výsledcích, ale velikost odchylky je velmi podobná jako u D-optimálních návrhů.
- Neomezené návrhy kritérií AE a EMM jsou dobré, ale optimální návrhy těchto kritérií dodržující LHS podmínky dosahují špatných výsledků. Odchylka je vysoká u obou typů návrhů.
- Kritéria založená na ortogonalitě optimalizovaná bez podmínek LHS definují návrhy, které jsou nejen špatně rozprostřené, ale jejich použití pro citlivostní analýzu není příliš vhodné především kvůli jejich nadměrné odchylce ve výsledných chybách. Chyby mohou být značně zmenšeny použitím LHS podmínek, nicméně odchylka je přesto velmi vysoká.

## 8 Závěr

Cílem této práce je prozkoumat různé možnosti hodnocení návrhu experimentů a prověřit, které hledisko je důležité, pokud chceme jeho optimální návrh použít pro vyhodnocení citlivostní analýzy. Konkrétně byla studována kritéria: Audze-Eglais, Maximin, ML<sub>2</sub> diskrepance a D-optimalita, které jsou zaměřeny na tvorbu návrhů rovnoměrně pokrývajících návrhový prostor. Další větší skupinou studovaných kritérií jsou korelační koeficienty (Pearsonův, Spearmanův a Kendallův) a také číslo podmínek, které hodnotí ortogonalitu daného návrhu.

Pro všechna tato kritéria jsou získány jejich neomezené i LHS optimální návrhy, u nichž je zkoumána jejich kvalita vzájemných vlastností, minimální vzdálenost mezi návrhovými body a promítací vlastnosti. Získané návrhy jsou nakonec použity pro stochastickou citlivostní analýzu 15 teoretických modelů. Následující odstavce shrnují

uvedený rozbor optimálních návrhů, přičemž další výsledky získané v průběhu tohoto výzkumu jsou například v [12,13].

Špatné výsledky ve všech provedených testech má kritérium CN. Jeho optimální návrhy jsou velmi špatně rozprostřené v návrhovém prostoru, s čímž souvisí i velké chyby na odhadech citlivosti všech vybraných modelů při použití těchto návrhů.

Optimální návrhy ostatních kritérií ortogonalitu návrhů, tj. PMCC, SRCC a KRCC, špatně pokrývají návrhový prostor, což se příliš nezlepšuje ani při použití LHS podmínek. Neomezené návrhy nedokážou zaručit dobrý odhad citlivosti modelů, zatímco LHS návrhy jsou v tomto ohledu úspěšnější. Ovšem použití těchto LHS návrhů nezajišťuje velkou přesnost, protože získané výsledky v SSA mají velké odchylky.

Jednoduchým výkladem a časově nenáročným výpočtem jsou charakteristická kritéria AE a EMM. Návrhy těchto kritérií mají velmi podobné vlastnosti, dobře pokrývají návrhový prostor a z hlediska ortogonalitu dosahují průměrných výsledků. Použití těchto návrhů v SSA vede k velmi dobrým výsledkům s malými odchylkami. Pokud jde o vzájemné porovnání výsledků v SSA mezi těmito dvěma kritérii, lepších výsledků dosahují návrhy kritéria AE. Při aplikaci LHS podmínek dochází ke zhoršení výsledků u obou kritérií.

Nakonec jsou zmíněna kritéria definující návrhy s nejlepšími výsledky v odhadu citlivosti odezvy modelu na parametr a to jsou kritéria Dopt a  $ML_2$ . Návrhy obou kritérií nemají tak dobré rozprostření jako návrhy AE a EMM, ale jsou téměř ortogonální. V případě LHS návrhů se výsledky obou kritérií ještě zlepšují. Vyrovnaných výsledků v SSA dosáhly návrhy  $ML_2$ . Důležitou nevýhodou Dopt je její formulace a optimalizace. Kromě toho, že toto kritérium se potýká s velkým množstvím lokálních extrémů, hlavním úskalím je především nutnost manuálního nastavení bayesovské modifikace pro eliminaci duplicitních nebo velmi blízkých bodů.

Závěrem se tedy po uvážení všech zjištěných vlastností optimálních návrhů ukazuje jako nejvhodnější pro generování návrhů experimentů pro stochastickou citlivostní analýzu kritérium  $ML_2$ . Toto kritérium není příliš známé, ale jeho optimální návrhy mají vynikající kvalitu pro stanovení citlivosti odezvy modelu na parametry, která se ještě zlepšuje při kombinaci kritéria s LHS podmínkou. Tento typ návrhů je navíc výrazně snadnější pro optimalizaci, proto jej lze doporučit pro praktické využití.

## Literatura

- [1] Audze, P., Eglais, V. *New approach for planning out of experiments*. Problems of Dynamics and Strengths, ročník 35: s. 104-107. 1977
- [2] Banks, J. (editor) *Handbook of Simulation: Principles, Methodology, Advances, Applications, and Practice*. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc. 2007
- [3] Bursztyn, D., Steinberg, D. M. *Comparison of designs for computer experiments*. Journal of Statistical Planning and Inference, roč. 136, č. 3: s. 1103-1119. 2006
- [4] Cioppa, T. M., Lucas, T. *Efficient Nearly Orthogonal and Space-Filling Latin Hypercubes*. Technometrics, ročník 49, č. 1: s. 45-55. 2007
- [5] Crombecq, K., Laermans, E., Dhaene, T. *Efficient space-filling and non-collapsing sequential design strategies for simulation-based modeling*. European Journal of Operational Research, ročník 214, č. 3: s. 683-696. 2011
- [6] van Dam, E., Husslage, B. M., den Hertog, D. *One-dimensional nested maximin designs*. CentER Discussion Paper, č. 2004-66: str. 14. 2004

- [7] Heinrich, S. *Efficient Algorithms for Computing the  $L_2$ -discrepancy*. Math Comput, ročník 65, č. 216: s. 1621-1633. 1996
- [8] Helton, J., Johnson, J., Oberkampf, W. *Sensitivity analysis in conjunction of with evidence theory representations epistemic uncertainty*. Reliab Eng Syst Safe, ročník 91, č. 10-11: s. 1414-1434. 2006
- [9] Helton, J., Johnson, J., Sallaberry, C. *Survey of sampling-based methods for uncertainty and sensitivity analysis*. Reliab Eng Syst Safe, ročník 91, č. 10-11: s. 1175-1209. 2006
- [10] Hofwing, M., Strömberg, N. *D-optimality of non-regular design spaces by using a Bayesian modification and a hybrid method*. Structural and Multidisciplinary Optimization, ročník 42, č. 1: s. 73-88. 2010
- [11] Holmes, P. *Correlation: From Picture to Formula*. Teaching Statistics, ročník 23, č. 3: s. 67-71. 2001
- [12] Janouchová, E. *Návrh experimentů pro stochastickou citlivostní analýzu*, [online, cit. 2012-05-08]. 2012  
URL <[http://klobouk.fsv.cvut.cz/~anicka/bazant/works/2012\\_janouchova.pdf](http://klobouk.fsv.cvut.cz/~anicka/bazant/works/2012_janouchova.pdf)>
- [13] Janouchová, E., Kučerová, A. *Competitive Comparison of Optimal Designs of Experiments for Sampling-based Sensitivity Analysis*. Computers & Structures, odesláno k publikaci, e-print: arXiv: 1201.0942. 2011
- [14] Johnson, M., Moore, L., Ylvisaker, D. *Minimax and maximin distance designs*. Journal of Statistical Planning and Inference, ročník 26, č. 2: s. 131-148. 1990
- [15] Kirkpatrick, S., Gelatt, C., Jr., Vecchi, M. P. *Optimization by Simulated Annealing*. Science, ročník 220: s. 671-680. 1983
- [16] Kučerová, A., *Identification of nonlinear mechanical model parameters based on soft computing methods*. Dizertační práce, Ecole Normale Supérieure de Cachan, Laboratoire de Mécanique et Technologie. 2007
- [17] McKay, M. D., Beckman, R. J., Conover, W. J. *A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code*. Technometrics, ročník 21, č. 2: s. 239-245. 1979
- [18] Novák, D., Vořechovský M., Rusina, M. *FReET v. 1.5 – program documentation*, [online, cit. 2012-03-31]. Brno/Červenka consulting. 2011  
URL <<http://www.freet.cz>>
- [19] Novák, J. *Generator of optimal LHS designs SPERM v. 2.0*, [online, cit. 2012-03-31]. Centre for Integrated Design of Advanced Structures. 2011  
URL <[http://www.cideas.cz/ke\\_stazeni/sperm/index.htm](http://www.cideas.cz/ke_stazeni/sperm/index.htm)>
- [20] Saltelli, A., Chan, K., Scott, E. M. *Sensitivity analysis*. NY:Wiley. 2000
- [21] Smith, K. *On the standard deviations and interpolated values of an observed polynomial function and its constants and the guidance they give towards a proper choice of the distribution of observations*. Biometrika, ročník 1/2: s.1-85. 1918
- [22] Toropov, V., Bates, S., Querin, O. *Generation of Extended Uniform Latin Hypercube Designs of Experiments*. In Proceedings of the Ninth International Conference on the Application of Artificial Intelligence to Civil, Structural and Environmental Engineering, editace B. Topping, Civil-Comp Press. 2007