

ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE  
FAKULTA STAVEBNÍ

# NÁVRHY EXPERIMENTŮ PRO STOCHASTICKOU CITLIVOSTNÍ ANALÝZU

Autorka:

ELIŠKA JANOUCHOVÁ

Vedoucí práce:

Ing. ANIČKA KUČEROVÁ, Ph.D.

25. dubna 2012

---

# 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.

## Klíčová slova

návrh experimentů, stochastická citlivostní analýza, počítačové experimenty, optimalizace návrhu, sekvenční návrhy, vnořené návrhy, smíšené návrhy, vyplnění prostoru, ortogonalita, promítací vlastnost

---

# 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.

# Keywords

design of experiments, sampling-based sensitivity analysis, computer experiments, optimization of design, sequential designs, nested designs, mixed designs, space-filling, orthogonality, projective property

# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod</b>	<b>10</b>
<b>2</b>	<b>Návrh experimentů</b>	<b>12</b>
2.1	Požadované vlastnosti DoE . . . . .	12
2.2	Metody tvoření návrhů . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Přehled kritérií</b>	<b>19</b>
3.1	Rovnoměrné pokrytí návrhu . . . . .	19
3.1.1	Kritérium minimální potenciální energie Audze-Eglais . . . . .	19
3.1.2	Maximin . . . . .	20
3.1.3	$ML_2$ diskrepance . . . . .	20
3.1.4	D-optimalita . . . . .	20
3.2	Ortogonalita návrhu . . . . .	22
3.2.1	Korelace . . . . .	22
3.2.2	Číslo podmíněnosti . . . . .	25
<b>4</b>	<b>Implementace kritérií</b>	<b>27</b>
<b>5</b>	<b>Optimalizační metoda</b>	<b>32</b>
<b>6</b>	<b>Porovnání kritérií</b>	<b>35</b>
6.1	Grafické porovnání . . . . .	35
6.1.1	Plocha kritéria pro doplnění 4. bodu . . . . .	36
6.1.2	Plocha kritéria pro doplnění 5. bodu . . . . .	37
6.2	Vzájemné vlastnosti optimálních návrhů . . . . .	37
6.3	Minimální vzdálenosti . . . . .	39
6.4	Promítací vlastnosti . . . . .	41
<b>7</b>	<b>Sekvenční návrhy</b>	<b>43</b>
<b>8</b>	<b>Citlivostní analýza na sadě matematických funkcí</b>	<b>46</b>
<b>9</b>	<b>Citlivostní analýza na prutových konstrukcích</b>	<b>51</b>

10 Závěr	55
A Kód použitého optimalizačního algoritmu	61
B Podrobné výsledky SSA na matematických funkcích	65
C Porovnání výsledků SSA pro různé typy návrhů	73
D Návrh experimentů pro trénování neuronových sítí	76

# Seznam tabulek

4.1	Průměrné časy v sekundách pro 1000 vyhodnocení PMCC, SRCC a KRCC návrhu s 10 body o dvou souřadnicích (a) a 30 body o šesti souřadnicích (b).	31
6.1	Průměrný počet zbytečných simulací. . . . .	42
8.1	Průměrné a maximální chyby v predikci citlivosti teoretických modelů pro základní optimální návrhy. . . . .	48
8.2	Průměrné a maximální chyby v predikci citlivosti teoretických modelů pro sekvenční optimální návrhy. . . . .	49
9.1	Materiálové charakteristiky a zatížení konstrukce. . . . .	51
9.2	Materiálové charakteristiky konstrukce. . . . .	52
9.3	Zatížení konstrukce v jednotkách kip. . . . .	52
9.4	Průměrné a maximální chyby v predikci citlivosti konstrukčních modelů. . .	53
B.1	Výsledky SSA teoretických modelů při použití návrhů s deseti body. . . . .	65
B.2	Výsledky SSA teoretických modelů při použití LHS návrhů s deseti body. . .	66
B.3	Výsledky SSA teoretických modelů při použití návrhů se sedmi body. . . . .	66
B.4	Výsledky SSA teoretických modelů při použití LHS návrhů se sedmi body. . .	67
B.5	Výsledky SSA teoretických modelů při použití návrhů se třinácti body. . . .	67
B.6	Výsledky SSA teoretických modelů při použití LHS návrhů se třinácti body. .	68
B.7	SSA teoretických modelů: sekvenční volné návrhy s 20 body - 1. metoda. . .	68
B.8	SSA teoretických modelů: sekvenční volné návrhy s 30 body - 1. metoda. . .	69
B.9	SSA teoretických modelů: sekvenční volné návrhy se 40 body - 1. metoda. . .	69
B.10	SSA teoretických modelů: sekvenční LHS návrhy s 20 body - 1. metoda. . . .	70
B.11	SSA teoretických modelů: sekvenční LHS návrhy se 30 body - 1. metoda. . .	70
B.12	SSA teoretických modelů: sekvenční LHS návrhy se 40 body - 1. metoda. . .	71
B.13	SSA teoretických modelů: sekvenční LHS návrhy s 20 body - 2. metoda. . . .	71
B.14	SSA teoretických modelů: sekvenční LHS návrhy s 30 body - 2. metoda. . . .	72
B.15	SSA teoretických modelů: sekvenční LHS návrhy se 40 body - 2. metoda. . .	72
C.1	Průměrné a maximální chyby v predikci citlivosti teoretických modelů pro optimální $ML_2$ návrhy, řídké mřížky a náhodné návrhy. . . . .	74

C.2	Výsledky SSA: průměrné a maximální chyby v odhadu citlivosti. . . . .	75
D.1	Přehled parametrů hydratačního modelu. . . . .	76

# Seznam obrázků

1.1	Princip návrhu experimentů a vyhodnocení simulací. . . . .	10
2.1	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). . . . .	15
2.2	Typy faktoriálních návrhů: plně faktoriální (a), částečně faktoriální (b) a centrálně kompozitní (c). . . . .	16
2.3	Princip prohazování bodů v návrhovém prostoru. . . . .	17
3.1	Plochy Dopt a odpovídající matice $\mathbf{Z}$ . . . . .	22
3.2	Příklady souborů bodů o souřadnicích $[x_1; x_2]$ vyjádřeny graficky a pomocí korelačního koeficientu. . . . .	23
3.3	Plochy korelační matice. . . . .	24
3.4	Rozmístění bodů: (a) $x_2 = x_1^2$ a (b) $x_2 = 10x_1$ . . . . .	25
5.1	Vývojový diagram simulovaného žíhání. . . . .	33
5.2	Simulované žíhání umožňuje únik z lokálních extrémů. . . . .	34
6.1	Tvar jednotlivých kritérií pro různé polohy 4. bodu. . . . .	36
6.2	Tvar jednotlivých metrik pro různé polohy 5. bodu. . . . .	37
6.3	Krabicové grafy s výsledky vzájemných vlastností optimálních návrhů uspořádané ve sloupcích podle hodnotícího kritéria. . . . .	38
6.4	Krabicové grafy s výsledky vzájemných vlastností optimálních návrhů uspořádané ve sloupcích podle optimálního návrhu daného kritéria . . . . .	39
6.5	Nejhorší optimální návrhy z hlediska součtu minimálních vzdáleností a odpovídající sloupcové grafy minimálních vzdáleností. . . . .	40
6.6	Četnosti promítnutých návrhů s příslušným počtem zbytečných simulací. . . . .	41
7.1	Neomezené sekvenční návrhy. . . . .	44
7.2	Neomezené sekvenční návrhy s výchozími LHS návrhy. . . . .	45
7.3	Sekvenční mLHS návrhy s výchozími LHS návrhy. . . . .	45
8.1	Tvary 15 funkcí pro citlivostní analýzu s odpovídajícími hodnotami korelací mezi vstupními a výstupními hodnotami. . . . .	47

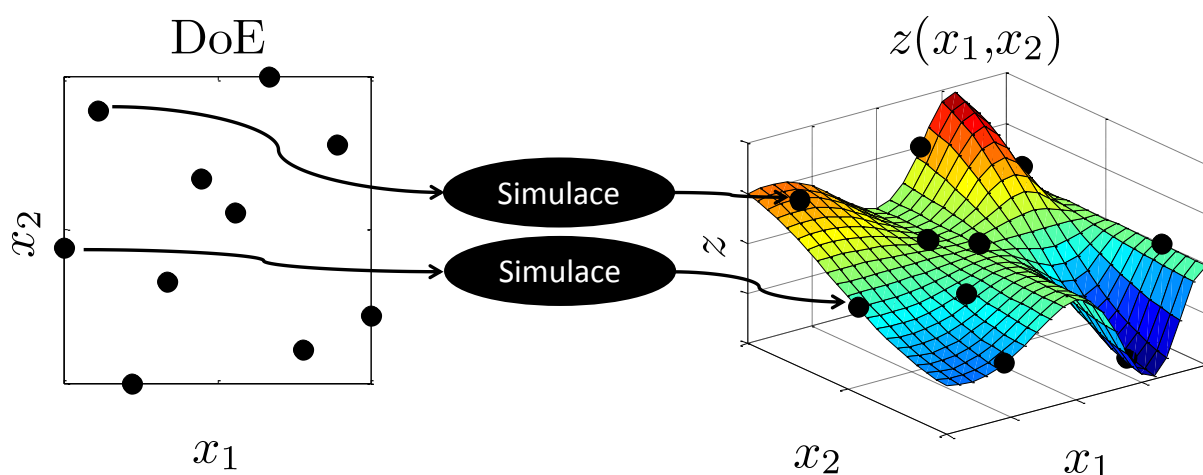


8.2	Krabicové grafy s výsledky základních optimálních návrhů v odhadu citlivosti teoretických modelů na vstupní parametry. . . . .	48
8.3	Krabicové grafy s výsledky sekvenčních optimálních návrhů v odhadu citlivosti teoretických modelů na vstupní parametry. . . . .	50
9.1	Schéma řešení konstrukce. . . . .	51
9.2	Schéma řešení konstrukce. . . . .	52
9.3	Krabicové grafy s výsledky citlivostní analýzy na konstrukčních modelech. . .	52
C.1	Sparse gridy metody KPU s úrovní přesnosti: 2 (a), 3 (b), 4 (c) a 5 (d). . . . .	73
C.2	Sparse gridy metody GQU s úrovní přesnosti: 2 (a), 3 (b) a 4 (c). . . . .	74
D.1	Citlivostní analýza výstupů hydratačního modelu. . . . .	77
D.2	Citlivostní analýza hlavních komponent výstupů hydratačního modelu. . . . .	77

# Kapitola 1

## Úvod

Citlivostní analýza (SA z angl. *sensitivity analysis*) představuje důležitý nástroj pro studium vlastností komplexních systémů. Tvoří nezbytnou součást inverzní analýzy [31], je využívána při modelování ploch odezvy [20] nebo při analýze nejistot [19]. 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 [41]. Tato bakalářská 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 [20]. Příslušné vstupní parametry těchto simulací zároveň představují souřadnice návrhových bodů, které tvoří tzv. návrh experimentů (DoE). Princip DoE a vyhodnocení simulací je na Obrázku 1.1. Pro výpočet korelace je použit Spearmanův koeficient pořadové korelace (SRCC), který je schopen zachytit nelineární, avšak monotónní závislost.



Obrázek 1.1: Princip návrhu experimentů a vyhodnocení simulací.

V případě fyzikálních experimentů či 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.

Jedním důležitým faktorem při tvorbě DoE je počet návrhových bodů. Zatímco málo bodů nemusí dostatečně vystihnout chování modelu, pro velký počet bodů může být provedení simulací až příliš časově náročné. Další důležitou otázkou 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. Zkoumaná kritéria budou implementována do prostředí MATLAB. Dále se práce zaměří na porovnání těchto kritérií z hlediska jejich optimalizace a vlastností jejich optimálních návrhů. Posléze budou získané návrhy použity jako výchozí návrhy pro sekvenčně doplňované návrhy. Nakonec se všechny optimální návrhy aplikují pro vyhodnocení citlivostní analýzy teoretických matematických funkcí a konstrukčních modelů. Ze získaných výsledků se stanoví nejvíce vhodné kritérium pro definování návrhů experimentů použitelných pro citlivostní analýzu.

# Kapitola 2

## Návrh experimentů

Návrh neboli plánování experimentů je běžnou součástí průzkumů či vědeckého bádání, ať už jde o laboratorní či počítačem simulované experimenty. Velmi důležité je v obou případech vhodný výběr vstupních parametrů (nazývaných též proměnné nebo faktory) a správný způsob vyhodnocení získaných výstupních dat (nazývaných též odezvy). Významný vliv na vývoj metody návrhu experimentů, která byla původně určena pro laboratorní experimenty, měl anglický statistik R. A. Fisher [14], kterému se tříděním experimentů do bloků, jejich opakováním a znáhodněním podařilo snížit vliv náhodné chyby, a zajistit tak platné odhady nejistoty. Fisher formálně zavedl analýzu rozptylu (ANOVA z angl. *ANalysis Of VAriance*), která je další možnou metodou pro stanovení citlivosti modelu na vstupní parametry.

### 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 [4]. 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.

**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.

**Promítací vlastnost** Další vlastností DoE zmiňovanou v literatuře [8, 6] 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 tzv. 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.

**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.

**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, přehled dalších typů pravděpodobnostního rozdělení je k dispozici v [44]. 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*).

Tato práce se zaměřuje především na návrhy v diskrétním prostoru, jelikož problémy ve spojitém prostoru jsou z důvodu zvládnutí optimalizace stejně často diskretizovány.

## 2.2 Metody tvoření návrhů

**Zrnitost vs. kvalita** Při tvorbě návrhů je velmi důležitá i volba počtu návrhových bodů. Autoři v [8] 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 nedostatečným 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 optimální návrhy rozdělit do tří skupin:

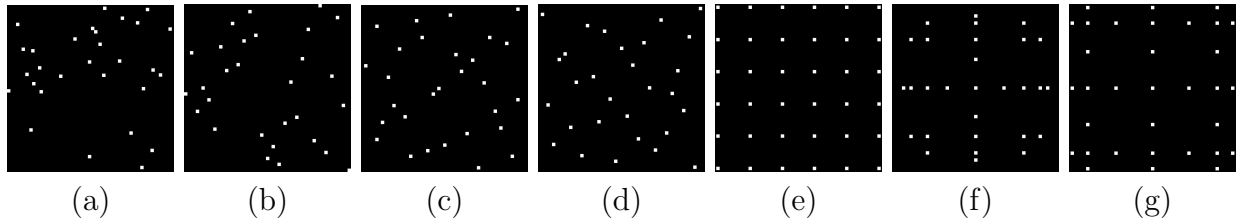
- *jednorázově generované návrhy*, kdy počet návrhových bodů i jejich souřadnice jsou stanoveny před provedením simulací,
- *sekvenční návrhy*, při kterých je vyhodnocena odezva modelu pro výchozí návrh (získaný jednorázovým generováním) a následně je přidán potřebný počet dalších návrhových bodů pro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

Přehled metod generování sekvenčních návrhů je uveden například v [50]. Při sekvenčním doplňování lze vytvářet tzv. *vnořené návrhy* (z angl. *nested designs*), kdy se výsledný návrh skládá z více menších doplňujících se návrhů [10].

**Deterministické vs. stochastické metody** Metody generování DoE mohou být rozděleny na dvě základní skupiny dle samotného způsobu definování návrhu. První skupinou jsou metody deterministické [42], 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 narozdíl 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.

Návrh experimentů může být v prostoru rozprostřen různými způsoby. V následujících odstavcích jsou některé základní typy návrhů rozebrány podrobněji. Příklady návrhů ve dvou-dimenzionálním prostoru jsou na Obrázku 2.1.



Obrázek 2.1: 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).

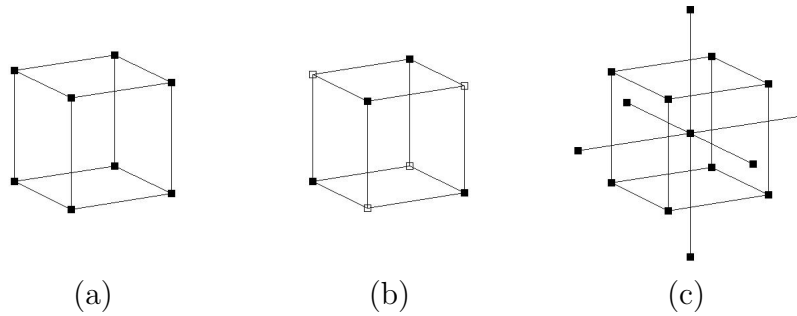
### Náhodné návrhy

Prvním typem návrhů jsou *náhodné návrhy*. Metodou Monte Carlo lze získat náhodně rozprostřené návrhy, jejichž generování je velmi snadné. Ovšem vlastnosti těchto návrhů nejsou nijak specifikovány, a nezaručují tedy získání důvěryhodných informací ohledně zkoumaného vlivu parametrů na odezvu modelu. V tomto případě je možné se spolehnout pouze na dostatečné množství návrhových bodů, které je oproti ostatním typům návrhů výrazně větší. Jelikož je většinou vyžadováno počet návrhových bodů minimalizovat z důvodu výpočetní náročnosti simulací, nejsou náhodně generované návrhy příliš vhodné. Přesto jde o nejjednodušší metodu pro získání DoE, a proto jsou tyto návrhy používány, pokud není vyhodnocení simulací příliš náročné.

### Faktoriální návrhy

*Faktoriální návrhy* se skládají z určitých kombinací souřadnic návrhových bodů (faktorů), jejich rozprostření má určitou strukturu, která je pevně dána. Pokud je návrhový prostor spojitý, musí být pro tvorbu faktoriálního návrhu nejdříve diskretizován. Faktoriální návrhy se běžně používají jako tzv. *prověřovací návrhy* (angl. *screening designs*) v počáteční fázi experimentování. Podrobněji se rozlišuje plně faktoriální, částečně faktoriální či centrálně kompozitní návrh, viz. Obrázek 2.2. *Úplný faktoriální návrh* zahrnuje všechny možné kombinace diskretních souřadnic návrhových bodů, tedy pokrývá celý návrhový prostor. Jedná se ovšem o návrhy s nejhorsími promítacími vlastnostmi. Jelikož počet simulací v tomto případě roste exponenciálně s počtem souřadnic návrhového bodu, je tento typ návrhu pro mnohé modely s větším počtem parametrů příliš rozsáhlý. Z tohoto důvodu se používají *částečně faktoriální návrhy*, kdy jsou určité body z plně obsazených pozic odebrány. Tyto částečně fak-

toriální návrhy lze zvoleným způsobem natočit, pak se jedná o tzv. *rotační návrhy*. V případě *centrálně kompozitního návrhu* jsou do návrhového prostoru navíc přidány centrální body a k nim příslušící hvězdicové body (angl. star points) umístěné ve vzdálenosti  $\alpha$  pro každý parametr. Na Obrázku 2.2c je uveden tento návrh pro tři parametry. Pokud platí  $\alpha = 1$ , hvězdicové body jsou v případě tří parametrů umístěny ve středu stěn krychle, pro hodnotu  $\alpha$  lišící se od jedné nabývá každý parametr pěti hodnot.



Obrázek 2.2: Typy faktoriálních návrhů: plně faktoriální (a), částečně faktoriální (b) a centrálně kompozitní (c).

### Optimální návrhy

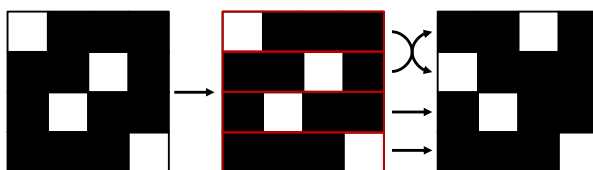
Dalším typem návrhů jsou *návrhy optimální*. Jde o návrhy získané optimalizací pozic návrhových bodů vzhledem ke kritériím, která specifikují vlastnosti generovaného návrhu. Narozdíl od předešlého typu návrhů nemají optimální návrhy jasně dané schéma rozložení bodů, jde o stochasticky získávané návrhy. 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 [4, 6]. 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* [36, 23], 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 [19]. LHS návrhy jsou často používány pro jejich časovou 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 prohazovat odpovídající souřadnice dvou bodů tak, aby bylo stále dodrženo omezení jednoho bodu na interval. Názorný příklad této výměny souřadnic je na Obrázku 2.3. 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.



Obrázek 2.3: Princip prohazování bodů v návrhovém prostoru.

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. V ostatních případech lze předepsat pouze minimální počet bodů pro každý interval [2, 45]. Autoři v [49] optimalizují tyto smíšené návrhy pomocí smíšené celočíselné programovací metody bez jakéhokoliv předepsaného počtu bodů na interval. 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.

### Řídké mřížky

Kromě zmíněných návrhů lze k modelování plochy odezvy použít body používané mimo jiné k numerické integraci. Tyto body tvoří tzv. *řádkou mřížku* (z angl. *sparse grid*), která byla navržena ruským matematikem S. A. Smolyakem a více o řídkých mřížkách se lze dočíst v [15]. Stanovení těchto bodů je deterministické. Pro konkrétní počet parametrů, jejich pravděpodobnostní rozdělení a zvolenou přesnost je stanoven počet a pozice integračních

bodů. Tyto velmi efektivní návrhy mají ale několik nevýhod a omezení: mohou být použity pouze pro spojitý prostor, mají špatné promítací vlastnosti, počet těchto bodů je pevně dán a nelze předepsat požadovanou korelaci mezi souřadnicemi. Snadné získání řídkých mřížek s rovnoměrným či normálním rozdělením umožňuje kód dostupný z [18]. Pro porovnání s optimálními návrhy zkoumanými v této práci byly použity dvě z nabízených metod KPU a GQU a obdržené výsledky citlivostní analýzy jsou uvedeny v Příloze C.

# Kapitola 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:

- i) rovnoměrné pokrytí (space-filling) návrhového prostoru, které je nezbytné pro zachycení významu parametrů modelu v celém jeho definičním oboru,
- ii) 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. Například v oboru modelování plochy odezvy může být odstranění šumu a systematické chyby důležitější než ortogonalita [16]. Nicméně pro případ SSA nejsou zformulovány žádné speciální požadavky, proto se tato práce zaměří na obecně požadované charakteristiky návrhů.

Optimální návrh by měl splňovat základní požadavky: měl by být snadno dostupný, jako například LHS návrhy, o kterých pojednává Kapitola 2.2, co nejvíce ortogonální a měl by rovnoměrně pokrývat celý definiční obor. Mezi kritéria zajišťující ortogonalitu návrhu patří například korelace a číslo podmíněnosti. Na vlastnosti týkající se rovnoměrného rozprostření návrhu se zaměřují kritéria Audze-Eglais, Maximin,  $ML_2$  diskrepance a D-optimalita.

### 3.1 Rovnoměrné pokrytí návrhu

Tato práce zahrnuje studium čtyřech 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) [3, 45] 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. Rovnováhy 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

$$E^{\text{AE}} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{L_{ij}^2} \quad (3.1)$$

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

### 3.1.2 Maximin

Dalším kritériem upřednostňující rovnoměrné rozprostření návrhu je Maximin (*Euclidean maximin distance* - EMM) [28], 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  $E^{\text{EMM}}$  (3.2). Hodnoty  $L_{ij}$  jsou opět euklidovské vzdálenosti mezi  $n$  návrhovými body.

$$E^{\text{EMM}} = \min\{\dots, L_{ij}, \dots\}, \quad i = 1 \dots n, \quad j = (i + 1) \dots n \quad (3.2)$$

### 3.1.3 $\text{ML}_2$ diskrepance

Modifikovaná  $L_2$  diskrepance ( $\text{ML}_2$ ) je kritérium používané místo časově náročnější původní  $L_\infty$  diskrepance [7], která se užívá pro přesné vyhodnocování kvadraturních vzorců s více proměnnými [13]. Její hodnota se získá ze vzorce

$$E^{\text{ML}_2} = \left(\frac{4}{3}\right)^k - \frac{2^{(1-k)}}{n} \sum_{d=1}^n \prod_{i=1}^k (3 - x_{di}^2) + \frac{1}{n^2} \sum_{d=1}^n \sum_{j=1}^n \prod_{i=1}^k [2 - \max(x_{di}, x_{ji})], \quad (3.3)$$

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 jako je například v [17]. Menší hodnoty  $\text{ML}_2$  vyjadřují rovnoměrnější rozložení bodů.

### 3.1.4 D-optimality

Kritérium D-optimality (Dopt) bylo navrženo Kirsten Smithovou roku 1918 [43] jako průkopnická práce v oboru DoE pro polynomiální regresní analýzu. Kritérium minimalizuje odchylku spojenou s odhadem koeficientů regresního modelu buď minimalizováním determinantu disperzní matice  $(\mathbf{Z}^T \mathbf{Z})^{-1}$  nebo maximalizováním informační matice  $\mathbf{A} = (\mathbf{Z}^T \mathbf{Z})$

[1]. Aby se při optimalizaci, kdy jsou všechna kritéria minimalizována, nemusela vytvářet inverzní informační matice, lze minimalizovat zápornou hodnotu determinantu informační matice, tzn.

$$E^{\text{Dopt}} = -\det(\mathbf{Z}^T \mathbf{Z}), \quad (3.4)$$

kde  $\mathbf{Z}$  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

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & x_{11}^2 & x_{12}^2 & x_{11}x_{12} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & x_{21}^2 & x_{22}^2 & x_{21}x_{22} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & x_{n1}^2 & x_{n2}^2 & x_{n1}x_{n2} \end{bmatrix}, \quad (3.5)$$

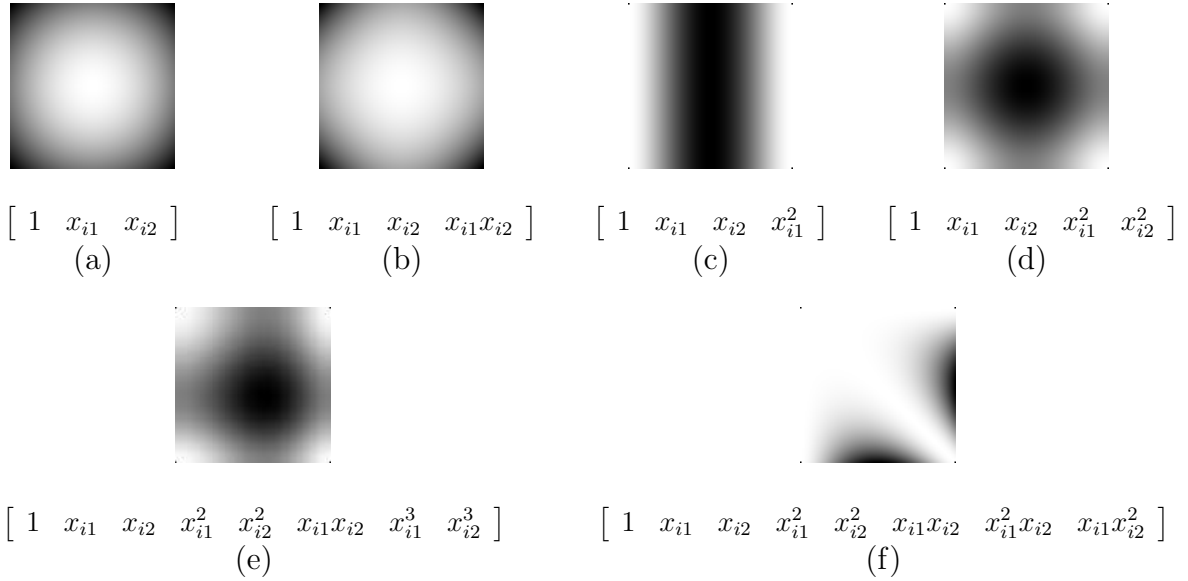
přičemž počet sloupců matice  $\mathbf{Z}$  je omezen počtem bodů v návrhu. Pokud je počet sloupců větší než  $n - 1$ , kde  $n$  je počet bodů, stane se matice  $\mathbf{A}$  singularní. D-optimální návrhy získané tímto postupem však někdy obsahují duplicitní body, které ovšem nemají žádnou informační hodnotu vzhledem k aproximaci odezvy modelu, a proto je vhodné jejich výskyt eliminovat.

Za tímto účelem navrhli autoři Hofwing a Strömberg [21] bayesovskou modifikaci popsaného postupu. Modifikace spočívá v přidání určitého počtu dalších sloupců do matice  $\mathbf{Z}$ , čímž je možné penalizovat návrhy s duplicitními body. Problém singularity je možné vyřešit jednoduše tak, že se do přidaných sloupců přičte k prvkům na diagonále matice  $\mathbf{A}$  jednička. Pokud je vyžadováno zachování stejného vztahu kritéria k jednotlivým souřadnicím návrhových bodů, měla by být zachována symetrie zastoupení obou souřadnic v matici  $\mathbf{Z}$ . Proto v případech, kdy se do matice  $\mathbf{Z}$  přidávají další sloupce (tzn. počet sloupců je vyšší než  $n - 1$ ), doplňuje se za každý takový sloupec na diagonálu matice  $\mathbf{A}$  jednička tak, aby nebyla opomenuta symetrie souřadnic. Proto se může stát, že počet přidaných jedniček bude převyšovat počet přidaných sloupců.

Nevýhodou této modifikace je nezbytnost určitých manuálních úprav, kdykoliv se mění počet bodů v návrhu. Zatím nebyl navržen explicitní postup, jak určit počet sloupců, které je nutné do matice  $\mathbf{Z}$  přidat, aby byly penalizovány veškeré duplicitní návrhy. Proto navržená bayesovská modifikace spočívá ve zvolení matice  $\mathbf{Z}$  s minimálním možným počtem sloupců a při získání duplicitních návrhů se počet sloupců postupně zvětšuje.

Důležitost správného sestavení matic a důsledky chybného postupu jsou pro názornost ukázány na jednoduchém příkladu. Ve čtvercovém prostoru s body pevně umístěnými v rozích je umisťován pátý bod postupně do zbylých pozic. Pro každou pozici je stanovena hodnota  $D_{\text{opt}}$  a následně zanesena do grafické podoby intenzitou černé barvy (minimum). Plochy kritéria  $D_{\text{opt}}$  pro různé varianty matice  $\mathbf{Z}$ , resp. informační matice  $\mathbf{A}$  uvádí Obrázek 3.1. Na Obrázku 3.1a je zobrazena varianta, kdy má matice  $\mathbf{Z}$  méně než  $n - 1$  sloupců. V tomto případě jsou sloupce tři a je patrné, že řešení takto definovaného kritéria vede k duplicitě

stávajících bodů, protože Dopt nabývá minimální hodnoty již v obsažených rozích. Obrázek 3.1b je ukázkou s  $n - 1$  sloupci v matici  $\mathbf{Z}$ , ale tento počet je stále nedostatečný. Dále je na Obrázku 3.1c uvedena plocha odpovídající nesymetrickému uspořádání matice. Správné řešení pro pět bodů se symetrickým zastoupením obou souřadnic uvádí rovnice odpovídající Obrázku 3.1d. Počet sloupců matice  $\mathbf{Z}$  je  $5 = (n - 1) + 1$  a do matice  $\mathbf{A}$  patří na dvě poslední pozice na diagonále jedničky pro zachování symetrie, pro řešení singularity by postačila pouze jedna. Na Obrázcích 3.1e a 3.1f je ukázán vliv přílišného počtu sloupců.



Obrázek 3.1: Plochy Dopt a odpovídající matice  $\mathbf{Z}$ .

## 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 [22] 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. V následujících odstavcích jsou tyto korelační koeficienty popsány podrobněji.

#### 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

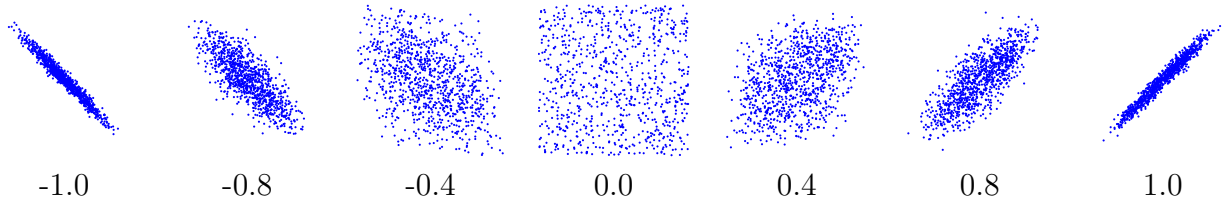
směrodatných odchylek, tj.

$$c_{ij} = \frac{\text{Cov}(x_i, x_j)}{\sigma_{x_i} \sigma_{x_j}} = \frac{\sum_{a=1}^n (x_{ai} - \bar{x}_i)(x_{aj} - \bar{x}_j)}{\sqrt{\sum_{a=1}^n (x_{ai} - \bar{x}_i)^2 \sum_{a=1}^n (x_{aj} - \bar{x}_j)^2}}, \quad (3.6)$$

kde

$$\bar{x}_i = \frac{1}{n} \sum_{a=1}^n x_{ai} \quad \text{a} \quad \bar{x}_j = \frac{1}{n} \sum_{a=1}^n x_{aj}. \quad (3.7)$$

Korelační koeficient nabývá hodnot  $< -1; 1 >$  a pro představu vztahu mezi jeho hodnotou a rovinným uspořádáním bodů jsou na Obrázku 3.2 zobrazeny množiny bodů a odpovídající hodnoty korelačního koeficientu. Pro hledání optimálního rozložení bodů je rozhodující absolutní hodnota korelačního koeficientu, při jejíž minimalizaci se soubor bodů stává stále více ortogonálním.



Obrázek 3.2: Příklady souborů bodů o souřadnicích  $[x_1; x_2]$  vyjádřeny graficky a pomocí korelačního koeficientu.

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  $k \times k$ .

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdots & C_{1k} \\ C_{21} & C_{22} & \cdots & C_{2k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ C_{k1} & C_{k2} & \cdots & C_{kk} \end{bmatrix}. \quad (3.8)$$

Korelační matici lze zpracovat několika způsoby. Například softwary SPERM [39] a FReET [38] založené na metodě LHS minimalizují výraz

$$E_1 = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n (C_{ij} - \tilde{C}_{ij})^2}, \quad (3.9)$$

kde  $C_{ij}$  jsou prvky korelační matice, získané pro daný návrh bodů a  $\tilde{C}_{ij}$  jsou prvky předepsané korelační matice. Jelikož v našem případě je cílem získat v co největší míře ortogonální návrh bodů, pak předepsaná matice  $\tilde{\mathbf{C}}$  je maticí jednotkovou. V takovém případě se rovnice (3.9)

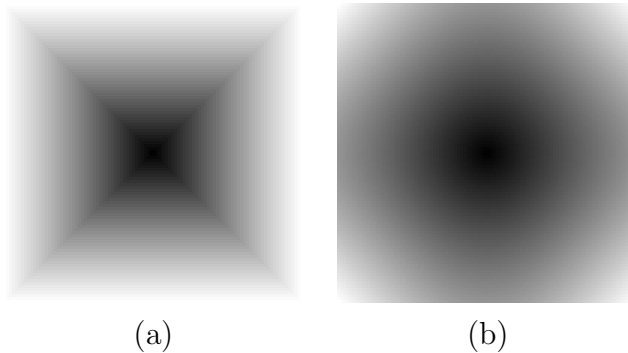
zjednoduší na

$$E_1 = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n C_{ij}^2}. \quad (3.10)$$

Druhou možností uvedenou např. v [7] je minimalizovat maximum z absolutních hodnot korelační matice nad diagonálou, tzn. funkci

$$E_2 = \max |C_{ij}|, \quad i = 1 \dots n, \quad j = (i + 1) \dots n. \quad (3.11)$$

Srovnání obou přístupů můžeme sledovat na Obrázcích 3.3a, kde je zobrazena plocha funkce (3.11), a 3.3b s plochou funkce (3.10) v závislosti na poloze devátého bodu umístěvaného do prostoru ve tvaru krychle s osmi body pevně umístěnými v rozích. Korelace je počítána pomocí Pearsonova korelačního koeficientu. Na obrázcích je vykreslen řez stěnou krychlové domény. Optimalizací odchylky od modelové matice (3.10) získáváme hladký průběh plochy na rozdíl od ostrého minima, které vytváří kritérium maximálního prvku korelační matice (3.11).



Obrázek 3.3: Plochy korelační matice.

Zvolené vyhodnocení korelačních koeficientů se řídí podle 3.10, tj.  $E^{\text{PMCC}} = E_1$ .

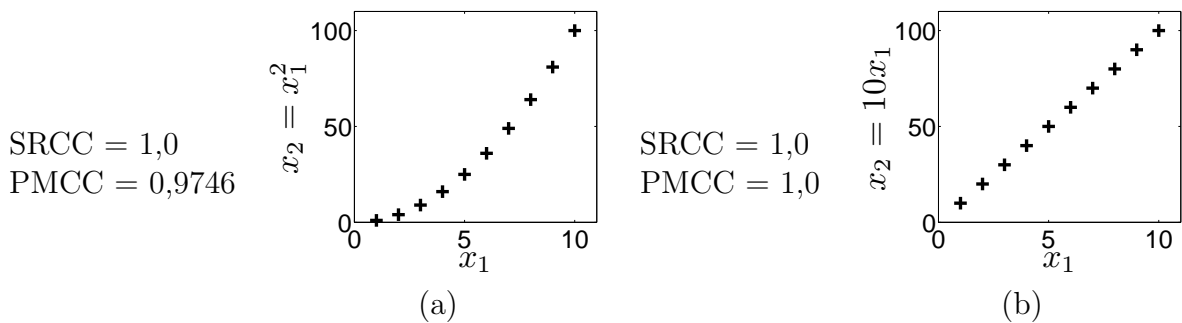
### Spearmanův koeficient pořadové korelace

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 (3.12), kde  $r(x_{ai})$  a  $r(x_{aj})$  vyjadřují pořadí hodnoty  $x_{ai}$ , respektive  $x_{aj}$ .

$$\rho_{ij} = 1 - \frac{6 \sum_{a=1}^n (r(x_{ai}) - r(x_{aj}))^2}{n(n^2 - 1)}. \quad (3.12)$$

Hodnoty SRCC se pro obě varianty rozprostření bodů na Obrázku 3.4 rovnají jedné navorzídíl od PMCC, jehož hodnota se pro (a) rovná 0.9746 a pro (b) se shoduje se SRCC.




 Obrázek 3.4: Rozmístění bodů: (a)  $x_2 = x_1^2$  a (b)  $x_2 = 10x_1$ .

Na tomto jednoduchém příkladu vidíme, že PMCC není schopen zachytit nelineární vztah proměnných tak dobře jako SRCC.

Pro více proměnných může být ortogonalita návrhu dosažena podobně jako (3.10) minimalizováním

$$E^{\text{SRCC}} = \sqrt{\sum_{i=1}^k \sum_{j=i+1}^k \rho_{ij}^2}. \quad (3.13)$$

### 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

$$\tau_{ij} = \frac{T_{c,ij} - T_{d,ij}}{n(n-1)/2}. \quad (3.14)$$

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

Ortogonalní návrh lze opět získat minimalizováním

$$E^{\text{KRCC}} = \sqrt{\sum_{i=1}^k \sum_{j=i+1}^k \tau_{ij}^2}. \quad (3.15)$$

### 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 [7]. V této práci se používá číslo podmíněnosti  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ , kde  $\mathbf{X}$  je matice souřadnic návrhových bodů, které se říká návrhová matice (DoE matrix)

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix}, \quad (3.16)$$

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

$$E^{\text{CN}} = \text{cond}(\mathbf{X}^T \mathbf{X}) = \frac{\lambda_1}{\lambda_n}, \quad (3.17)$$

kde  $\lambda_1$  a  $\lambda_n$  jsou největší a nejmenší vlastní čísla získaná pro  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ , tedy  $E^{\text{CN}}$  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.

# Kapitola 4

## Implementace kritérií

MATLAB kombinuje kvalitní technický programovací jazyk a interaktivní prostředí pro vývoj algoritmů, numerické výpočty, vizualizaci a analýzu dat. Tento program se těší v dnešní době velké oblibě, jelikož je uživatelsky příjemný nejen pro svou bohatou nabídku již naprogramovaných nástrojů a funkcí, ale i pro velmi užitečnou rozsáhlou nápovědu k programu, která umožňuje i začátečníkům rychlé zorientování se v jeho ovládní. Z uvedených důvodů byl program MATLAB zvolen pro provedení potřebných výpočtů a následného zpracování získaných dat.

Nejprve musela být již představená kritéria implementována do MATLABu. Jak už bylo zmíněno, některé funkce jsou zde již připravené, a to se v tomto případě týkalo korelačních koeficientů a čísla podmíněnosti. Všechna kritéria jsou vždy funkcí návrhové matice  $\mathbf{X}$  (3.16) a některá ještě vektoru počtů možných hodnot jednotlivých parametrů  $m$ . Výpočet kritérií v MATLABu je následující.

Funkce vyhodnocení AE:

```
1 function AE = get_AE (X)
2 [n,k] = size(X);
3 A = repmat(X, [1 1 n]);
4 B(1, :, :) = X';
5 B = repmat(B, [n 1 1]);
6 AE = (sum(sum((reshape(sum((A-B).^2,2), [n n])+eye(n)).^(-1))))-n)/2;
```

Funkce vyhodnocení EMM:

```
1 function EMM = get_EMM (X)
2 [n,k] = size(X);
3 A = repmat(X, [1 1 n]);
4 B(1, :, :) = X';
5 B = repmat(B, [n 1 1]);
6 EMM = -min(min(reshape(sqrt(sum((A-B).^2,2)), [n n])+eye(n)*n*sqrt(k)));
```

Funkce vyhodnocení  $ML_2$ :

```
1 function ML = get_ML (X, m)
2 [n,k] = size(X);
```

```

3 X = (X-1)./(m(ones(1,n),:)-1);           % normování na interval <0,1>
4 suma1 = sum(prod((3-X(:,:)).^2)');
5 A = repmat(X, [1 1 n]);
6 B(1, :, :) = X';
7 B = repmat(B, [n 1 1]);
8 suma2 = sum(sum(prod(2-max(A,B),2)));
9 ML = [(4/3)^k - 2^(1-k)/n*suma1 + 1/n^2*suma2];

```

Funkce vyhodnocení Dopt:

```

1 function Dopt = get_Dopt (X, m)
2 [n,k] = size(X);
3 X = ((X-1)/(m(ones(1,n),:)-1))*2-1;     % normování na interval <-1,1>
4 Z = get_Z(X);                          % konkrétní podoba Z
5 A = Z'*Z;
6 for i = 1:z                             % případné přičtení jedniček
7     A(end-i+1,end-i+1) = A(end-i+1,end-i+1)+1;
8 end
9 Dopt = - det(A);

```

Funkce vyhodnocení PMCC:

```

1 function PMCC = get_PMCC (X)
2 cm = corr(X);                          % korelační matice cm
3 cm = tril(cm,-1);                      % prvky dolního trojúhelníku cm
4 PMCC = sqrt(sum(cm(:).^2));

```

Funkce vyhodnocení SRCC:

```

1 function SRCC = get_SRCC (X)
2 cm = corr(X, 'type', 'Spearman');
3 cm = tril(cm,-1);
4 SRCC = sqrt(sum(cm(:).^2));

```

Funkce vyhodnocení KRCC:

```

1 function KRCC = get_KRCC (X)
2 cm = corr(X, 'type', 'Kendall');
3 cm = tril(cm,-1);
4 KRCC = sqrt(sum(cm(:).^2));

```

Funkce vyhodnocení CN:

```

1 function CN = get_CN (X, m)
2 [n,k] = size(X);
3 X = ((X-1)/(m(ones(1,n),:)-1))*2-1;     % normování na interval <-1,1>
4 A = X'*X;
5 CN = cond(A);

```

Dále byla většina původně implementovaných funkcí kvůli své výpočetní náročnosti při optimalizaci rozsáhlejších návrhů naprogramována efektivněji s využitím známých charakteristik návrhů, v tomto případě to byly podmínky LHS. Zrychlení bylo nutné provést

pro všechny korelační koeficienty. U kritéria SRCC bylo největší úsporou výpočetního času odstranění přebytečného přepočítávání souřadnic na pořadí, kdy v případě LHS návrhů můžeme místo pořadí použít přímo samotné souřadnice. Použití LHS podmínek přispělo i ke zjednodušení výpočtu KRCC, kdy se vycházelo z předpokladu, že hodnoty jednotlivých parametrů se neopakují a tedy nedochází k výskytu dvojic, které by nebyly ani konkordantní ani diskordantní. Výpočet jednotlivých korelačních koeficientů má následující tvar:

```

1 function SRCC = get_SRCC_new_LHS (X)
2 [n,k] = size(X);
3 cm = zeros(k,k);
4 for i = 1:k
5     for j = 1:i-1
6         cm(i,j) = 1-(6*sum((X(:,i)-X(:,j))^2))/(n*(n^2-1));
7     end
8 end
9 SRCC = sqrt(sum(cm(:).^2));

1 function KRCC = get_KRCC_new_LHS (X)
2 [n,k] = size(X);
3 ij = repmat(~logical(tril(ones(n))),[1 1 k]);
4 A(:,1,:) = X;
5 A = repmat(A, [1 n 1]);
6 B(1,:,:) = X;
7 B = repmat(B, [n 1 1]);
8 dif = reshape(A(ij)-B(ij),[(n*(n-1))/2 k]);
9 Y = repmat(dif, [1 1 k]);
10 Z(:,1,:) = dif;
11 Z = repmat( Z, [1 k 1]);
12 C = reshape(sum((Y.*Z>0),1),[k k]);
13 cm = 4*C/(n*(n-1))-1;
14 cm = tril(cm, -1);
15 KRCC = sqrt(sum(cm(:).^2));

```

Při implementaci PMCC se vycházelo z přesné definice tohoto koeficientu, tedy tato varianta je použitelná i u návrhů neomezených.

```

1 function PMCC = get_PMCC_new (X)
2 [n,k] = size(X);
3 PMCC = zeros(k,k);
4 covariance = cov(X); % kovarianční matice
5 a = diag(covariance); % rozptyly souřadnic
6 b = a';
7 a = a(:,ones(1,k)); % matice rozptylů i-tých souřadnic
8 b = b(ones(1,k),:); % matice rozptylů j-tých souřadnic
9 cm = covariance./(sqrt(a).*sqrt(b));
10 cm = tril(cm,-1);
11 PMCC = sqrt(sum(cm(:).^2));

```

Kritérium SRCC lze také vyjádřit i jinou rovnicí, než je (3.12) uvedená v Kapitole 3. Pokud se souřadnice bodů převedou na jejich pořadí, shoduje se výpočet SRCC a PMCC. To také znamená, že pro LHS návrhy jsou tato kritéria zaměnitelná. Pro neomezené návrhy se musí souřadnice převést a to tak, že hodnotám náležícím jednotlivým parametrům se přiřadí dle jejich velikosti pořadová čísla. Pokud se některé hodnoty opakují, je jejich pořadím průměrné pořadí. Převod je patrný z uvedeného kódu:

```

1 function SRCC = get_SRCC_new (X)
2 [n,k] = size(X);
3 [D,IX] = sort(X);
4 E = repmat((1:n)', [1 k]);           % E - matice pořadí souřadnic
5 E = E(IX);
6 for i = 1:k
7     for j = 1:n
8         a = find(X(:,i)==X(j,i));
9         if size(a,1)>1
10            E(a,i) = sum(E(a,i))/size(a,1);
11        end
12    end
13 end
14 cm = zeros(k,k);
15 covariance = cov(E);
16 a = diag(covariance);
17 b = a';
18 a = a(:,ones(1,k));
19 b = b(ones(1,k),:);
20 cm = covariance./(sqrt(a).*sqrt(b));
21 cm = tril(cm,-1);
22 SRCC = sqrt(sum(cm(:).^2));

```

Pro úplnost ještě zbývá uvést kód pro výpočet KRCC u neomezených návrhů. Zde je nutné navíc dopočítat pro každý parametr počet dvojic se stejnými hodnotami  $t$ , který se zohlední při redukci počtu možných dvojic dle upraveného vzorce 4.1:

$$\tau_{ij} = \frac{T_{c,ij} - T_{d,ij}}{\sqrt{(t_0 - t_i) \cdot (t_0 - t_j)}}, \quad (4.1)$$

kde  $t_0$  se rovná počtu všech dvojic a  $t_i$  a  $t_j$  jsou počty dvojic stejných hodnot parametru  $i$ , respektive  $j$ .

```

1 function KRCC = get_KRCC_new(X)
2 [n,k] = size(X);
3 cm = zeros(k,k);
4 r = 0;
5 t = zeros(k,1);
6 signum = zeros(n,n,k);
7 t0 = (0.5*n*(n-1));
8 for i = 1:k

```

```

9     pa = repmat(X(:,i), [1 n]);
10    pb = repmat(X(:,i)', [n 1]);
11    t(i) = sum(sum(tril(pa==pb - eye(n),0)));
12    signum(:, :, i) = sign(pa-pb);
13  end
14  for i = 1:k
15    for j = 1:i-1
16      r = sum(sum((signum(:, :, i).*signum(:, :, j))))/2;
17      cm(i,j) = r/sqrt((t0-t(i))*(t0-t(j)));
18      r = 0;
19    end
20  end
21  KRCC = sqrt(sum(cm(:).^2));

```

Pro ilustrativní srovnání časové náročnosti jednotlivých zápisů korelačních koeficientů bylo provedeno 100 měření, kdy byla tato kritéria pokaždé vyhodnocena 1000krát ve dvou variantách: *a*) s návrhem o 10 bodech s dvěma parametry a *b*) s návrhem o 30 bodech s šesti parametry. Průměrné časy pro 1000 vyhodnocení jsou uvedeny v Tabulce 4.1.

Kód	PMCC		SRCC		KRCC	
	a	b	a	b	a	b
Původní	0,512	1,868	0,924	4,378	1,124	8,030
Nový	0,091	0,103	0,179	0,536	0,213	0,834
Nový - LHS	0,091	0,103	0,026	0,058	0,214	0,830

Tabulka 4.1: Průměrné časy v sekundách pro 1000 vyhodnocení PMCC, SRCC a KRCC návrhu s 10 body o dvou souřadnicích (a) a 30 body o šesti souřadnicích (b).

# Kapitola 5

## Optimalizační metoda

Optimalizace jednotlivých kritérií proběhla metodou simulovaného žíhání [46]. Tato metoda byla vybrána pro menší časovou náročnost a lepší odolnost proti uvíznutí v lokálních extrémech na rozdíl od jednoduššího horolezeckého algoritmu. Hlavní rozdíl spočívá v tom, že simulované žíhání umožňuje akceptování nového řešení i přesto, že jeho funkční hodnota (hodnota používaného kritéria) je nepříznivá vzhledem k hledanému optimu. Únik řešení z lokálního extrému umožněný simulovaným žíháním je znázorněn na Obrázku 5.2. První verze tohoto algoritmu byla navržena v [30] a nezávisle v [9]. Studium a implementace komplexnějších optimalizačních algoritmů vhodných pro řešení uvedených diskrétních úloh není předmětem této práce.

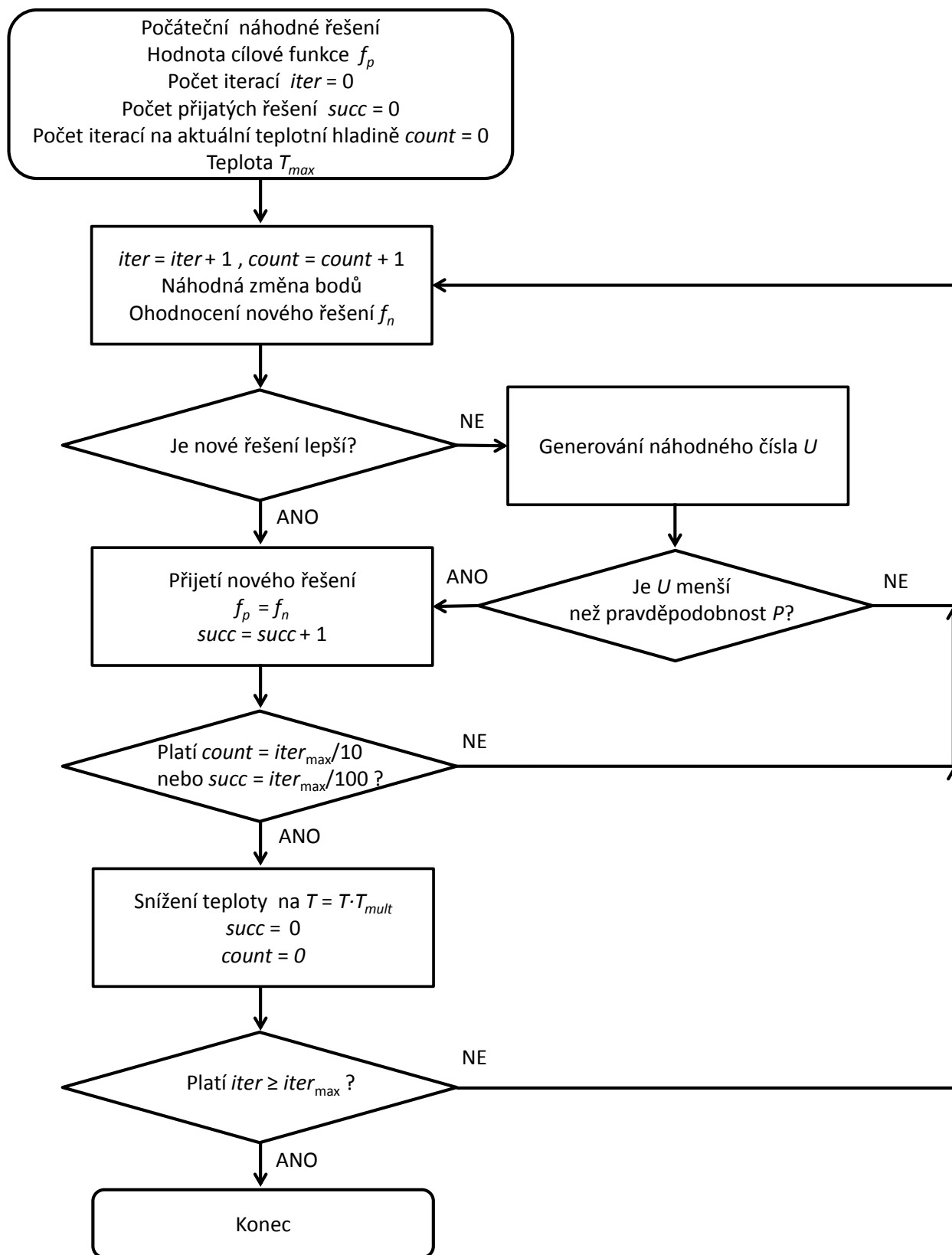
Simulované žíhání je inspirováno, jak už název napovídá, fyzikálním dějem, při němž se odstraňují defekty z pevných látek. Materiál je zahřát na vysokou teplotu, kdy dochází k odstranění převážné většiny defektů, a posléze postupně ochlazován. Dochází k ustálení atomů v rovnovážných polohách a vznik nových defektů je málo pravděpodobný vzhledem k pomalému snižování teploty soustavy.

Podobně probíhá i použitý algoritmus, jehož průběh je znázorněn na Obrázku 5.1. Materiál je zastoupen řešením problému, které je ohodnoceno. Pokud je funkční hodnota nově vzniklého řešení lepší nebo alespoň rovna hodnotě řešení předcházejícího, je nové řešení vždy přijato. Když je jeho ohodnocení horší, je nové řešení přijato s určitou pravděpodobností  $P$ . Na začátku procesu je stanovena teplota, která se snižuje s počtem proběhlých iterací a s počtem akceptovaných řešení s horší funkční hodnotou. S klesající teplotou se také mění pravděpodobnost akceptování horšího řešení. Tato pravděpodobnost je určena Metropolisovým kritériem

$$P = \exp\left(\frac{f_p - f_n}{T}\right) \geq U, \quad (5.1)$$

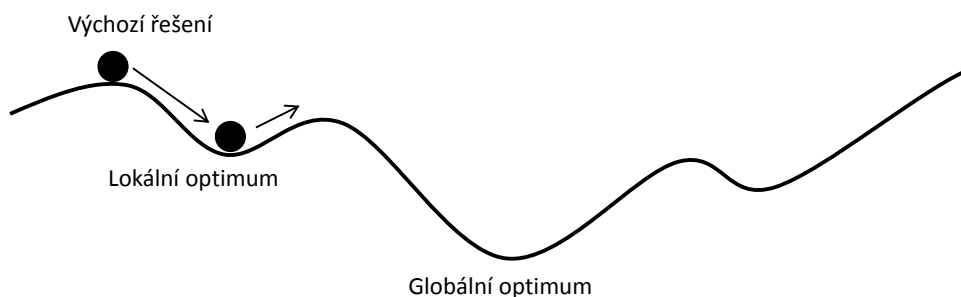
kde  $f_p$  a  $f_n$  jsou hodnoty kritéria pro původní, respektive nové řešení.  $T$  označuje teplotu systému, která je původně nastavena na  $T_{\max} = 10^{-3}$  a postupně je snižována násobením konstantou  $T_{\text{mult}} = (T_{\max}/10^{-6})^{1/100}$ . Teplotní hladina se snižuje po každých 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





Obrázek 5.1: Vývojový diagram simulovaného žhání.

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. Algoritmy pro oba případy jsou uvedeny v Příloze A.



Obrázek 5.2: Simulované žíhání umožňuje únik z lokálních extrémů.

Jelikož jde o stochastický algoritmus, je vhodné optimalizační proces spustit vícekrát pro nalezení hledaného řešení. První možností je spustit samotný algoritmus simulovaného žíhání vícekrát za sebou a poté vybrat nejlepší řešení, nebo lze použít tzv. simulované přezíhání. Algoritmus simulovaného přezíhání, který je také uveden v Příloze A, je velmi podobný těm předešlým. Pokud v průběhu optimalizačního procesu klesne teplota pod  $T_{\min}$ , je znovu navýšena na  $T_{\max}$  a chlazení probíhá znovu. Začíná se z nového náhodného řešení, přičemž doposud nalezené nejlepší řešení se zachovává. Navíc je nutné nastavit parametr  $nre$ , který ovlivňuje rychlost chlazení a tím i počet přezíhání v průběhu optimalizace. Teplota se snižuje násobením konstantou  $T_{\text{mult}} = (T_{\max}/10^{-6})^{nre/100}$ .

# Kapitola 6

## Porovnání kritérií

Uvedená kritéria byla před samotnou citlivostní analýzou porovnána podle:

- i) grafického vykreslení jejich průběhu při umístění čtvrtého a pátého bodu ve čtvercovém prostoru,
- ii) vzájemných výsledků dosažených při optimalizaci pomocí jednotlivých kritérií,
- iii) minimálních vzdáleností bodů ve výsledných návrzích
- iv) a počtu duplicitních bodů v promítnutých optimálních návrzích.

### 6.1 Grafické porovnání

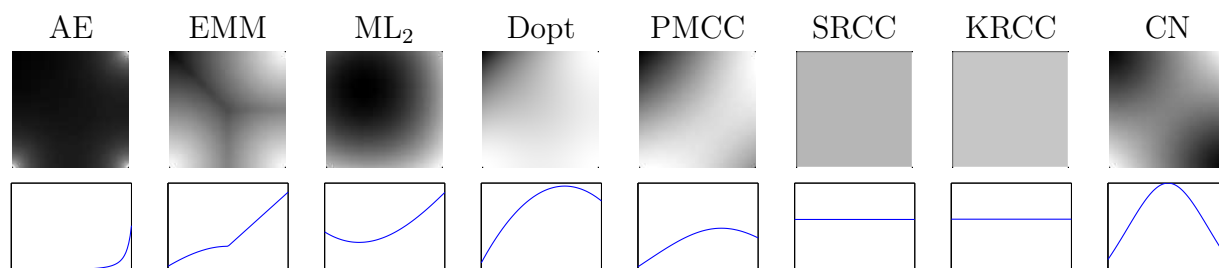
Efektivní generování optimálních DoE je v dnešní době předmětem vědeckého úsilí. Hlavním důvodem je, že všechna zkoumaná kritéria jsou multimodálními funkcemi optimalizovaných proměnných, a proto nemohou být vhodně aplikovány gradientní algoritmy a vývoj robustnějších stochastických algoritmů je stále řešenou problematikou. Pro příklad uvádíme několik současných prací zabývajících se touto problematikou: užití kritéria AE pro generování LHS návrhů bylo nedávno představeno v [5] a dále rozvinuto v [45] použitím genetického algoritmu pro optimalizaci; hranice pro LHS návrhy kritéria EMM byly stanoveny v [11] a porovnání vhodných generátorů pro případ tohoto kritéria jsou uvedeny v [37]; heuristický algoritmus pro minimalizování  $ML_2$  na LHS návrzích je aplikován v [12]; přehled existujících metod pro generování dobře rozprostřených optimálních LHS návrhů společně s jiným heuristickým přístupem je uveden v [48] a simulované žhání bylo implementováno do inženýrského programu [39, 38] pro generování LHS návrhů s předepsanou korelační maticí.

Vývoj robustního algoritmu není cílem této práce, ale obtížnost optimalizace jednotlivých kritérií je jedním z důležitých faktorů pro posouzení využitelnosti kritérií. Pro názornost bylo porovnání z hlediska průběhu kritéria v dvoudimenzionálním prostoru vyjádřeno graficky na sériích obrázků pro jednotlivá kritéria.

Umístění, které je dle daného kritéria vyhodnoceno jako nejlepší, zobrazuje barva černá, naopak nejhorší umístění barva bílá. Předem stanovená umístění neměnných bodů jsou zobrazena černě, ale ze zkoumání prostoru jsou vyloučena z důvodu předpokládané nerovnosti bodů.

### 6.1.1 Plocha kritéria pro doplnění 4. bodu

Pro zachycení obtíží při generování konkrétního optimálního návrhu jsme nejdříve porovnávaly kritéria v testu, ve kterém hlavním předmětem bylo umístění čtvrtého bodu do čtvercového prostoru za předpokladu stálé polohy předchozích třech bodů v rozích.



Obrázek 6.1: Tvar jednotlivých kritérií pro různé polohy 4. bodu.

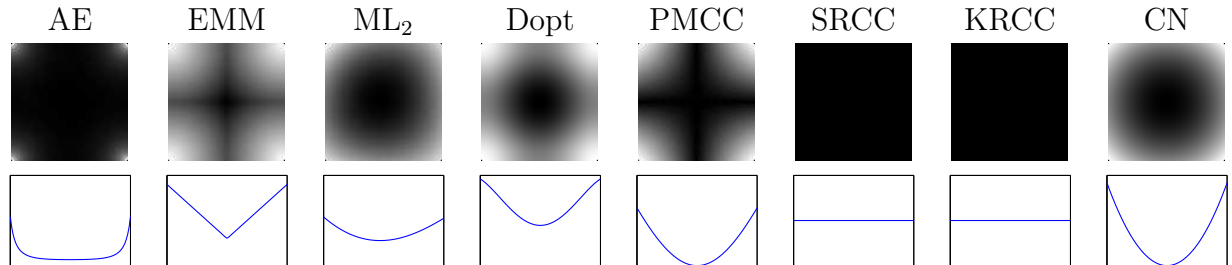
Z obdržených tvarů ploch na Obrázku 6.1 je patrné, že všechna zkoumaná kritéria kromě  $ML_2$  upřednostňují umístění čtvrtého bodu do zbývajících volného rohu, což je předpokládané optimum. Ovšem každé kritérium spěje k tomuto optimu viditelně jiným způsobem.

Pod vyobrazením hodnot jednotlivých kritérií ve dvoudimenzionálním prostoru jsou umístěny řezy znázorňující průběh těchto hodnot po úhlopříčce směrem z levého horního rohu. Můžeme zřetelně vidět, jak jednotlivá kritéria mění svou hodnotu při umístění bodu z nejvzdálenější pozice až po určené optimum.

Kritéria AE, EMM a SRCC mají zcela jasné optimum v levém horním rohu. Hodnota kritéria AE strmě klesá s rostoucí vzdáleností od třech obsazených bodů, ale od určité pozice se klesání výrazně omezí a jeho průběh k volnému rohu je velmi pozvolný. Metrika EMM klesá výrazně rychleji, ale její průběh není hladký. O plynulosti dosahování optima ovšem nelze mluvit u kritérií PMCC a Dopt, která ve zkoumaném prostoru vytvářejí oddělená lokální minima. Tento jev odhalil nedokonalost těchto kritérií pro bezpečné nalezení optimálního řešení. Také kritéria SRCC a KRCC vyšly z tohoto rozboru jako nepříliš vhodná, protože téměř v celém prostoru jsou jejich hodnoty konstantní kromě okrajů, což znemožňuje optimalizaci pomocí gradientních algoritmů. Naprosto nepoužitelně se zachovalo kritérium CN, které nedokáže v tomto případě jasně určit hledané optimum a naznačuje možnou duplicitu bodů. Zajímavý je pak průběh  $ML_2$  diskrepance, která vytváří minimum v ojediné pozici oproti ostatním kritériím, její průběh je hladký podobně jako u AE a nevytváří lokální minima, což ji řadí v tomto testu mezi úspěšné.

### 6.1.2 Plocha kritéria pro doplnění 5. bodu

Dále byla kritéria vyšetřena velmi obdobným způsobem s tím rozdílem, že předem umístěné body byly čtyři a obsadily všechny čtyři rohy definičního oboru. Intuitivně je tedy optimálním řešením pozice uprostřed takto osazeného prostoru. Výsledky měření jsou na Obrázku 6.2. Opět je zařazeno i srovnání s průběhem kritérií po úhlopříčce řešeného prostoru.



Obrázek 6.2: Tvar jednotlivých metrik pro různé polohy 5. bodu.

V tomto případě očividně selhávají SRCC a KRCC, jelikož umístění bodu kdekoliv ve střední části dosahuje stejného pořadí a tedy i celkové pořadové koeficienty se nemění. Kritéria PMCC a Dopt nevytvářejí lokální minima, ale naopak velmi hladce směřují do středu prostoru. Podobně je tomu také u CN a  $ML_2$ . EMM klesá opět velmi prudce a vytváří tentokrát ostré globální minimum. Původní rychlý spád a následovně pozvolné klesání směrem k optimu opět předvádí kritérium AE.

Dle těchto měření lze konstatovat, že AE a EEM se zdají být ze všech zkoumaných kritérií nejvhodnější k optimalizaci. Následně lze ještě vypíchnout z těchto dvou kritérium AE, které pro jeho hladký průběh v tomto porovnání považujeme za nejsnadněji minimalizovatelné.

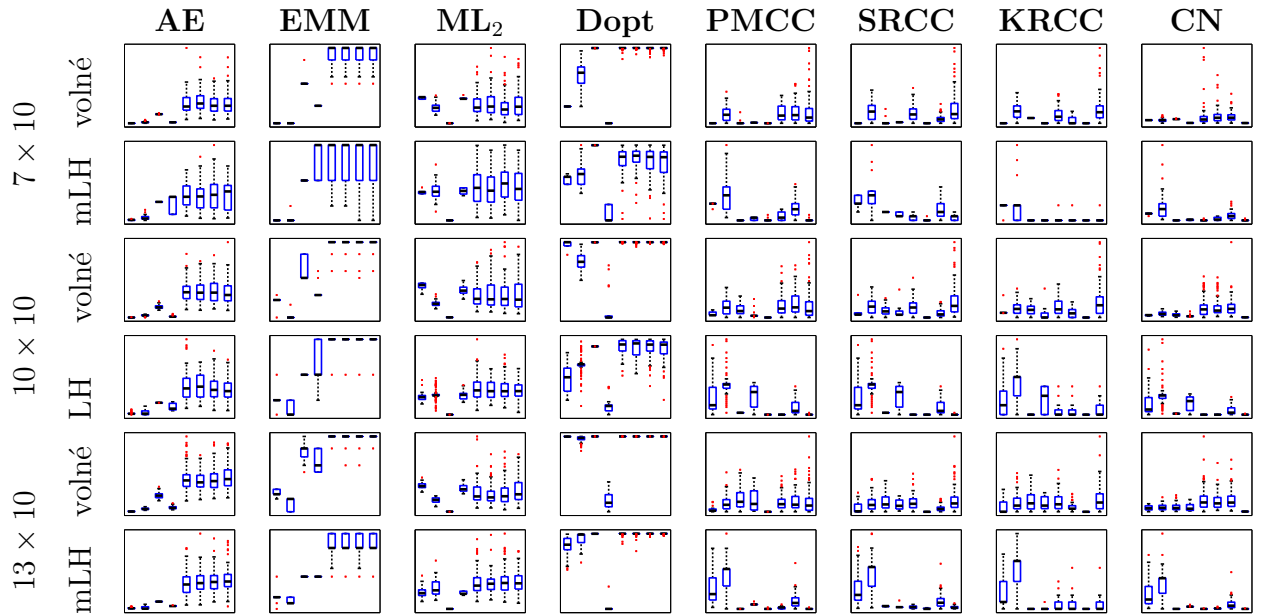
## 6.2 Vzájemné vlastnosti optimálních návrhů

V této části 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 diskretního prostoru. Definiční obor první proměnné obsahuje vždy 10 diskretních hodnot, druhá proměnná může nabývat 7, 10 nebo 13 hodnot podle konkrétního počtu návrhových bodů.

Pro výpočet byla použita výše uvedená optimalizační metoda simulovaného žíhání s počtem iterací  $iter_{max} = 10^6$ . 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 nebylo zapotřebí robustnější optimalizační metody a stačilo tedy uvedené simulované žíhání, kterým byly získány prezentované výsledky.

Celkově bylo získáno 100 optimálních návrhů každého kritéria, které byly ukládány a následně ohodnoceny všemi zbývajících kritérií. Pro grafické znázornění statistického

rozložení výsledků byly použity krabicové grafy (angl. *boxplot*), viz. Obrázek 6.3. 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 náležícími 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.

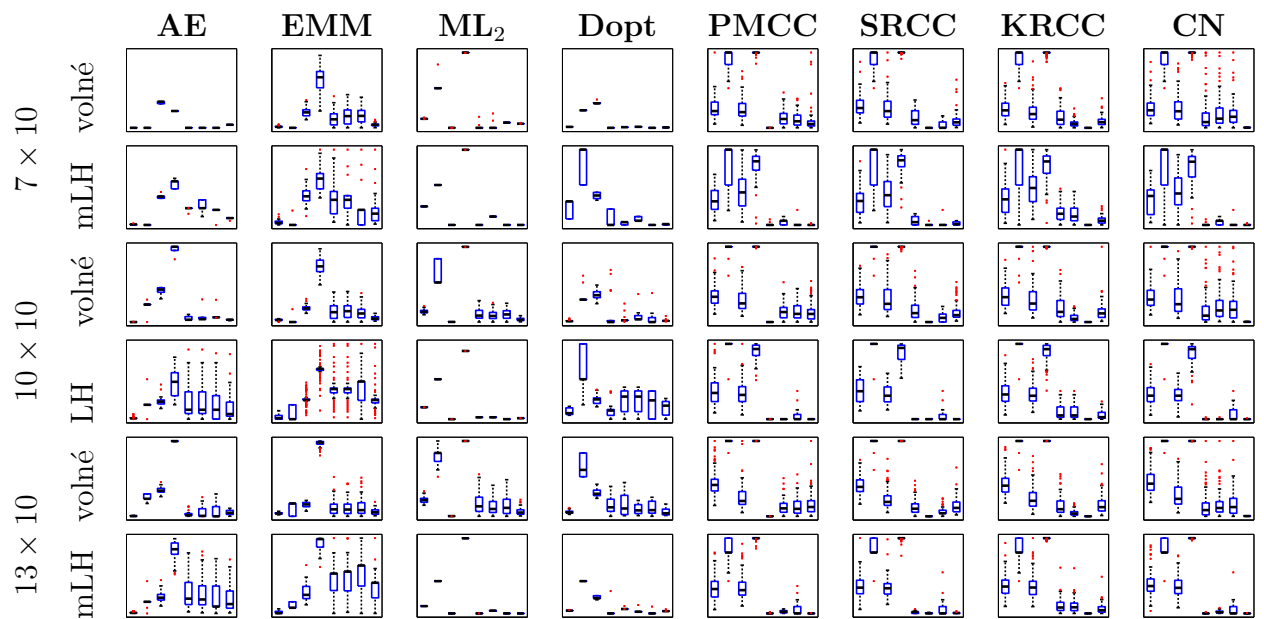


Obrázek 6.3: Krabicové grafy s výsledky vzájemných vlastností optimálních návrhů uspořádané ve sloupcích podle hodnotícího kritéria.

Pro názornost jsou ještě na Obrázku 6.4 uvedeny krabicové grafy s jiným uspořádáním, tentokrát každý obdélník odpovídá jednomu optimálnímu návrhu kritéria příslušícího k danému sloupci. Jednotlivé grafy v obdélníku znázorňují rozdělení hodnot všech kritérií získaných ohodnocením tohoto návrhu, seřazení grafů je opět stejné jako seřazení sloupců.

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

- Minimalizování neortogonalit 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.



Obrázek 6.4: Krabicové grafy s výsledky vzájemných vlastností optimálních návrhů uspořádané ve sloupcích podle optimálního návrhu daného kritéria

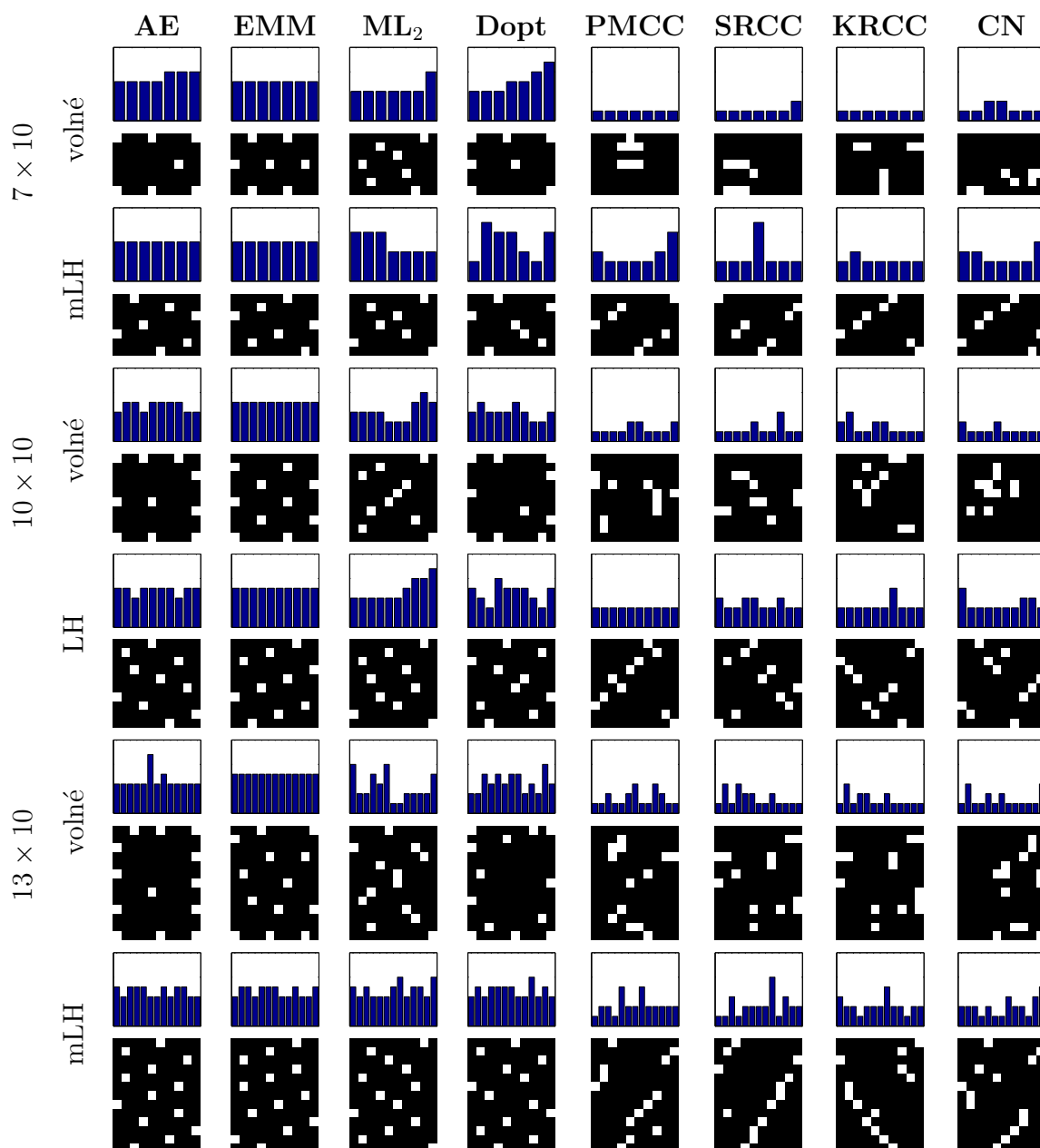
- Kritérium  $ML_2$  definuje návrhy průměrné až horší kvality s ohledem na všechna ostatní kritéria hodnotící pokrytí návrhového prostoru, ovšem jejich míra ortogonalita je dobrá. Při použití LHS podmínek se míra ortogonalita návrhů ještě zvyšuje.
- D-optimalita je ojedinělým kritériem, jelikož všechny 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 ortogonalita.
- 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.

### 6.3 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 opět 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 Obrázku 6.5, kde je vždy připojen i odpovídající optimální návrh v grafické podobě.



Obrázek 6.5: Nejhorší optimální návrhy z hlediska součtu minimálních vzdáleností a odpovídající sloupcové grafy minimálních vzdáleností.

V tomto testu nebyly příliš úspěšné korelační koeficienty PMCC, SRCC a KRCC a číslo podmíněnosti, které v průměru dosahují nejmenších hodnot minimálních vzdáleností, což

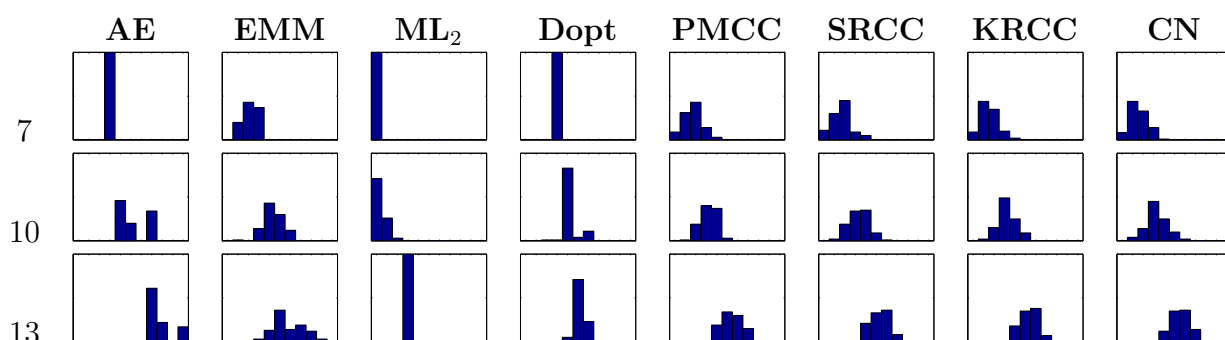


vede k větším shlukům bodů, v některých případech k sobě body přímo přiléhají. Tuto vadu zmírňuje použití LHS podmínky. Lepšího rozprostření bodů a tudíž i větších hodnot minimálních vzdáleností dosahují kritéria Dopt a  $ML_2$ . Nejlepšími výsledky se dle očekávání pyšní kritéria AE a EMM, jejichž optimální návrhy jsou na první pohled dobře pokrývají návrhový prostor, o čemž také vypovídají vyrovnané hodnoty minimálních vzdáleností, které v průměru dosahují největších hodnot.

## 6.4 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 3.



Obrázek 6.6: Četnosti promítnutých návrhů s příslušným počtem zbytečných simulací.

Výsledky jsou zobrazeny v podobě histogramů (viz. Obrázek 6.6), 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 Tabulce 6.1 připojeny průměrné počty zbytečných simulací připadající na jeden návrh.

Z uvedených výsledků je patrné prvenství optimálních návrhů kritéria  $ML_2$ , které po průmětu do prostoru s menším počtem dimenzí obsahují nejméně duplicitních bodů, v případě 7 a 13 přípustných hodnot odebraného parametru dokonce naprosto minimum. Kritérium  $ML_2$  tedy definuje návrhy mající nejlepší promítací vlastnosti ze všech zkoumaných optimálních návrhů. Navzájem velmi podobných výsledků dosáhly optimální návrhy všech

	<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>
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	5,32	4,12	1,11	4,14	3,45	3,44	3,37	3,47

Tabulka 6.1: Průměrný počet zbytečných simulací.

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.

# Kapitola 7

## Sekvenční návrhy

Při generování DoE je dalším důležitým faktorem volba počtu návrhových bodů. Jelikož příliš malý návrh nemusí poskytnout požadovanou přesnost odhadu citlivosti, je často zapotřebí počet návrhových bodů navyšovat. Sekvenčně generované návrhy dosahují horších vlastností než návrhy se stejným počtem bodů generované jednorázově. Z hlediska optimalizace ale může být jednorázové generování velkého návrhu příliš obtížné a sekvenční návrh dosáhne lepšího výsledku oproti jednorázovému návrhu, který uvízl v lokálním extrému. Doplnění bodů do existujícího návrhu je také časově úspornější než generování zcela nového většího návrhu, jelikož jsou pro vyhodnocení SSA využity již naměřené výstupy modelu a k nim jsou pouze dopočítány další výstupy příslušící přidaným bodům.

Stanovení velikosti návrhu zůstává aktuální problematikou, kterou se zabývají například autoři v [29], kteří vytváří sekvenční návrhy pro modelování plochy odezvy, při čemž přidávají jeden nebo více bodů a to do míst s velkou chybou interpolované odezvy získané výchozím návrhem. Pozice přidávaných bodů se přitom stanovuje podle očekávaného zlepšení aproximace plochy odezvy. Z tohoto přístupu vychází i práce [33]. Zde jsou uvažovány nejen experimentální kontrolovatelné parametry, ale i nekontrolovatelné šumové parametry, které nelze ovlivnit. Cílem autorů je stanovit takovou kombinaci kontrolovatelných parametrů, kdy citlivost odezvy modelu je vůči nekontrolovatelným parametrům minimální. Při modelování plochy odezvy je navyšován počet experimentů (návrhových bodů), dokud kritérium předpokládaného zlepšení není dostatečně malé a tedy přesnost aproximace dostatečně přesná.

Generováním sekvenčních návrhů se zabývá např. [8], kde jsou tyto návrhy používány pro vytváření náhradních modelů. Autoři představují přehled různých metod na postupné přidávání bodů do návrhového prostoru po jednom bodu. Získané návrhy porovnávají s jednorázovými návrhy například z hlediska promítací vzdálenosti (z angl. *projected distance*, jedná se o minimální vzdálenost ze vzájemných vzdáleností všech návrhových bodů při postupném uvažování pouze jedné souřadnice), pomocí níž se hodnotí kvalita návrhu z hlediska promítacích vlastností. Cílem je získat ortogonální návrhy s dobrým rozprostřením, ale tyto návrhy nelze použít pro analýzu spolehlivosti, jelikož nesplňují žádná pravděpodobnostní rozdělení.

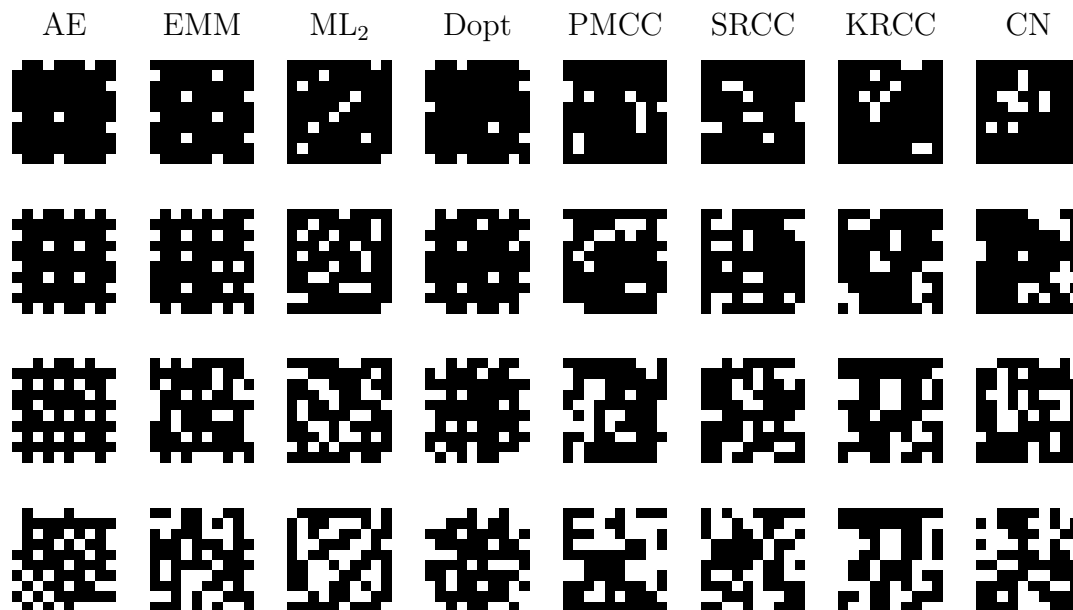
Jiný přístup se zaměřením na LHS návrhy s možností dodržování pravděpodobnostního rozdělení jednotlivých parametrů se nachází v [51]. Generování sekvenčních návrhů je zde založeno na postupném zjemňování diskretizace návrhového prostoru při každém přidání dalších bodů do původního LHS návrhu. Nevýhoda uvedených metod spočívá v rychlém nárůstu přidávaných bodů.

V této práci se řídí sekvenční návrhy základními pravidly, která jsou:

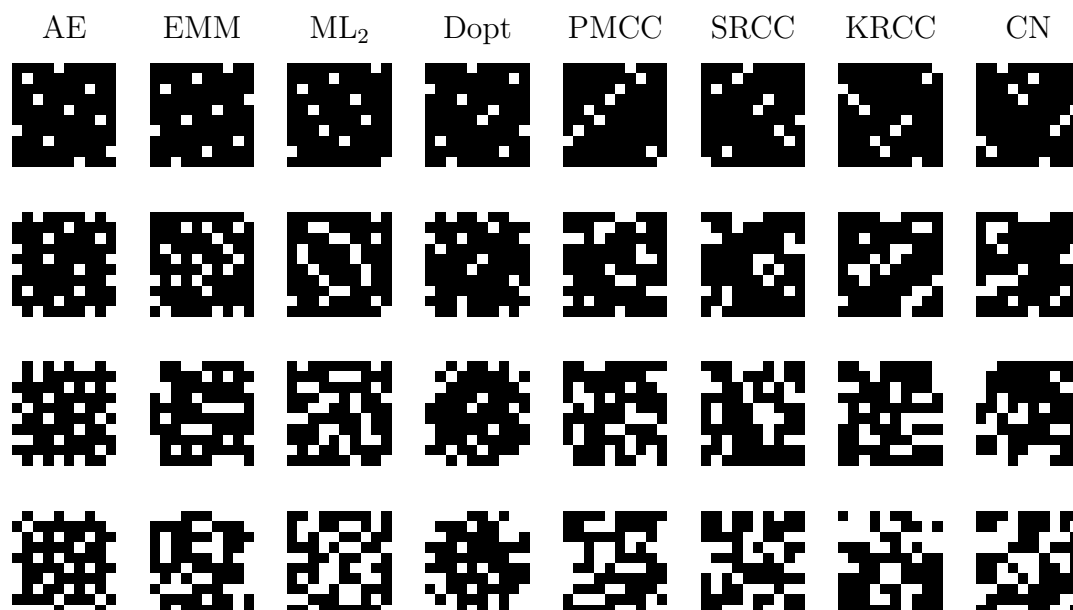
- v každém kroku se přidává stále stejný počet nových bodů, který je roven původnímu počtu bodů,
- původní diskretizace návrhového prostoru se nemění,
- a optimalizované kritérium se vždy vyhodnocuje pro nový návrh jako celek.

Pro generování sekvenčních návrhů byly použity návrhy z Kapitoly 6.2 s deseti návrhovými body jako návrhy výchozí. Větší návrhy byly získány ve třech krocích přidáním dalších deseti bodů v každém kroce. Optimalizační proces se od toho původního příliš nelišil. Hlavním rozdílem byla optimalizace pozic pouze nově přidávaných bodů, zatímco optimalizované kritérium se vyhodnocovalo pro celý návrh.

Do této studie byly zahrnuty dvě metody přidávání bodů. V první z nich nové body nejsou omezeny žádnou podmínkou, tedy jejich pozice jsou optimalizovány pouze vzhledem k danému kritériu. Výchozími návrhy pro tuto metodu byly jak návrhy neomezené tak LHS návrhy. Graficky znázorněné příklady takto získaných návrhů jsou na Obrázcích 7.1 a 7.2. Opět byly vybrány ty návrhy, které měly nejmenší součet minimálních vzdáleností jako v předchozí kapitole.

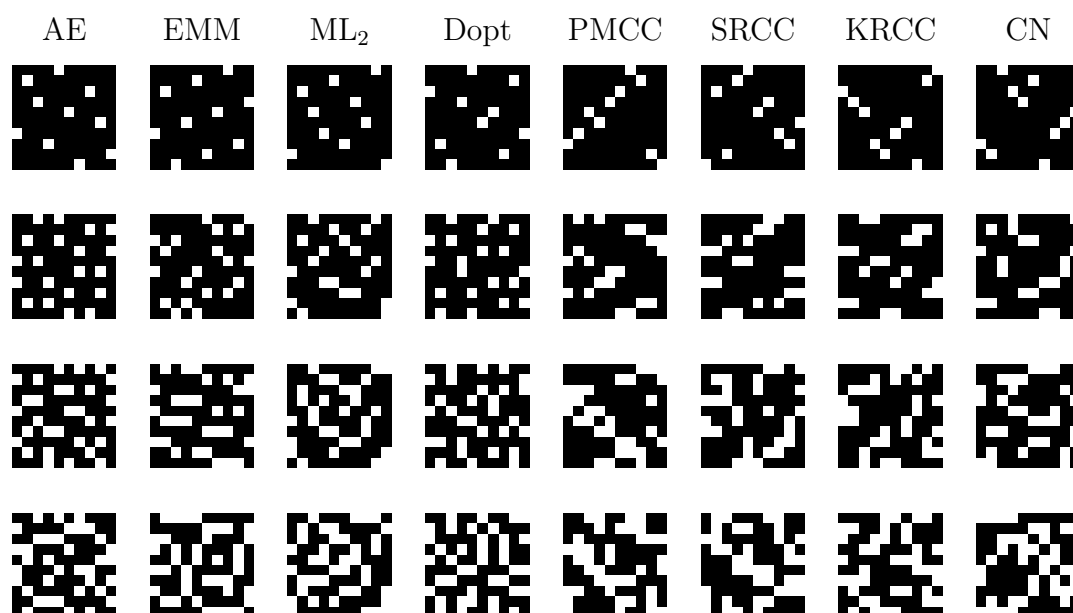


Obrázek 7.1: Neomezené sekvenční návrhy.



Obrázek 7.2: Neomezené sekvenční návrhy s výchozími LHS návrhy.

Základem druhé metody získávání sekvenčních návrhů je zachování LHS podmínky, kdy na každém intervalu bude stejný počet bodů. To znamená, že například v případech 20 a 30 bodů budou na každém intervalu právě dva, respektive tři body. Tato metoda ovšem vyžaduje od výchozích návrhů splnění podmínky LHS, proto jsou zde prezentovány výsledky pouze pro tento typ výchozích návrhů. Výsledné návrhy vybrané stejně jako v předešlém případě jsou na Obrázku 7.3.



Obrázek 7.3: Sekvenční mLHS návrhy s výchozími LHS návrhy.

# Kapitola 8

## 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 [20]. Pokud máme numerický model

$$z = f(x_1, x_2, \dots, x_k) \quad (8.1)$$

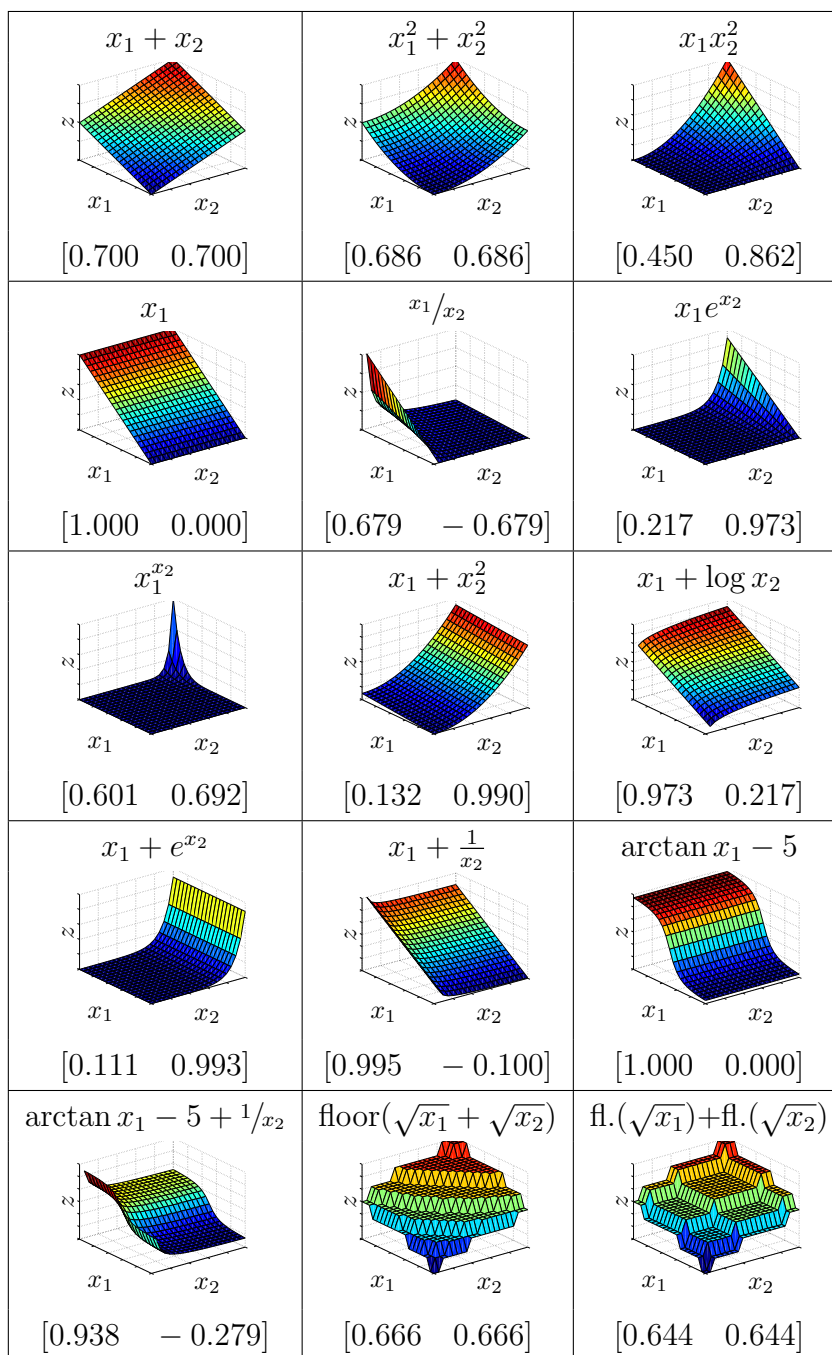
s odezvou modelu  $z$  a parametry  $x_i$ , vliv parametru  $x_i$  na odezvu modelu  $z$  lze ohodnotit Spearmanovým koeficientem pořadové korelace  $\rho_{x_i, z}$  podle

$$\rho_{x_i, z} = 1 - \frac{6 \sum_{a=1}^n (r(x_{a,i}) - r(z_a))^2}{n(n^2 - 1)}, \quad (8.2)$$

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 Obrázku 8.1 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.

Citlivostní analýza byla provedena jak pro všechny základní optimální návrhy z Kapi-



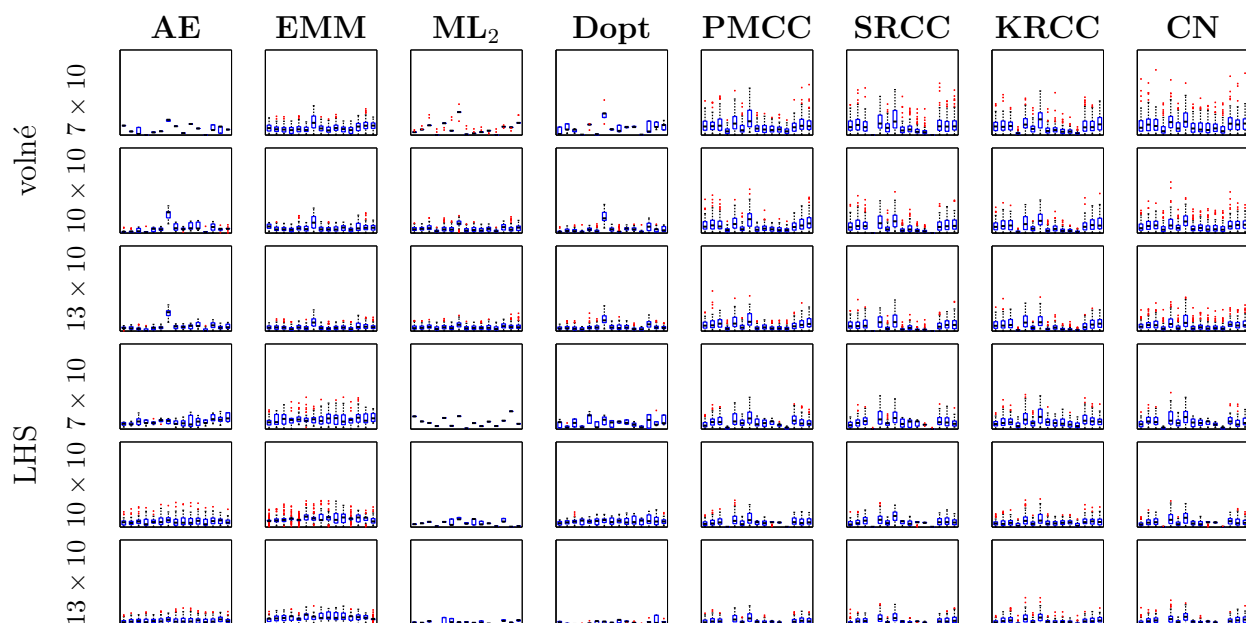
Obrázek 8.1: Tvary 15 funkcí pro citlivostní analýzu s odpovídajícími hodnotami korelací mezi vstupními a výstupními hodnotami.

toly 6, tak i pro sekvenční návrhy z kapitoly předešlé. Byly vypočteny rozdíly mezi korelacemi  $\tilde{\rho}$  získanými optimálními návrhy a korelacemi  $\rho$  získanými plným návrhem. Výslednou chybu  $\epsilon$  v odhadu citlivosti pro danou funkci tvoří průměrný rozdíl mezi každým parametrem a odezvou modelu získanou pro optimální a plný návrh, tj.

$$\epsilon = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k |\tilde{\rho}_{x_i, z} - \rho_{x_i, z}|. \quad (8.3)$$

Pro zobrazení výsledných chyb  $\epsilon$  byly opět zvoleny krabicové grafy, které jsou uvedeny

na Obrázcích 8.2 a 8.3. Výsledky citlivostní analýzy jsou uspořádány tak, že každý obdélník obsahuje 15 krabicových grafů znázorňující statistické rozdělení chyb v predikci citlivosti pro jednotlivé modely uvedené na Obrázku 8.1. Stupnice grafů je v rozmezí 0 v dolní části až 1 v horní části obdélníku. Každý obdélník ukazuje výsledky jednoho optimálního návrhu náležitosti kritériu dle odpovídajícího sloupce a zvolené velikosti návrhového prostoru, případného omezení či počtu návrhových bodů v příslušném řádku.



Obrázek 8.2: Krabicové grafy s výsledky základních optimálních návrhů v odhadu citlivosti teoretických modelů na vstupní parametry.

Dále jsou ještě uvedeny průměrné a maximální chyby v Tabulkách 8.1 a 8.2 pro snažší porovnání jednotlivých optimálních návrhů. Podrobné výsledky jsou v Příloze B.

		AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
		$\mu$	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</b>	<b>32,0</b>	<b>6,5</b>	<b>34,5</b>	<b>6,0</b>	<b>36,3</b>	<b>5,7</b>	<b>41,2</b>	<b>8,6</b>	<b>59,3</b>	<b>7,5</b>	<b>60,8</b>	<b>7,7</b>	<b>51,8</b>	<b>9,2</b>	<b>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</b>	<b>28,9</b>	<b>10,1</b>	<b>37,3</b>	<b>5,4</b>	<b>20,8</b>	<b>5,5</b>	<b>21,9</b>	<b>5,8</b>	<b>37,3</b>	<b>5,8</b>	<b>39,1</b>	<b>6,4</b>	<b>40,5</b>	<b>5,9</b>	<b>42,9</b>

Tabulka 8.1: Průměrné a maximální chyby v predikci citlivosti teoretických modelů pro základní optimální návrhy.

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.

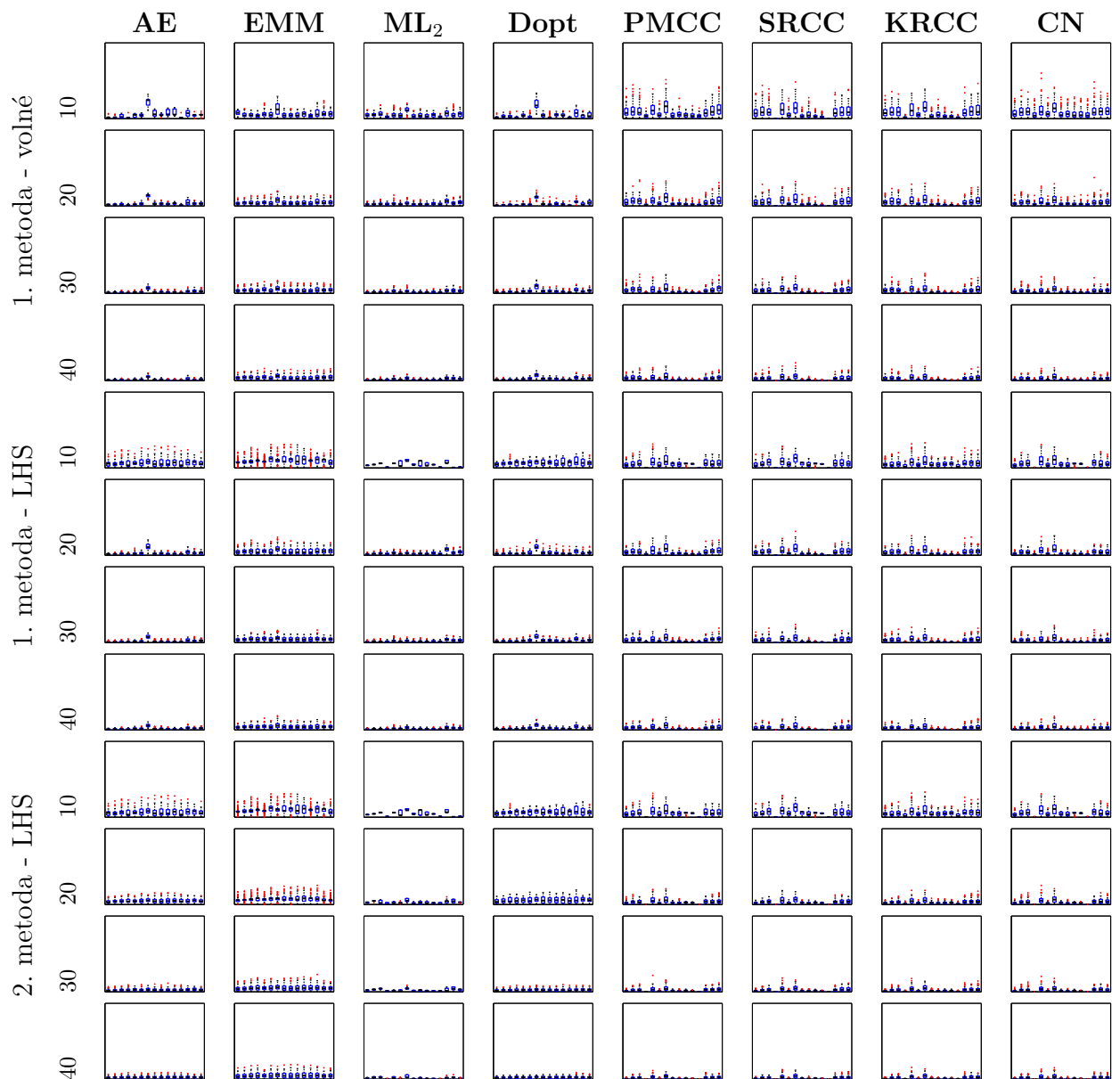
- D-optimální volné návrhy mají také velmi dobré výsledky ale s velkou odchylkou. Volné návrhy kritéria  $ML_2$  jsou trochu horší v průměrných výsledcích, ale velikost odchylky je velmi podobná jako u D-optimálních návrhů.
- Neomezené návrhy kritérií AE a EMM jsou dobré, ale optimální návrhy těchto 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.

		Počet bodů	AE		EMM		$ML_2$		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
			$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max
1. metoda	volné	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
		20	3,3	16,5	4,6	19,7	3,1	14,3	2,9	20,7	5,1	34,2	4,4	32,4	4,4	29,9	4,4	37,4
		30	2,1	12,0	4,3	17,1	2,2	10,6	3,0	17,4	3,6	25,2	3,3	22,7	3,2	26,1	2,9	22,0
		40	1,5	10,0	4,1	16,0	1,7	8,5	2,5	13,0	2,6	19,0	2,4	23,4	2,5	19,6	2,2	17,0
		celkem		<b>3,2</b>	<b>17,6</b>	<b>4,8</b>	<b>20,6</b>	<b>3,0</b>	<b>13,5</b>	<b>3,2</b>	<b>21,2</b>	<b>4,9</b>	<b>32,5</b>	<b>4,4</b>	<b>31,8</b>	<b>4,4</b>	<b>30,5</b>	<b>4,5</b>
1. metoda	LHS	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
		20	2,9	20,2	5,6	23,8	2,8	13,5	3,5	20,3	4,2	25,2	3,9	31,4	3,9	25,7	3,6	25,7
		30	2,0	12,6	4,5	16,5	2,0	9,5	3,0	15,3	3,1	19,1	2,9	23,7	2,9	20,0	2,7	22,6
		40	1,8	10,6	4,3	18,6	1,7	8,3	2,4	13,6	2,5	16,5	2,3	16,9	2,3	14,8	2,2	17,9
		celkem		<b>3,4</b>	<b>18,1</b>	<b>6,1</b>	<b>22,5</b>	<b>2,8</b>	<b>10,6</b>	<b>3,9</b>	<b>17,4</b>	<b>3,8</b>	<b>23,1</b>	<b>3,7</b>	<b>25,1</b>	<b>3,7</b>	<b>23,4</b>	<b>3,5</b>
2. metoda	LHS	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
		20	4,8	15,4	7,1	25,3	2,8	10,2	6,0	19,3	3,1	20,8	3,1	18,5	3,0	18,6	3,0	25,2
		30	2,6	11,3	5,3	22,9	2,3	8,7	2,5	9,6	2,1	21,8	2,2	18,2	2,3	17,5	2,2	20,5
		40	2,5	9,0	4,9	19,2	1,6	5,9	2,3	8,8	1,6	11,3	1,6	12,6	1,8	15,5	1,7	15,1
		celkem		<b>4,2</b>	<b>16,2</b>	<b>6,8</b>	<b>24,6</b>	<b>2,8</b>	<b>9,0</b>	<b>4,4</b>	<b>14,5</b>	<b>3,1</b>	<b>21,3</b>	<b>3,2</b>	<b>19,4</b>	<b>3,2</b>	<b>21,2</b>	<b>3,1</b>

Tabulka 8.2: Průměrné a maximální chyby v predikci citlivosti teoretických modelů pro sekvenční optimální návrhy.

Kvalita všech optimálních návrhů se samozřejmě přidáním další bodů zlepšila. Lze říci, že poznatky získané z výsledků původních malých návrhů jsou podpořeny i velmi podobnými výsledky sekvenčních návrhů, z nichž je možno ještě poznamenat následující:

- Zatímco D-optimální návrhy s malým počtem bodů dosahovaly lepších výsledků při optimalizaci bez omezení než při dodržování LHS podmínek, s nárůstem počtu návrhových bodů dochází k obrácenému efektu a větší LHS návrhy tohoto kritéria mají stejnou či



Obrázek 8.3: Krabicové grafy s výsledky sekvenčních optimálních návrhů v odhadu citlivosti teoretických modelů na vstupní parametry.

menší chybu v odhadu citlivosti v porovnání s návrhy neomezenými se stejným počtem bodů.

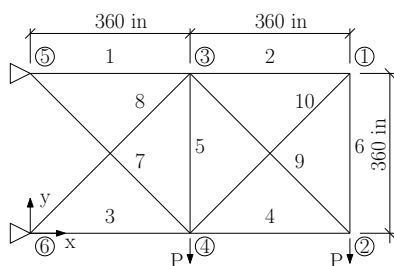
- Nejlepší odhady citlivosti teoretických modelů stanovily sekvenční návrhy kritéria  $ML_2$ , průměrná chyba i odchylka výsledků těchto návrhů byly velmi malé. Kritérium  $ML_2$  navíc v kombinaci s LHS podmínkou definovalo návrhy s ještě větší přesností v SSA.

# Kapitola 9

## Citlivostní analýza na prutových konstrukcích

Předchozí kapitola pojednává o citlivostní analýze teoretických modelů se dvěma parametry, zatímco další studie se zabývala vícedimenzionálním prostorem. Tato kapitola se tedy věnuje názorným inženýrským problémům s větším počtem parametrů. Pro analýzu citlivosti byly vybrány dva modely prutových konstrukcí, které jsou běžně používány jako benchmarky pro rozměrovou optimalizaci.

Prvním modelem je desetiprutová příhradová konstrukce [47], jejíž schéma je na Obrázku 9.1. Materiálové charakteristiky, zatížení a plochy průřezů pocházejí z [34] a jsou uvedeny v Tabulce ???. Parametry modelu jsou plochy průřezů jednotlivých prutů. V diskrétním definičním oboru nabývá každá plocha jedné ze 42 variant příčného průřezu (v  $\text{in}^2$ ): 1,62, 1,80, 1,99, 2,13, 2,38, 2,62, 2,63, 2,88, 2,83, 3,09, 3,13, 3,38, 3,47, 3,55, 3,63, 3,84, 3,87, 3,88, 4,18, 4,22, 4,49, 4,59, 4,80, 4,97, 5,12, 5,74, 7,22, 7,97, 11,50, 13,50, 13,90, 14,20, 15,50, 16,00, 16,90, 18,80, 19,90, 22,00, 22,90, 26,50, 30,00, 33,50.



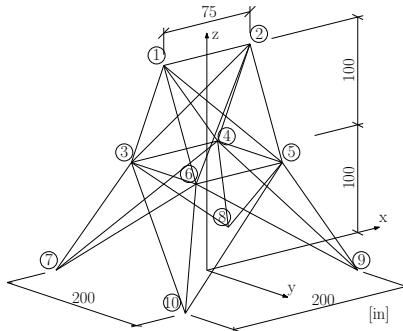
Obrázek 9.1: Schéma řešené konstrukce.

Materiál:	hliník
Objemová hmotnost:	0,1 lb/in <sup>3</sup>
Youngův modul pružnosti:	10 <sup>7</sup> psi
Zatížení P:	100 kips

Tabulka 9.1: Materiálové charakteristiky a zatížení konstrukce.

Dvacetiprutová příhradová 3D věž je na Obrázku 9.2. Materiálové charakteristiky jsou uvedeny v Tabulce 9.2 a zatížení konstrukce v Tabulce 9.3. Symetrie konstrukce určuje osm skupin prutů, kdy pruty dané skupiny mají stejnou plochu příčného průřezu. Celkem má tedy tento model osm parametrů, kdy každý z nich nabývá jedné ze 30 variant příčného průřezu (v  $\text{in}^2$ ): 0,1, 0,2, 0,3, 0,4, 0,5, 0,6, 0,7, 0,8, 0,9, 1,0, 1,1, 1,2, 1,3, 1,4, 1,5, 1,6, 1,7,

1,8, 1,9, 2,0, 2,1, 2,2, 2,3, 2,4, 2,5, 2,6, 2,8, 3,0, 3,2, 3,4 viz. [52].



Obrázek 9.2: Schéma řešené konstrukce.

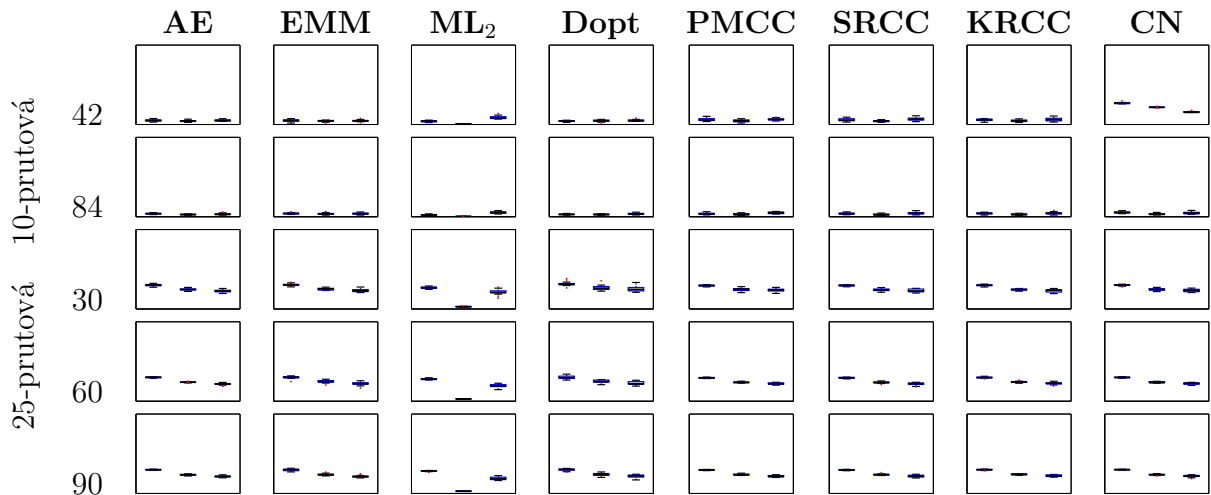
Materiál:	hliník
Objemová hmotnost:	0,1 lb/in <sup>3</sup>
Youngův modul pružnosti:	10 <sup>7</sup> psi

Tabulka 9.2: Materiálové charakteristiky konstrukce.

Uzel	$F_x$	$F_y$	$F_z$
1	1,0	-10,0	-10,0
2	0,0	-10,0	-10,0
3	0,5	0,0	0,0
6	0,6	0,0	0,0

Tabulka 9.3: Zatížení konstrukce v jednotkách kip.

Odezvou těchto modelů jsou tři hodnoty: váha konstrukce  $w$ , maximální posun  $d$  a maximální napětí  $s$ . Implementace těchto modelů byla převzata z [40]. Jelikož řešené problémy mají větší počet dimenzí, generování optimálních návrhů je náročnější, proto byly zvoleny pro porovnání odhadu citlivosti pouze návrhy řídicí se podmínkami LHS, které se optimalizují snadněji. Použití tohoto typu návrhů automaticky stanovuje počet návrhových bodů, který se vždy rovná počtu všech možných hodnot parametrů modelu. Tedy v případě desetiprutové konstrukce je to 42 a v případě dvacetipětiprutové konstrukce 30 návrhových bodů.



Obrázek 9.3: Krabicové grafy s výsledky citlivostní analýzy na konstrukčních modelech.

Pro optimalizaci těchto LHS návrhů bylo opět použito simulované žíhání se stejnými hodnotami parametrů jako v Kapitole 5, ale maximální počet iterací byl tentokrát 10<sup>7</sup>. Celkem se generovalo 20 optimálních návrhů každého kritéria.

Citlivost modelů stanovená na základě získaných optimálních návrhů byla porovnána s citlivostí stanovenou použitím návrhu s  $2 \cdot 10^7$  návrhovými body, který byl generován

metodou Monte Carlo. Statistické rozdělení chyb  $\epsilon$  v odhadu korelací mezi parametry a odezvou modelu znázorňují krabicové grafy na Obrázku 9.3. Jednotlivé obdélníky obsahují tři grafy s rozdělením chyb v odhadu citlivosti jednotlivých výstupů modelu v pořadí váha  $w$ , maximální posun  $d$  a maximální napětí  $s$ . Stupnice grafů je v rozmezí 0 v dolní části až 1 v horní části obdélníku. Každý obdélník ukazuje výsledky jednoho optimálního návrhu náležícího kritériu dle odpovídajícího sloupce a řešené konstrukce v příslušném řádku.

Konkrétní hodnoty průměrných a maximálních chyb jsou následně v Tabulce 9.4.

	Model	AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
		$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max
10-prutová 42	$w$	5,1	7,5	4,9	7,5	4,1	5,5	4,3	5,4	6,2	10,3	5,9	9,2	5,8	7,5	27,0	29,7
	$d$	4,5	6,7	4,4	5,6	0,7	1,1	4,6	6,5	4,5	7,3	4,3	6,2	4,7	7,1	21,7	23,0
	$s$	5,1	7,3	4,7	7,7	8,9	13,9	5,1	8,0	6,5	9,2	6,8	11,0	6,6	10,7	15,7	17,7
	celkem	<b>4,9</b>	<b>7,5</b>	<b>4,7</b>	<b>7,7</b>	<b>4,6</b>	<b>13,9</b>	<b>4,7</b>	<b>8,0</b>	<b>5,7</b>	<b>10,3</b>	<b>5,7</b>	<b>11,0</b>	<b>5,7</b>	<b>10,7</b>	<b>21,5</b>	<b>29,7</b>
10-prutová 84	$w$	3,9	5,1	4,1	6,1	2,3	3,6	3,0	4,2	3,7	6,3	3,9	6,1	4,1	5,8	5,4	7,7
	$d$	2,7	3,6	3,6	6,7	0,4	0,7	2,9	4,0	3,1	5,0	2,7	4,6	2,9	4,4	3,4	5,5
	$s$	3,3	5,7	3,9	6,0	5,4	7,7	3,7	5,8	5,0	6,7	4,3	7,7	4,4	8,0	4,8	8,0
	celkem	<b>3,3</b>	<b>5,7</b>	<b>3,9</b>	<b>6,7</b>	<b>2,7</b>	<b>7,7</b>	<b>3,2</b>	<b>5,8</b>	<b>3,9</b>	<b>6,7</b>	<b>3,6</b>	<b>7,7</b>	<b>3,8</b>	<b>8,0</b>	<b>4,5</b>	<b>8,0</b>
25-prutová 30	$w$	30,0	32,3	30,4	33,5	26,8	28,9	31,6	38,3	29,5	30,8	29,6	30,7	29,9	31,4	30,0	31,2
	$d$	24,6	27,2	25,1	27,5	23,6	28,3	26,8	35,7	24,4	28,1	24,1	27,1	24,3	25,8	24,5	27,2
	$s$	22,6	25,9	23,2	27,6	21,2	27,4	25,2	33,4	23,8	27,2	23,0	26,0	22,7	25,8	23,4	26,3
	celkem	<b>25,7</b>	<b>32,3</b>	<b>26,2</b>	<b>33,5</b>	<b>23,9</b>	<b>28,9</b>	<b>27,9</b>	<b>38,3</b>	<b>25,9</b>	<b>30,8</b>	<b>25,6</b>	<b>30,7</b>	<b>25,6</b>	<b>31,4</b>	<b>26,0</b>	<b>31,2</b>
25-prutová 60	$w$	30,0	30,9	30,0	31,9	27,8	29,5	30,2	34,1	29,4	30,4	29,4	30,4	29,9	31,4	29,9	30,9
	$d$	23,9	25,1	24,7	27,7	22,5	25,5	24,9	27,3	23,8	25,3	23,6	25,6	24,2	26,5	23,8	25,1
	$s$	21,6	23,7	22,3	25,8	19,3	22,6	22,6	26,4	22,1	23,9	21,9	23,9	22,5	25,1	22,2	23,8
	celkem	<b>25,2</b>	<b>30,9</b>	<b>25,7</b>	<b>31,9</b>	<b>23,2</b>	<b>29,5</b>	<b>25,9</b>	<b>34,1</b>	<b>25,1</b>	<b>30,4</b>	<b>25,0</b>	<b>30,4</b>	<b>25,5</b>	<b>31,4</b>	<b>25,3</b>	<b>30,9</b>
25-prutová 90	$w$	29,9	30,6	29,6	31,7	28,2	29,0	29,9	31,6	29,6	30,2	29,5	30,4	29,9	31,1	29,9	30,6
	$d$	23,5	24,8	23,8	26,8	22,6	24,8	24,0	27,1	23,7	25,6	23,7	25,8	23,9	25,0	23,6	25,0
	$s$	21,5	23,5	21,5	24,5	18,9	22,4	21,7	24,2	21,7	23,7	21,8	24,2	22,3	24,0	21,8	23,6
	celkem	<b>25,0</b>	<b>30,6</b>	<b>25,0</b>	<b>31,7</b>	<b>23,2</b>	<b>29,0</b>	<b>25,2</b>	<b>31,6</b>	<b>25,0</b>	<b>30,2</b>	<b>25,0</b>	<b>30,4</b>	<b>25,4</b>	<b>31,1</b>	<b>25,1</b>	<b>30,6</b>

Tabulka 9.4: Průměrné a maximální chyby v predikci citlivosti konstrukčních modelů.

Uvedené výsledky citlivostní analýzy konstrukčních modelů mohou být shrnuty do několika následujících poznatků:

- Návrhy všech kritérií kromě CN předvedly velmi dobré výsledky v odhadu citlivosti na modelu desetiprutové konstrukce. Ovšem citlivosti všech tří výstupů tohoto modelu stanovené pomocí návrhů kritéria CN měly až překvapivě velké chyby.
- Lepších výsledků v případě desetiprutové konstrukce dosáhly návrhy kritérií zabývající se rozprostřením návrhů. Nejmenší průměrná chyba v odhadu citlivosti byla sice stanovena na základě návrhů kritéria ML<sub>2</sub>, ale výsledky těchto optimálních návrhů mají relativně velké rozdíly mezi jednotlivými výstupy modelu. Z tohoto hlediska jsou výsledky návrhů AE, EMM a Dopt více vyrovnané.

- Výsledky získané pro model dvacetipřipřutové konstrukce jsou velmi špatné pro všechna studovaná kritéria a nelze s jistotou stanovit, které z kritérií definuje vhodnější návrh z hlediska odhadu citlivosti na tomto modelu. Důvodem může být příliš malý počet návrhových bodů, který je v případě jednorázově generovaných návrhů 30 bodů. Avšak ani v případě sekvenčních návrhů s 60 body nedošlo k výraznému zpřesnění odhadu citlivosti. V obou případech jsou získané výsledky pro tento model neuspokojivé pro optimální návrhy všech kritérií.

# Kapitola 10

## Závěr

Cílem této bakalářské 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,  $ML_2$  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 podmíněnosti, které hodnotí ortogonalitu daného návrhu.

Tato kritéria jsou nejprve porovnána z hlediska jejich optimalizace. Následně jsou získány neomezené i LHS optimální návrhy všech těchto kritérií, u nichž je zkoumána jejich kvalita vzájemných vlastností a minimální vzdálenost mezi jejich jednotlivými návrhovými body. Tyto jednorázově generované návrhy jsou dále použity jako výchozí návrhy pro získání větších návrhů při sekvenčním doplňování bodů do těchto již existujících návrhů. Všechny zmíněné návrhy jsou nakonec použity pro stochastickou citlivostní analýzu 15 teoretických a dvou konstrukčních modelů. Následující odstavce shrnují výsledky získané v průběhu celého výzkumu uvedených kritérií.

Celkově špatné výsledky ve všech provedených testech má kritérium CN. Kvůli častému výskytu lokálních extrémů je jeho optimalizace složitější. 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.

Ostatní kritéria hodnotící ortogonalitu návrhů, tj. PMCC, SRCC a KRCC, také nejsou příliš úspěšná. Také vykazují obtíže při jejich optimalizaci, konkrétně SRCC a KRCC kvůli své diskrétní povaze a PMCC kvůli větší náchylnosti k tvorbě lokálních extrémů. Optimální návrhy těchto kritérií také 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 celkově použití těchto LHS návrhů nezajišťuje velkou přesnost, protože získané výsledky v SSA mají velké odchylky.

Jednoduchým výkladem a časově nenáročným vypočtem jsou charakteristická kritéria AE a EMM. Jejich optimalizace není stížena výskytem zbytečných lokálních extrémů, jako

je tomu u jiných kritérií (CN, PMCC a Dopt). Návrhy těchto kritérií mají velmi podobné vlastnosti, dobře pokrývají návrhový prostor a z hlediska ortogonalit dosahují průměrných výsledků. Použití těchto návrhů v SSA vede k velmi dobrým výsledkům s malými odchylkami. Pokud jde o vzájemné porovnání výsledků v CA mezi těmito dvěma kritérii, lepších výsledků dosahují návrhy kritéria AE. Při aplikaci LHS podmínek dochází ke zhoršení výsledků u obou kritérií. Tato tvrzení se potvrzují i při testování příslušných sekvenčních návrhů.

Nakonec jsou zmíněna kritéria definující návrhy s nejlepší 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 teoretických modelů dosáhly návrhy  $ML_2$ , zatímco v případě desetiprutové konstrukce byly vyrovnější odhady D-optimálních návrhů. Avšak 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 kritéria i jeho optimálních návrhů ukazuje jako nejvhodnější pro generování návrhů experimentů pro stochastickou citlivostní analýzu kritérium  $ML_2$ . Toto kritérium není příliš známé a používané, ovšem jeho optimální návrhy mají velmi dobrou 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.

V návaznosti na tyto poznatky bylo již kritérium  $ML_2$  použito pro vytvoření návrhu experimentů pro trénování neuronových sítí [35], krátce k přípravě vstupních dat se lze dočíst v Příloze D. Dále je nutno zmínit soutěžní práci [24], konferenční příspěvky [25], [26] a [32] a článek [27], které vznikly v průběhu celé studie kritérií a vhodnosti jejich optimálních návrhů pro citlivostní analýzu.



# Literatura

- [1] de Aguiar, P.; Bourguignon, B.; Khots, M.; aj.: D-optimal designs. Chemometr Intell Lab, ročník 30, č. 2, 1995: s. 199–210.
- [2] Alam, F. M.; McNaught, K. R.; Ringrose, T. J.: A comparison of experimental designs in the development of a neural network simulation metamodel. Simulation Modelling Practice and Theory, ročník 12, č. 7-8, 2004: s. 559–578.
- [3] Audze, P.; Eglais, V.: New approach for planning out of experiments. Problems of Dynamics and Strengths, ročník 35, 1977: s. 104–107.
- [4] Banks, J. (editor): Handbook of Simulation: Principles, Methodology, Advances, Applications, and Practice. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2007.
- [5] Bates, S.; Sienz, J.; Langley, D.: Formulation of the Audze-Eglais Uniform Latin Hypercube design of experiments. Adv Eng Softw, ročník 34, č. 8, 2003: s. 493–506.
- [6] Bursztyn, D.; Steinberg, D. M.: Comparison of designs for computer experiments. Journal of Statistical Planning and Inference, ročník 136, č. 3, 2006: s. 1103–1119.
- [7] Cioppa, T. M.; Lucas, T.: Efficient Nearly Orthogonal and Space-Filling Latin Hypercubes. Technometrics, ročník 49, č. 1, 2007: s. 45–55.
- [8] 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, 2011: s. 683–696.
- [9] Černý, J.: Thermodynamical approach to the traveling salesmanproblem: An efficient simulation algorithm. Journal of Optimization Theory and Applications, ročník 45, 1985: str. 41–51.
- [10] van Dam, E.; Husslage, B. M.; den Hertog, D.: One-dimensional nested maximin designs. CentER Discussion Paper, , č. 2004-66, 2004: str. 14.
- [11] van Dam, E.; Rennen, G.; Husslage, B. G. M.: Bounds for Maximin Latin Hypercube Designs. Oper Res, ročník 57, č. 3, 2009: s. 595–608.
- [12] Fang, K.; Ma, C.-X.; Winker, P.: Centered  $L_2$ -discrepancy of Random Sampling and Latin Hypercube Design, and Construction of Uniform Designs. Math Comput, ročník 71, č. 237, 2002: s. 275–296.
- [13] Fang, K.; Wang, Y.: Number-theoretic Methods in Statistics. London: Chapman & Hall, 1994.
- [14] Fisher, R. A.: The design of experiments. Oliver & Boyd, 1935.

- [15] Garcke, J.: Sparse Grid Tutorial, 2008, [online, cit. 2012-04-17].  
URL <<http://www.math.tu-berlin.de/~garcke/paper/sparseGridTutorial.pdf>>
- [16] Goel, T.; Haftka, R.; Shyy, W.; aj.: Pitfalls of using a single criterion for selecting experimental designs. Int J Numer Meth Eng, ročník 75, č. 2, 2008: s. 127–155.
- [17] Heinrich, S.: Efficient Algorithms for Computing the  $L_2$ -discrepancy. Math Comput, ročník 65, č. 216, 1996: s. 1621–1633.
- [18] Heiss, F.; Winschel, V.: Quadrature on sparse grids. [online, cit. 2012-04-17], 2007.  
URL <<http://sparse-grids.de/>>
- [19] Helton, J.; Johnson, J.; Oberkampf, W.; aj.: Sensitivity analysis in conjunction of with evidence theory representations epistemic uncertainty. Reliab Eng Syst Safe, ročník 91, č. 10-11, 2006: s. 1414–1434.
- [20] Helton, J.; Johnson, J.; Sallaberry, C.; aj.: Survey of sampling-based methods for uncertainty and sensitivity analysis. Reliab Eng Syst Safe, ročník 91, č. 10-11, 2006: s. 1175–1209.
- [21] 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, 2010: s. 73–88.
- [22] Holmes, P.: Correlation: From Picture to Formula. Teaching Statistics, ročník 23, č. 3, 2001: s. 67–71.
- [23] Iman, R.; Conover, W.: Small sample sensitivity analysis techniques for computer models, with an application to risk assessment. Communications in Statistics - Theory and Methods, ročník A9, č. 17, 1980: s. 1749–1842.
- [24] Janouchová, E.: Návrh experimentů v diskretním prostoru pro stochastickou citlivostní analýzu, [online, cit. 2012-03-31]. 2011.  
URL <[http://klobouk.fsv.cvut.cz/~anicka/bazant/works/2011\\\_janouchova.pdf](http://klobouk.fsv.cvut.cz/~anicka/bazant/works/2011\_janouchova.pdf)>
- [25] Janouchová, E.; Kučerová, A.: Comparison of space-filling designs in discrete domains. In Proc. of Engineering Mechanics 2011, editace V. Fuis; Svratka: 2011.
- [26] Janouchová, E.; Kučerová, A.: Sampling-based sensitivity analysis for designing truss structures. In NMM 2011 Nano & Macro Mechanics, Praha: České vysoké učení technické v Praze, 2011, str. 65–72.
- [27] Janouchová, E.; Kučerová, A.: Competitive Comparison of Optimal Designs of Experiments for Sampling-based Sensitivity Analysis. Computers & Structures, 2011, odesláno k publikaci, e-print: arXiv:1201.0942.
- [28] Johnson, M.; Moore, L.; Ylvisaker, D.: Minimax and maximin distance designs. Journal of Statistical Planning and Inference, ročník 26, č. 2, 1990: s. 131–148.
- [29] Jones, D. R.; Schonlau, M.; Welch, W. J.: Efficient global optimization of expensive black-box functions. Journal of Global Optimization, ročník 13, 1998: s. 455–492.
- [30] Kirkpatrick, S.; Gelatt, C., Jr.; Vecchi, M. P.: Optimization by Simulated Annealing. Science, ročník 220, 1983: str. 671–680.

- [31] Kučerová, A.: Identification of nonlinear mechanical model parameters based on softcomputing methods. Dizertační práce, Ecole Normale Supérieure de Cachan, Laboratoire de Mécanique et Technologie, 2007.
- [32] Kučerová, A.; Janouchová, E.: Design of Experiments Suitable for Sampling-based Sensitivity Analysis. In Proceedings of the Second International Conference on Soft Computing Technology in Civil, Structural and Environmental Engineering, editace B. Topping; Y. Tsompanakis, Stirlingshire, Scotland: Civil-Comp Press, 2011.
- [33] Lehman, J. S.; Santner, T. J.; Notz, W. I.: Designing computer experiments to determine robust control variables. Statistica Sinica, ročník 14, 2004: s. 571–590.
- [34] Lemonge, A.; Barbosa, H.: An adaptive penalty scheme for genetic algorithms in structural optimization. International Journal for Numerical Methods in Engineering, ročník 59, 2003: s. 703–736.
- [35] Mareš, T.; Janouchová, E.; Kučerová, A.: Artificial Neural Networks in Calibration of Nonlinear Models. In Third International Symposium on Life-Cycle Civil Engineering 2012.
- [36] 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, 1979: s. 239–245.
- [37] Myšáková, E.; Lepš, M.: Comparison of space-filling design strategies. In Proc. of Engineering Mechanics 2011, editace V. Fuis; Svratka: 2011.
- [38] Novák, D.; Vořechovský, M.; Rusina, M.: FREET v. 1.5 - program documentation, [online, cit. 2012-03-31]. Brno/Červenka consulting, Praha, user's and theory guides vydání, 2011.  
URL <<http://www.freet.cz>>
- [39] Novák, J.: Generator of optimal LHS designs SPERM v. 2.0, [online, cit. 2012-03-31]. Centre for Integrated Design of Advanced Structures (CIDEAS), České vysoké učení technické v Praze, 2011.  
URL <[http://www.cideas.cz/ke\\_stazeni/sperm/index.htm](http://www.cideas.cz/ke_stazeni/sperm/index.htm)>
- [40] Pospíšilová, A.: Analýza tradičních příkladů rozměrové optimalizace. Bakalářská práce, České vysoké učení technické v Praze, 2010.
- [41] Saltelli, A.; Chan, K.; Scott, E. M.: Sensitivity analysis. New York: NY:Wiley, 2000.
- [42] Simpson, T. W.; Peplinski, J. D.; Koch, P. N.; aj.: On the use of statistics in design and implications for deterministic computer experiments. In Design Theory and Methodology- DTM'97, DETC97/DTM-3881, Sacramento, CA, USA: ASME, 1997.
- [43] 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, 1918: s. 1–85.
- [44] StatSoft, I.: Electronic Statistics Textbook, [online, cit. 2012-04-18]. 2011, tulsa, OK: StatSoft.  
URL <<http://www.statsoft.com/textbook/>>

- [45] 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, Stirlingshire, Scotland: Civil-Comp Press, 2007.
- [46] Vašíček, Z.: Simulované žíhání, [online, cit. 2012-04-4].  
URL <<http://feldocuments.googlecode.com/svn-history/r127/trunk/NS/msi.pdf>>
- [47] Venkaya, V.: Design of optimum structures. Computers and Structures, ročník 1, 1971: s. 265–309.
- [48] Viana, F.; Venter, G.; Balabanov, V.: An algorithm for fast optimal Latin hypercube design of experiments. Int J Numer Meth Eng, ročník 82, č. 2, 2010: s. 135–156.
- [49] Vieira, H.; Sanchez, S.; Kienitz, K. H.; aj.: Generating and improving orthogonal designs by using mixed integer programming. European Journal of Operational Research, ročník 215, č. 3, 2011: s. 629–638.
- [50] Voelkel, J. G.: Sequential Experimental Designs For Sensitivity Experiments. Technická zpráva, Rochester Institute of Technology, 1999.
- [51] Vořechovský, M.: Hierarchical Subset Latin Hypercube Sampling for correlated random vectors. In Proceedings of the First International Conference on Soft Computing Technology in Civil, Structural and Environmental Engineering, editace B. Topping; Y. Tsompanakis, Stirlingshire, Scotland: Civil-Comp Press, 2009.
- [52] Wu, S.-J.; Chow, P.-T.: Steady-state genetic algorithms for discrete optimization of trusses. Computers and Structures, ročník 56, č. 6, 1995: s. 979–991.

# Příloha A

## Kód použitého optimalizačního algoritmu

Jak bylo řečeno v Kapitole 5, pro optimalizaci bylo použito simulované žhání. Při optimalizaci neomezených návrhů nebyly do funkcí jednotlivých kritérií posílány přímo návrhové matice  $X$ , ale pouze vektor  $y$  jednočíselných pozic návrhových bodů, který byl převeden na návrhovou matici až v samotné funkci. Převod je uveden v závěru kódu před uložením výsledného řešení. Kód tohoto algoritmu pro neomezené návrhy se dvěma parametry je následující:

```
1 %% Zadání vlastností DoE:
2 m = [10 10]; % počet možných hodnot jednotlivých parametrů
3 n = 10; % počet návrhových bodů
4
5 %% Zadání parametrů algoritmu:
6 itermax =1000000; % maximální počet iterací
7 Tmax = 0.001 ; % maximální teplota systému
8 Tmin = 0.000001; % minimální teplota systému
9 succmax = itermax/100; % max. počet přijatých řešení na tepl. hladině
10 countmax = 10*succmax; % max. počet iterací na teplotní hladině
11 Tmult = (Tmin/Tmax)^(succmax/itermax); % konstanta pro snižování teploty
12
13 %% Vlastní algoritmus:
14 iter = 0;
15 T = Tmax;
16 free = m(1)*m(2) - n; % počet volných pozic
17 A = zeros(m(1),m(2));
18 y = randsample(m(1)*m(2),n); % pozice bodů
19 A(y)=1; % generování výchozího řešení
20 z = find(A<1); % volné pozice
21 value = get_criterium(y, m); % ohodnocení řešení optimalizovaným kritériem
22 best = A; % nejlepší nalezené řešení
23 bestvalue = value; % nejlepší dosažená hodnota kritéria
24 while (iter < stepmax)
25     count = 0;
26     succ = 0;
27     while ( (count < countmax) && (succ < succmax) )
28         iter = iter + 1;
29         count = count + 1;
```

```

31 % generování a ohodnocení nového řešení
32     a = y(ceil(rand*n));           % volba bodu pro přemístění
33     b = z(ceil(rand*free));       % volba nové pozice bodu
34     B = A;
35     B([a b]) = B([b a]);         % nové řešení
36     yB = find(B==1);
37     valuenew = get_criterium(yB, m); % ohodnocení nového řešení
38
39 % přijetí lepšího řešení a případné přijetí horšího řešení
40     if ((valuenew<value) || (rand < exp((value-valuenew)/T)))
41         A([a b]) = A([b a]);
42         y = find(A==1);
43         z = find(A==0);
44         value = valuenew;
45         succ = succ + 1;
46         if (valuenew<bestvalue)
47             bestvalue = valuenew;
48             best = A;
49         end
50     end
51     end
52     T = T*Tmult;                 % snížení teploty
53 end
54
55 %% Úprava výsledného řešení do podoby návrhové matice (3.16) a jeho uložení
56 y = find(best == 1);
57 DoE(:,1) = ceil(y(:)/m(1));
58 DoE(:,2) = mod(y(:),m(1));
59 DoE(DoE(:,2)==0,2) = m(1);
60 save('DoE.mat', 'DoE');

```

Algoritmus pro LHS návrhy libovolného počtu parametrů:

```

1 %% Zadání vlastností DoE:
2 k = 2;                               % počet parametrů
3 n = 10;                               % počet návrhových bodů
4
5 %% Zadání parametrů algoritmu:
6 itermax =1000000;                    % maximální počet iterací
7 Tmax = 0.001 ;                       % maximální teplota systému
8 Tmin = 0.000001;                     % minimální teplota systému
9 succmax = itermax/100;                % max. počet přijatých řešení na tepl. hladině
10 countmax = 10*succmax;                % max. počet iterací na teplotní hladině
11 Tmult = (Tmin/Tmax)^(succmax/itermax); % konstanta pro snižování teploty
12
13 %% Vlastní algoritmus:
14 iter = 0;
15 T = Tmax;
16 X = zeros(n,k);                       % návrhová matice
17 for i=1:k
18     X(:,i)= randsample(n,n);          % generování výchozího řešení
19 end
20 value = get_criterium(X);              % ohodnocení řešení optimalizovaným kritériem
21 best = X;                              % nejlepší nalezené řešení
22 bestvalue = value;                     % nejlepší dosažená hodnota kritéria
23 while (iter < itermax)
24     count = 0;
25     succ = 0;
26     while ( (count < countmax) && (succ < succmax) )

```

```

27     iter = iter + 1;
28     count = count + 1;
29
30 % generování a ohodnocení nového řešení
31     a = fix(k*rand)+1;           % volba měněné souřadnice
32     b = fix((n)*rand(1,2))+1;   % volba prohazovaných bodů
33     B = X;
34     B([b(1) b(2)],a) = B([b(2) b(1)],a); % nové řešení
35     valuenew = get_criterium(B); % ohodnocení nového řešení
36
37 % přijetí lepšího řešení a případné přijetí horšího řešení
38     if ((valuenew<value) || (rand < exp((value-valuenew)/T)))
39         X([b(1) b(2)],a) = X([b(2) b(1)],a);
40         value = valuenew;
41         succ = succ + 1;
42         if (valuenew<bestvalue)
43             bestvalue = valuenew;
44             best = X;           % nejlepší nalezené řešení
45         end
46     end
47 end
48     T = T*Tmult;               % snížení teploty
49 end
50
51 %% Uložení výsledného řešení
52 DoE = best;
53 save('DoE.mat', 'DoE');

```

Algoritmus simulovaného přezhívání pro LHS návrhy libovolného počtu parametrů:

```

1 %% Zadání vlastností DoE:
2 k = 2;           % počet parametrů
3 n = 10;         % počet návrhových bodů
4 bests = zeros(n,k,10); % nejlepší nalezená řešení
5
6 %% Zadání parametrů algoritmu:
7 itermax =1000000; % maximální počet iterací
8 Tmax = 0.001 ;   % maximální teplota systému
9 Tmin = 0.000001; % minimální teplota systému
10 succmax = itermax/100; % max. počet přijatých řešení na tepl. hladině
11 countmax = 10*succmax; % max. počet iterací na teplotní hladině
12 nre = 3;        % konstanta ovlivňující průběh ochlazování
13 Tmult = (Tmin/Tmax)^(succmax*nre/itermax); % konstanta pro snižování teploty
14
15 %% Vlastní algoritmus:
16 iter = 0;
17 T = Tmax;
18 X = zeros(n,k); % návrhová matice
19 for i=1:k
20     X(:,i)= randsample(n,n); % generování výchozího řešení
21 end
22 value = get_criterium(X); % ohodnocení řešení optimalizovaným kritériem
23 best = X; % nejlepší nalezené řešení
24 kbest = 1; % počet nejlepších řešení
25 bests(:, :, kbest) = X(:, :);
26 bestvalue = value; % nejlepší dosažená hodnota kritéria
27 while (iter < itermax)
28     count = 0;
29     succ = 0;

```

```

30     while ( (count < countmax) && (succ < succmax) )
31         iter = iter + 1;
32         count = count + 1;
33
34     % generování a ohodnocení nového řešení
35         a = fix(k*rand)+1;           % volba měněné souřadnice
36         b = fix((n)*rand(1,2))+1;   % volba prohazovaných bodů
37         B = X;
38         B([b(1) b(2)],a) = B([b(2) b(1)],a); % nové řešení
39         valuenew = get_criterium(B); % ohodnocení nového řešení
40
41     % přijetí lepšího řešení a případné přijetí horšího řešení
42         if ((valuenew<value) || (rand < exp((value-valuenew)/T)))
43             X([b(1) b(2)],a) = X([b(2) b(1)],a);
44             value = valuenew;
45             succ = succ + 1;
46             if (valuenew==bestvalue) % nové řešení s doposud nejlepší
47                 kbest = kbest+1;    % hodnotou kritéria
48                 bests(:, :, kbest) = X(:, :);
49             elseif (valuenew<bestvalue) % nové řešení s novou
50                 bestvalue = valuenew; % nejlepší hodnotou kritéria
51                 best = X;
52                 bests = zeros(n,k,10);
53                 kbest = 1;
54                 bests(:, :, kbest) = X(:, :);
55         end
56     end
57 end
58 T = T*Tmult; % snížení teploty
59
60 % opětovné navýšení teploty
61 if T < Tmin
62     T = Tmax;
63     for i=1:k
64         X(:,i) = randsample(n,n); % generování náhodného řešení
65     end
66     value = get_ML(X); % ohodnocení řešení optimalizovaným kritériem
67 end
68 end
69
70 %% Uložení nejlepších řešení:
71 save('bests.mat', 'bests');
```



# Příloha B

## Podrobné výsledky SSA na matematických funkcích

Model	AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max
$x_1 + x_2$	2,2	6,6	7,6	12,3	4,8	11,6	1,9	7,3	9,5	39,6	8,9	34,2	8,6	30,2	7,7	36,0
$x_1^2 + x_2^2$	2,3	5,9	4,8	20,3	7,9	22,9	2,7	8,4	10,9	44,5	10,5	43,9	10,6	35,6	9,8	37,4
$x_1x_2^2$	2,7	7,1	4,8	12,3	6,8	17,9	3,0	9,3	10,4	39,3	9,9	39,3	10,2	39,8	10,3	35,0
$x$	2,4	7,9	4,2	10,6	2,3	6,7	1,4	9,7	3,6	13,8	0,0	0,0	1,5	5,4	5,6	26,1
$x_1/x_2$	3,8	6,9	6,2	20,4	10,0	29,1	4,5	9,0	13,7	48,6	13,0	37,9	12,7	43,0	11,8	59,9
$x_1e^{x_2}$	4,6	7,7	5,0	12,3	4,7	14,0	2,5	10,7	5,8	23,3	5,5	26,6	5,4	22,5	7,0	27,9
$x_1^{x_2}$	21,0	32,0	11,6	29,4	14,4	28,2	18,1	33,6	17,1	51,4	15,0	48,5	16,2	45,1	14,9	44,5
$x_1 + x_2^2$	7,2	12,8	5,3	13,6	4,8	12,6	4,1	10,7	4,9	18,9	3,4	15,8	3,7	21,5	6,6	33,0
$x_1 + \log x_2$	5,1	7,7	5,1	13,2	4,2	13,1	2,4	9,9	6,4	26,7	5,8	28,8	5,9	25,4	7,2	27,2
$x_1 + e^{x_2}$	8,1	14,0	5,4	12,5	4,5	11,4	5,0	12,0	4,8	16,8	2,9	12,9	3,3	15,0	6,4	28,5
$x_1 + 1/x_2$	8,6	14,7	5,6	13,0	4,8	11,9	5,2	10,3	4,4	16,7	2,5	13,6	3,0	15,6	6,2	28,0
$\arctan x_1 - 5$	2,4	7,9	4,2	10,6	2,3	6,7	1,4	9,7	3,6	13,8	0,0	0,0	1,5	5,4	5,6	26,1
$\arctan x_1 - 5 + 1/x_2$	6,7	13,6	6,8	21,0	5,7	14,2	8,3	17,6	8,0	36,1	8,2	34,4	8,0	41,5	9,7	48,4
$\text{floor}(\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2})$	4,6	9,1	7,2	23,7	5,3	19,4	3,2	10,3	10,9	33,3	10,6	38,2	10,5	34,0	9,8	47,1
$\text{fl.}(\sqrt{x_1}) + \text{fl.}(\sqrt{x_2})$	5,2	9,8	6,9	15,2	6,4	14,8	4,0	10,2	13,4	41,9	11,7	44,3	11,7	54,0	10,6	33,2
<b>Celkem</b>	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
<b>Odchylka</b>	4,9	6,5	2,1	5,5	2,2	4,2	4,2	6,5	4,1	13,3	4,7	15,5	4,5	13,6	2,7	9,8

Tabulka B.1: Výsledky SSA teoretických modelů při použití návrhů s deseti body.

Model	AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max
$x_1 + x_2$	5,3	17,9	7,3	20,6	2,5	3,4	4,9	8,4	4,2	14,2	4,3	17,9	4,5	19,1	3,9	20,8
$x_1^2 + x_2^2$	5,1	21,4	7,9	21,3	8,7	17,0	5,6	10,3	6,1	19,5	5,7	18,2	5,7	18,4	6,1	20,0
$x_1x_2^2$	6,3	23,7	8,9	26,8	5,7	6,6	6,8	18,2	7,0	21,3	7,3	20,0	5,9	20,0	6,2	18,1
$x$	5,9	22,7	10,2	24,5	0,9	0,9	6,0	10,6	0,3	0,3	0,3	0,3	2,6	9,4	0,3	0,9
$x_1/x_2$	6,3	18,8	8,8	22,4	9,5	14,6	6,4	12,1	9,4	37,2	8,7	31,3	9,1	31,6	8,6	32,8
$x_1e^{x_2}$	7,1	26,4	11,9	30,7	4,5	9,5	6,8	14,9	4,6	12,5	4,9	11,9	4,8	15,5	4,6	12,5
$x_1^{x_2}$	8,3	25,3	10,6	27,1	14,7	21,9	7,9	14,8	11,1	35,5	11,1	25,7	10,3	33,0	10,0	27,6
$x_1 + x_2^2$	6,9	28,9	11,0	31,1	5,4	6,2	6,7	14,3	5,0	7,4	5,2	7,4	5,1	15,3	5,0	8,0
$x_1 + \log x_2$	7,5	27,1	11,1	30,7	3,8	9,5	7,1	14,9	4,8	12,5	4,7	12,5	4,8	12,5	4,6	12,5
$x_1 + e^{x_2}$	7,6	28,6	10,6	30,4	4,9	6,8	6,8	16,5	5,2	6,2	5,2	6,2	5,4	15,3	5,2	6,8
$x_1 + 1/x_2$	7,5	28,0	10,6	29,8	5,2	6,1	7,4	15,8	5,2	5,5	5,2	5,5	5,4	14,6	5,2	6,1
$\arctan x_1 - 5$	5,9	22,7	10,2	24,5	0,9	0,9	6,0	10,6	0,3	0,3	0,3	0,3	2,6	9,4	0,3	0,9
$\arctan x_1 - 5 + 1/x_2$	7,6	23,9	10,1	25,7	5,6	10,1	8,7	18,4	6,9	17,3	6,4	16,7	6,8	26,3	6,6	21,5
$\text{floor}(\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2})$	7,4	17,1	10,0	22,5	2,7	5,1	8,3	20,3	6,8	25,0	6,9	20,2	7,2	23,6	6,6	21,6
$\text{fl.}(\sqrt{x_1}) + \text{fl.}(\sqrt{x_2})$	6,7	20,8	7,5	23,6	3,5	8,2	7,2	16,9	6,7	21,3	5,7	16,5	7,1	24,0	6,2	22,4
<b>Celkem</b>	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
<b>Odchylka</b>	0,9	3,9	1,3	4,5	2,8	3,6	1,0	3,4	2,6	9,0	3,2	8,5	2,0	7,4	2,8	8,9

Tabulka B.2: Výsledky SSA teoretických modelů při použití LHS návrhů s deseti body.

Model	AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max
$x_1 + x_2$	11,1	11,1	8,8	20,2	3,9	6,1	4,9	9,5	11,9	22,1	11,7	35,6	11,2	36,8	12,1	65,9
$x_1^2 + x_2^2$	4,2	4,3	7,2	22,0	6,7	10,7	7,6	13,3	12,1	47,1	13,5	53,0	11,7	47,5	14,5	61,2
$x_1x_2^2$	4,4	9,0	6,8	21,5	14,0	23,9	5,0	7,4	13,7	24,3	11,4	55,4	11,5	32,2	13,3	76,6
$x$	0,0	0,0	5,7	16,5	1,4	7,1	0,5	0,5	5,0	12,7	0,0	0,0	2,2	9,6	7,4	37,5
$x_1/x_2$	3,3	3,5	7,6	22,4	12,6	13,9	11,2	13,3	15,1	38,4	16,0	45,4	14,3	43,1	17,2	64,9
$x_1e^{x_2}$	4,4	4,4	6,7	15,5	8,0	21,2	0,6	1,0	8,3	15,5	9,6	36,4	8,1	32,0	10,5	37,1
$x_1^{x_2}$	17,3	18,0	15,9	34,5	28,2	36,3	24,9	41,2	20,0	41,4	19,1	53,4	18,4	51,8	18,5	61,0
$x_1 + x_2^2$	10,3	10,3	8,3	21,4	2,9	10,9	6,5	6,9	8,2	11,7	7,2	45,3	6,2	30,7	9,6	36,2
$x_1 + \log x_2$	2,3	2,3	6,7	18,8	2,5	7,3	6,5	11,5	7,9	13,2	8,4	31,4	7,1	49,8	9,6	43,2
$x_1 + e^{x_2}$	13,0	13,0	9,1	24,1	4,6	9,3	9,2	9,6	7,1	12,4	5,5	30,5	4,8	25,1	9,1	34,6
$x_1 + 1/x_2$	7,7	7,7	7,2	16,5	4,6	5,2	9,8	10,3	7,1	12,5	4,4	30,8	4,6	20,9	9,5	38,3
$\arctan x_1 - 5$	0,0	0,0	5,7	16,5	1,4	7,1	0,5	0,5	5,0	12,7	0,0	0,0	2,2	9,6	7,4	37,5
$\arctan x_1 - 5 + 1/x_2$	8,4	12,1	9,9	23,0	10,1	11,7	7,6	16,5	10,1	21,9	12,9	60,8	12,1	44,4	15,6	69,1
$\text{floor}(\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2})$	6,8	10,0	11,7	30,8	8,3	9,1	11,5	15,7	13,8	33,1	12,0	40,1	11,9	35,1	13,7	60,5
$\text{fl.}(\sqrt{x_1}) + \text{fl.}(\sqrt{x_2})$	6,5	6,5	11,0	21,1	16,4	23,5	11,3	17,2	12,8	28,2	13,6	52,8	14,3	40,1	14,3	72,6
<b>Celkem</b>	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
<b>Odchylka</b>	4,8	5,1	2,7	5,3	7,2	8,8	6,1	9,9	4,2	14,6	5,5	18,3	4,8	13,2	3,5	15,5

Tabulka B.3: Výsledky SSA teoretických modelů při použití návrhů se sedmi body.

Model	AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max
$x_1 + x_2$	5,9	8,1	9,0	22,4	14,9	14,9	6,2	11,3	5,4	16,9	5,3	14,2	6,5	19,0	6,4	20,0
$x_1^2 + x_2^2$	6,5	9,1	10,6	21,6	8,9	8,9	2,6	7,1	9,2	28,6	8,2	28,6	8,8	34,4	10,1	28,6
$x_1x_2^2$	9,4	19,0	12,0	28,6	7,2	7,2	7,1	11,8	10,0	26,1	9,6	26,1	8,9	27,9	9,5	26,1
$x$	8,0	10,7	11,4	32,1	3,6	3,6	2,3	3,6	1,2	3,6	0,2	1,8	4,7	14,3	1,2	3,6
$x_1/x_2$	8,0	12,2	12,1	30,5	13,0	13,0	13,5	20,5	11,8	30,9	14,0	39,1	13,2	40,5	12,9	42,9
$x_1e^{x_2}$	10,0	12,7	11,9	37,3	3,8	3,8	4,4	8,7	7,5	17,6	7,0	17,6	7,4	21,2	7,8	19,4
$x_1^{x_2}$	8,9	12,3	11,3	26,6	15,1	15,1	10,4	16,3	14,6	37,3	14,9	35,5	16,0	39,1	15,1	37,3
$x_1 + x_2^2$	6,9	12,7	11,9	34,7	0,8	0,8	6,3	9,9	7,1	15,3	6,6	13,5	8,3	26,0	7,3	15,3
$x_1 + \log x_2$	7,0	14,2	13,2	30,5	7,0	7,0	8,3	9,1	6,6	12,4	6,8	12,4	7,7	17,7	7,1	12,4
$x_1 + e^{x_2}$	9,4	19,8	12,4	34,0	3,5	3,5	8,1	10,8	7,8	12,6	7,1	10,8	8,1	23,3	7,4	12,6
$x_1 + 1/x_2$	9,0	15,9	12,1	37,3	8,8	8,8	5,3	8,8	5,1	8,8	5,2	7,0	6,5	19,5	5,3	8,8
$\arctan x_1 - 5$	8,0	10,7	11,4	32,1	3,6	3,6	2,3	3,6	1,2	3,6	0,2	1,8	4,7	14,3	1,2	3,6
$\arctan x_1 - 5 + 1/x_2$	13,4	18,8	13,9	36,7	9,9	9,9	9,9	17,0	10,9	29,4	9,9	29,4	11,6	36,6	10,2	29,4
$\text{floor}(\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2})$	11,9	20,6	11,8	25,7	20,8	20,8	8,0	21,9	8,4	26,9	9,2	26,8	9,6	29,7	7,7	29,1
$\text{fl.}(\sqrt{x_1}) + \text{fl.}(\sqrt{x_2})$	13,2	19,3	14,1	23,9	6,2	6,2	10,2	16,5	8,0	23,0	7,1	24,9	9,4	29,3	8,9	23,0
<b>Celkem</b>	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
<b>Odchylka</b>	2,3	4,2	1,3	5,3	5,5	5,5	3,3	5,6	3,6	10,3	4,1	11,7	3,0	8,7	3,7	11,7

Tabulka B.4: Výsledky SSA teoretických modelů při použití LHS návrhů se sedmi body.

Model	AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max
$x_1 + x_2$	3,6	6,4	4,4	9,7	4,2	12,2	3,4	8,1	7,4	22,1	7,4	23,9	7,5	28,0	6,4	24,8
$x_1^2 + x_2^2$	3,3	7,4	4,3	14,2	4,3	11,9	4,0	12,1	8,9	47,1	7,7	37,0	8,7	38,2	8,1	25,9
$x_1x_2^2$	2,8	7,7	4,4	14,1	5,2	13,5	3,3	12,1	9,3	24,3	8,5	28,1	8,8	25,8	8,4	33,0
$x$	1,3	6,4	2,8	11,0	3,2	10,4	2,3	5,3	3,1	12,7	0,0	0,0	1,1	4,3	3,9	25,1
$x_1/x_2$	3,3	7,9	4,8	11,9	4,9	14,6	4,5	21,0	11,0	38,4	11,0	27,2	11,7	32,9	10,3	34,2
$x_1e^{x_2}$	4,0	8,1	3,8	13,5	3,9	10,6	4,5	14,3	4,8	15,5	3,5	18,0	3,9	11,3	4,6	26,7
$x_1^{x_2}$	21,8	30,8	10,8	24,9	7,6	18,3	13,4	29,7	13,4	41,4	12,6	36,5	12,6	39,9	13,0	39,6
$x_1 + x_2^2$	5,0	8,5	3,8	10,5	3,6	11,3	4,8	11,8	3,6	11,7	2,1	10,5	2,4	10,9	4,3	27,4
$x_1 + \log x_2$	4,6	8,6	3,2	11,3	4,1	10,4	4,8	16,7	4,9	13,2	4,3	19,3	4,6	18,9	5,6	21,7
$x_1 + e^{x_2}$	5,5	9,2	3,8	10,7	3,8	11,6	4,7	12,2	3,7	12,4	1,8	11,2	2,1	8,6	4,4	26,8
$x_1 + 1/x_2$	7,5	14,0	4,4	12,3	4,4	13,8	2,7	9,2	3,7	12,5	1,8	13,3	2,1	11,0	4,5	23,6
$\arctan x_1 - 5$	1,3	6,4	2,8	11,0	3,2	10,4	2,3	5,3	3,1	12,7	0,0	0,0	1,1	4,3	3,9	25,1
$\arctan x_1 - 5 + 1/x_2$	6,8	13,3	6,1	18,5	6,2	13,9	8,1	18,9	6,5	21,9	6,2	21,9	5,9	19,3	8,7	27,3
$\text{floor}(\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2})$	4,2	9,3	6,0	16,0	5,4	19,7	4,6	12,3	8,8	33,1	8,3	22,8	8,5	26,7	7,9	25,0
$\text{fl.}(\sqrt{x_1}) + \text{fl.}(\sqrt{x_2})$	5,5	10,1	5,0	16,1	5,5	20,8	4,2	9,5	10,3	28,2	8,4	34,7	9,6	25,0	9,1	30,5
<b>Celkem</b>	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
<b>Odchylka</b>	4,9	6,1	2,0	4,0	1,2	3,4	2,8	6,4	3,3	12,0	4,0	11,8	3,9	11,7	2,7	4,7

Tabulka B.5: Výsledky SSA teoretických modelů při použití návrhů se třinácti body.

Model	AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max
$x_1 + x_2$	3,9	11,9	6,8	15,9	3,2	3,5	3,6	4,3	4,0	13,8	3,1	18,4	3,7	11,1	3,4	20,5
$x_1^2 + x_2^2$	4,7	14,0	8,1	17,1	2,7	2,7	1,6	2,1	5,3	17,9	5,1	14,9	5,7	15,6	5,4	18,0
$x_1x_2^2$	5,0	12,1	8,5	17,7	4,3	4,7	1,2	1,6	5,3	14,2	5,2	14,2	6,5	20,3	6,1	17,4
$x$	4,7	15,3	9,2	18,6	0,6	0,7	0,4	2,1	0,4	1,1	0,1	0,3	1,9	11,2	0,4	1,4
$x_1/x_2$	4,8	12,2	7,2	14,4	4,2	8,9	1,3	5,1	7,7	20,3	8,5	24,9	8,3	32,2	8,0	29,1
$x_1e^{x_2}$	5,2	16,4	10,3	21,3	5,2	7,7	3,1	4,6	3,5	9,2	3,2	9,3	3,9	14,4	3,7	9,5
$x_1^{x_2}$	6,6	14,1	9,3	22,5	3,0	3,4	3,0	4,1	9,1	22,7	9,0	24,2	9,7	32,1	10,2	25,7
$x_1 + x_2^2$	5,2	18,7	9,5	21,1	3,5	3,8	2,9	3,0	3,5	6,0	3,8	5,2	3,9	10,6	3,8	5,9
$x_1 + \log x_2$	5,3	20,0	9,9	19,4	2,5	2,7	4,5	6,1	3,3	11,5	3,0	8,6	3,6	15,2	3,1	11,1
$x_1 + e^{x_2}$	5,5	19,7	9,0	20,5	3,7	4,9	4,3	4,8	3,7	5,3	3,9	4,5	3,9	15,5	3,9	5,3
$x_1 + 1/x_2$	5,4	16,8	9,4	22,3	1,6	1,7	2,5	4,5	3,0	4,8	3,0	4,5	3,4	8,3	3,1	4,8
$\arctan x_1 - 5$	4,7	15,3	9,2	18,6	0,6	0,7	0,4	2,1	0,4	1,1	0,1	0,3	1,9	11,2	0,4	1,4
$\arctan x_1 - 5 + 1/x_2$	6,8	13,3	8,9	18,5	5,4	6,2	3,5	8,5	4,9	15,5	5,0	13,5	5,1	15,8	4,9	15,7
$\text{floor}(\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2})$	4,2	9,3	8,6	14,3	3,0	3,0	6,6	11,6	5,7	16,3	5,4	16,5	5,9	15,8	6,2	18,6
$\text{fl.}(\sqrt{x_1}) + \text{fl.}(\sqrt{x_2})$	5,5	10,1	7,2	17,8	5,4	5,9	3,6	7,7	5,5	15,2	6,4	19,8	6,4	20,1	6,7	22,7
<b>Celkem</b>	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
<b>Odchylka</b>	0,7	2,5	1,0	2,6	1,5	2,4	1,7	2,8	2,3	6,8	2,5	8,0	2,2	7,1	2,6	8,9

Tabulka B.6: Výsledky SSA teoretických modelů při použití LHS návrhů se třinácti body.

Model	AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max
$x_1 + x_2$	1,8	2,6	3,5	10,6	2,2	5,8	0,9	4,2	5,5	17,2	5,0	13,0	5,3	17,1	3,3	14,3
$x_1^2 + x_2^2$	1,7	3,4	4,1	10,9	2,5	6,8	1,1	4,7	7,6	26,2	5,8	28,5	6,6	23,1	5,6	18,4
$x_1x_2^2$	2,0	4,6	4,5	13,7	2,9	8,6	1,7	6,1	7,3	34,2	6,4	21,2	6,3	21,2	5,6	14,9
$x$	1,1	3,2	3,8	13,0	2,4	6,3	1,0	6,6	1,7	8,2	0,0	0,0	0,7	2,5	2,2	13,8
$x_1/x_2$	2,0	5,2	4,9	14,0	3,2	14,3	1,8	6,4	8,4	29,1	8,6	25,2	8,0	28,8	7,1	25,8
$x_1e^{x_2}$	3,2	7,3	3,8	15,2	2,4	7,3	2,5	9,6	3,3	11,8	2,8	10,9	2,9	9,4	3,0	13,0
$x_1^{x_2}$	13,5	16,5	8,3	19,7	4,1	11,1	11,5	20,7	11,6	32,8	10,1	32,4	9,5	29,9	9,0	29,2
$x_1 + x_2^2$	2,9	7,0	4,2	12,4	2,2	7,3	2,6	10,2	2,8	10,7	2,0	15,1	2,0	8,2	2,7	11,4
$x_1 + \log x_2$	3,2	7,7	4,0	12,5	2,4	8,2	2,4	12,0	3,1	8,3	2,8	11,0	2,8	13,7	3,2	11,8
$x_1 + e^{x_2}$	2,6	6,2	4,1	13,0	2,2	6,5	2,5	10,2	2,5	9,5	1,5	12,0	1,6	7,7	2,6	12,6
$x_1 + 1/x_2$	3,4	5,9	4,3	12,9	3,1	8,1	2,0	6,4	2,1	10,4	1,0	3,7	1,4	4,3	2,6	14,8
$\arctan x_1 - 5$	1,1	3,2	3,8	13,0	2,4	6,3	1,0	6,6	1,7	8,2	0,0	0,0	0,7	2,5	2,2	13,8
$\arctan x_1 - 5 + 1/x_2$	4,9	11,3	5,9	15,5	6,3	14,1	5,9	12,8	4,9	17,6	5,2	23,2	4,8	15,2	5,3	37,4
$\text{floor}(\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2})$	3,4	7,4	4,7	14,4	4,1	11,3	2,3	5,8	6,0	22,7	6,7	22,7	6,0	23,9	5,0	20,9
$\text{fl.}(\sqrt{x_1}) + \text{fl.}(\sqrt{x_2})$	3,1	6,1	4,8	13,8	4,8	12,6	4,7	8,6	8,4	30,8	7,3	24,0	7,6	24,7	6,2	17,2
<b>Celkem</b>	3,3	16,5	4,6	19,7	3,1	14,3	2,9	20,7	5,1	34,2	4,4	32,4	4,4	29,9	4,4	37,4
<b>Odchylka</b>	3,0	3,6	1,2	2,2	1,2	2,9	2,7	4,2	3,0	9,9	3,2	10,1	2,9	9,5	2,1	7,5

Tabulka B.7: SSA teoretických modelů: sekvenční volné návrhy s 20 body - 1. metoda.

Model	AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max
$x_1 + x_2$	1,1	2,6	3,6	10,9	1,4	3,5	1,7	5,0	4,1	17,6	3,8	11,5	4,2	11,7	2,0	6,2
$x_1^2 + x_2^2$	1,2	3,1	4,3	12,0	1,5	3,9	1,7	5,4	5,7	15,5	4,3	19,1	5,2	21,2	3,8	15,8
$x_1x_2^2$	1,5	3,9	4,2	12,2	1,7	5,0	2,2	5,9	5,2	25,2	4,6	14,4	4,6	15,2	3,6	11,5
$x$	0,9	3,1	3,5	13,5	1,5	5,2	1,5	6,0	0,9	2,8	0,0	0,0	0,5	1,9	1,3	5,4
$x_1/x_2$	1,6	4,3	5,2	15,3	3,0	9,9	2,7	6,6	5,7	21,4	6,8	21,3	6,3	19,3	4,5	22,0
$x_1e^{x_2}$	1,8	4,7	3,8	12,3	1,6	4,9	2,9	6,9	2,0	7,4	2,1	6,8	1,8	6,0	2,0	6,0
$x_1^{x_2}$	7,0	12,0	6,7	17,1	3,0	10,6	9,0	17,4	7,8	24,6	8,3	22,7	6,8	26,1	6,5	21,8
$x_1 + x_2^2$	1,6	4,7	3,9	13,8	1,5	4,5	2,8	8,5	1,6	8,5	1,3	5,7	1,4	4,7	1,7	5,9
$x_1 + \log x_2$	1,9	4,9	3,9	14,3	1,6	4,4	3,0	8,2	2,1	7,8	1,8	6,3	2,0	8,9	2,0	8,7
$x_1 + e^{x_2}$	1,6	4,9	3,9	13,3	1,5	4,5	2,6	9,3	1,4	5,2	0,9	4,0	1,0	3,3	1,6	5,4
$x_1 + 1/x_2$	1,8	5,3	3,8	13,3	1,7	5,9	2,0	6,5	1,2	4,1	0,6	1,7	0,8	3,3	1,5	5,1
$\arctan x_1 - 5$	0,9	3,1	3,5	13,5	1,5	5,2	1,5	6,0	0,9	2,8	0,0	0,0	0,5	1,9	1,3	5,4
$\arctan x_1 - 5 + 1/x_2$	2,6	8,1	4,8	13,3	3,7	9,2	4,8	11,7	3,4	11,1	3,9	13,7	3,5	11,9	3,8	20,5
$\text{floor}(\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2})$	2,8	7,9	4,5	13,8	3,8	10,4	2,5	6,8	4,7	17,9	4,9	16,1	4,3	19,3	3,4	12,1
$\text{fl.}(\sqrt{x_1}) + \text{fl.}(\sqrt{x_2})$	2,8	7,7	4,7	11,8	3,3	8,4	3,7	9,5	6,6	23,7	5,6	17,3	5,9	20,7	4,4	12,0
<b>Celkem</b>	2,1	12,0	4,3	17,1	2,2	10,6	3,0	17,4	3,6	25,2	3,3	22,7	3,2	26,1	2,9	22,0
<b>Odchylka</b>	1,5	2,6	0,8	1,5	0,9	2,6	1,9	3,2	2,3	8,2	2,5	7,7	2,2	8,2	1,5	6,3

Tabulka B.8: SSA teoretických modelů: sekvenční volné návrhy s 30 body - 1. metoda.

Model	AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max
$x_1 + x_2$	0,9	2,0	3,8	10,6	1,0	2,6	1,3	3,4	3,2	11,3	2,9	9,6	2,9	9,1	1,5	4,5
$x_1^2 + x_2^2$	1,1	2,9	4,4	12,0	1,3	2,9	1,5	4,1	4,1	11,9	3,2	13,9	4,0	15,0	2,9	9,4
$x_1x_2^2$	1,2	3,3	4,4	12,1	1,4	4,4	1,4	3,6	3,9	16,4	3,8	17,2	3,4	11,8	3,0	10,1
$x$	0,6	2,4	3,5	13,1	1,1	3,2	1,3	3,7	0,6	2,7	0,0	0,0	0,3	1,9	0,8	3,8
$x_1/x_2$	1,5	3,6	4,8	16,0	2,3	6,5	2,0	4,6	4,7	17,2	5,3	19,2	5,2	19,6	3,7	16,0
$x_1e^{x_2}$	1,4	3,7	3,6	12,4	1,3	3,9	2,8	6,4	1,4	4,2	1,5	5,2	1,4	4,5	1,4	5,5
$x_1^{x_2}$	5,3	10,0	6,3	14,2	3,2	8,5	7,1	13,0	6,2	19,0	6,3	23,4	5,6	18,5	5,5	17,0
$x_1 + x_2^2$	1,2	2,9	3,6	13,0	1,1	3,5	2,6	6,2	1,1	4,5	0,9	2,9	1,0	3,9	1,2	3,9
$x_1 + \log x_2$	1,5	3,9	3,7	14,8	1,3	4,1	2,8	6,4	1,6	4,7	1,3	5,5	1,5	4,7	1,3	5,1
$x_1 + e^{x_2}$	1,0	2,8	3,6	12,8	1,1	3,2	2,4	6,1	0,9	3,7	0,5	2,4	0,7	2,9	1,0	3,2
$x_1 + 1/x_2$	0,8	2,5	3,6	13,1	1,2	3,6	1,5	4,4	0,7	3,2	0,4	1,4	0,5	1,8	1,0	3,5
$\arctan x_1 - 5$	0,6	2,4	3,5	13,1	1,1	3,2	1,3	3,7	0,6	2,7	0,0	0,0	0,3	1,9	0,8	3,8
$\arctan x_1 - 5 + 1/x_2$	2,5	6,8	4,3	14,3	3,2	7,3	4,1	10,4	2,6	9,2	2,9	11,8	2,9	9,2	2,9	11,2
$\text{floor}(\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2})$	1,3	3,9	4,4	14,0	2,8	6,8	2,4	7,4	3,7	12,0	3,6	13,6	3,4	15,4	2,5	7,8
$\text{fl.}(\sqrt{x_1}) + \text{fl.}(\sqrt{x_2})$	1,9	4,2	4,9	15,8	2,5	5,1	3,0	7,5	4,4	13,9	3,8	13,8	4,5	17,5	3,2	10,6
<b>Celkem</b>	1,5	10,0	4,1	16,0	1,7	8,5	2,5	13,0	2,6	19,0	2,4	23,4	2,5	19,6	2,2	17,0
<b>Odchylka</b>	1,2	2,1	0,8	1,5	0,8	1,8	1,5	2,7	1,8	5,8	2,0	7,5	1,8	6,6	1,4	4,6

Tabulka B.9: SSA teoretických modelů: sekvenční volné návrhy se 40 body - 1. metoda.

Model	AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max
$x_1 + x_2$	1,5	3,2	4,5	13,8	1,5	3,9	2,1	7,7	4,3	12,5	4,0	12,6	3,8	12,0	2,2	7,2
$x_1^2 + x_2^2$	1,7	4,0	5,3	15,9	2,0	5,4	2,2	8,6	5,6	15,3	5,1	18,5	5,0	14,7	4,7	12,9
$x_1x_2^2$	2,0	5,7	5,9	19,8	2,6	7,5	2,7	9,2	5,3	18,2	5,6	15,4	5,3	14,8	4,3	11,1
$x$	1,5	4,1	5,1	16,0	1,8	5,5	2,0	11,5	1,4	4,6	0,0	0,0	0,9	4,2	1,3	5,8
$x_1/x_2$	2,1	9,3	5,6	14,3	3,1	7,9	2,8	9,6	6,9	22,6	7,4	22,0	7,5	25,7	7,0	24,4
$x_1e^{x_2}$	2,5	6,8	5,3	18,3	2,0	7,7	3,8	16,7	2,6	8,7	2,6	8,4	2,7	7,1	2,4	9,2
$x_1^{x_2}$	11,5	20,2	8,9	23,8	2,8	6,2	11,2	20,3	9,9	25,2	10,0	31,4	8,5	24,3	9,1	25,7
$x_1 + x_2^2$	2,1	5,9	5,1	16,9	1,7	6,5	3,3	15,2	2,2	6,6	1,9	4,9	1,9	6,8	2,1	6,9
$x_1 + \log x_2$	2,3	6,0	5,2	18,9	2,2	6,3	3,5	12,1	2,7	9,3	2,4	8,3	2,2	8,0	2,2	6,8
$x_1 + e^{x_2}$	1,8	6,5	5,1	16,5	1,7	6,2	2,9	14,5	2,0	6,0	1,5	4,4	1,6	5,5	1,8	6,8
$x_1 + 1/x_2$	2,0	5,2	5,1	17,4	2,9	7,0	2,4	12,0	1,7	5,8	1,2	2,7	1,4	5,2	1,8	5,3
$\arctan x_1 - 5$	1,5	4,1	5,1	16,0	1,8	5,5	2,0	11,5	1,4	4,6	0,0	0,0	0,9	4,2	1,3	5,8
$\arctan x_1 - 5 + 1/x_2$	4,6	11,1	5,9	16,7	7,7	13,5	5,2	11,5	4,6	18,4	4,5	15,8	4,9	22,7	5,1	14,4
$\text{floor}(\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2})$	3,0	8,6	5,7	13,2	3,5	10,2	2,7	10,4	6,1	19,5	5,9	18,0	5,6	24,0	4,5	14,1
$\text{fl.}(\sqrt{x_1}) + \text{fl.}(\sqrt{x_2})$	3,1	7,5	5,7	16,4	4,7	11,0	3,5	11,6	6,8	19,8	5,9	16,2	5,7	14,9	4,7	13,7
<b>Celkem</b>	2,9	20,2	5,6	23,8	2,8	13,5	3,5	20,3	4,2	25,2	3,9	31,4	3,9	25,7	3,6	25,7
<b>Odchylka</b>	2,5	4,2	1,0	2,6	1,6	2,5	2,3	3,3	2,5	7,1	2,8	8,9	2,4	8,0	2,3	6,5

Tabulka B.10: SSA teoretických modelů: sekvenční LHS návrhy s 20 body - 1. metoda.

Model	AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max
$x_1 + x_2$	1,0	3,4	3,6	8,9	1,2	3,3	1,7	4,3	3,3	10,1	3,3	13,8	3,4	11,8	1,6	5,5
$x_1^2 + x_2^2$	1,3	3,2	4,2	9,9	1,7	4,5	1,9	5,0	4,3	12,2	4,1	11,3	4,1	14,5	3,7	14,3
$x_1x_2^2$	1,5	4,1	5,0	13,2	1,5	5,2	2,0	5,1	4,5	15,1	4,1	19,0	3,9	17,6	3,6	10,1
$x$	1,0	4,8	4,3	11,0	1,4	4,0	1,7	5,6	1,0	2,9	0,0	0,0	0,5	2,1	1,0	6,2
$x_1/x_2$	1,6	3,7	5,4	14,3	2,5	8,6	2,6	7,2	4,9	14,4	5,6	14,0	5,5	20,0	5,0	14,5
$x_1e^{x_2}$	1,8	5,0	4,2	10,8	1,5	5,7	3,2	9,5	1,8	5,6	1,9	5,3	1,8	5,5	1,6	7,0
$x_1^{x_2}$	7,5	12,6	6,3	16,1	2,4	7,1	8,2	15,3	7,3	17,4	7,2	23,7	7,1	18,1	7,1	22,6
$x_1 + x_2^2$	1,4	5,0	4,2	11,1	1,3	5,0	3,1	8,7	1,5	6,3	1,2	3,4	1,2	6,2	1,5	6,0
$x_1 + \log x_2$	1,6	5,3	4,3	11,1	1,6	6,2	3,3	8,8	1,9	6,9	1,7	6,6	1,7	5,3	1,5	4,3
$x_1 + e^{x_2}$	1,3	4,9	4,2	11,2	1,3	4,8	2,6	7,5	1,3	4,3	0,9	2,5	1,0	4,4	1,1	5,2
$x_1 + 1/x_2$	1,3	4,9	4,3	10,7	1,7	4,2	1,9	5,4	1,1	3,8	0,6	1,4	0,8	2,1	1,3	6,0
$\arctan x_1 - 5$	1,0	4,8	4,3	11,0	1,4	4,0	1,7	5,6	1,0	2,9	0,0	0,0	0,5	2,1	1,0	6,2
$\arctan x_1 - 5 + 1/x_2$	3,1	7,3	5,0	16,5	7,7	13,5	4,9	11,5	3,4	11,2	3,4	10,7	3,3	12,6	3,7	16,6
$\text{floor}(\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2})$	2,4	7,8	4,3	10,0	3,1	8,6	2,3	6,4	4,7	13,4	4,7	15,7	4,2	14,0	3,4	10,4
$\text{fl.}(\sqrt{x_1}) + \text{fl.}(\sqrt{x_2})$	2,7	5,8	4,4	9,5	3,1	7,6	3,4	9,6	5,3	19,1	4,9	12,7	5,0	18,9	3,8	11,9
<b>Celkem</b>	2,0	12,6	4,5	16,5	2,0	9,5	3,0	15,3	3,1	19,1	2,9	23,7	2,9	20,0	2,7	22,6
<b>Odchylka</b>	1,6	2,3	0,7	2,3	0,9	2,0	1,7	3,0	2,0	5,4	2,2	7,3	2,0	6,7	1,8	5,3

Tabulka B.11: SSA teoretických modelů: sekvenční LHS návrhy se 30 body - 1. metoda.

Model	AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max
$x_1 + x_2$	1,0	2,3	3,7	8,9	1,1	2,6	1,4	3,3	2,8	8,8	2,5	8,5	2,4	9,7	1,3	4,4
$x_1^2 + x_2^2$	1,1	2,9	4,1	9,6	1,3	3,0	1,6	3,9	3,5	11,5	3,6	12,5	3,5	11,3	2,9	9,0
$x_1x_2^2$	1,3	3,5	4,6	11,7	1,3	3,4	1,7	5,2	3,8	11,8	3,2	10,3	3,0	8,9	2,9	9,4
$x$	1,0	2,9	3,9	11,5	1,2	3,3	1,4	4,1	0,6	2,3	0,0	0,0	0,3	1,1	0,8	4,6
$x_1/x_2$	1,7	4,7	4,8	15,4	2,0	6,6	2,2	5,3	4,7	14,0	4,7	14,2	4,3	13,0	4,0	14,2
$x_1e^{x_2}$	1,8	5,0	4,0	12,2	1,4	4,9	2,6	6,5	1,2	3,2	1,3	4,1	1,5	4,1	1,3	5,7
$x_1^{x_2}$	5,8	10,6	6,0	18,6	3,1	6,4	6,4	13,6	6,2	16,5	5,8	16,9	5,2	14,8	5,5	17,9
$x_1 + x_2^2$	1,5	4,6	4,0	12,5	1,2	3,8	2,4	5,5	1,0	3,7	0,9	3,4	0,9	5,6	1,3	5,2
$x_1 + \log x_2$	1,7	5,2	4,0	11,9	1,4	3,9	2,6	6,2	1,5	5,7	1,2	3,9	1,2	3,8	1,3	4,4
$x_1 + e^{x_2}$	1,3	3,8	4,0	12,8	1,2	3,6	2,0	5,0	0,9	3,2	0,6	2,0	0,7	3,5	1,0	4,5
$x_1 + 1/x_2$	1,1	3,3	3,9	11,0	1,2	3,5	1,6	4,9	0,7	2,6	0,3	0,8	0,5	1,5	0,9	5,0
$\arctan x_1 - 5$	1,0	2,9	3,9	11,5	1,2	3,3	1,4	4,1	0,6	2,3	0,0	0,0	0,3	1,1	0,8	4,6
$\arctan x_1 - 5 + 1/x_2$	2,9	7,2	4,7	13,6	3,3	8,3	4,7	9,8	2,7	11,1	3,1	8,9	3,1	11,0	2,9	13,6
$\text{floor}(\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2})$	2,0	4,4	4,2	11,8	2,6	7,0	1,9	4,7	4,0	12,8	3,7	12,8	3,5	12,0	2,7	8,4
$\text{fl.}(\sqrt{x_1}) + \text{fl.}(\sqrt{x_2})$	2,3	5,3	4,4	10,8	2,4	5,6	2,6	6,1	3,9	13,9	4,1	12,5	4,0	14,8	2,9	9,6
<b>Celkem</b>	1,8	10,6	4,3	18,6	1,7	8,3	2,4	13,6	2,5	16,5	2,3	16,9	2,3	14,8	2,2	17,9
<b>Odchylka</b>	1,2	2,1	0,6	2,3	0,8	1,7	1,4	2,6	1,8	5,1	1,9	5,7	1,6	5,0	1,4	4,3

Tabulka B.12: SSA teoretických modelů: sekvenční LHS návrhy se 40 body - 1. metoda.

Model	AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max	μ	max
$x_1 + x_2$	3,5	10,3	5,5	16,9	2,6	3,1	4,5	10,8	2,2	10,2	2,0	5,6	2,0	6,4	1,9	7,0
$x_1^2 + x_2^2$	4,2	11,1	6,2	17,6	4,2	4,8	5,2	11,4	3,6	13,0	3,2	8,5	3,1	8,5	3,6	12,8
$x_1x_2^2$	4,7	11,6	7,0	19,4	3,4	6,3	5,8	13,6	3,8	10,3	4,1	10,3	3,4	10,9	3,7	15,6
$x$	4,8	13,6	7,6	20,9	1,2	2,7	6,1	13,6	0,0	0,3	0,0	0,3	1,0	4,5	0,1	0,3
$x_1/x_2$	4,7	11,6	6,6	16,8	2,6	4,1	5,6	11,3	6,1	19,7	6,0	18,5	5,0	18,6	5,9	25,2
$x_1e^{x_2}$	4,9	14,4	7,5	22,2	2,1	4,9	6,0	16,2	1,9	6,7	2,0	6,3	2,0	6,3	1,8	5,4
$x_1^{x_2}$	5,6	12,8	7,7	16,8	5,5	8,0	6,9	13,0	6,6	20,8	6,8	17,0	6,5	18,6	7,0	20,8
$x_1 + x_2^2$	5,0	15,3	7,5	24,2	1,5	3,9	6,1	15,8	2,3	5,3	2,6	6,0	2,1	8,2	2,3	5,1
$x_1 + \log x_2$	4,7	15,0	7,5	22,7	2,3	4,9	6,1	16,2	2,1	7,6	1,9	5,8	2,0	7,6	1,8	6,6
$x_1 + e^{x_2}$	5,1	15,4	7,4	23,8	2,4	4,8	6,2	14,6	2,5	4,2	2,6	4,8	2,3	7,4	2,2	3,9
$x_1 + 1/x_2$	5,1	15,0	8,0	22,4	1,9	2,3	6,2	15,8	2,3	3,5	2,1	3,2	2,5	6,5	2,2	3,7
$\arctan x_1 - 5$	4,8	13,6	7,6	20,9	1,2	2,7	6,1	13,6	0,0	0,3	0,0	0,3	1,0	4,5	0,1	0,3
$\arctan x_1 - 5 + 1/x_2$	4,7	12,1	7,2	25,3	4,0	10,2	6,5	19,3	4,1	10,9	3,5	12,6	4,1	12,5	4,2	11,1
$\text{floor}(\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2})$	5,3	11,7	6,4	17,3	4,4	6,9	6,9	11,9	4,1	13,3	4,3	12,8	4,2	14,3	4,5	15,5
$\text{fl.}(\sqrt{x_1}) + \text{fl.}(\sqrt{x_2})$	4,6	11,5	6,3	18,6	2,8	3,2	6,3	13,4	4,6	15,2	4,5	10,7	4,3	17,5	4,1	14,1
<b>Celkem</b>	4,8	15,4	7,1	25,3	2,8	10,2	6,0	19,3	3,1	20,8	3,1	18,5	3,0	18,6	3,0	25,2
<b>Odchylka</b>	0,5	1,7	0,7	3,0	1,3	2,2	0,6	2,3	1,9	6,3	1,9	5,5	1,5	5,0	2,0	7,4

Tabulka B.13: SSA teoretických modelů: sekvenční LHS návrhy s 20 body - 2. metoda.

Model	AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max
$x_1 + x_2$	1,9	6,8	4,1	14,0	2,0	3,5	1,8	6,0	1,2	4,6	1,3	4,8	1,1	3,9	1,2	5,8
$x_1^2 + x_2^2$	2,1	7,4	4,6	14,6	3,0	3,5	2,2	6,1	2,5	8,0	2,4	7,2	2,4	9,5	2,7	9,9
$x_1x_2^2$	2,4	7,7	5,2	16,8	4,1	4,6	2,3	7,4	2,7	10,3	2,8	8,5	2,8	8,7	2,8	12,9
$x$	2,4	9,2	5,5	18,5	1,1	1,5	2,3	8,6	0,1	0,1	0,1	0,1	0,6	2,1	0,1	0,3
$x_1/x_2$	3,0	7,7	5,2	15,5	1,8	2,6	2,8	7,2	3,7	21,8	4,5	18,2	4,5	17,5	4,4	20,5
$x_1e^{x_2}$	2,5	9,5	5,4	17,4	1,6	2,7	2,5	7,4	1,2	4,0	1,3	4,4	1,3	3,1	1,2	4,1
$x_1^{x_2}$	3,1	8,3	6,3	14,7	4,7	8,7	3,2	8,8	4,8	15,7	5,1	15,5	5,5	14,0	4,9	17,7
$x_1 + x_2^2$	2,5	10,2	5,4	17,7	1,3	2,1	2,5	7,8	1,5	3,8	1,6	4,0	1,4	4,9	1,5	3,5
$x_1 + \log x_2$	2,4	9,0	5,3	18,3	1,9	2,7	2,4	7,6	1,2	4,0	1,2	4,0	1,4	3,9	1,2	4,2
$x_1 + e^{x_2}$	2,6	11,3	5,4	18,3	1,2	2,0	2,6	7,8	1,6	3,6	1,6	3,4	1,6	4,0	1,5	3,4
$x_1 + 1/x_2$	2,6	8,4	5,7	19,6	0,9	1,9	2,5	9,6	1,3	2,3	1,3	2,1	1,3	3,6	1,2	2,2
$\arctan x_1 - 5$	2,4	9,2	5,5	18,5	1,1	1,5	2,3	8,6	0,1	0,1	0,1	0,1	0,6	2,1	0,1	0,3
$\arctan x_1 - 5 + 1/x_2$	2,9	7,8	5,8	22,9	2,7	6,4	2,8	8,2	2,9	9,0	2,7	9,0	3,1	11,9	3,2	9,9
$\text{floor}(\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2})$	3,3	7,2	4,9	14,9	4,1	6,5	3,1	8,5	3,0	9,7	3,4	10,4	3,3	10,2	3,4	10,4
$\text{fl.}(\sqrt{x_1}) + \text{fl.}(\sqrt{x_2})$	2,6	6,8	4,9	12,9	2,7	3,5	2,9	7,9	3,6	11,7	3,6	11,5	3,3	14,4	2,9	9,4
<b>Celkem</b>	2,6	11,3	5,3	22,9	2,3	8,7	2,5	9,6	2,1	21,8	2,2	18,2	2,3	17,5	2,2	20,5
<b>Odchylka</b>	0,4	1,3	0,7	3,0	1,2	2,1	0,4	1,0	1,4	6,0	1,5	5,3	1,4	5,1	1,5	6,1

Tabulka B.14: SSA teoretických modelů: sekvenční LHS návrhy s 30 body - 2. metoda.

Model	AE		EMM		ML <sub>2</sub>		Dopt		PMCC		SRCC		KRCC		CN	
	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max
$x_1 + x_2$	1,9	6,4	3,9	14,8	1,5	2,3	1,7	4,5	0,8	2,7	0,9	3,4	0,9	3,1	0,8	2,4
$x_1^2 + x_2^2$	2,3	7,0	4,4	15,4	2,3	3,5	2,1	5,2	1,9	6,3	1,9	5,6	1,9	6,5	2,1	6,9
$x_1x_2^2$	2,3	7,3	4,9	17,6	2,6	3,6	2,2	5,1	2,1	6,9	2,1	5,5	2,3	7,4	2,2	7,2
$x$	2,6	8,6	5,2	18,3	0,5	0,9	2,3	5,9	0,0	0,3	0,0	0,2	0,4	1,2	0,0	0,3
$x_1/x_2$	2,3	6,1	4,7	12,4	2,0	3,2	2,4	5,0	3,2	11,3	3,2	12,6	3,5	15,5	3,5	13,1
$x_1e^{x_2}$	2,5	8,2	5,0	17,9	0,9	2,8	2,1	5,6	0,8	2,6	0,8	2,4	0,8	2,4	0,8	3,3
$x_1^{x_2}$	2,9	7,5	5,7	17,1	3,7	5,9	3,0	5,4	4,0	9,7	4,2	11,9	4,7	13,5	4,2	15,1
$x_1 + x_2^2$	2,5	8,6	5,1	18,6	0,6	1,4	2,3	6,2	1,0	2,5	1,1	2,4	1,0	3,3	1,0	3,1
$x_1 + \log x_2$	2,5	8,6	4,9	19,2	1,2	2,8	2,3	6,1	0,8	2,3	0,8	4,0	0,9	2,4	0,7	3,4
$x_1 + e^{x_2}$	2,5	9,0	5,0	19,0	0,8	1,5	2,5	6,3	1,0	2,3	1,1	2,0	1,0	2,6	1,0	2,4
$x_1 + 1/x_2$	2,6	8,2	5,3	17,2	0,6	1,1	2,3	6,4	0,8	1,6	0,8	1,5	0,8	2,3	0,8	1,7
$\arctan x_1 - 5$	2,6	8,6	5,2	18,3	0,5	0,9	2,3	5,9	0,0	0,3	0,0	0,2	0,4	1,2	0,0	0,3
$\arctan x_1 - 5 + 1/x_2$	2,7	7,5	5,3	16,7	1,6	5,1	2,7	8,8	2,3	8,5	2,2	8,3	2,2	9,7	2,4	9,4
$\text{floor}(\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2})$	2,6	6,5	4,6	14,9	3,0	5,9	2,4	7,4	2,4	6,6	2,7	9,1	2,8	8,7	2,7	8,4
$\text{fl.}(\sqrt{x_1}) + \text{fl.}(\sqrt{x_2})$	2,4	6,8	4,7	14,4	1,7	2,1	2,5	6,9	2,7	7,7	2,8	9,8	2,8	8,1	2,4	8,8
<b>Celkem</b>	2,5	9,0	4,9	19,2	1,6	5,9	2,3	8,8	1,6	11,3	1,6	12,6	1,8	15,5	1,7	15,1
<b>Odchylka</b>	0,2	1,0	0,4	2,0	1,0	1,7	0,3	1,1	1,2	3,6	1,2	4,1	1,3	4,5	1,3	4,6

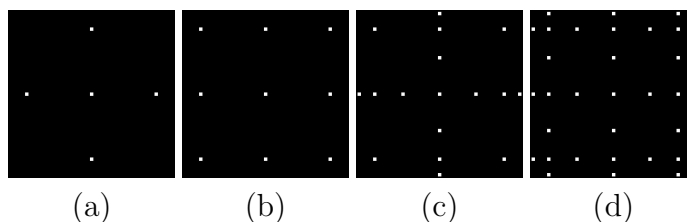
Tabulka B.15: SSA teoretických modelů: sekvenční LHS návrhy se 40 body - 2. metoda.



# Příloha C

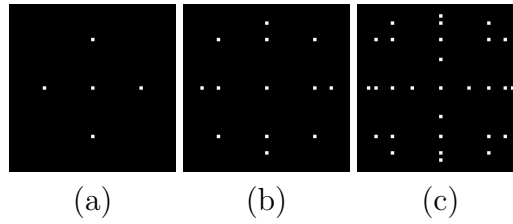
## Porovnání výsledků SSA pro různé typy návrhů

Při použití řídkých mřížek popsaných v Kapitole 2.2 pro SSA se předpokládá dosažení velmi dobrých výsledků v odhadu citlivosti odezvy modelu na vstupní parametry, protože tyto návrhy slouží k efektivnímu modelování ploch odezvy a numerické integraci. Z tohoto důvodu je vhodné zařadit do této práce i porovnání výsledků obdržných řídkými mřížkami s odhady citlivosti stanovenými optimálními návrhy zkoumanými v této práci. Pro generování řídkých mřížek byly použity dvě metody (KPU a GQU) z metod nabízených v [18], obě s rovnoměrným rozdělením. Program dále nabízí generování řídkých mřížek s pravděpodobnostním rozdělením normálním. Generovaly se řídké mřížky pro určité hladiny přesnosti, které jsou uvedeny na Obrázcích C.2 a C.1, a následně 100 optimálních návrhů kritéria  $ML_2$  s odpovídajícím počtem bodů. Pro optimalizaci bylo použito simulované přezíhání s počtem iterací v závislosti na počtu návrhových bodů  $iter_{\max} = n \cdot 10^5$ . Pro porovnání byly zvoleny pouze optimální návrhy kritéria  $ML_2$ , protože byly tyto návrhy v závěru této práce vyhodnoceny jako nejvhodnější pro použití v SSA. Tyto sofistikovaně generované návrhy jsou pro názornost ještě porovnány s výsledky 100 náhodných návrhů získanými metodou Monte Carlo (MC).



Obrázek C.1: Sparse grids metody KPU s úrovní přesnosti: 2 (a), 3 (b), 4 (c) a 5 (d).

Postup a uvažované modely provedené SSA jsou stejné jako v Kapitole 8. Všechny analyzované modely mají dva parametry, v případě řídkých mřížek a náhodných návrhů je návrhový prostor spojitý a parametry jsou  $x_i \in [1; 10]$ , zatímco u optimálních návrhů je definiční obor parametrů diskretizován do příslušného počtu přípustných hodnot dle počtu



Obrázek C.2: Sparse gridsy metody GQU s úrovní přesnosti: 2 (a), 3 (b) a 4 (c).

bodů v jednotlivých řídkých mřížkách, aby mohly být získané výsledky porovnány. Diskretizace byla provedena na základě rovnoměrného rozložení a body byly umístěny do středů jednotlivých intervalů. Získané odhady citlivosti byly porovnány s citlivostí získanou plně faktoriálním návrhem s uvažováním 1000 diskrétních přípustných hodnot pro každý parametr. Souhrn výsledků citlivostní analýzy při použití všech těchto návrhů je uveden v Tabulce C.1, výsledky průměrných a maximálních chyb v odhadu citlivosti jednotlivě pro každý model jsou uvedeny dále v Tabulce C.2.

Úroveň přesnosti	dva		tři		čtyři		pět			
Počet bodů	<b>5</b>	<b>9</b>	<b>13</b>	<b>17</b>	<b>29</b>	<b>33</b>				
	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$	max	$\mu$			
<b>KPU</b>	9,7	26,1	5,0	16,8	-	3,9	13,7	-	2,9	9,3
<b>GQU</b>	9,5	26,1	-	3,8	14,1	-	2,5	9,4	-	-
<b>ML<sub>2</sub></b>	5,8	18,7	4,3	16,9	3,7	20,9	3,1	18,9	1,8	12,0
<b>ML<sub>2</sub> LHS</b>	4,9	11,1	2,8	7,9	3,6	11,0	2,6	9,3	1,6	9,6
<b>MC</b>	24,1	86,6	17,4	79,9	13,1	58,6	11,7	38,8	8,9	39,9
									7,7	29,3

 Tabulka C.1: Průměrné a maximální chyby v predikci citlivosti teoretických modelů pro optimální ML<sub>2</sub> návrhy, řídké mřížky a náhodné návrhy.

Uvedené výsledky ukazují, že odhady citlivosti optimálních návrhů kritéria ML<sub>2</sub> jsou dokonce lepší než výsledky řídkých mřížek. Výsledky se od sebe navzájem tolik neliší, ale nejlepších odhadů dosáhly optimální LHS návrhy. Z výsledků náhodných návrhů je zřejmé, že zkoumané počty bodů jsou pro tento typ návrhů zcela nedostatečné a odhady citlivosti jsou velmi nepřesné. Se vzrůstajícím počtem bodů se odhad náhodných návrhů výrazně zlepšuje, přesto i pro největší zkoumaný počet bodů jsou tyto návrhy stále neúspěšné.

Tento test ukazuje výhody použití řídkých mřížek, které jsou velmi snadno generovatelné, jelikož pozice jejich bodů jsou deterministicky určeny. Přesto poskytují velmi přesný odhad citlivosti modelu na vstupní parametry, který je srovnatelný s obtížněji získávanými optimálními návrhy kritéria ML<sub>2</sub>, které byly v této práci vyhodnoceny jako nejvhodnější ze zkoumaných optimálních návrhů pro použití v SSA. Ovšem u řídkých mřížek je nutné připomenout jejich omezení: mohou být použity pouze pro spojitý prostor, mají špatné promítací vlastnosti, počet bodů těchto návrhů je pevně dán a nelze předepsat požadovanou korelaci mezi souřadnicemi.

PŘÍLOHA C. POROVNÁNÍ VÝSLEDKŮ SSA PRO RŮZNÉ TYPY NÁVRHŮ

Model		$x_1 + x_2$	$x_1^2 + x_2^2$	$x_1 x_2^2$	$x$	$x_1/x_2$	$x_1 e^{x_2}$	$x_1^{x_2}$	$x_1 + x_2^2$	$x_1 + \log x_2$	$x_1 + e^{x_2}$	$x_1 + 1/x_2$	$\arctan x_1 - 5$	$\arctan x_1 - 5 + 1/x_2$	$\text{floor}(\sqrt{x_1} + \sqrt{x_2})$	$\text{fl.}(\sqrt{x_1}) + \text{fl.}(\sqrt{x_2})$	celkem		
5	$\mu$	KPU	0,7	1,9	1,4	0,0	1,2	16,4	13,9	21,8	16,4	26,1	24,6	0,0	13,9	4,7	2,5	<b>9,7</b>	
		GQU	0,7	1,9	1,4	0,0	1,2	16,4	13,9	21,8	16,4	26,1	24,6	0,0	13,9	1,4	2,5	<b>9,5</b>	
		ML <sub>2</sub>	6,8	5,6	11,2	3,7	1,3	7,5	12,3	2,1	7,5	3,1	6,8	3,7	7,5	2,0	5,6	<b>5,8</b>	
		ML <sub>2</sub> LHS	3,3	2,2	8,7	5,0	1,2	6,3	11,1	0,8	6,3	3,6	8,1	5,0	6,3	1,1	4,6	<b>4,9</b>	
		MC	25,8	26,3	26,0	20,5	25,4	23,8	27,1	22,7	24,8	20,8	21,0	20,5	23,4	27,3	26,7	<b>24,1</b>	
	max	KPU	0,7	1,9	1,4	0,0	1,2	16,4	13,9	21,8	16,4	26,1	24,6	0,0	13,9	4,7	2,5	<b>26,1</b>	
		GQU	0,7	1,9	1,4	0,0	1,2	16,4	13,9	21,8	16,4	26,1	24,6	0,0	13,9	1,4	2,5	<b>26,1</b>	
		ML <sub>2</sub>	17,3	16,1	18,7	5,0	1,7	11,3	16,1	5,8	11,3	3,6	8,1	5,0	11,3	4,7	8,6	<b>18,7</b>	
		ML <sub>2</sub> LHS	3,3	2,2	8,7	5,0	1,2	6,3	11,1	0,8	6,3	3,6	8,1	5,0	6,3	1,1	4,6	<b>11,1</b>	
		MC	80,0	80,0	73,7	50,0	75,0	61,3	81,5	59,2	61,3	51,6	53,1	50,0	63,7	70,7	86,6	<b>86,6</b>	
9	$\mu$	KPU	0,3	0,5	2,8	0,0	1,4	7,1	2,4	12,6	7,1	16,8	15,3	0,0	4,7	2,5	1,5	<b>5,0</b>	
		ML <sub>2</sub>	3,7	5,1	6,5	1,3	3,4	6,1	6,2	2,8	6,1	1,7	3,2	1,3	5,7	4,8	6,7	<b>4,3</b>	
		ML <sub>2</sub> LHS	3,4	2,7	5,0	1,7	4,2	0,9	4,5	1,7	1,0	0,3	4,7	1,7	4,2	3,3	3,1	<b>2,8</b>	
		MC	16,9	17,7	17,5	15,5	17,8	17,1	20,1	16,5	17,6	15,7	16,0	15,5	17,4	18,4	20,8	<b>17,4</b>	
		max	KPU	0,3	0,5	2,8	0,0	1,4	7,1	2,4	12,6	7,1	16,8	15,3	0,0	4,7	2,5	1,5	<b>16,8</b>
	ML <sub>2</sub>		12,8	7,5	12,9	4,2	10,0	10,4	16,9	10,0	12,1	5,7	6,4	4,2	8,7	9,2	10,8	<b>16,9</b>	
	ML <sub>2</sub> LHS		3,4	2,7	7,9	1,7	4,2	1,2	5,2	1,7	1,2	0,3	4,7	1,7	4,6	3,3	3,1	<b>7,9</b>	
	max		MC	62,5	57,2	68,7	45,8	48,3	55,4	79,9	51,6	52,3	47,4	43,0	45,8	45,4	56,9	65,0	<b>79,9</b>
			$\mu$	GQU	0,5	1,4	1,2	0,0	0,7	4,4	3,1	9,9	4,4	14,1	12,6	0,0	3,7	1,1	0,3
		ML <sub>2</sub>		3,8	4,1	4,4	1,4	4,2	2,7	8,4	3,0	3,0	1,9	2,8	1,4	4,4	5,5	5,0	<b>3,7</b>
ML <sub>2</sub> LHS		3,1		5,3	5,1	1,4	2,8	3,2	9,3	4,4	3,6	1,0	1,7	1,4	3,0	2,8	6,7	<b>3,6</b>	
MC		12,7		12,7	14,4	11,3	14,7	12,0	16,7	11,6	12,2	11,4	11,7	11,3	13,3	14,2	15,7	<b>13,1</b>	
max	GQU	0,5		1,4	1,2	0,0	0,7	4,4	3,1	9,9	4,4	14,1	12,6	0,0	3,7	1,1	0,3	<b>14,1</b>	
	ML <sub>2</sub>	9,7	8,9	9,5	5,1	13,2	9,1	13,1	7,5	7,7	5,4	7,5	5,1	11,8	20,9	10,9	<b>20,9</b>		
	ML <sub>2</sub> LHS	3,1	5,3	6,1	1,4	3,9	6,1	11,0	5,0	6,1	1,1	1,7	1,4	4,1	5,9	8,6	<b>11,0</b>		
	max	MC	41,8	40,1	46,3	36,3	35,9	37,1	58,6	32,5	37,1	34,9	37,2	36,3	47,0	51,0	40,1	<b>58,6</b>	
		$\mu$	KPU	0,4	1,4	2,4	0,0	0,3	5,0	1,2	10,5	5,0	13,7	12,2	0,0	4,6	1,2	0,7	<b>3,9</b>
ML <sub>2</sub>			2,9	3,1	3,2	1,4	3,2	2,2	6,7	2,4	2,5	1,6	2,0	1,4	3,4	4,8	5,3	<b>3,1</b>	
ML <sub>2</sub> LHS			2,4	3,9	2,8	0,7	2,6	1,8	6,6	2,5	1,9	0,9	0,4	0,7	2,2	4,3	5,0	<b>2,6</b>	
MC			10,7	12,1	12,3	10,6	13,4	11,1	14,5	11,1	10,7	10,9	10,9	10,6	11,6	11,2	13,5	<b>11,7</b>	
max	KPU		0,4	1,4	2,4	0,0	0,3	5,0	1,2	10,5	5,0	13,7	12,2	0,0	4,6	1,2	0,7	<b>13,7</b>	
	ML <sub>2</sub>	7,4	7,9	9,8	4,0	9,4	7,7	12,9	6,9	7,7	4,8	6,0	4,0	9,5	18,9	14,3	<b>18,9</b>		
	ML <sub>2</sub> LHS	3,6	4,5	6,3	1,6	6,0	4,4	9,3	4,5	4,4	1,8	1,5	1,6	4,4	7,9	9,3	<b>9,3</b>		
	max	MC	38,8	37,0	36,9	34,1	36,4	36,6	37,1	33,7	33,2	35,0	33,6	34,1	32,7	33,8	33,6	<b>38,8</b>	
		$\mu$	GQU	0,5	1,4	1,4	0,0	1,0	2,4	2,5	6,3	2,4	9,4	7,7	0,0	1,8	0,1	0,5	<b>2,5</b>
ML <sub>2</sub>			1,7	1,6	1,9	1,0	2,1	1,4	2,8	1,2	1,2	1,0	1,4	1,0	1,8	3,6	3,2	<b>1,8</b>	
ML <sub>2</sub> LHS			1,5	1,8	1,9	0,5	1,6	1,2	3,7	1,1	1,2	0,7	0,9	0,5	1,4	2,9	3,1	<b>1,6</b>	
MC			7,6	8,7	8,6	8,4	9,8	8,4	10,4	8,5	8,8	8,4	8,7	8,4	9,1	8,8	10,3	<b>8,9</b>	
max	GQU		0,5	1,4	1,4	0,0	1,0	2,4	2,5	6,3	2,4	9,4	7,7	0,0	1,8	0,1	0,5	<b>9,4</b>	
	ML <sub>2</sub>	5,0	4,2	5,1	3,2	6,0	5,5	6,2	4,6	4,5	3,7	4,0	3,2	5,0	12,0	8,7	<b>12,0</b>		
	ML <sub>2</sub> LHS	4,0	3,1	3,3	1,9	5,5	3,6	6,6	2,7	3,6	3,0	2,4	1,9	3,9	9,6	7,9	<b>9,6</b>		
	max	MC	30,8	35,0	31,5	33,1	21,2	37,0	33,1	36,4	39,9	34,2	31,6	33,1	28,3	31,5	35,8	<b>39,9</b>	
		$\mu$	KPU	0,3	0,7	1,4	0,0	0,5	3,3	4,0	5,6	3,3	9,3	6,2	0,0	5,5	1,1	1,7	<b>2,9</b>
ML <sub>2</sub>			1,2	1,6	1,7	1,0	1,9	1,3	2,6	1,1	1,1	1,1	1,4	1,0	1,7	3,0	2,8	<b>1,6</b>	
ML <sub>2</sub> LHS			1,2	1,3	1,5	0,5	1,5	0,9	2,8	0,9	0,9	0,6	1,0	0,5	1,6	2,8	2,2	<b>1,3</b>	
MC			7,1	7,6	8,0	6,9	8,2	6,9	9,6	7,1	7,3	7,0	7,0	6,9	8,2	8,4	8,7	<b>7,7</b>	
max	KPU		0,3	0,7	1,4	0,0	0,5	3,3	4,0	5,6	3,3	9,3	6,2	0,0	5,5	1,1	1,7	<b>9,3</b>	
	ML <sub>2</sub>	4,5	3,6	5,2	3,3	5,6	4,5	8,1	3,5	3,6	3,5	3,5	3,3	4,7	8,9	8,8	<b>8,9</b>		
	ML <sub>2</sub> LHS	2,9	3,7	5,2	1,3	5,0	2,4	5,5	2,5	3,0	1,9	2,4	1,3	5,2	7,9	5,3	<b>7,9</b>		
	max	MC	23,5	26,9	25,2	25,2	24,6	24,9	27,2	23,7	25,8	23,9	22,8	25,2	23,8	23,2	29,3	<b>29,3</b>	

Tabulka C.2: Výsledky SSA: průměrné a maximální chyby v odhadu citlivosti.

# Příloha D

## Návrh experimentů pro trénování neuronových sítí

Z výsledků uvedených v této práci vyplývá, že LHS návrhy kritéria  $ML_2$  mají velmi dobré vlastnosti (dobré pokrytí návrhového prostoru a vysokou míru ortogonalitu). Proto byl tento typ návrhu vybrán pro definování trénovacích dat neuronových sítí.

Konkrétně byly neuronové sítě trénovány pro identifikaci parametrů modelu hydratace betonu:

$$\tilde{A}(\alpha) = B_1 \left( \frac{B_2}{\alpha_\infty} + \alpha \right) (\alpha_\infty - \alpha) \exp \left( -\bar{\eta} \frac{\alpha}{\alpha_\infty} \right), \quad (D.1)$$

kdy přehled parametrů, jejich rozmezí a vztah se souřadnicemi návrhových bodů, které jsou  $p_i \in [0; 1]$ , je uveden v Tabulce D.1. Pro generování návrhu je tedy stanoven počet dimenzí

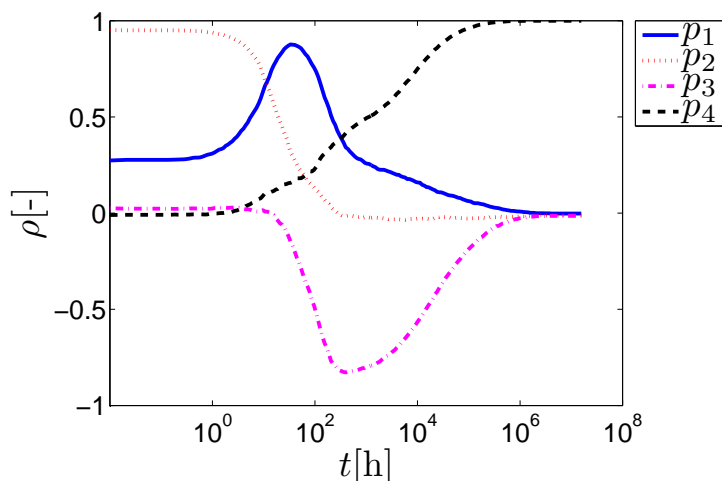
Parametr	Minimum	Maximum	Vztah
$B_1$	$10^6$	$10^7$	$p_1 = \log B_1 - 6$
$B_2$	$10^{-6}$	$10^{-3}$	$p_2 = (\log B_2 + 6)/3$
$\bar{\eta}$	-12	-2	$p_3 = (-\bar{\eta} - 2)/10$
$\alpha_\infty$	0,7	1,0	$p_4 = (\alpha_\infty - 0,7)/0,3$

Tabulka D.1: Přehled parametrů hydratačního modelu.

(rovný počtu parametrů modelu) a počet návrhových bodů byl zvolen 100. Pro optimalizaci byl použit algoritmus simulovaného přezhánění, který je velmi podobný simulovanému žhánění, popsanému v Kapitole 5, s tím rozdílem, že při dosažení hodnoty  $T_{\min}$  dochází k opětovnému navýšení teploty na  $T_{\max}$  se zachováním nejlepšího nalezeného řešení.

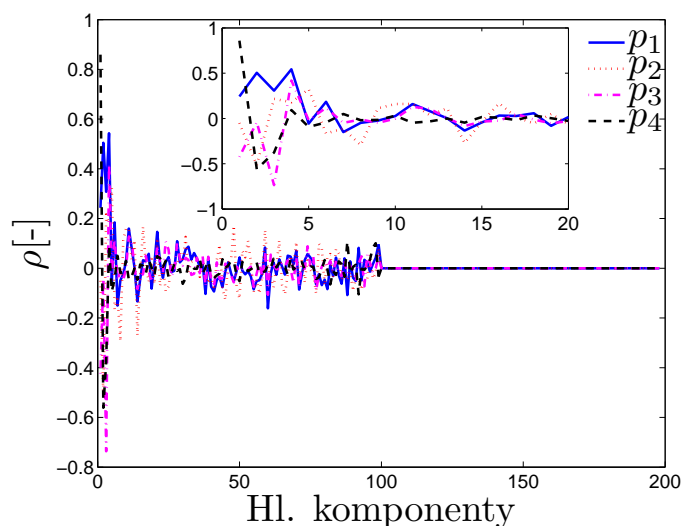
Následně byla spuštěna simulace postupně pro všechny návrhové body, kdy odezvou modelu je vývoj stupně hydratace v čase. Čas byl diskretizován do 199 hodnot rovnoměrně rozdělených po jeho logaritmování. Tedy výstupem modelu je 199 hodnot stupňů hydratace, jejich citlivost na jednotlivé parametry  $p_i$  byla opět vyjádřena pomocí SRCC. Výsledky citlivostní analýzy jsou uvedeny na Obrázku D.1.

Ovšem počet výstupních hodnot modelu je pro trénování neuronových sítí moc velký,



Obrázek D.1: Citlivostní analýza výstupů hydratačního modelu.

a proto se zvolilo použití hlavních komponent, které jsou lineární kombinací původních výstupů. Celkově je 100 hlavních komponent a jejich hodnoty se získají analýzou hlavních komponent (PCA - z angl. *Principal Component Analysis*), která je implementována v MATLABu. Jelikož se jedná o novou formu výstupů modelu, bude jejich citlivost vůči parametrům  $p_i$  odlišná od citlivosti výstupů v původním tvaru. Proto musela být provedena ještě citlivostní analýza určující vztah mezi získanými hlavními komponentami a parametry modelu, jejíž výsledky jsou na Obrázku D.2.



Obrázek D.2: Citlivostní analýza hlavních komponent výstupů hydratačního modelu.

Tyto získané výsledky byly následně použity jako vstupní hodnoty pro trénování různých typů neuronových sítí, více v [35].