



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
FAKULTA STAVEBNÍ

NÁVRH EXPERIMENTŮ V DISKRÉTNÍM PROSTORU PRO STOCHASTICKOU CITLIVOSTNÍ ANALÝZU

Autorka:

ELIŠKA JANOUCHOVÁ

Vedoucí práce:

Ing. ANIČKA KUČEROVÁ, Ph.D.

13. dubna 2011

Abstrakt

Za účelem důkladného prozkoumání odezvy modelu je nutné provést simulace pro sady návrhových bodů, neboli návrhových experimentů. V případě složitých nelineárních modelů jsou tyto simulace obvykle velmi časově náročné, proto je počet prováděných simulací v omezeném čase poměrně malý. Náhodně vybrané návrhové body nezajistí, aby zkoumané vlastnosti byly řádně zachyceny. Z tohoto důvodu musí být návrhové body vybírány opatrně. Motivací této práce je zkoumat metody, které lze využít pro generování návrhů v diskrétním prostoru, kde každý parametr může dosáhnout odlišného počtu hodnot. V tomto případě totiž selhávají běžně užívané softwary založené na metodě LHS (Latin Hypercube Sampling). Cílem této práce je porovnat několik známých metrik pro hodnocení optimálních návrhů jako je například euklidovská maximin vzdálenost, korelace či D-optimalita. Výsledné optimální návrhy jsou použity pro stochastickou citlivostní analýzu za účelem prověření jejich schopnosti zachytit korelaci mezi parametry a odezvou zkoumaného modelu.

Abstract

In order to properly explore response of a model, one needs to perform simulations for a set of design points. In the case of complex non-linear models, the simulations are often very time-consuming. Randomly chosen design points do not ensure that the properties of interest will be captured properly. Therefore, the design points must be chosen very carefully. The motivation of the presented contribution is to investigate methods, which are suitable for generating designs in discrete parameter space, where each parameter can attain different number of levels, because commonly used software based on Latin Hypercube Sampling fails in solving such a situation. Hence, we compare here several well-known metrics for assessing optimal designs, e.g. the Euclidean maximin distance, the maximum pairwise correlation or the D-optimal criterion. The resulting optimal designs are then employed for the evaluation of the stochastic sensitivity analysis so as to verify their ability in the prediction of the 'parameter-response' correlations for a given model.

Obsah

1	Úvod	3
2	Metriky	3
2.1	Metrika Audze-Eglais	3
2.2	Maximin	3
2.3	ML_2 diskrepance	4
2.4	Korelace	4
2.4.1	Pearsonův korelační koeficient	4
2.4.2	Spearmanův koeficient pořadové korelace	4
2.4.3	Kendallův koeficient pořadové korelace	5
2.4.4	Korelace více proměnných	5
2.5	Číslo podmíněnosti	6
2.6	D-optimalita	6
3	Optimalizační metoda	7
4	Porovnání metrik	8
4.1	Grafické porovnání	8
4.1.1	Plocha metriky pro doplnění 4. bodu	8
4.1.2	Plocha metriky pro doplnění 5. bodu	9
4.2	Turnaj metrik	9
4.3	Minimální vzdálenost	11
4.4	Korelace mezi vstupními a výstupními hodnotami	15
5	Závěr	15
6	Poděkování	16

1 Úvod

Z důvodu vzrůstající komplexnosti numerických modelů se průzkum odezvy modelu stává důležitou oblastí zkoumání. Jsou sestavovány spolehlivé meta-modely [11], aby se snížil počet časově náročných simulací. Meta-modely reprezentují aproximaci odezvy modelu v definičním oboru parametrů, který se nazývá návrhový prostor. Obvykle jsou získány minimalizací jejich odchylky v návrhových bodech. Schopnost výsledného meta-modelu zachytit korelaci mezi parametry a odezvou závisí na volbě návrhových bodů. Metody pro získávání těchto bodů se souhrnně nazývají návrhové či plánované experimenty (design of experiments - DOE).

Tato práce se zaměřuje na několik běžných metrik pro hodnocení optimálních návrhů a zkoumá jejich vlastnosti při aplikaci v diskrétním návrhovém prostoru. Každá metrika definuje odlišný optimální návrh, proto je její volba velmi důležitá. Porovnáním získaných optimálních návrhů a chování metrik v jednoduchých situacích získáváme přehled o výhodách a úskalích jednotlivých metrik.

2 Metriky

V této části jsou představeny jednotlivé studované metriky. Pro přehlednost lze metriky rozdělit do dvou hlavních skupin podle charakteristiky návrhů, které jsou danou metrikou upřednostňovány. To 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.

Optimální návrh by měl splňovat základní kritéria: měl by být snadno dostupný, jako například LHS návrhy, co nejvíce ortogonální a měl by rovnoměrně pokrývat celý definiční obor. Mezi metriky zajišťující ortogonalitu návrhu patří například korelace a číslo podmíněnosti. Na vlastnosti týkající se rovnoměrného rozprostření návrhu se zaměřují metriky Audze-Eglais, maximin či ML_2 diskrepance.

2.1 Metrika Audze-Eglais

Metrika Audze-Eglais (AE) [1, 12] je založena na následující fyzikální analogii: body tvořící systém o jednotkové hmotnosti na sebe navzájem působí silami tak, že systém má určitou potenciální energii U . Pokud se body uvolní ze své původní pozice, tak se hýbou. Rovnováha je dosaženo tehdy, když je potenciální energie systému minimální. Pokud je velikost sil nepřímo úměrná druhé mocnině vzdálenosti jednotlivých bodů, pak je minimalizováním potenciální energie

$$U = \sum_{p=1}^n \sum_{q=p+1}^n \frac{1}{L_{pq}^2} \quad (1)$$

dosaženo rovnoměrného rozložení bodů. L_{pq} je euklidovská vzdálenost mezi body p a q ($p \neq q$) a n je počet navržených bodů.

2.2 Maximin

Další metrikou upřednostňující rovnoměrné rozprostření návrhu je Maximin (Euclidean maximin distance - EMM) [6], jejíž 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 L_{\min} (2). Hodnoty L_{pq} jsou opět euklidovské vzdálenosti mezi n návrhovými body.

$$L_{\min} = \min\{\dots, L_{pq}, \dots\}, \quad p = 1 \dots n, \quad q = (p + 1) \dots n \quad (2)$$

2.3 ML₂ diskrepance

Modifikovaná L₂ diskrepance (ML₂) je metrika používaná místo časově náročnější původní L_∞ diskrepance [2]. Její hodnotu získáváme ze vzorce

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

kde k je dimenze návrhového prostoru a n je opět počet bodů v návrhu. Souřadnice bodů x jsou normalizovány tak, aby ležely na intervalu $(0; 1)$. Menší hodnoty ML₂ vyjadřují rovnoměrnější rozložení bodů.

2.4 Korelace

Pomocí korelace [4] 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.

2.4.1 Pearsonův korelační koeficient

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

$$r_{xy} = \frac{\text{cov}_{xy}}{\sigma_x \sigma_y} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}. \quad (4)$$

Korelační koeficient nabývá hodnot $< -1; 1 >$ a pro představu vztahu mezi jeho hodnotou a rovinným uspořádáním bodů jsou na obrázku 1 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.

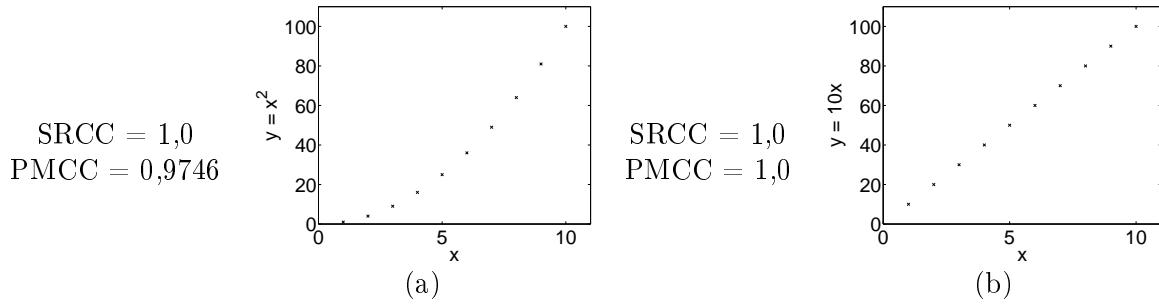


Obrázek 1: Příklady souborů bodů o souřadnicích $[x; y]$ vyjádřeny graficky a pomocí korelačního koeficientu.

2.4.2 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 (5), kde $d_i = r(x_i) - r(y_i)$; $r(x_i)$ vyjadřuje pořadí hodnoty x_i a obdobně pro y_i .

$$r_s = 1 - \frac{6 \sum_{i=1}^n d_i^2}{n(n^2 - 1)}. \quad (5)$$



Obrázek 2: Rozmístění bodů: (a) $y = x^2$ a (b) $y = 10x$.

Hodnoty SRCC se pro obě varianty rozprostření bodů na obrázku 2 rovnají jedné na rozdíl od PMCC, jehož hodnota se pro (a) rovná 0.9746 a pro (b) se shoduje se SRCC. Na tomto jednoduchém příkladu vidíme, že PMCC není schopen zachytit nelineární vztah proměnných tak dobře jako SRCC.

2.4.3 Kendallův koeficient pořadové korelace

Pokud si dvojice hodnot jednotlivých proměnných rozdělíme na vzájemně si odpovídající (P), tedy dvojice s pozitivní korelací, a na ty, které si odporují (N) s negativní korelací, pak Kendallův koeficient pořadové korelace má tvar

$$r_s = \frac{P - N}{n(n - 1)/2}. \quad (6)$$

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

2.4.4 Korelace více proměnných

Pro více proměnných mají koeficienty tvar matice. Korelační matici lze zpracovat několika způsoby. Například softwary SPERM [9] a FReET [8] založené na metodě LHS minimalizují výraz

$$E_1 = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n (C_{ij} - \tilde{C}_{ij})^2}, \quad (7)$$

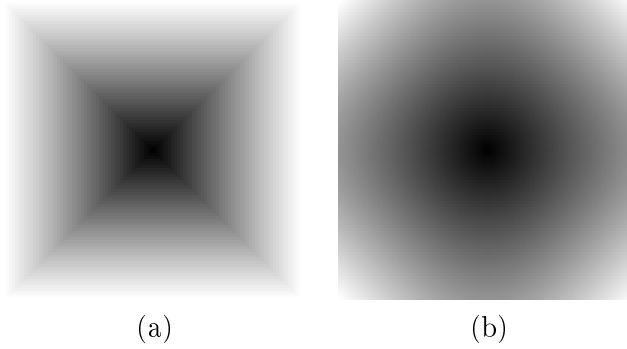
kde C_{ij} jsou prvky korelační matice, získané pro daný návrh bodů a \tilde{C}_{ij} jsou prvky předepsané korelační matice. Jelikož v našem případě je cílem získat v co největší míře ortogonální návrh bodů, pak předepsaná matice \tilde{C} je maticí jednotkovou. V takovém případě se rovnice (7) zjednoduší na

$$E_1 = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n C_{ij}^2}. \quad (8)$$

Druhou možností uvedenou např. v [2] je minimalizovat maximum z absolutních hodnot korelační matice nad diagonálou, tzn. funkci

$$E_2 = \max |C_{ij}|, \quad i = 1 \dots n, \quad j = (i + 1) \dots n. \quad (9)$$

Srovnání obou přístupů můžeme sledovat na obrázcích 3, kde je zobrazena plocha (a) funkce (9) a (b) funkce (8) v závislosti na poloze devátého bodu umísťovaného 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 (8) získáváme hladký průběh plochy na rozdíl od ostrého minima, které vytváří metrika maximálního prvku korelační matice (9).



Obrázek 3: Plochy korelační matice.

2.5 Číslo podmíněnosti

Další metrikou, která zaručuje ortogonalitu, je číslo podmíněnosti (conditional number)

$$\kappa(\mathbf{X}) = \text{cond}(\mathbf{X}^T \mathbf{X}) = \frac{\lambda_1}{\lambda_n}, \quad (10)$$

kde \mathbf{X} je návrhová matice (DoE matrix), neboli matice souřadnic navržených bodů

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

λ_1 a λ_n jsou největší a nejmenší vlastní čísla získaná pro $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ poté, co jsou hodnoty ve sloupcích matice \mathbf{X} normovány na interval $< -1; 1 >$. Pokud je hodnota $\kappa(\mathbf{X})$ rovna jedné, je řešení ortogonální. Velké číslo podmíněnosti poukazuje na to, že řešení může být špatně podmíněné. Hledáme tedy umístění bodů, kterému bude odpovídat číslo podmíněnosti blízké se jedné.

2.6 D-optimalita

D-optimalita (Dopt) je metrikou maximalizující entropii [10]. Cílem je maximalizovat determinant matice \mathbf{A} , tzn.

$$\min_x D(x) = -\det \mathbf{A}, \quad (12)$$

kde \mathbf{A} je tzv. informační matice, kterou získáme

$$\mathbf{A} = \mathbf{Z}^T \mathbf{Z} \quad (13)$$

a kde matice \mathbf{Z} může mít například následující podobu

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & x_{11}^2 & x_{12}^2 & x_{11}x_{12} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & x_{21}^2 & x_{22}^2 & x_{21}x_{22} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & x_{n1}^2 & x_{n2}^2 & x_{n1}x_{n2} \end{bmatrix}, \quad (14)$$

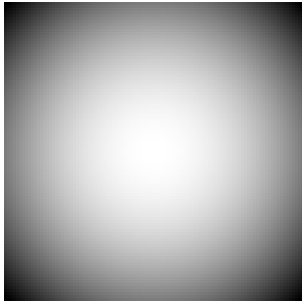
přičemž počet sloupců matice \mathbf{Z} je omezen počtem bodů v návrhu. Pokud je počet sloupců větší než $n - 1$, kde n je počet bodů, stane se matice \mathbf{A} singulární. D-optimální návrhy získané tímto postupem však někdy

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 [3] bayesovkou 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 do přidaných sloupců přičteme k prvkům na diagonále matice \mathbf{A} jedničku. Pokud chceme zachovat stejný vztah metriky k jednotlivým souřadnicím návrhových bodů, měla by být zachována symetrie zastoupení obou souřadnic v matici \mathbf{Z} . Proto v případech, kdy do matice \mathbf{Z} přidáváme další sloupce (tzn. počet sloupců je vyšší než $n - 1$), doplňujeme za každý takový sloupec na diagonálu matice \mathbf{A} jedničku tak, aby nebyla opomenuta symetrie souřadnic. Proto se může stát, že počet přidaných jedniček bude převyšovat počet přidaných sloupců.

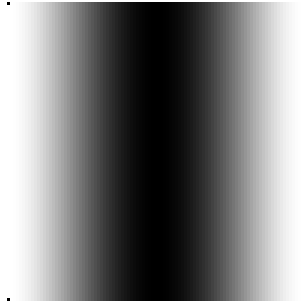
Nevýhodou této modifikace je nezbytnost určitých manuálních úprav, kdykoliv se rozhodneme změnit počet bodů v návrhu. Zatím nebyl navržen explicitní postup, jak určit počet sloupců, které je nutné do matice \mathbf{Z} přidat, aby byly penalizovány veškeré duplicitní návrhy. Proto navržená bayesovská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

Důležitost správného sestavení matic a důsledky chybného postupu si ukážeme na jednoduchém příkladu. Mějme čtvercový prostor s body umístěnými v rozích a pátý bod je umístován postupně do zbylých pozic. Pro každou pozici je stanovena hodnota D_{opt} a následně zanesena do grafické podoby intenzitou černé barvy (minimum). Plochy metriky D_{opt} pro různé varianty matice \mathbf{Z} a \mathbf{A} můžeme sledovat na obrázcích 4. Na prvním obrázku 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 definované metriky vede k duplicitě stávajících bodů. Dále je uprostřed uvedena plocha odpovídající nesymetrickému uspořádání matic. Správné řešení pro pět bodů uvádí rovnice pro matici \mathbf{Z}_c uvedená u odpovídajícího obrázku vpravo. Počet sloupců matice \mathbf{Z}_c je $6 = (n - 1) + 2$ a do matice \mathbf{A} patří na tři poslední pozice na diagonále jedničky pro zachování symetrie.



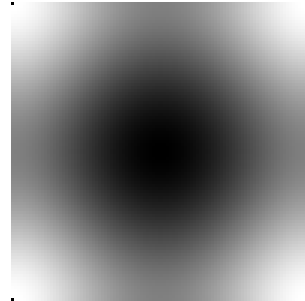
(a)

$$\mathbf{Z}_a = \begin{bmatrix} 1 & x_{ii} & x_{ij} \end{bmatrix}$$



(b)

$$\mathbf{Z}_b = \begin{bmatrix} 1 & x_{ii} & x_{ij} & x_{ii}^2 \end{bmatrix}$$



(c)

$$\mathbf{Z}_c = \begin{bmatrix} 1 & x_{ii} & x_{ij} & x_{ii}^2 & x_{ij}^2 & x_{ii}x_{ij} \end{bmatrix}$$

Obrázek 4: Plochy D_{opt} a odpovídající matice \mathbf{Z} .

3 Optimalizační metoda

Optimalizace jednotlivými metrikami proběhla metodou simulovaného žíhání. Tato metoda byla vybrána pro menší časovou náročnost a lepší odolnost proti uvíznutí v lokálních minimech na rozdíl od jednoduššího horelezeckého algoritmu. Hlavní rozdíl spočívá v tom, že simulované žíhání umožňuje akceptování nového řešení i přesto, že jeho funkční hodnota (hodnota používané metriky) je nepříznivá vzhledem k hledanému optimu. První verze tohoto algoritmu byla navržena v [7] a nezávisle v [13]. Studium a implementace komplexnějších

optimalizačních algoritmů vhodných pro řešení uvedených diskrétních úloh není předmětem této práce, ale budeme se jim věnovat v budoucnu.

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 převážně 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. 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. 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.

4 Porovnání metrik

Uvedené metriky byly porovnány podle:

- i grafického vykreslení jejich průběhu při umístění čtvrtého a pátého bodu ve čtvercovém prostoru,
- ii vzájemných výsledků dosažených při optimalizaci pomocí jednotlivých metrik,
- iii minimálních vzdáleností bodů ve výsledných návrzích
- iv a schopností určit korelaci mezi modelovými vstupními a výstupními hodnotami při stochastické citlivostní analýze.

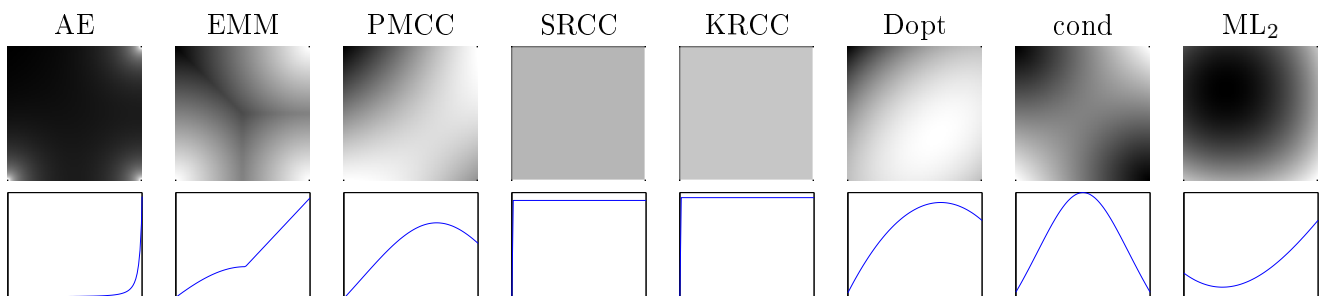
4.1 Grafické porovnání

Při hledání optimálního návrhu jsou všechna zmíněná kritéria minimalizována simulovaným žíháním. Proto je jedním z důležitých faktorů obtížnost jejich minimalizace. Pro názornost bylo porovnání z hlediska průběhu metriky v prostoru vyjádřeno graficky na sériích obrázků pro jednotlivé metriky.

Umístění, které je dle dané metriky 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.

4.1.1 Plocha metriky pro doplnění 4. bodu

Při tomto porovnání metrik bylo hlavním předmětem umístění čtvrtého bodu do čtvercového prostoru za předpokladu stále polohy předchozích třech bodů v rozích. Z obdržených tvarů ploch na obrázcích 5 je patrné,



Obrázek 5: Tvar jednotlivých metrik pro různé polohy 4. bodu.

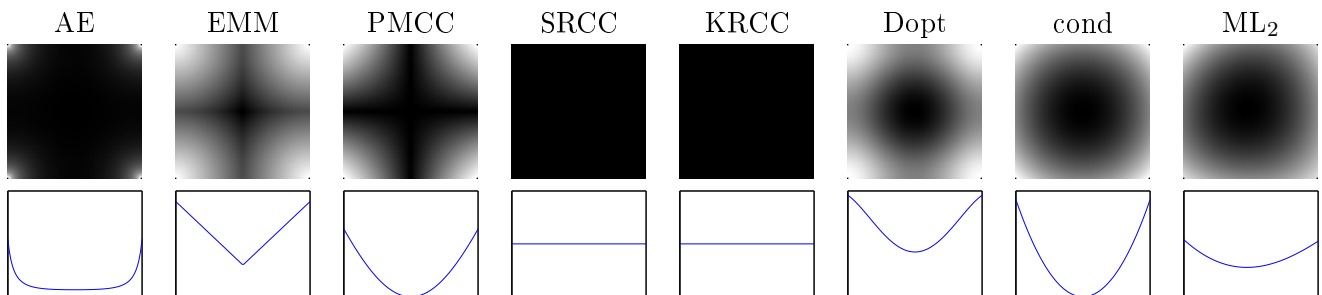
že všechny zkoumané metriky upřednostňují umístění čtvrtého bodu do zbývajících volného rohu, což je naše hledané optimum. Ovšem každá metrika spěje k tomuto optimu viditelně jiným způsobem.

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

Metriky AE, EMM a SRCC mají zcela jasné optimum v levém horním rohu. Hodnota metriky 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 metrik PMCC a Dopt, které ve zkoumaném prostoru vytvářejí oddělená lokální minima. Tento jev odhalil nedokonalost těchto metrik pro bezpečné nalezení optimálního řešení. Také metriky SRCC a KRCC vyšly z tohoto rozboru jako nepřilíš vhodné, protože téměř v celém prostoru jsou jejich hodnoty konstantní kromě okrajů, což znemožňuje optimalizaci pomocí gradientních algoritmů. Naprosto nepoužitelně se zachovala metrika cond, která nedokáže v tomto případě jasně určit hledané optimum a naznačuje možnou duplicitu bodů. Zajímavý je pak průběh naposled uvedené metriky ML_2 , která vytváří minimum v ojedinělé pozici oproti ostatním metrikám, její průběh je hladký podobně jako u AE a nevytváří lokální minima, což ji řadí v tomto testu mezi úspěšné.

4.1.2 Plocha metriky pro doplnění 5. bodu

Dále byly metriky vyšetřeny velmi obdobným způsobem s tím rozdílem, že předem umístěné body byly čtyři a obsadily všechny čtyři rohy definičního oboru. Tedy optimálním řešením je pozice uprostřed takto osazeného prostoru. Výsledky měření jsou na sérii obrázků 6. Opět je zařazeno i srovnání s průběhem metrik po úhlopříčce řešeného prostoru.



Obrázek 6: Tvar jednotlivých metrik pro různé polohy 5. bodu.

V tomto případě očividně selhávají SRCC a KRCC, jelikož umístění bodu kdekoli v střední části dosahuje stejného pořadí a tedy i celkové pořadové koeficienty se nemění. Metriky PMCC a Dopt nevytvářejí lokální minima, ale naopak velmi hladce směřují do středu prostoru. Podobně je tomu také u cond 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 metrika AE.

Dle těchto měření lze konstatovat, že AE a EEM se zdají být ze všech zkoumaných metrik nejvhodnější k optimalizaci. Následně lze ještě vypíchnout z těchto dvou metriku AE, kterou pro její hladký průběh v tomto porovnání považujeme za nejsnadněji minimalizovatelnou.

4.2 Turnaj metrik

V této části bylo provedeno přezkoumání kvality optimálních návrhů s ohledem na ostatní metriky pro tři různé situace se 7, 10 a 13 návrhovými body, které byly umístovány do čtvercového diskretního prostoru s 10ti hodnotami v obou směrech. Pro výpočet byla použita výše uvedená optimalizační metoda simulovaného

žihání s dostatečným počtem iterací tak, aby bylo dosaženo globálního optima pro každou metriku. Zatímco AE a Dopt stanovily pouze jeden optimální návrh, ostatní metriky vedly k několika návrhům stejné optimální hodnoty.

Funkční hodnota získaného řešení byla zanesena do výsledkové tabulky k použité metrice. Řešení bylo dále ohodnoceno zbylými metrikami a jejich hodnoty byly připsány do stejného řádku tabulky. Pro vícenásobná řešení pak byly vybrány nejhorší výsledky odpovídající jednotlivým metrikám, protože naším cílem je ukázat, jaký nejhorší návrh může optimalizace dané metriky poskytnout, pokud nemáme čas provést optimalizaci opakovaně. Tímto způsobem byly postupně vyplněny všechny tři tabulky 1, 2 a 3, z nichž jsme po oznámkování výsledků získaly celkové ohodnocení metrik vzhledem ke vzájemnosti hledaného optima jednotlivých metrik.

Metrika	AE		EMM		PMCC		SRCC		KRCC		Dopt		cond		ML ₂		#
	#	#	#	#	#	#	#	#	#	#	#	#	#	#	#		
AE	0.49	1	-4.00	2	0.018	2	0.000	1	0.000	1	$-2 \cdot 10^{13}$	2	1.20	3	0.113	5	2.1
EMM	0.59	3	-4.47	1	0.271	6	0.198	6	0.167	6	$-5 \cdot 10^{12}$	3	1.61	6	0.044	3	4.3
PMCC	4.61	7	-1.00	5	0.000	1	0.372	8	0.278	7	$-1 \cdot 10^7$	7	3.43	7	0.259	8	6.3
SRCC	4.79	8	-1.00	5	0.474	9	0.000	1	0.108	3	$-1 \cdot 10^6$	8	3.57	8	0.292	9	6.4
KRCC	6.13	9	-1.00	5	0.397	8	0.270	7	0.000	1	$-2 \cdot 10^5$	9	6.60	9	0.168	6	6.8
Dopt	0.51	2	-4.00	2	0.019	3	0.049	3	0.059	2	$-3 \cdot 10^{13}$	1	1.10	2	0.094	4	2.4
cond	2.58	6	-1.00	5	0.309	7	0.136	4	0.114	4	$-3 \cdot 10^9$	6	1.01	1	0.182	7	5.0
ML₂	1.14	4	-2.83	3	0.209	5	0.143	5	0.143	5	$-3 \cdot 10^{10}$	5	1.53	5	0.009	1	4.1
oLHS	2.12	5	-1.41	4	0.113	4	0.048	2	0.000	1	$-1 \cdot 10^{11}$	4	1.26	4	0.011	2	3.3

Tabulka 1: Hodnoty metrik při umístění 7 bodů do prostoru 10x10.

Metrika	AE		EMM		PMCC		SRCC		KRCC		Dopt		cond		ML ₂		#
	#	#	#	#	#	#	#	#	#	#	#	#	#	#			
AE	1.38	1	-3.00	2	0.015	3	0.020	3	0.028	3	$7 \cdot 10^{15}$	9	1.13	5	0.071	5	3.9
EMM	1.80	3	-3.61	1	0.153	5	0.142	7	0.125	5	$-1 \cdot 10^{27}$	2	1.25	6	0.032	3	4.0
PMCC	8.09	6	-1.00	5	0.000	1	0.227	8	0.220	7	$-1 \cdot 10^{16}$	4	2.82	7	0.265	9	5.9
SRCC	9.41	8	-1.00	5	0.241	6	0.000	1	0.148	6	$-7 \cdot 10^{15}$	5	2.96	8	0.128	6	5.6
KRCC	8.59	7	-1.00	5	0.264	7	0.082	6	0.000	1	$-4 \cdot 10^{11}$	7	4.10	9	0.210	8	6.3
Dopt	1.45	2	-2.83	3	0.015	3	0.026	4	0.000	1	$-7 \cdot 10^{28}$	1	1.03	3	0.058	4	2.6
cond	9.48	9	-1.00	5	0.533	8	0.530	9	0.436	8	$-2 \cdot 10^9$	8	1.00	1	0.135	7	6.9
ML₂	2.78	4	-1.41	4	0.055	4	0.055	5	0.022	2	$-6 \cdot 10^{12}$	6	1.12	4	0.006	1	3.8
oLHS	3.56	5	-1.41	4	0.006	2	0.006	2	0.067	4	$-3 \cdot 10^{20}$	3	1.01	2	0.008	2	3.0

Tabulka 2: Hodnoty metrik při umístění 10 bodů do prostoru 10x10.

Kromě výsledků výše popsaných metrik je do těchto tabulek přidán řádek s výsledky pro optimální LHS návrh [5], který byl získán pomocí softwaru SPERM 2.0 [9] optimalizováním s ohledem na PMCC. LHS návrhy jsou často používané pro jejich časovou nenáročnost, která ovšem plyne z jejich omezení. To má význam zejména při přípravě návrhu ve spojitém prostoru, kde může být optimalizace metrik ještě řádově výpočetně náročnější než v případě diskrétního návrhového prostoru. 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 jeden bod. V rámci následné optimalizace je možné pouze prohazovat odpovídající souřadnice dvou bodů tak, aby bylo stále dodrženo omezení jednoho bodu na interval. Prohledávaný prostor je tím z hlediska optimalizace významně

Metrika	AE		EMM		PMCC		SRCC		KRCC		Dopt		cond		ML ₂		#
		#		#		#		#		#		#		#		#	
AE	2.82	1	-3.00	1	0.010	2	0.017	2	0.015	2	$-1 \cdot 10^{36}$	2	1.05	2	0.052	5	2.1
EMM	3.20	2	-3.00	1	0.125	7	0.186	9	0.134	8	$-6 \cdot 10^{28}$	3	1.13	4	0.045	4	4.8
PMCC	16.04	9	-1.00	3	0.000	1	0.180	8	0.195	9	$-2 \cdot 10^{21}$	6	2.81	8	0.120	9	6.8
SRCC	14.51	8	-1.00	3	0.225	8	0.000	1	0.071	7	$-2 \cdot 10^{25}$	4	2.78	7	0.097	7	5.6
KRCC	12.26	7	-1.00	3	0.240	9	0.084	7	0.000	1	$-1 \cdot 10^{25}$	5	2.95	9	0.108	8	6.0
Dopt	3.42	3	-1.41	2	0.027	4	0.056	4	0.056	5	$-6 \cdot 10^{42}$	1	1.06	3	0.041	3	3.1
cond	6.27	5	-1.00	3	0.022	3	0.068	5	0.058	6	$-2 \cdot 10^{14}$	7	1.00	1	0.058	6	5.1
ML₂	6.16	4	-1.00	3	0.097	6	0.075	6	0.027	3	$-2 \cdot 10^{13}$	9	1.22	6	0.005	1	4.1
oLHS	9.04	6	-1.00	3	0.071	5	0.053	3	0.055	4	$-5 \cdot 10^{13}$	8	1.15	5	0.007	2	4.1

Tabulka 3: Hodnoty metrik při umístění 13 bodů do prostoru 10x10.

redukován, a proto je možné najít dobré řešení i v případě většího počtu proměnných a návrhových bodů.

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. Tato situace nastala například v případě návrhu 10ti bodů, jehož výsledky jsou uvedeny v tabulce 2. V situaci, kdy jednotlivé proměnné dosahují různého počtu přípustných hodnot nebo se liší od počtu návrhových bodů už není možné použít skutečný LHS návrh. Proto je tento turnaj zaměřen především na optimální návrhy, které se nepodřizují podmínkám LHS. Nicméně je obecně možné připravit LHS návrh pro zvolený počet návrhových bodů a poté jejich souřadnice proporcionálně převést na přípustné hodnoty jednotlivých proměnných. Výsledný návrh pak už ovšem není skutečný LHS návrh tak, jak je původně definovaný. Tímto způsobem byly vytvořeny modifikované LHS návrhy sedmi a třinácti bodů a jejich výsledky zařazeny do tabulek 1 a 2.

Optimalizace LHS návrhů také vede na několik různých řešení se stejnou optimální hodnotou. Proto i v tomto případě jsou výsledky uvedené v tabulkách 1 až 3 získané pro nejhorší návrh s optimální hodnotou vzhledem k příslušné metrice.

V tabulkách 1 a 3 dosahuje nejlepšího ohodnocení metrika AE a metrika Dopt dosahuje druhého nejlepšího výsledku. Modifikovaný LHS návrh se ukazuje až jako třetí nejlepší, takže pro tyto situace zřejmě není tento postup řešení příliš vhodný. Naproti tomu jsme očekávaly velmi dobré výsledky optimálního LHS návrhu v tabulce 2 a výsledné hodnocení je opravdu lepší, nicméně D-optimální návrh překonal LHS návrh a dosáhl zde nejlepších výsledků. Naopak metrika AE se zde propadla až na třetí místo, a to zejména proto, že její výsledný návrh dosáhl nejhoršího výsledku z hlediska D-optimality. Celkově lze tedy shrnout, že D-optimální návrhy dosáhly v tomto turnaji vzájemného ohodnocení v průměru nejlepšího výsledků a překonaly v praxi často užívanou metodu LHS.

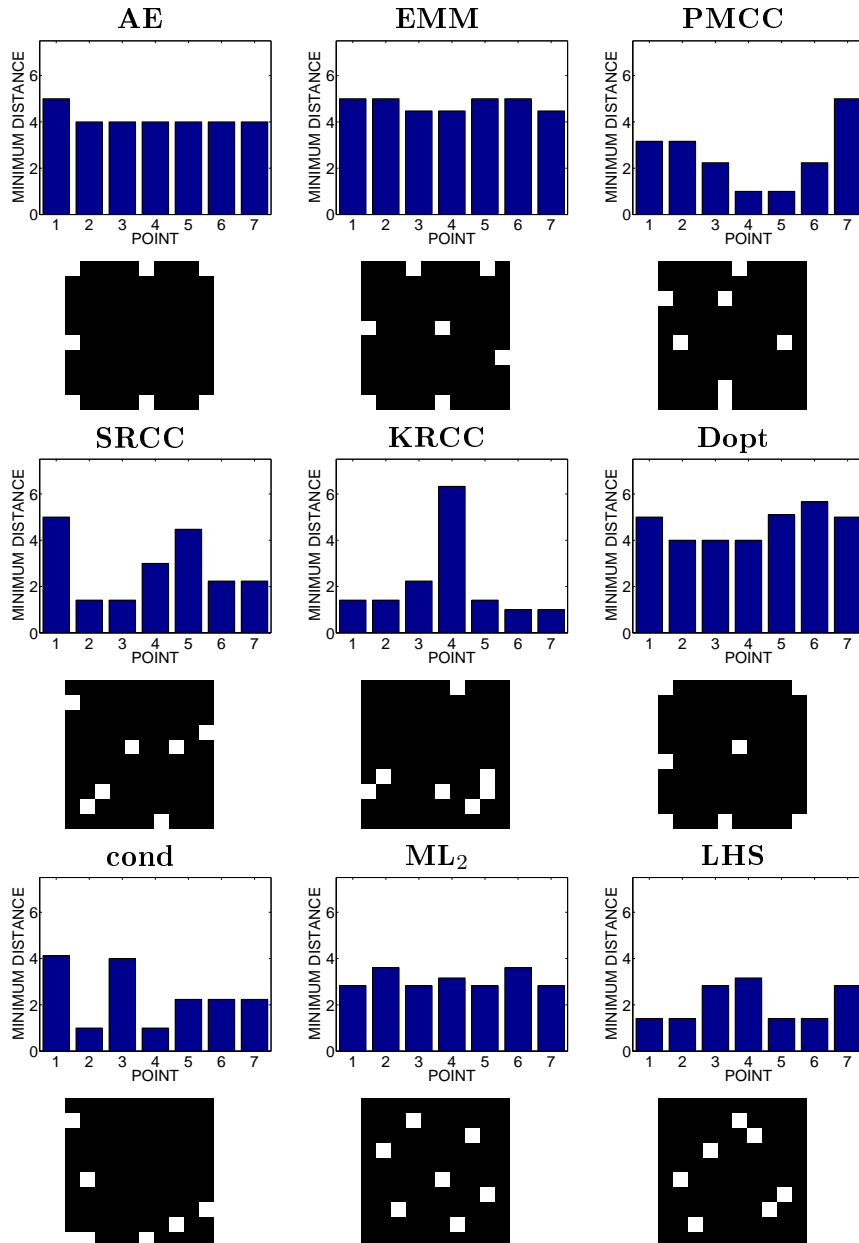
4.3 Minimální vzdálenost

Jelikož blízké body v návrhu jsou v určité míře redundantní z hlediska informace, kterou přináší o zkoumaném modelu, je naším cílem vytvořit návrh, kde budou body od sebe v co největší vzdálenosti. Toto hledisko sice úzce souvisí s metrikami hodnotícími rozprostřenost návrhu, ale žádná metrika není formulována tak, aby toto hledisko hodnotila přímo. Proto zde uvádíme 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, které jednotlivé metriky 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 pro varianty se 7, 10 a 13 body. Navíc je připo-

jen odpovídající optimální návrh v grafické podobě. Pro každou situaci uvádíme konkrétní podobu metriky Dopt, která se mění v závislosti na počtu návrhových bodů, jak už bylo zmíněno na straně 6.

- Pro variantu sedmi návrhových bodů v prostoru o velikosti definičních oborů obou proměnných rovné 10 zachycují obrázky (7). i -tý řádek matice \mathbf{Z} metriky Dopt má v tomto případě tvar $\mathbf{z}_i = [1 \ x_i \ y_i \ x_i^2 \ y_i^2 \ x_i y_i]$, kde x_i a y_i jsou souřadnice i -tého bodu.

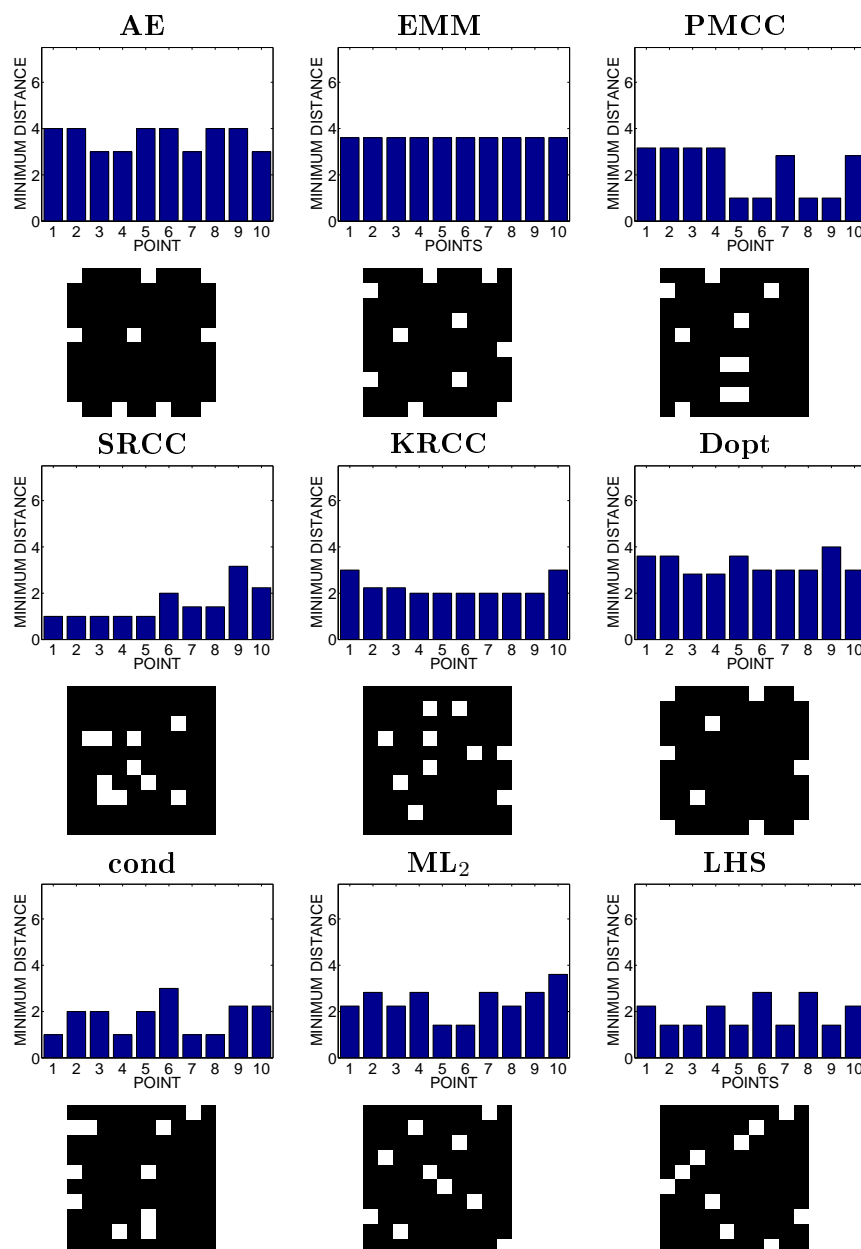


Obrázek 7: Optimální návrhy se 7 body v prostoru 10x10 a odpovídající grafy minimálních vzdáleností.

Nejvyšší průměrné hodnoty minimálních vzdáleností dosahuje pro tuto variantu Dopt, dále metriky EMM a AE. Na první pohled je patrná nerovnoměrnost rozložení optimálních návrhů metrik KRCC a cond na rozdíl od návrhu ML₂, jehož body jsou od sebe sice vzdáleny méně než u optimalizace

Dopt, ale můžeme sledovat pravidelnost návrhu prostřednictvím vyrovnaných hodnot minimálních vzdáleností, které nekolísají jako je tomu u korelačních koeficientů a metriky cond.

- Optimální návrhy a grafy (8) jsou výsledkem rozprostření deseti bodů. V tomto případě se počet návrhových bodů shoduje s velikostmi definičních oborů obou proměnných, proto lze zařadit nezměněný optimální návrh LHS. i -tý řádek matice \mathbf{Z} pro Dopt bylo nutné rozšířit a zahrnuje tentokrát členy $\mathbf{z}_i = [1 \ x_i \ y_i \ x_i^2 \ y_i^2 \ x_i y_i \ x_i^3 \ y_i^3 \ x_i^2 y_i \ x_i y_i^2]$, do matice \mathbf{A} je ještě nutné doplnit dvě jedničky na diagonálu.

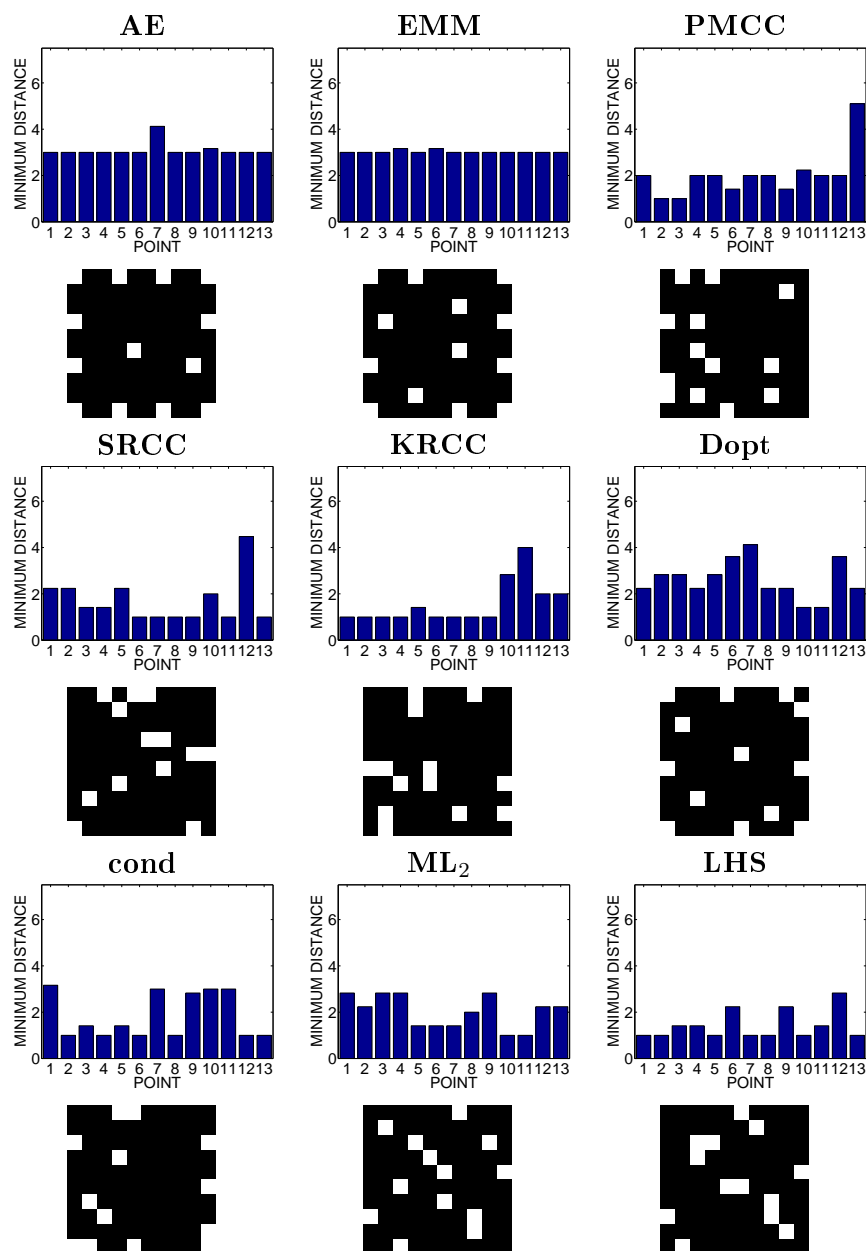


Obrázek 8: Optimální návrhy s 10 body v prostoru 10x10 a odpovídající grafy minimálních vzdáleností.

Podobně jako v předchozí variantě nejlépe dopadly AE, Dopt a EMM. Optimální návrh EMM je ze jmenovaných tří nejrovnoměrněji rozložen. Návrh LHS překvapivě nepatří mezi favority, dokonce metriky

KRCC a ML_2 vyhodnotily návrhy s vyšší průměrnou hodnotou minimálních vzdáleností.

- Při umísťování 13 bodů v prostoru 10×10 se získaly optimální návrhy a jim odpovídající grafy minimálních vzdáleností uvedené na obrázcích 9. i -tý řádek matice \mathbf{Z} pro Dopt bylo nutné opět rozšířit, takže tentokrát zahrnuje členy $\mathbf{z}_i = [1 \ x_i \ y_i \ x_i^2 \ y_i^2 \ x_i y_i \ x_i^3 \ y_i^3 \ x_i^2 y_i \ x_i y_i^2 \ x_i^4 \ y_i^4 \ x_i^2 y_i^2]$ a na diagonálu matice \mathbf{A} se doplní jedna jednička.



Obrázek 9: Optimální návrhy s 13 body v prostoru 10×10 a odpovídající grafy minimálních vzdáleností.

Ani v posledním případě metriky EMM a AE neztrácejí a opět předvádějí velmi vyrovnané hodnoty minimálních vzdáleností. D-optimální návrh dosahuje také vyšších vzdáleností v porovnání s ostatními metrikami, ale jejich hodnoty už nejsou tak vyrovnané.

V tomto testu nebyly příliš úspěšné korelační koeficienty PMCC, SRCC a KRCC, které v průměru

dosahují nejmenších hodnot minimálních vzdáleností, což vede k větším shlukům bodů, v některých případech k sobě body přímo přiléhají. Podobně dopadla i metrika cond , o něco lépe ML_2 . Lepšího rozprostření bodů a tudíž i větších hodnot minimálních vzdáleností dosahuje Dopt . Nejlepšími výsledky se dle očekávání pyšní metriky AE a EMM , jejichž optimální návrhy jsou na první pohled rovnoměrné, o čemž také vypovídají vyrovnané hodnoty minimálních vzdáleností, které v průměru dosahují největších hodnot.

4.4 Korelace mezi vstupními a výstupními hodnotami

Mezi první kroky při formulaci meta-modelu patří stanovení důležitých parametrů s významným vlivem na odezvu zkoumaného modelu. Toto se běžně provádí pomocí stochastické citlivostní analýzy, která spočívá ve vyhodnocení korelace mezi jednotlivými parametry a hodnotami odezvy modelu na základě souboru simulací provedených pro návrhové body. Z tohoto důvodu se další zkoumání metrik zaměří na schopnost optimálních návrhů stanovit SRCC mezi každým parametrem a modelovou odezvou. Byly uvažovány dva jednoduché modely, lineární a kvadratický, oba se dvěma diskrétními parametry x a y s 10ti možnými hodnotami. Skutečná hodnota korelací byla získána z kompletního návrhu čítajícího všech 100 bodů. Pro každou metriku byl optimalizován návrh s 10 body, aby bylo možné zahrnout i optimální LHS návrh. Výsledky takto získaných korelací jsou porovnány v tabulkách 4 a 5.

Návrh	Komplet	AE	EMM	PMCC	SRCC	KRCC	Dopt	cond	ML_2	oLHS
$\text{corr}(x,z)$	0.700	0.699	0.813	0.236	0.975	0.307	0.694	0.198	0.630	0.835
$\text{corr}(y,z)$	0.700	0.686	0.566	0.840	0.161	0.932	0.673	0.908	0.667	0.530
Odchylka		0.016	0.247	0.604	0.814	0.625	0.033	0.710	0.104	0.305
Pořadí		1	4	6	9	7	2	8	3	5

Tabulka 4: Korelace vstupů a výstupů pro model: $z = x + y$.

Návrh	Komplet	AE	EMM	PMCC	SRCC	KRCC	Dopt	cond	ML_2	oLHS
$\text{corr}(x,z)$	0.686	0.699	0.419	0.195	0.948	0.973	0.698	0.954	0.535	0.827
$\text{corr}(y,z)$	0.686	0.686	0.875	0.914	0.160	0.197	0.669	0.301	0.827	0.450
Odchylka		0.013	0.456	0.719	0.788	0.775	0.029	0.654	0.292	0.377
Pořadí		1	5	7	9	8	2	6	3	4

Tabulka 5: Korelace vstupů a výstupů pro model: $z = x^2 + y^2$.

Uvedené výsledky ukazují, že nejlépe se podařilo vyhodnotit korelaci na základě návrhu optimalizovaného metrikou AE , a to v případě lineárního i nelineárního modelu. Druhého nejlepšího výsledku pak dosáhla metrika Dopt a třetího metrika ML_2 . Navzdory tomu, že v praxi se nejčastěji používají návrhy LHS, naše výsledky ukazují, že LHS návrhy mohou určit korelace v citlivostní analýze s významnou chybou. Nejhorších výsledků dosáhly návrhy upřednostňující ortogonální uspořádání bodů, z čehož vyplývá, že pro citlivostní analýzu je zejména důležité pokrytí návrhového prostoru.

5 Závěr

Cílem této práce je prozkoumat různé možnosti hodnocení návrhu experimentů a prověřit, které hledisko je důležité, pokud chceme návrh experimentů použít pro vyhodnocení citlivostní analýzy. Konkrétně jsme zde studovaly metriky: Audze-Eglais, Maximin a ML_2 diskrepance, které jsou zaměřeny na tvorbu návrhů rovnoměrně pokrývajících návrhový prostor. Další větší skupinou studovaných metrik jsou korelační koeficienty a

to Pearsonův, Spearmanův a Kendalův a také číslo podmíněnosti, které hodnotí ortogonalitu daného návrhu. Poslední skupinu pak tvoří kritérium D-optimality, které vyjadřuje entropii systému bodů.

Jednotlivá kritéria byla porovnána ze čtyř hledisek. Nejdříve byl studován tvar jejich funkčního průběhu, kde se nejvhodnějším, hladkým průběhem zařadily na první místa metriky AE a ML_2 . Jejich podstatnou předností je také fakt, že nevytvářejí zbytečné lokální extrémů jako je tomu PMCC, Dopt a cond.

V další studii byla pozornost věnována vzájemnému ohodnocení optimálních návrhů, kde byly výsledky jednotlivých metrik zároveň porovnány s optimálním LHS návrhem. Ve třech různých testech hodnotíme celkově nejlépe návrhy Dopt, přičemž na druhé místo se řadí návrhy získané pro metriku AE. Také zde byly ukázány limity pro využití návrhů LHS.

Z hlediska minimálních vzdáleností mezi body ve výsledném návrhu se také dle očekávání umístily na předních místech návrhy pro metriky EMM, AE. Trochu překvapivě dosáhla jako třetího nejlepšího návrhu z tohoto hlediska metrika Dopt, která překonala i výsledek metriky ML_2 .

Poslední studie byla hlavním cílem předkládané práce. Zde byly výsledné optimální návrhy použity pro odhad korelace mezi vstupními a výstupními parametry dvou modelů: lineárního a kvadratického. Ačkoliv se právě pro tuto aplikaci v praxi často využívají optimální LHS návrhy, v předložené studii se propadly až na čtvrté a páté místo. Nejlepšího odhadu korelace dosáhla metrika AE, dále Dopt a ML_2 .

Ačkoliv metrika AE není příliš rozšířená, do této chvíle jsme na ni narazily pouze v práci [12], dosahuje v provedených studiích nejlepších výsledků. Jako druhé nejlepší kritérium se nám jeví metrika Dopt, nicméně její praktické využití značně limituje nezbytnost manuálního nastavení. Nakonec je třeba zmínit překvapivě neuspokojivé výsledky optimálních LHS návrhů, nicméně jejich rozšířené použití je opodstatněné zejména díky jejich snadné optimalizaci, a to i v případě návrhů s větším počtem bodů ve vícerozměrném návrhovém prostoru.

Na základě uvedených výsledků se proto v naší budoucí práci budeme věnovat strategiím pro efektivní generování návrhů optimálních z hlediska metriky AE a Dopt.

6 Poděkování

Autorky by rády poděkovaly za finanční podporu Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy v rámci projektu MSM 6840770003 (Algorithms for computer simulation and application in engineering) a Grantové agentuře České republiky v rámci projektu číslo P105/11/P370 (Využití umělých neuronových sítí při víceúrovňovém modelování transportních procesů v heterogenních materiálech).

Reference

- [1] P. Audze and V. Eglais. New approach for planning out of experiments. *Problems of Dynamics and Strengths*, 35:104–107, 1977. Zinatne Publishing House.
- [2] T. M. Cioppa and T.W. Lucas. Efficient nearly orthogonal and space-filling latin hypercubes. *Technometrics*, 49(1):45–55, 2007.
- [3] M. Hofwing and N. Strömberg. D-optimality of non-regular design spaces by using a Bayesian modification and a hybrid method. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 42(1):73–88, 2010.
- [4] P. Holmes. Correlation: From picture to formula. *Teaching Statistics*, 23(3):67–71, 2001.
- [5] R.L. Iman and W.J. Conover. Small sample sensitivity analysis techniques for computer models, with an application to risk assessment. *Communications in Statistics - Theory and Methods*, A9(17):1749–1842, 1980.

- [6] M. Johnson, L. Moore, and D. Ylvisaker. Minimax and maximin distance designs. Journal of Statistical Planning and Inference, 26(2):131–148, 1990.
- [7] S. Kirkpatrick, C. Gelatt, Jr., and M. P. Vecchi. Optimization by simulated annealing. Science, 220:671–680, 1983.
- [8] D. Novák, M. Vořechovský, and M. Rusina. FREET v. 1.5 - program documentation. Brno/Červenka consulting, Prague, user’s and theory guides edition, 2011.
- [9] J. Novák. Generator of optimal LHS designs SPERM v. 2.0. Centre for Integrated Design of Advanced Structures (CIDEAS), Czech Technical University in Prague, 2011.
- [10] M.C. Shewry and H.P. Wynn. Maximum entropy sampling. Journal of Applied Statistics, 14(2):165–170, 1987.
- [11] T. W. Simpson, J. D. Poplinski, P. N. Koch, and J. K. Allen. Metamodels for Computer-based Engineering Design: Survey and recommendations. Engineering with Computers, 17(2):129–150, 2001.
- [12] V.V. Toropov, S.J. Bates, and O.M. Querin. Generation of extended uniform latin hypercube designs of experiments. In B.H.V. Topping, editor, Proceedings of the Ninth International Conference on the Application of Artificial Intelligence to Civil, Structural and Environmental Engineering, Stirlingshire, Scotland, 2007. Civil-Comp Press.
- [13] J. Černý. Thermodynamical approach to the traveling salesmanproblem: An efficient simulation algorithm. Journal of Optimization Theory and Applications, 45:41–51, 1985.