

Сысоев, А. С. Математическое и программное обеспечение для решения задачи анализа чувствительности по факторам таблично заданных математических моделей с использованием концепции ремоделирования / А. С. Сысоев, А. И. Мирошников, П. В. Сараев // Прикладная математика и вопросы управления. – 2024. – № 4. – С. 6–17. DOI 10.15593/2499-9873/2024.4.01

Библиографическое описание согласно ГОСТ Р 7.0.100–2018

Сысоев, А. С. Математическое и программное обеспечение для решения задачи анализа чувствительности по факторам таблично заданных математических моделей с использованием концепции ремоделирования / А. С. Сысоев, А. И. Мирошников, П. В. Сараев. – Текст : непосредственный. – DOI 10.15593/2499-9873/2024.4.01 // Прикладная математика и вопросы управления / Applied Mathematics and Control Sciences. – 2024. – № 4. – С. 6-17.



ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА
И ВОПРОСЫ УПРАВЛЕНИЯ

№ 4, 2024

<https://ered.pstu.ru/index.php/amcs>



Научная статья

DOI: 10.15593/2499-9873/2024.4.01

УДК 004.4'2



Математическое и программное обеспечение для решения задачи анализа чувствительности по факторам таблично заданных математических моделей с использованием концепции ремоделирования

А.С. Сысоев, А.И. Мирошников, П.В. Сараев

Липецкий государственный технический университет, Липецк, Российская Федерация

О СТАТЬЕ

Получена: 27 сентября 2024

Одобрена: 14 октября 2024

Принята к публикации:

28 декабря 2024

Финансирование

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-21-00474, <https://rscf.ru/project/24-21-00474/>.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов

равноценен.

Ключевые слова:

математическое моделирование, анализ чувствительности, табулирование функций, анализ конечных изменений, ремоделирование

АННОТАЦИЯ

Анализ чувствительности математических моделей предполагает большое количество подходов, среди которых выделяют локальные методы (исследование влияния фактора на отклик в случае его изолированного варьирования) и глобальные методы (предполагающие исследование одновременных изменений групп факторов). Классификацию методов также строят и на основе применяемых математических инструментов. Однако известные методы являются приближенными или допускают использования суррогатных моделей, аппроксимирующих исходную функцию, что является источником ошибки.

Ранее авторами предложен аналитический метод анализа чувствительности по факторам математических моделей на основе анализа конечных изменений. В таком случае для исследования изменений отклика функции используют известную теорему Лагранжа о промежуточной точке. Однако в некоторых ситуациях процесс нахождения частных производных может быть вычислительно трудоемкой задачей, а в некоторых случаях функция задана таблично. В этом случае возможно применение численного дифференцирования с дальнейшим восстановлением аналитического представления функции. Для этого предлагается использовать подход математического ремоделирования и в качестве ремоделирующего класса применять модели линейной регрессии с эффектами взаимодействия. Такое предположение естественно, так как моделирует наличие линейной связи между факторами модели.

В работе приведен численный пример – анализ функции Розенброка, выполненный двумя способами: аналитическим методом и с применением ремоделирования для восстановления частных производных. Результаты показывают высокое качество полученных оценок чувствительности, что свидетельствует о состоятельности подхода ремоделирования в таких задачах. Перспективными аспектами представленного подхода являются: применение более широкого набора классов ремоделирующих моделей (полносвязные нейронные сети, аппроксимирующие многочлены) и оптимальный выбор шага численного дифференцирования.

© Сысоев Антон Сергеевич – кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой прикладной математики, e-mail: sysoev_as@stu.lipetsk.ru, ORCID 0000-0002-0866-1124.

Мирошников Артем Игоревич – кандидат технических наук, доцент кафедры прикладной математики, e-mail: miroshnikov_ai@stu.lipetsk.ru, ORCID 0000-0003-0639-105X.

Сараев Павел Викторович – доктор технических наук, доцент, профессор кафедры автоматизированных систем управления, e-mail: saraev_pv@stu.lipetsk.ru, ORCID 0000-0002-1373-2521.



Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

Perm Polytech Style: Sysoev A.S., Miroshnikov A.I., Saraev P.V. Mathematical approaches and software to solve the problem of sensitivity analysis by factors of tabularly specified mathematical models using remodeling concept. *Applied Mathematics and Control Sciences*. 2024, no. 4, pp. 6-17. DOI: 10.15593/2499-9873/2024.4.01

MDPI and ACS Style: Sysoev, A.S.; Miroshnikov, A.I.; Saraev, P.V. Mathematical approaches and software to solve the problem of sensitivity analysis by factors of tabularly specified mathematical models using remodeling concept. *Appl. Math. Control Sci.* **2024**, *4*, 6-17. <https://doi.org/10.15593/2499-9873/2024.4.01>

Chicago/Turabian Style: Sysoev, Anton S., Artem I. Miroshnikov, and Pavel V. Saraev. 2024. "Mathematical approaches and software to solve the problem of sensitivity analysis by factors of tabularly specified mathematical models using remodeling concept". *Appl. Math. Control Sci.* no. 4: 6-17. <https://doi.org/10.15593/2499-9873/2024.4.01>



APPLIED MATHEMATICS
AND CONTROL SCIENCES

№ 4, 2024

<https://ered.pstu.ru/index.php/amcs>



Article

DOI: 10.15593/2499-9873/2024.4.01

UDC 004.4'2



Mathematical approaches and software to solve the problem of sensitivity analysis by factors of tabularly specified mathematical models using remodeling concept

A.S. Sysoev, A.I. Miroshnikov, P.V. Saraev

Lipetsk State Technical University, Lipetsk, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 27 September 2024
Approved: 14 October 2024
Accepted for publication:
28 December 2024

Funding

The research is supported by the Russian Science Foundation grant No. 24-21-00474, <https://rscf.ru/project/24-21-00474/>.

Conflicts of Interest

The authors declare no conflict of interest.

Author Contributions

equivalent.

Keywords:

Mathematical modeling, sensitivity analysis, function tabulation, analysis of finite fluctuations, remodeling

ABSTRACT

Sensitivity Analysis of mathematical models involves a large number of approaches, among which there are local methods (studying the influence of a factor on the response in the case of its isolated variation) and global methods (involving the study of simultaneous fluctuations in groups of factors). Classification of methods is also based on the applied mathematical tools. However, the known methods are approximate or allow using surrogate models approximating the original function, which is a source of error.

Previously, the authors proposed an analytical method for analyzing the sensitivity by factors of mathematical models based on Analysis of Finite Fluctuations. In this case, the well-known Lagrange mean value theorem is used to study fluctuations of function response. However, in some situations the process of finding partial derivatives can be a computationally labor-intensive task, and in some cases the function is given tabularly. In this case, it is possible to use numerical differentiation with further restoration of the analytical representation of the function. For this purpose it is suggested to use the approach of mathematical remodeling and to apply linear regression models with interaction effects as a remodeling class. This assumption is natural, as it models the presence of a linear relationship between the model factors.

The paper presents a numerical example - the analysis of the Rosenbrock function, performed in two ways: analytical method and using remodeling to recover partial derivatives. The results obtained show the high quality of the obtained sensitivity estimates, which testifies to the validity of the remodeling approach in such problems. Promising aspects of the presented approach are: application of a wider set of classes of remodeling models (fully connected neural networks, approximating polynomials) and optimal choice of the numerical differentiation step.

© Anton S. Sysoev – CSc of technical Sciences, Associate Professor, Head of the Department of Applied Mathematics, e-mail: sysoev_as@stu.lipetsk.ru, ORCID 0000-0002-0866-1124.

Artem I. Miroshnikov – CSc of technical Sciences, Associate Professor of the Department of Applied Mathematics, e-mail: miroshnikov_ai@stu.lipetsk.ru, ORCID 0000-0003-0639-105X.

Pavel V. Saraev – DSc of technical Sciences, Associate Professor, Professor of the Department of Automated Control Systems, e-mail: saraev_pv@stu.lipetsk.ru, ORCID 0000-0002-1373-2521.



This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

Введение

Анализ чувствительности по факторам математических моделей имеет особое практическое значение при структурной идентификации модели, а также ее адаптации. Под анализом чувствительности по факторам модели понимают исследование того, как неопределенность отклика математической модели может быть объяснена неопределенностями ее входов [1]. Среди наиболее значимых работ в этой области стоит выделить исследования [2–7]. В зависимости от того, на что направлен применяемый анализ, его задачами могут быть: 1) исследование устойчивости отклика модели или системы; 2) понимание взаимосвязи отклика и соответствующих факторов; 3) снижение неопределенности отклика за счет учета наиболее влиятельных факторов; 4) выявление ошибок в модели за счет выявления неожиданных связей между откликом и факторами; 5) редукция модели путем исключения факторов, не оказывающих значимого эффекта на отклик; 6) интерпретация модели за счет построения объяснения зависимости отклика от факторов.

Упомянутые в работах, ссылки на которые приведены выше, методы анализа чувствительности могут быть классифицированы в соответствии с различными признаками, в частности, существуют универсальные методы, а некоторые могут быть применены только к моделям заданной структуры. Одной из классификаций является разделение всех подходов на методы локального и глобального анализа чувствительности.

Методы локального анализа чувствительности предполагают оценку частной производной функции y относительно исследуемого фактора x_i :

$$\frac{\partial y}{\partial x_i}(x_1^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}),$$

которая характеризует, как изменения x_i влияют на изменение y в окрестности рассматриваемой точки $X^{(0)} = (x_1^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ [7].

Известным подходом к оценке первых производных функции является метод *one at a time*. Пусть x_i^* – целевое значение фактора x_i ; определим $y_i^{\max} = y(x_1^*, \dots, x_i^{\max}, \dots, x_n^*)$ как отклик модели, где все факторы имеют целевые значения, за исключением фактора x_i , значение которого установлено как максимально возможное. Тогда мера чувствительности может быть оценена как

$$\Delta_i = \frac{y_i^{\max} - y_i^{\min}}{x_i^{\max} - x_i^{\min}},$$

где $y_i^{\min} = y(x_1^*, \dots, x_i^{\min}, \dots, x_n^*)$. Такой подход подразумевает фиксирование всех факторов, кроме одного исследуемого фактора [8].

Еще одним подходом локального анализа чувствительности является метод Морриса [9; 10]. Пусть доступна информация о r оценках чувствительности, полученных методом «one at a time». Создадим дискретное представление пространства n входных факторов в количестве d штук. Тогда $E_j^{(i)}$ – элементарные эффекты от переменной j в оценке i , определяемые как

$$E_j^{(i)} = \frac{y(x^{(i)} + \Delta e_j) - y(x^{(i)})}{\Delta},$$

где Δ – шаг дискретизации, e_j – вектор в канонической форме. Согласно методу Морриса, для оценок мер чувствительности используют:

• $\mu_j^* = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r |E_j^{(i)}|$ – средние арифметические абсолютных значений элементарных эффектов;

• $\sigma_j = \sqrt{\frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \left(E_j^{(i)} - \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r E_j^{(i)} \right)^2}$ – стандартные отклонения элементарных эффектов.

Указанные величины интерпретируют как: μ_j^* – это мера влияния фактора j на отклик модели (большее значение указывает на более высокое влияние), σ_j – мера нелинейности и/или эффектов от взаимодействия фактора j с другими факторами (фактор с большим показателем считается имеющей нелинейные эффекты или подразумевается, что он взаимодействует по крайней мере с одним другим фактором).

Методы глобального анализа чувствительности могут быть разделены на несколько классов. Подходы, относящиеся к первому классу, основаны на графическом представлении изучаемого набора данных анализируемой модели [11]. Рассматриваются наборы данных $(x_1, \dots, x_n, y)$. Парные диаграммы рассеяния между факторами модели и ее откликом могут наглядно показать наличие или отсутствие линейной или нелинейной связи между y и каждым x_i . Но поскольку парные (двумерные) диаграммы рассеяния не всегда могут определить эффекты взаимодействия переменных между собой и с выходом модели, то используется также анализ параллельных координат.

К этому классу относятся и методы аппроксимации рассматриваемой модели линейной регрессионной моделью [12]. В этом случае в качестве мер чувствительности могут быть использованы:

• коэффициент корреляции Пирсона $\rho(x_i, y)$;

• стандартизированные коэффициенты регрессии $SRC_i = \beta_i \sqrt{\frac{Var(x_i)}{Var(y)}}$;

• частный коэффициент корреляции $PCC_i = \rho(x_i - \hat{x}_i, y - \hat{y})$.

Полученные оценки интерпретируют следующим образом. Если $\rho(x_i, y)$ по абсолютному значению близок к 1, то рассматриваемый фактор и отклик связаны линейно. Если входы независимы, то каждый SRC_i^2 показывает долю дисперсии отклика, объясняемую фактором. PCC_i определяет чувствительность y к x_i , когда влияние других входных переменных несущественно. Следует отметить, что сама аппроксимация системы линейной моделью может быть источником ошибки.

Второй класс предполагает исследование вариации модели (например, [13]). Такие методы основаны на вычислении производных модели. Это предположение естественно, так как производная функции в заданной точке показывает тенденцию к ее увеличению с изменением ее аргументов. Описанный анализ заключается в нахождении чувствительности y по отношению к изменению x : $\frac{dy}{dx}(X)$. Здесь $y: R^n \rightarrow R$ – дифференцируемая функция с непрерывными производными и

$$\nabla_x = \left(\frac{\partial y}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial y}{\partial x_n} \right)^T.$$

Самый простой способ применения подхода – зафиксировать все переменные модели, кроме изучаемой, изменить ее и оценить изменение отклика (такой случай описан выше как метод локального анализа чувствительности). Более продвинутый подход предполагает построение схем численной аппроксимации градиента на основе конечных разностей и последующее вычисление его значения. Однако этот подход имеет два недостатка. Во-первых, вычислительные затраты существенно возрастают с увеличением размерности n вектора X , и, во-вторых, выбор приращений Δx_j является критическим.

Подходы следующего класса [14] основаны на применении составных показателей. Идея этих методов заключается в построении составного показателя, объединяющего несколько факторов с некоторыми весами. Композитный показатель y , который агрегирует n входных переменных x_i , чаще всего является средневзвешенным арифметическим

$$y_j = \sum_{i=1}^n w_i x_{ji}, \quad j = 1, \dots, m,$$

где x_{ji} – нормированные значения показателя j , а w_i – вес переменной x_j .

Подход к определению коэффициентов чувствительности Соболя заключается в разложении модели как функции в конечное иерархическое разложение функций. Способом реализации этой процедуры является функциональный дискриминантный анализ (функциональный ANOVA, FANOVA) [15].

В монографии [16] предложен подход к анализу чувствительности по факторам функций, основанный на применении анализа конечных изменений. Под анализом конечных изменений понимают подход к анализу сложных систем различной структуры с целью построения зависимости, связывающей конечные изменения показателя (отклика функции) с конечными изменениями факторов (переменных) [17]. Предложенный подход отличается использованием теоремы Лагранжа о промежуточной точке, которая по сути является точным факторным разложением конечного приращения отклика функции по конечным приращениям ее факторов. Полученные результаты нашли применение в различных прикладных задачах, таких как, например, редукция нейросетевых моделей поиска аномалий в задачах анализа медицинских статистических данных [18] и др.

Цель данной работы – описать методику применения анализа чувствительности по факторам математической модели в случае, когда она задана таблично. В качестве аппроксимации найденных численных производных предлагается использовать подход математического ремоделирования, позволяющий унифицировать анализ за счет применения моделей заданной известной структуры в качестве ремоделирующего класса.

Анализ чувствительности, основанный на использовании анализа конечных изменений

Впервые этот подход был представлен в [16] как логичное расширение экономического факторного анализа и затем нашел применение в различных прикладных исследованиях [17]. Обозначим изменение некоторой величины (фактора) x через $\mu(x)$. Естественной формой такого показателя является абсолютное приращение $\mu(x) = \Delta x = b - a$ при начальном значении фактора $x^{(0)} = a$ и его целевом значении $x^{(*)} = b$.

Основная задача анализа конечных изменений формулируется следующим образом: пусть задана зависимость

$$y = f(X) = f(x_1, \dots, x_n), \quad x \in R^n,$$

описывающая связь выхода системы y и ее входов x_i , $i = 1, \dots, n$. Необходимо трансформировать модель рассматриваемого процесса, чтобы она приняла вид

$$\mu(y) = \varphi(\mu(x_1), \dots, \mu(x_n)),$$

связывающий конечные изменения ее входов и выхода.

Стоит отметить, что во многих практических приложениях конечные изменения, отмеченные выше, предполагаются малыми.

Для случая малых конечных приращений из математического анализа известна теорема, позволяющая выполнить указанные преобразования. Это теорема Лагранжа о средней точке (промежуточной точке, формула конечных приращений). Для случая функции многих переменных, определенной и непрерывной на своей области определения и имеющей на ней частные производные, она формулируется следующим образом:

$$\Delta y = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(X^{(m)})}{\partial x_i} \cdot \Delta x_i,$$

$$X^{(m)} = (x_1^{(m)}, \dots, x_d^{(m)}), \quad x_i^{(m)} = x_i^{(0)} + \alpha \cdot \Delta x_i, \\ i = 1, \dots, d, \quad 0 < \alpha < 1.$$

Промежуточная точка определяется значением параметра α .

Таким образом, приращение отклика модели может быть определено, с одной стороны, как разница начального и целевого значений отклика и, с другой стороны, по теореме Лагранжа, т.е. может быть составлено и решено относительно параметра α следующее уравнение:

$$y^{(*)} - y^{(0)} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial y}{\partial x_i} (\dots, x_i^{(0)} + \alpha \cdot \Delta x_i, \dots) \cdot \Delta x_i,$$

что позволит оценить так называемые факторные нагрузки A_{x_i} и получить модель вида

$$\Delta y = \sum_{i=1}^n \frac{\partial y}{\partial x_i} (\dots, x_i^{(0)} + \alpha \cdot \Delta x_i, \dots) \cdot \Delta x_i = A_{x_1} \Delta x_1 + \dots + A_{x_n} \Delta x_n.$$

Указанная процедура может быть повторена $m - 1$ раз, численные результаты анализа (факторные нагрузки) могут быть усреднены и получены оценки влияния факторов рассматриваемой системы, что позволит рассматривать их как коэффициенты чувствительности модели по факторам [18].

Анализ чувствительности для таблично заданных функций

В некоторых случаях отсутствует аналитическое задание модели или вычисление ее производных может быть трудоемкой процедурой, что приводит к табулированию функции. В таких задачах необходимо применение численной аппроксимации производных. Известно, что производная функции $y = f(x)$ представляет собой предел приращения функции к ее аргументу:

$$y' = f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}.$$

В случае численного дифференцирования производная функции заменяется на этот предел.

Пусть заданы значения функции y_{i-1}, y_i, y_{i+1} в соответствующих узлах интерполяции x_{i-1}, x_i, x_{i+1} : $x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1} = h = \text{const}$.

Для вычисления производной используется центральная разностная ее аппроксимация:

$$y'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{x_{i+1} - x_{i-1}} = \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{(x_i + h) - (x_i - h)} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}.$$

Используемая формула приводит к табличному расчету производной, однако для проведения анализа чувствительности необходимо иметь некоторое ее аналитическое представление. В данном исследовании предлагается применять подход ремоделирования для унификации класса моделей, применяемых для описания численных производных функций, которые анализируются на чувствительность к своим факторам.

Технически ремоделирование – это процесс формирования новой модели из заранее заданного класса на основе существующей модели (в том числе ее табличного представления). Метод обеспечивает возможность использования общих подходов к анализу, оптимизации и управлению объектом. При очевидных достоинствах подхода он имеет и некоторые недостатки, среди которых: игнорирование физической основы изучаемого процесса или системы; дополнительная потеря точности при переходе от одной модели к другой; сложности, связанные с разработкой и внедрением дополнительных алгоритмов преобразования моделей.

Идея ремоделирования по определенным причинам и критериям была высказана в связи с прикладными задачами металлургического производства [19] и активно развивается, включая те же приложения и новые прикладные задачи.

Близкими к схеме ремоделирования являются суррогатное моделирование [20], метамоделирование [21], совместное моделирование [22] и некоторые другие подобные подходы (re-run, repeat, reproduce, reuse, replicate) [23].

В качестве ремоделирующего класса в данной работе выбрана регрессионная модель с эффектами взаимодействия. Для функции n переменных такая модель имеет вид:

$$y(x_1, \dots, x_n) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_n x_n + \beta_{n+1} x_1 x_2 + \dots$$

Приведенная модель является простейшей моделью с нелинейной структурой, способной учесть связь между факторами модели. Применение анализа конечных изменений к полученной модели приводит к вычислению оценок мер чувствительности.

Численный пример

В качестве примера рассмотрим известную функцию Розенброка

$$y(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 + x_2^4 + x_1 x_2 + x_2 x_3^4,$$

табулированную на интервалах $[-10; 10]$ с шагом в 1 для каждого фактора.

Проведем анализ чувствительности функции, зная ее аналитическое представление, а также предполагая, что она задана таблично.

С одной стороны, приращение рассматриваемой функции может быть выражено как

$$\Delta y = (x_1 + \Delta x_1)^2 + (x_2 + \Delta x_2)^4 + (x_1 + \Delta x_1)(x_2 + \Delta x_2) + \\ + (x_2 + \Delta x_2)(x_3 + \Delta x_3)^4 - x_1^2 + x_2^4 + x_1 x_2 + x_2 x_3^4,$$

с другой стороны, по теореме Лагранжа:

$$\Delta y = (2(x_1 + \alpha \Delta x_1) + (x_2 + \alpha \Delta x_2))\Delta x_1 - \\ - (4(x_2 + \alpha \Delta x_2)^3 + (x_1 + \alpha \Delta x_1) + (x_3 + \alpha \Delta x_3)^4)\Delta x_2 - (4(x_2 + \alpha \Delta x_2)(x_3 + \alpha \Delta x_3)^3)\Delta x_3.$$

Приравнявая эти выражения и решая численно полученное нелинейное уравнение относительно параметра промежуточной точки α для всех приращений, возможно получить факторные нагрузки.

Используем теперь табличное представление функции Розенброка. Табличные значения частных производных ремоделированы линейными моделями с эффектами взаимодействия.

Аналогично приращение функции с учетом нового представления производной функции имеет вид:

$$\Delta y = (\beta_1^1 + \beta_2^1(x_1 + \alpha \Delta x_1) + \beta_3^1(x_2 + \alpha \Delta x_2) + \beta_4^1(x_3 + \alpha \Delta x_3) + \\ + \beta_5^1(x_1 + \alpha \Delta x_1)(x_2 + \alpha \Delta x_2) + \beta_6^1(x_1 + \alpha \Delta x_1)(x_3 + \alpha \Delta x_3) + \\ + \beta_7^1(x_2 + \alpha \Delta x_2)(x_3 + \alpha \Delta x_3) + \beta_8^1(x_1 + \alpha \Delta x_1)(x_2 + \alpha \Delta x_2)(x_3 + \alpha \Delta x_3))\Delta x_1 - \\ - (\beta_1^2 + \beta_2^2(x_1 + \alpha \Delta x_1) + \beta_3^2(x_2 + \alpha \Delta x_2) + \beta_4^2(x_3 + \alpha \Delta x_3) + \\ + \beta_5^2(x_1 + \alpha \Delta x_1)(x_2 + \alpha \Delta x_2) + \beta_6^2(x_1 + \alpha \Delta x_1)(x_3 + \alpha \Delta x_3) + \\ + \beta_7^2(x_2 + \alpha \Delta x_2)(x_3 + \alpha \Delta x_3) + \beta_8^2(x_1 + \alpha \Delta x_1)(x_2 + \alpha \Delta x_2)(x_3 + \alpha \Delta x_3))\Delta x_2 - \\ - (\beta_1^3 + \beta_2^3(x_1 + \alpha \Delta x_1) + \beta_3^3(x_2 + \alpha \Delta x_2) + \beta_4^3(x_3 + \alpha \Delta x_3) + \\ + \beta_5^3(x_1 + \alpha \Delta x_1)(x_2 + \alpha \Delta x_2) + \beta_6^3(x_1 + \alpha \Delta x_1)(x_3 + \alpha \Delta x_3) + \\ + \beta_7^3(x_2 + \alpha \Delta x_2)(x_3 + \alpha \Delta x_3) + \beta_8^3(x_1 + \alpha \Delta x_1)(x_2 + \alpha \Delta x_2)(x_3 + \alpha \Delta x_3))\Delta x_3.$$

Приравнявая прямое приращение функции и приращение, полученное по новой модели с применением теоремы Лагранжа, решая уравнение относительно параметра средней точки, возможно найти факторные нагрузки.

Точечные значения мер чувствительности для анализа чувствительности аналитической функции и ее табличного представления приведены в таблице. Проведенная серия численных экспериментов показывает, что шаг дискретизации 0,3 при табулировании позволяет получить наивысшую точность по средней абсолютной ошибке (MAE).

Для решения задачи анализа чувствительности модели, заданной в табличном виде с дискретным шагом, было разработано программное обеспечение, схема реализации которого представлена на рисунке. Анализ может проводиться как для функций, которые изначально заданы в табличном виде, так и для функций, имеющих аналитическое представление. В этом случае проводится табулирование значений функции в заданном диапазоне с установленным шагом дискретизации. На схеме данные этапы представлены пунктирной линией.

Реализация программного обеспечения выполнена на языке Python с использованием библиотек numpy, pandas, scipy.optimize и sklearn. Для выполнения ремоделирования представленного ранее численного примера функции Розенброка используется метод Polynomial

Features из sklearn.preprocessing с параметром «interaction_only=True» для получения нелинейной регрессионной модели с эффектами взаимодействия.

Точечные значения мер чувствительности

Шаг	x_1	x_2	x_3	MAE
1	0,000010	0,939210	0,060781	0,0020728
0,9	0,000339	0,967827	0,031834	0,0004853
0,8	0,000006	0,959049	0,040945	0,0008603
0,7	0,000164	0,972120	0,027715	0,0003457
0,6	0,000240	0,983240	0,016520	0,0000900
0,5	0,000003	0,982895	0,017102	0,0000973
0,4	0,000002	0,988822	0,011176	0,0000252
0,3	0,000066	0,994079	0,005855	0,0000005
0,2	0	0,997096	0,002903	0,0000030
0,1	0	0,999262	0,000738	0,0000123
Для аналитического представления	0,000012	0,994969	0,005020	–

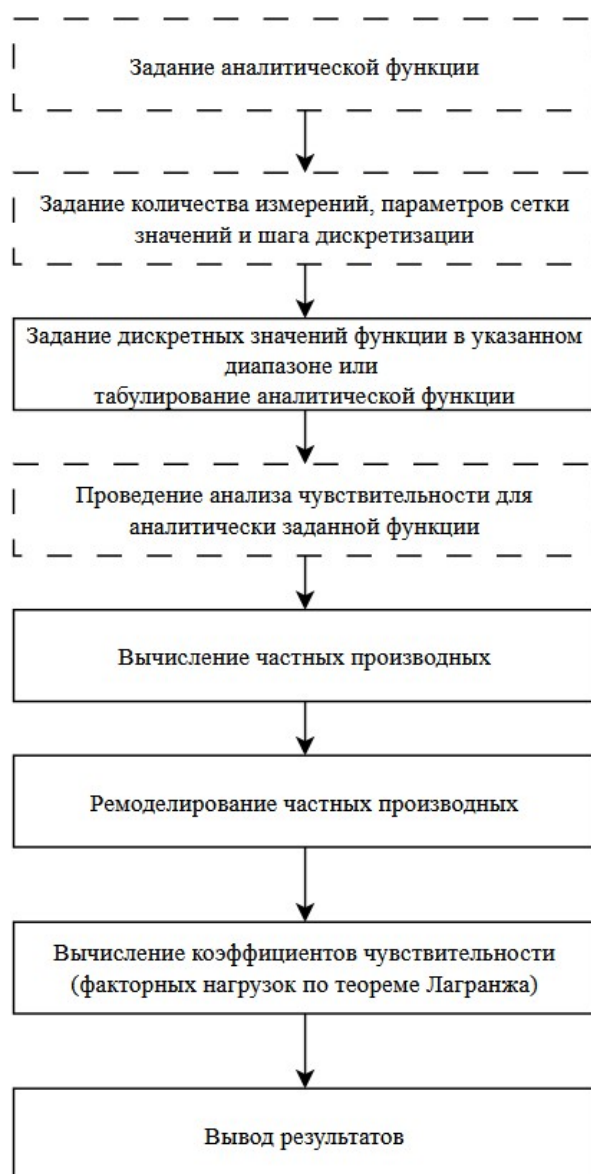


Рис. Схема программной реализации анализа чувствительности факторов математической модели

Заключение и перспективы

В приведенном исследовании предпринята попытка применить предложенный ранее авторами метод анализа чувствительности по факторам к математическим моделям, заданным табулированными значениями. Применено численное дифференцирование; в качестве восстановления аналитического представления производной модели применен подход математического ремоделирования, предполагающий использование унифицированных классов ремоделирующих моделей. В данной работе использована модель линейной регрессии с эффектами взаимодействия. Такие структуры естественны в задачах анализа чувствительности, так как моделируют наличие линейных связей между независимыми переменными. Однако перспективным является применение и других ремоделирующих структур, в частности, аппроксимирующих полиномов и полносвязных нейронных сетей с небольшим количеством нейронов на скрытом слое. В качестве численного примера проведен анализ чувствительности известной функции Розенброка в двух видах: аналитически и на основе ее табулирования. Полученные результаты свидетельствуют о достаточном качестве приближения численных производных линейными моделями с эффектами взаимодействия. Повысить качество возможно выбрав шаг численного дифференцирования оптимальным образом, что является перспективным направлением исследования.

Список литературы

1. Sensitivity Analysis in Practice: A Guide to Assessing Scientific Models / A. Saltelli, S. Tarantola, F. Campolongo, M. Ratto. – Hoboken, John Wiley & Sons Ltd., 2004 – 232 p.
2. Global Sensitivity Analysis: The Primer / A. Saltelli, M. Ratto, T. Andres, F. Campolongo, J. Cariboni, D. Gatelli, M. Saisana, S. Tarantola. – John Wiley & Sons: Chichester, UK, 2008. – 305 p.
3. Sobol, I.M. Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates / I.M. Sobol // Math. Comput. Simul. – 2001. – Vol. 55. – P. 271–280.
4. Lamboni, M. Multivariate sensitivity analysis and derivative-based global sensitivity measures with dependent variables / M. Lamboni, S. Kucherenko // Reliab. Eng. Syst. Saf. – 2021. – Vol. 212. – P. 107519.
5. Borgonovo, E. Model emulation and moment-independent sensitivity analysis: An application to environmental modelling / E. Borgonovo, W. Castaings, S. Tarantola // Environ. Model. Softw. – 2012. – Vol. 34. – P. 105–115.
6. Rana, S. An efficient assisted history matching and uncertainty quantification workflow using Gaussian processes proxy models and variogram based sensitivity analysis: GP-VARS / S. Rana, T. Ertekin, G.R. King // Comput. Geosci. – 2018. – Vol. 114. – P. 73–83.
7. Pujol, G. Simplex-based screening designs for estimating metamodels / G. Pujol // Reliab. Eng. Syst. Saf. – 2009. – Vol. 94. – P. 1156–1160.
8. Hamby, D.M. A comparison of sensitivity analysis techniques / D. M. Hamby // Health Phys. – 1995. – Vol. 68. – P. 195–204.
9. Box, G.E. An analysis for unreplicated fractional factorials / G. E. Box, R. D. Meyer // Technometrics. – 1986. – Vol. 28. – P. 11–18.
10. Dean, A. Screening: Methods for Experimentation in Industry, Drug Discovery, and Genetics / A. Dean, S. Lewis. – Springer Science & Business Media: Berlin/Heidelberg, Germany, 2006. – 234 p.
11. Kurowicka, D. Uncertainty analysis with high dimensional dependence modeling / D. Kurowicka, D.M. Cooke. – John Wiley & Sons. – 2006. – 304 p.

12. Christensen, R. Linear models for multivariate, time series, and spatial data / R. Christensen. – New York: Springer-Verlag, 1991. – Vol. 1. – P. 354–355.
13. Cacuci, D.G. Sensitivity and uncertainty analysis, volume II: applications to large-scale systems / D.G. Cacuci, M. Ionescu-Bujor, I.M. Navon. – CRC press, 2005. – 368 p.
14. Sobol, I.M. On sensitivity estimation for nonlinear mathematical models / I.M. Sobol // *Matematicheskoe modelirovanie*, 1990. – Vol. 2, iss. 1. – P. 112–118.
15. Efron, B. The jackknife estimate of variance / B. Efron, C. Stein // *Ann. Stat.* – 1981. – Vol. 9. – P. 586–596.
16. Блюмин, С.Л. Экономический факторный анализ: Монография / С.Л. Блюмин, В.Ф. Суханов, С.В. Чеботарев. – Липецк: ЛЭГИ, 2004. – 148 с.
17. Analysis of finite fluctuations for solving big data management problems / S.L. Blyumin, G.S. Borovkova, K.V. Serova, A.S. Sysoev // 2015 9th International Conference on Application of Information and Communication Technologies (AICT). – IEEE, 2015. – P. 48–51. DOI: 10.1109/ICAICT.2015.7338514
18. Sensitivity analysis of neural network models: Applying methods of analysis of finite fluctuations / A. Sysoev, A. Ciurlia, R. Sheglevatykh, S. Blyumin // *Periodica polytechnica Electrical engineering and computer science*. – 2019. – Vol. 63(4). – P. 306–311.
19. Применение несимметричного ортогонального планирования при исследовании процессов прокатки / С.Л. Блюмин, В.Г. Барышев, С.Л. Коцарь, Б.А. Поляков // *Применение ЭВМ в металлургии: I Всесоюзн. науч.-техн. конф.* – М.: МИСиС, 1973. – С. 118–119.
20. Surrogate Modeling of Buckling Analysis in Support of Composite Structure Optimization / S. Grihon, S. Alestra, E. Burnaev, P. Prikhodko // 1st International Conference on Composite Dynamics, Arcachon, France, 2012.
21. Zhao, D. A multi-surrogate approximation method for metamodeling / D. Zhao, D. Xue // *Engineering with Computers*, 2011. – Vol. 27(2).
22. Co-simulation: State of the Art. [arXiv:1702.00686] / C. Gomes, C. Thule, D. Broman, P. Larsen, H. Vangheluwe. – 2017.
23. Benureau, F. Re-run, Repeat, Reproduce, Reuse, Replicate: Transforming Code into Scientific Contributions. [arXiv:1708.08205] / F. Benureau, N. Rougier. – 2017.

References

1. Saltelli A., Tarantola S., Campolongo F., Ratto M. Sensitivity Analysis in Practice: A Guide to Assessing Scientific Models. John Wiley & Sons, Ltd., 2004, 232 p.
2. Saltelli A., Ratto M., Andres T., Campolongo F., Cariboni J., Gatelli D., Saisana M., Tarantola, S. Global Sensitivity Analysis: The Primer. John Wiley & Sons: Chichester, UK, 2008, 305 p.
3. Sobol I.M. Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates. *Math. Comput. Simul.*, 2001, vol. 55, pp. 271–280.
4. Lamboni M., Kucherenko S. Multivariate sensitivity analysis and derivative-based global sensitivity measures with dependent variables. *Reliab. Eng. Syst. Saf.*, 2021, vol. 212, pp. 107519.
5. Borgonovo E., Castaings W., Tarantola S. Model emulation and moment-independent sensitivity analysis: An application to environmental modelling. *Environ. Model. Softw.*, 2012, vol. 34, pp. 105–115.
6. Rana S., Ertekin T., King G.R. An efficient assisted history matching and uncertainty quantification workflow using Gaussian processes proxy models and variogram based sensitivity analysis: GP-VARS. *Comput. Geosci.*, 2018, vol. 114, pp. 73–83.

7. Pujol G. Simplex-based screening designs for estimating metamodels. *Reliab. Eng. Syst. Saf.*, 2009, vol. 94, pp. 1156-1160.
8. Hamby D.M. A comparison of sensitivity analysis techniques. *Health Phys.*, 1995, vol. 68, pp. 195-204.
9. Box G.E., Meyer R.D. An analysis for unreplicated fractional factorials. *Technometrics*, 1986, vol. 28, pp. 11-18.
10. Dean A., Lewis S. Screening: Methods for Experimentation in Industry, Drug Discovery, and Genetics. Springer Science & Business Media: Berlin/Heidelberg, Germany, 2006, 234 p.
11. Kurowicka D., Cooke D. M. Uncertainty analysis with high dimensional dependence modelling. John Wiley & Sons, 2006, 304 p.
12. Christensen R. Linear models for multivariate, time series, and spatial data. New York : Springer-Verlag, 1991, vol. 1., pp. 354-355
13. Cacuci D. G., Ionescu-Bujor M., Navon I. M. Sensitivity and uncertainty analysis, volume II: applications to large-scale systems. CRC press, 2005, 368 p.
14. Sobol I. M. On sensitivity estimation for nonlinear mathematical models. *Matematicheskoe modelirovanie*, 1990, vol. 2 (1), pp. 112-118.
15. Efron B., Stein C. The jackknife estimate of variance. *Ann. Stat.*, 1981, vol. 9, pp. 586-596.
16. Blyumin S. L., Sukhanov V. F., Chebotarev S. V. Ekonomicheskii faktorniy analiz: Monografiya [Economic factor analysis: Monography]. – Lipetsk, LEGI publishing house, 2004, 148 p.
17. Blyumin S. L., Borovkova G. S., Serova K. V., Sysoev A. S. Analysis of finite fluctuations for solving big data management problems. *Proceedings of 2015 9th International Conference on Application of Information and Communication Technologies (AICT)*, IEEE, 2015, pp. 48-51. DOI: 10.1109/ICAICT.2015.7338514
18. Sysoev A., Ciurlia A., Sheglevatykh R., Blyumin S. Sensitivity analysis of neural network models: Applying methods of analysis of finite fluctuations. *Periodica polytechnica Electrical engineering and computer science*, 2019, vol. 63(4), pp. 306-311.
19. Kotsar S.L., Blyumin S.L., Baryshev V.G., Polyakov B.A. Supplementing of asymmetric orthogonal planning while exploration of the operation of rolling [Primenenie nesimmetrichnogo ortogonalnogo planirovaniya pri issledovanii protsessov prokatki]. *Primenenie EVM v metallurgii*. Proceedings of the first Soviet Technical Conference, Moscow, MISA, 1973.
20. Grihon S., Alestra S., Burnaev E., Prikhodko P. Surrogate Modeling of Buckling Analysis in Support of Composite Structure Optimization. *Proceedings of the 1st International Conference on Composite Dynamics*, Arcachon, France, 2012.
21. Zhao D., Xue D. A multi-surrogate approximation method for metamodeling. *Engineering with Computers*, 2011, 27(2).
22. Gomes C., Thule C., Broman D., Larsen P., Vangheluwe H. Co-simulation: State of the Art. [arXiv:1702.00686], 2017.
23. Benureau F., Rougier N. Re-run, Repeat, Reproduce, Reuse, Replicate: Transforming Code into Scientific Contributions. [arXiv:1708.08205], 2017.