

# Matematinų modelių parametrų jautrumo ir rezultatų neapibrėžtumo statistiniai tyrimo metodai

Vytis Kopustinskas,

Robertas Alzbutas,

Juozas Augutis

Lietuvos energetikos institutas,  
Branduolinių įrenginių saugos laboratorija,  
Breslaujos g. 3, LT-44403 Kaunas  
El. paštas: robertas@mail.lei.lt

Procesai ir reiškiniai įvairiose mokslo srityse dažnai analizuojami pasitelkus matematinius modelius. Pastaruoju metu matematiniai modeliai plačiai pradėti taikyti ne tik technologiniuose ar fiziniuose moksluose, bet ir biologijoje, farmacijoje ar kitose anksčiau buvusiose beveik tik eksperimentinėse srityse. Tačiau matematinų modelių ir kompiuterinių paketų taikymas iškelia ir naujų problemų bei uždavinių. Vienas tokių uždavinių yra efektyvus modelio rezultatų neapibrėžtumo įvertinimas bei parametrų jautrumo analizė. Šio straipsnio tikslas yra apžvelgti fizikinių procesų ar reiškinų matematinų modelių neapibrėžtumo ir jautrumo analizėje taikytinus statistinius metodus, įvertinant jų pranašumus bei trūkumus.

**Raktažodžiai:** matematiniai modeliai, rezultatų neapibrėžtumas, statistinė analizė, parametrų jautrumo indeksai, koreliacijos ir standartizuoti regresijos koeficientai

## 1. ĮVADAS

Šio straipsnio tikslas yra apžvelgti fizikinių procesų ar reiškinų matematinų modelių neapibrėžtumo ir jautrumo analizėje taikytinus statistinius metodus. Procesai ir reiškiniai įvairiose mokslo srityse dažnai analizuojami pasitelkus matematinius modelius. Paprastai matematiniai modeliai yra aprašomi diferencialinių lygčių sistemomis su įvairiomis kraštinėmis sąlygomis. Realių sudėtingų fizikinių procesų atveju tokių lygčių sistemų sprendinius galima gauti tik skaitmeniniais metodais. Tam tikslui yra kuriami specialūs programų paketai, leidžiantys analizuoti fizikinius procesus konkrečių sąlygų ar konkrečios vartotojo analizuojamos techninės sistemos atveju. Įdomu pažymėti, kad matematiniai modeliai plačiai taikomi ne tik technologiniuose ar fiziniuose moksluose, bet ir biologijoje, farmacijoje ar kitose anksčiau buvusiose beveik tik eksperimentinėse srityse.

Platus matematinų modelių taikymas iškelia ir naujų problemų bei uždavinių. Vienas tokių uždavinių yra efektyvus modelio rezultatų neapibrėžtumo įvertinimas. Šis uždavinys kyla dėl to, kad neįmanoma visiškai tiksliai nustatyti pradinių modelio parametrų reikšmių ir realiose situacijose jos gali būti skirtingos, nei naudojamos modelyje. Praktiniuose skaičiavimuose dažniausiai svarbu parodyti, kad tam tikri sistemos ar reiškinio kintamieji (pvz., maksimalus pasiekiamas slėgis, temperatūra, sprogimo jėga, vandens lygis ir kt.) neviršys leistinų ribų. Šiai problemai nagrinėti būtina įvertinti modelio rezultatų neapibrėžtumą.

Kitas ne mažesnę praktinę reikšmę turintis uždavinys yra modelio pradinių parametrų jautrumo įvertinimas. Modelio parametrų jautrumo indeksai parodo, kaip svarbus yra konkretus parametras modelio rezultatui. Jautrumo indeksai paprastai yra kiekybiniai dydžiai, todėl parametrų svarbą galima ranguoti ir

nustatyti labiausiai modelio rezultatus veikiančius parametrus. Jautrumo analizės rezultatai yra svarbūs siekiant nustatyti, kuriuos parametrus verta tikslinti, o kurių tikslumo padidinimas nesumažina rezultato neapibrėžtumo. Kadangi tikslus modelio parametrų įvertinimas dažnai susijęs su nemažomis išlaidomis (ypač jei reikia atlikti papildomus eksperimentus), jautrumo analizės rezultatai leidžia efektyviai paskirstyti tyrimų prioritetus.

Šiame straipsnyje pateikiama matematinų modelių rezultatų neapibrėžtumo ir parametrų jautrumo analizės statistinių metodų apžvalga. Straipsnyje taip pat aptariami šių metodų pranašumai, trūkumai, taikymo prielaidos ir sąlygos. Pastaruoju metu nemažai taikomųjų darbų neapibrėžtumo ir jautrumo analizės srityje atlikta ir Lietuvoje [1–6].

## 2. MODELIO REZULTATŲ NEAPIBRĖŽTUMO ANALIZĖ

### 2.1. Matematinio modelio aprašymas

Matematinis modelis dažnai patogiau aprašyti kaip funkciją:

$$y = F(x_1, x_2, \dots, x_N); \quad (1)$$

čia  $x_1, x_2, \dots, x_N$  – modelio parametrai;

$N$  – modelio parametrų skaičius;

$y$  – modelio rezultatas;

$F(\cdot)$  – funkcija, siejanti modelio parametrus ir modelio rezultata.

Matematinio modelio aprašymas (1) yra šiek tiek supaprastintas, nes realiuose modeliuose dažniausiai turime ne vieną rezultatą, o daug rezultatų, apibūdinančių įvairias nagrinėjamo proceso ar reiškinio charakteristikas, t. y.  $y$  yra vektorius, o ne skaliarinis dydis. Taip pat dažnai turime analizuoti rezultatus,

kurie priklauso nuo laiko  $t$ , t. y.  $y = y(t)$ , o funkcija  $F$  tuomet taip pat priklauso nuo  $t$ . Tačiau supaprastintas modelio aprašymas (1) nekeičia neapibrėžtumo ir jautrumo analizės principų, todėl šiame straipsnyje naudosime (1) aprašymą. Jeigu turime daug skirtingų modelio rezultatų (pvz., slėgis, temperatūra, srauto debitas), neapibrėžtumo ir jautrumo analizę reikėtų atlikti kiekvienam rezultatui atskirai, arba jei tokių rezultatų labai daug, vienam apibendrintam rezultatui ar tik svarbiausiems. Dažnai modelio rezultatai skaičiuojami įvairiems laiko momentams, tokiu atveju neapibrėžtumo ir jautrumo analizę reikėtų atlikti kiekvienam laiko momentui atskirai, arba pasirinktiems būdingiems taškams, pvz., maksimaliai reikšmei.

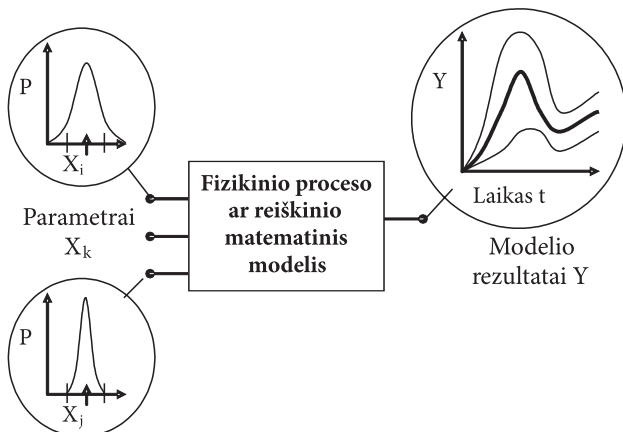
Modelio rezultato neapibrėžtumo problema kyla dėl to, kad modelio parametrai  $x_1, x_2, \dots, x_N$  nėra tiksliai žinomi arba gali keistis realios aplinkos sąlygomis. Todėl modelio parametrus galime laikyti atsitiktiniais dydžiais ir juos aprašyti tikimybiniais skirstiniais  $p(x_1), p(x_2), \dots, p(x_N)$ . Šių tikimybinių skirstinių nustatymas yra papildomas modeliuotojų uždavinys. Paprasčiausiu atveju, kai parametras yra išmatuojamas dydis ir jo reikšmės neapibrėžtumas kyla tik dėl matavimo paklaidos, naudojamas normalusis (Gauso) tikimybinis skirstinys. Praktikoje dažnai taikomi tolygusis, trikampis, lognormalinis, beta ir kiti skirstiniai. Pasirinktas tikimybinis skirstinys turi geriausiai atspindėti esamas žinias apie galimą parametro reikšmę.

Modelio funkcija  $F(\cdot)$ , siejanti modelio parametrus su rezultatu  $y$ , bendruoju atveju yra sudėtinga ir dažnai netiesinė funkcija, kurios analitinė išraiška retai žinoma. Sudėtingų modelių atveju, kai naudojami specializuoti programų paketai, funkciją  $F(\cdot)$  galime laikyti programų paketo skaičiavimus aprašančia funkcija. Svarbus palengvinimas yra tai, kad neapibrėžtumo ir jautrumo analizei atlikti nebūtina žinoti analitinę  $F(\cdot)$  išraišką.

**2.2. Rezultatų neapibrėžtumo statistinio tyrimo metodai**

Modelio parametų neapibrėžtumo schematinis ryšys su modelio rezultatų neapibrėžtumu pavaizduotas 1 pav.

Žinodami modelio parametų tikimybinius skirstinius galime atsitiktinai parinkti parametų reikšmes ir sudaryti modelio parametų reikšmių rinkinius. Atlikus modelio skaičiavimus kiekvienam parametų rinkiniui gaunamos skirtingos modelio rezultato reikšmės ir tai atspindi rezultato neapibrėžtumą. Siekiant įvertinti modelio rezultatų neapibrėžtumą kiekybiškai,



1 pav. Modelio parametų neapibrėžtumo schematinis ryšys su modelio rezultatų neapibrėžtumu

modelio rezultatas analizuojamas kaip atsitiktinis dydis ir vertinamos modelio rezultato skirstinio charakteristikos. Modelio rezultato neapibrėžtumo analizė leidžia atsakyti į klausimą, kokia yra tikimybė, kad modelio rezultatas bus didesnis arba mažesnis, nei tam tikra riba, arba kad nepateks į tam tikro dydžio intervalą. Šie klausimai dažnai turi svarbią praktinę reikšmę, ypač jei modelio rezultatų analizė turi užtikrinti technologinio proceso saugą (pvz., avarijos atveju slėgis vamzdynuose neturi viršyti leistinos ribos, arba vandenilio koncentracija neturi sudaryti sprogaus mišinio). Nesant galimybei atlikti neapibrėžtumo analizę, paprastai taikomos konservatyvios prielaidos apie modelio parametų reikšmes ir priimamos papildomos konservatyvios scenarijaus sąlygos, tačiau toks metodas neleidžia užtikrinti, kad konservatyvumas išlaikomas viso skaičiavimo metu, o gauti konservatyvūs rezultatai dažnai reiškia ir neefektyvius technologinio proceso apribojimus.

Atliekant modelio rezultatų neapibrėžtumo analizę, pirmiausia reikėtų atkreipti dėmesį į modelio skaičiavimo laiką. Jei šis laikas nėra ilgas (kelios minutės ar trumpiau), tuomet galima sudaryti didelę (1000 ir daugiau) modelio parametų atsitiktinę imtį bei gauti toki patį modelio rezultatų skaičių. Esant tokio dydžio imčiai galime pakankamai tiksliai įprastais statistiniais metodais nustatyti modelio rezultatų skirstinio tipą bei įvertinti jo charakteristikas: vidurkį, dispersiją, įvairius kvantilius bei nustatyti intervalą, į kurį pateks  $100\% \cdot \alpha$  ( $\alpha = 0,95; 0,99$  etc.) modelio rezultato reikšmių. Praktikoje dažnai gali būti svarbu įvertinti ne intervalą, bet tik viršutinę arba apatinę ribą, kurios kirtimo tikimybė yra labai maža, pavyzdžiui, nustatyti ribą, kurios neviršytų  $100\% \cdot \alpha$  ( $\alpha = 0,95; \alpha = 0,99$  etc.) modelio rezultato reikšmių.

Jei turima didelė imtis, tuomet intervalas, į kurį pateks  $100\% \cdot \alpha$  ( $\alpha = 0,95; \alpha = 0,99$  etc.) modelio rezultato reikšmių, apskaičiuojamas kaip skirtumas tarp atitinkamų skirstinio kvantilių. Pažymėkime  $x_q$  – atsitiktinio dydžio  $X$  (modelio rezultatas) skirstinio  $q$  kvantilį, t. y.  $P(X \leq x_q) = q$ . Kadangi skirstinio kvantiliai nustatomi empiriškai iš skaičiavimo rezultatų imties, tuomet apytiksliai  $100\% \cdot \alpha$  (arba kitaip su tikimybe, artima  $\alpha$ ) visų modelio rezultato reikšmių pateks į intervalą  $[x_{\frac{1-\alpha}{2}}, x_{\frac{\alpha+1}{2}}]$ . Pavyzdžiui, apytiksliai 99% visų modelio rezultato reikšmių pateks į intervalą  $[x_{0,005}, x_{0,995}]$ . Dėl paprastumo vadinkime šį intervalą  $\alpha$ -intervalu.

Jeigu reikia nustatyti ribą, kurios neviršytų  $100\% \cdot \alpha$  modelio rezultato reikšmių, tai tokią ribą nusako kvantilis  $x_\alpha$ . Jeigu reikia nustatyti ribą, kurią viršytų  $100\% \cdot \alpha$  modelio rezultato reikšmių, tai tokią ribą nusako kvantilis  $x_{1-\alpha}$ . Dėl paprastumo vadinkime tokias ribas atitinkamai  $\alpha$ -riba ir  $(1-\alpha)$  – riba.

Modelio rezultatų neapibrėžtumo analizė tampa sudėtingesnė, jeigu modelio skaičiavimo laikas yra ilgas ir atlikti daug skaičiavimų reikia didelių kompiuterinių išteklių. Tuomet norimas modelio rezultato skirstinio charakteristikas turime vertinti naudodami mažesnę atsitiktinę imtį. Mažos atsitiktinės imties atveju skirstinio charakteristikų įvertinimo tikslumas tampa aktualiu klausimu ir reikia taikyti sudėtingesnius statistinius metodus. Toliau išsamiau pateiksime metodą, kaip reikėtų įvertinti intervalą, į kurį pateks dauguma modelio rezultato reikšmių turint mažą imtį.

Mažos atsitiktinės imties atveju, kai skaičiavimų skaičius siekia tik kelis šimtus, negalime pakankamai tiksliai apskaičiuoti modelio rezultato skirstinio kvantilių, kartu ir  $\alpha$ -intervalo. Anglijos

statistikas S. S. Wilksas 1941 metais paskelbė darbą [7], kuriame pateikė metodą, kaip būtų galima iš nedidelės paprastosios atsitiktinės imties apskaičiuoti  $\alpha$ -intervalą, į kurį pateks ne mažiau kaip  $100\% \cdot \alpha$  modelio rezultato reikšmių. Šis intervalą nusako maksimalios ir minimalios skaičiavimo metu gautos modelio rezultato reikšmių skirtumas. Wilkso metodas nurodo, kokį minimalų modelio skaičiavimų kiekį reikia atlikti, kad skaičiavimo metu gautos maksimalios ir minimalios modelio rezultato reikšmės atitiktų norimo tikimybinio lygio intervalą. Praktikoje svarbi Wilkso metodo savybė yra tai, kad reikalingų atlikti modelio skaičiavimų skaičius nepriklauso nuo modelio parametrų skaičiaus, taip pat nepriklauso nuo modelio rezultato skirstinio tipo ir savybių, tačiau visi modelio parametrai tarpusavyje turi būti nepriklausomi. Taip pat svarbi Wilkso metodo savybė yra tai, kad skaičiavimams naudojama modelio parametrų atsitiktinė imtis turi būti būtinai paprastoji atsitiktinė imtis ir negali būti mažėjančios dispersijos atsitiktinė imtis, tokia, kaip, pavyzdžiui, Lotynų hiperkubo ar stratifikuota imtis.

Kaip minėta, Wilkso metodas reikalauja palyginti nedidelio skaičiavimų kiekio. Akivaizdu, kad parinkus kitus modelio parametrų rinkinius, gautos maksimalios ir minimalios modelio rezultato reikšmės gali skirtis. Todėl būtina įvertinti tikslumą, su kuriuo iš maksimalios ir minimalios modelio rezultato reikšmės nustatytas  $\alpha$ -intervalas apima ne mažiau nei  $100\% \cdot \alpha$  modelio rezultato reikšmių. Tikslumą įvertinantis  $\alpha$ -intervalas yra vadinamas tolerancijos intervalu ir jį apibūdina dvi tikimybinės charakteristikos ( $\alpha$ ,  $\beta$ ); čia  $\alpha$  –  $\alpha$ -intervalo parametras, nusakantis intervalą tarp kvantilių atsitiktinio dydžio skirstinio, apimančio ne mažiau kaip  $100\% \cdot \alpha$  skirstinio reikšmių, o  $\beta$  – pasiklovimo lygmuo, savo prasme atitinkantis statistikoje gerai žinomą pasiklovimo intervalo pasiklovimo lygmenį. Tolerancijos intervalo interpretacija yra tokia, kad į ( $\alpha$ ,  $\beta$ )-tolerancijos intervalą pateks ne mažiau kaip  $100\% \cdot \alpha$  visų modelio rezultatų su ne mažesne tikimybe nei  $\beta$ , t. y. su ne mažesne tikimybe nei  $\beta$ , modelio rezultatas iš ne mažiau kaip  $100\% \cdot \alpha$  visų skaičiavimų pateks į apskaičiuotą tolerancijos intervalą.

Jei reikia vertinti ne visą intervalą, o tik viršutinę arba apatinę ribą, tai naudojama ( $\alpha$ ,  $\beta$ )-tolerancijos riba: čia  $\alpha$  –  $\alpha$ -ribos parametras, o  $\beta$  – pasiklovimo lygmuo. Vertinant viršutinę tolerancijos ribą, surandama maksimali apskaičiuota modelio rezultato reikšmė, o vertinant apatinę tolerancijos ribą – minimali apskaičiuota modelio rezultato reikšmė. Reikiamas skaičiavimų skaičius vienpusės ribos atveju yra vienodas (1 lentelė), nepaisant to, ar skaičiuojama viršutinė, ar apatinė tolerancijos ribos. Tolerancijos ribos interpretacija yra analogiška tolerancijos intervalo interpretacijai, tik intervalas tarp skirstinio kvantilių keičiamas vienu kvantiliu, t. y. su ne mažesne tikimybe nei  $\beta$ , modelio rezultatas iš ne mažiau kaip  $100\% \cdot \alpha$  visų skaičiavimų bus ne mažesnis (ne didesnis), nei apskaičiuota apatinė (viršutinė) ( $\alpha$ ,  $\beta$ ) – tolerancijos riba.

Wilkso metodas numato, kad ( $\alpha$ ,  $\beta$ )-tolerancijos intervalui apskaičiuoti reikalingas minimalus modelio skaičiavimų skaičius  $n$  turi tenkinti (1) nelygybę, ( $\alpha$ ,  $\beta$ )-tolerancijos ribos atveju – (2) nelygybę:

$$1 - \alpha^n - n(1 - \alpha) \alpha^{n-1} \beta, \quad (1)$$

$$1 - \alpha^n \geq \beta. \quad (2)$$

Pagal (1) ir (2) formules apskaičiuoti reikalingi minimalūs modelio skaičiavimų kiekiai dažniausiai naudojami  $\alpha$  ir  $\beta$

reikšmėms pateikti lentelėje. Skaičiavimai pagal (1) ir (2) formules rodo, kad nereikia daug skaičiavimų, kad pakankamai tiksliai ( $\beta = 0,99$ ) apskaičiuotume tolerancijos intervalą, apimančią ne mažiau kaip 90% ( $\alpha = 0,9$ ) visų modelio rezultatų (užtenka 64). Tačiau jei norėtume nelabai tiksliai ( $\beta = 0,90$ ) apskaičiuoti tolerancijos intervalą, apimančią ne mažiau kaip 99% ( $\alpha = 0,99$ ) visų modelio rezultatų, reikėtų net 388 skaičiavimų. Jeigu parametras  $\beta$  artėja prie vieneto, tuomet ( $\alpha$ ,  $\beta$ )-tolerancijos intervalo interpretacija sutampa su  $\alpha$ -intervalo interpretacija. Ši situacija kaip tik atsitinka, kai turima modelio skaičiavimų imtis yra didelė. Ypač tikslūs tolerancijos intervalai nėra labai informatyvūs, nes yra pakankamai platus ir reikalauja atlikti daug skaičiavimų. Pavyzdžiui, (0,99; 0,99)-tolerancijos intervalui apskaičiuoti reikėtų atlikti net 662 skaičiavimus. Todėl praktiniuose skaičiavimuose dažniausiai taikomas (0,95; 0,95)-tolerancijos intervalas yra priimtinas kompromisas tarp tikslumo ir reikalingo modeliavimų skaičiaus.

Lentelė. Minimalus modelio skaičiavimų kiekis ( $\alpha$ ,  $\beta$ )-tolerancijos intervalui ir ( $\alpha$ ,  $\beta$ )-tolerancijos ribai apskaičiuoti

	( $\alpha$ , $\beta$ )-tolerancijos intervalui				( $\alpha$ , $\beta$ )-tolerancijos ribai		
$\beta/\alpha$	0,90	0,95	0,99	$\beta/\alpha$	0,90	0,95	0,99
0,90	38	77	388	0,90	22	45	230
0,95	46	93	473	0,95	29	59	299
0,99	64	130	662	0,99	44	30	459

### 3. MODELIO PARAMETRŲ JAUTRUMO ANALIZĖ

Matematinio modelio parametrų jautrumo analizė skirta iširti labiausiai modelio rezultato neapibrėžtumą sąlygojančius veiksnus. Tipiškas jautrumo analizės rezultatas yra svarbiausių modelio parametrų sąrašas, parametrų svarbą vertinant kiekybiniais dydžiais. Kadangi žinomas ne vienas jautrumo analizės statistinis metodas, dažnai naudinga ne tik teisingai pasirinkti konkretų metodą, bet ir palyginti gautus rezultatus su kitais metodais gautais rezultatais.

Pagal jautrumo analizės rezultatus galime nustatyti, kurių modelio parametrų tikslesnis įvertinimas leistų ženkliai sumažinti modelio rezultato neapibrėžtumus ir kurių parametrų tolesnis tikslinimas nėra prasmingas dėl jų mažos įtakos rezultatui. Kadangi parametrų įvertinimas dažnai susijęs su turimomis žiniomis apie tam tikrus fizikinius dydžius ar reiškinius, parametrai tiksliau įvertinti gali tekti atlikti papildomus eksperimentinius tyrimus. Todėl jautrumo analizė gali padėti numatyti prioritetinius eksperimentinius tyrimus ir objektyviai spręsti optimalaus lėšų paskirstymo brangiems tyrimams klausimą.

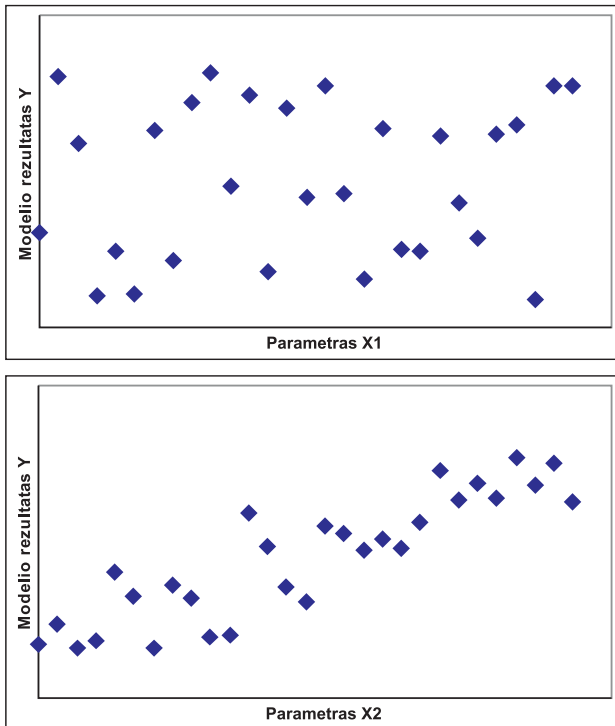
Jautrumo analizės metodai skirstomi į lokalius ir globalius. Šiame skyriuje siekiama aptarti globalius jautrumo indeksus, todėl apie lokalius indeksus pateiksime tik trumpą informaciją. Dažniausiai naudojamas lokalus jautrumo indeksas yra modelio rezultato išvestinė. Matematinio modelio atveju išvestines skaičiuoti patogiausia skaitmeniškai baigtinių skirtumų metodu:

$$\frac{\partial F(x_1, x_2, \dots, x_N)}{\partial x_i} \approx \frac{F(x_1, x_2, \dots, x_i + \Delta_i, \dots, x_N) - F(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_N)}{\Delta_i},$$

$$i = 1, 2, \dots, N.$$

Daugiau informacijos apie lokalius jautrumo analizės metodus pateikta [8]. Pagrindinis lokalių jautrumo indeksų trūkumas yra tai, kad jie vertina parametru įtaką modelio rezultatui tik vieno taško nedidelėje aplinkoje, o ne visame parametro reikšmės kitimo intervale. Taip pat lokalių jautrumo indeksai neįvertina parametru reikšmių tikimybinų skirstinių, todėl juos naudoti jautrumo analizei nerekomenduojama.

Vienas paprasčiausių jautrumo analizės metodų yra sklaidos grafikų analizė. Paprastai rekomenduojama atlikti tokią grafines analizę jautrumo analizės pradiniam etape, kuris leistų nesunkiai pastebėti esamus tiesioginius modelio parametru ir rezultato sąryšius. Sklaidos grafikams gauti naudojama ta pati parametru ir modelio rezultatų imtis, kaip ir neapibrėžtumo analizei atlikti. Sklaidos grafiko pavyzdžiai pavaizduoti 2 pav. Pavyzdžiuose matyti, kad parametro X1 reikšmės nėra susijusios su modelio rezultato Y reikšmėmis, tačiau parametro X2 atveju tokia priklausomybė egzistuoja. Parametro X2 mažesnės reikšmės yra susijusios su modelio rezultato mažesnėmis reikšmėmis, o didesnės – su rezultato didesnėmis reikšmėmis. Toliau pateiksime metodus, leidžiančius kiekybiškai įvertinti šią priklausomybę.



2 pav. Sklaidos grafiko pavyzdžiai

Globalios jautrumo analizės metodai pagal skaičiavimo principus skirstomi į imties metodus ir dispersijos išskaidymo metodus. Tolesniuose skyriuose aptarsime šias dvi metodų rūšis ir jų taikymo ypatumus tik tam atvejui, kai modelio parametrai yra tarpusavyje nepriklausomi. Priminsime, kad Wilkso neapibrėžtumo analizės metodas skirtas taip pat tik tarpusavyje nepriklausomų modelio parametru atveju. Jautrumo analizės metodai priklausomų modelio parametru atveju taip pat pakankamai išplėtoti, tačiau jie kur kas sudėtingesni.

### 3. 1. Imties metodai jautrumo analizėje

Imties metodai labai plačiai taikomi jautrumo analizėje, nes jie nėra sudėtingi ir leidžia greitai įvertinti parametru svarbą.

Vienas imties metodų pranašumų yra tai, kad galima naudoti tą pačią modelio parametru atsitiktinę imtį, kuri buvo naudojama modelio rezultato neapibrėžtumo analizėje. Todėl jau atlikus neapibrėžtumo analizę, jautrumo analizei atlikti imties metodais nereikia papildomų modelio skaičiavimų.

Vienas paprasčiausių imties metodais apskaičiuojamų parametru jautrumo indeksų yra koreliacijos koeficientas. Praktikoje skaičiuojami tiek Pirsono koreliacijos koeficientas, tiek ranginis Spirmeno koreliacijos koeficientas. Parametro  $x_i$  koreliacijos koeficientas nusako tiesinę priklausomybę tarp parametro ir modelio rezultato. Kuo absoliutiniu dydžiu koreliacijos reikšmė arčiau vieneto, tuo parametro  $x_i$  įtaka modelio rezultatui didesnė. Tokiu būdu galima reitinguoti modelio parametrus pagal jų įtaką modelio rezultatui. Pagrindiniai koreliacijos koeficiento kaip jautrumo indekso trūkumai yra šie: koreliacijos koeficientas turi prasmę tik esant tiesinei priklausomybei ir nėra vertinama keleto parametru tarpusavio sąveikos įtaka modelio rezultatui. Jeigu parametru ir modelio rezultato priklausomybė nėra tiesinė, o taip dažnai ir būna, galima pabandyti eliminuoti netiesiškumo įtaką ranguojant duomenis ir skaičiuojant koreliacijos koeficientą ne duomenims, o jų rangams. Tada parametru jautrumo indeksą atitinka ranginis Spirmeno koreliacijos koeficientas, kurio interpretacija ir trūkumai yra analogiški Pirsono koreliacijos koeficientui. Nei vienas iš koreliacijos koeficientų negali įvertinti keleto parametru tarpusavio sąveikos įtakos, todėl koreliacijos koeficientai yra tinkami parametru jautrumo indeksai, jei parametru tarpusavio sąveikos įtaka modelio rezultatui yra nežymi.

Literatūroje galima sutikti ir dalinės koreliacijos koeficiento taikymus parametru jautrumo analizėje. Tačiau tuo atveju, kai analizės tikslas yra nustatyti modelio parametrus, kurių neapibrėžtumas paaiškina didžiausią modelio rezultato neapibrėžtumo dalį, dalinės koreliacijos koeficientas (taip pat ir ranginis dalinės koreliacijos koeficientas) nėra tinkamas parametru jautrumo indeksas [9].

Vienas populiariausių imties metodų jautrumo analizėje yra standartizuota tiesinė regresija. Matematinį modelį (1) išreikšime daugialype tiesine parametru funkcija:

$$y = F(x_1, x_2, \dots, x_N) = a + b_1 \cdot x_1 + \dots + b_N \cdot x_N \quad (2)$$

Daugialypės regresijos koeficientai  $b_i$  apskaičiuojami mažiausių kvadratų metodu, tačiau jie negali būti jautrumo indeksais, nes būtina normuoti parametru matavimo skales. Parametru matavimo vienetai normuojami standartizuojant kiekvieną parametru ir modelio rezultatą:

$$\hat{x}_{i,k} = \frac{x_{i,k} - Ex_i}{\sigma x_i}, \quad i = 1, 2, \dots, N; k = 1, 2, \dots, M;$$

$$\hat{y}_k = \frac{y_k - Ey}{\sigma y};$$

čia  $Ex_i - x_i$  parametro vidurkis;

$Ey$  – modelio rezultato vidurkis;

$\sigma x_i - x_i$  parametro standartinis nuokrypis;

$\sigma y$  – modelio rezultato standartinis nuokrypis;

$M$  – parametru atsitiktinės imties dydis;

$N$  – parametru skaičius.

Tuomet regresijos koeficientai  $\beta_i$  standartizuotiems dydžiams vadinami standartizuotais regresijos koeficientais ir yra dažnai naudojami parametų jautrumo indeksai:

$$\hat{y} = \alpha + \beta_1 \cdot \hat{x}_1 + \dots + \beta_N \cdot \hat{x}_N. \quad (3)$$

Viena svarbiausių prielaidų, kuomet SRK turi prasmę, yra tai, kad tiesinio modelio (2, 3) determinacijos koeficientas  $R^2$  būtų artimas vienetui. Jautrumo analizėje determinacijos koeficiento reikšmė nurodo tą dalį modelio rezultato neapibrėžtumo, kurią galima paaiškinti modelio parametų neapibrėžtumu. Likusi nepaaiškinama modelio rezultato neapibrėžtumo dalis susijusi su modelio parametų tarpusavio sąveikos įtaka rezultatui ir ji gali būti analizuojama dispersijos išskaidymo metodais (3.2 skyrelis). Praktikoje dažnai reikalaujama, kad tiesinio modelio determinacijos koeficientas būtų ne mažesnis kaip 0,6, t. y. parametų neapibrėžtumas paaiškintų ne mažiau kaip 60% modelio rezultato neapibrėžtumo. Jei  $R^2$  yra mažesnis, tuomet SRK pateikiamas parametų jautrumo reitingavimas gali būti klaidingas. Esant mažam  $R^2$ , koreliacijos koeficientai taip pat negali būti parametų jautrumo indeksais.

Tiksli matematinė standartizuoto regresijos koeficiento interpretacija yra tokia: jei modelio parametą  $x_i$  padidintume dydžiu, lygiu vienam standartiniam nuokrypiui  $\sigma_{x_i}$ , tuomet modelio rezultatas  $y$  padidėtų vidutiniškai dydžiu  $\sigma_y \cdot \beta_i$ . Svarbi SRK savybė yra tai, kad jie nurodo tiek teigiamą, tiek neigiamą parametro įtaką rezultatui. Todėl reitinguojant modelio parametų svarbą pagal SRK, būtina reitinguoti pagal absoliutinę SRK vertę.

Jei jautrumo analizei atlikti imties metodais naudojama maža imtis (taip dažniausiai būna taikant Wilkso metodą), tuomet tarp tam tikrų modelio parametų gali susidaryti vadinamoji momentinė koreliacija. Ši koreliacija atsiranda tik dėl to, kad mažoje imtyje neįmanoma visiškai užtikrinti atsitiktinės imties savybių. Momentinė koreliacija gali iškreipti modelio parametų jautrumo indeksus ir pateikti klaidingą jų reitingavimą. Todėl rekomenduojama palyginti kelių imties metodų (SRK, koreliacijos koeficientai) pateikiamus rezultatus. Jei jautrumo reitingavimas tam tikriems parametrams ženkliai skiriasi, reikėtų iširti pradinės imties savybes.

### 3.2. Dispersijos išskaidymo metodai jautrumo analizėje

Dispersijos išskaidymo metodai laikomi vienais objektyviausių metodų vertinant parametų svarbą. Dažniausiai taikomi du pagrindiniai metodai: Furjė amplitudžių jautrumo indeksai ir Sobolio indeksai. Dispersijos išskaidymo metodams priskiriamas ir koreliacijos santykis. Pagrindinis dispersijos išskaidymo metodų pranašumas yra tai, kad jie vertina parametrus tiesiogiai tarp parametų imties ir modelio rezultatų, o ne per tarpinį tiesinį modelį (kaip SRK) ar duomenų rangavimą (kaip Spirmeno koreliacijos koeficientas). Dispersijos išskaidymo metodai taip pat gali įvertinti parametų tarpusavio sąveikos įtaką modelio rezultatui. Tačiau pagrindinis šių metodų (išskyrus koreliacijos santykį) trūkumas yra tai, kad reikia didelio modelio skaičiavimų skaičiaus ir jis didėja proporcingai parametų skaičiui. Šis trūkumas yra viena pagrindinių priežasčių, dėl kurios sudėtinga taikyti dispersijos išskaidymo metodus sudėtingiems modeliams, turintiems daug parametų. Ši jautrumo analizės sritis

šiuo metu intensyviai plėtojama ir kuriami nauji metodai, leidžiantys gauti tikslius parametų jautrumo indeksus su nedaug skaičiavimų [10]. Furjė amplitudžių jautrumo indeksų taikymas pateiktas [3]. Artimiausiu metu autoriai numato pateikti spaudai išsamesnę dispersijos išskaidymo metodų taikymų apžvalgą.

## 4. PROGRAMINĖ ĮRANGA

Jautrumo ir neapibrėžtumo analizei atlikti sukurta keletas programinės įrangos paketų. Viena jų yra GRS kompanijos programa SUSA (angl. *System for Uncertainty and Sensitivity Analysis*) [11]. Ši programa skirta atlikti modelio neapibrėžtumo ir jautrumo analizę imties metodais. Taip pat šia programa galima apytiksliai apskaičiuoti ir vieną iš dispersijos išskaidymo jautrumo indeksų – koreliacijos santykį. Kitas populiarus programų paketas yra SIMLAB [12]. Šis paketas skirtas atlikti modelio neapibrėžtumo ir jautrumo analizę imties ir dispersijos išskaidymo metodais. Tačiau šiuo paketu negalima skaičiuoti koreliacijos santykio. SIMLAB paketas yra laisvai platinamas visiems norintiems vartotojams.

Gauta 2006 10 22

Priimta 2007 07 20

## Literatūra

1. Ušpuras E., Kaliačka A. Safety analysis of RBMK-1500 using best estimate approach // Proceedings of 6th Int. Conference on Simulation Methods in Nuclear Engineering, Montreal, Quebec, Canada, 2004. P. 1–12.
2. Vileiniškis V., Kaliačka A. Uncertainty and sensitivity analysis of MCPs' trip events at Ignalina NPP // Nuclear Engineering and Design. 2003. Vol. 224. P. 213–225.
3. Miškinis V., Konstantinavičiūtė I., Ušpuras E., Kaliačka A., Kopustinskas V. Neapibrėžtumo analizės taikymas energetikos ekonomikos vienmačių modelių uždaviniams // Energetika. 2006. Nr. 2. P. 1–9.
4. Pabarčius R., Tonkūnas A., Bubelis E., Clemente M. Uncertainty and sensitivity analysis of void and power reactivity coefficients in an RBMK-1500 reactor core // Kerntechnik. 2005. Vol. 70(3). P. 114–119.
5. Urbonas R. Uncertainty and sensitivity analysis of Elektrogorsk-108 test facility RELAP5 model // Energetika. 2002. Nr. 1. P. 31–40.
6. Alzbutas R., Dundulis G., Augutis J., Ušpuras E. Probabilistic modeling of aircraft crash and impact on Ignalina NPP considering uncertainty // Proceedings of the 8th International Conference on Probabilistic Safety Assessment and Management PSAM 8. USA, 2006. P. 1–9.
7. Wilks S. S. Statistical prediction with special reference to the problem of tolerance limits // Annals of Mathematical Statistics. 1942. Vol. 13. P. 400–409.
8. Cacuci D. G., Sensitivity and Uncertainty Analysis, theory. Vol. 1. Chapman & Hall / CRC, 2003.
9. Hofer E. Sensitivity analysis in the context of uncertainty analysis for computationally intensive models // Computer Physics Communications. 1999. Vol. 117. P. 21–34.

10. Tarantola S., Gatelli D., Mara T. A. Random balance designs for the estimation of first order global sensitivity indices // Reliability Engineering and System Safety. 2006. Vol. 91. P. 717–727.
11. Kloos M., Hofer E. SUSA Version 3.2. User's guide and tutorial, GRS, Garching, 1999.
12. SIMLAB 2.2 Reference Manual, European Commission, Institute for Protection and Security of Citizens // <http://simlab.jrc.cec.eu.int/>

### Sutrupinimai

GRS – Vokietijos kompanija (Gesellschaft für Anlagen und Reaktorsicherheit)

SRK – standartizuotas regresijos koeficientas

RBMK – rusiška abreviatūra (Didelės galios kanalinis reaktorius)

SUSA – programinė įranga (System for Uncertainty and Sensitivity Analysis)

Vytis Kopustinskas, Robertas Alzbutas, Juozas Augutis

### STATISTICAL METHODS OF UNCERTAINTY AND SENSITIVITY ANALYSIS FOR MATHEMATICAL MODEL OUTPUT

#### Summary

Processes and phenomena in various fields of science are often analysed by mathematical models. Recently mathematical models are applied not only in physical and technological sciences, but also in biology, pharmacy and other sciences previously known as experimental. However, an extensive use of mathematical models and computer codes offers new problems and challenges. One of such challenges is effective evaluation of model output uncertainty and sensitivity analysis. The main aim of the paper is to overview the statistical methods that are available for uncertainty and sensitivity analysis and to indicate their strengths and weaknesses.

**Key words:** mathematical models, uncertainty of results, statistical analysis, indices of parameters sensitivity, coefficient of regression

Витис Копустинскас, Робертас Алзбутас, Юозас Аугутис

### СТАТИСТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ПАРАМЕТРОВ И НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ РЕЗУЛЬТАТОВ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

#### Резюме

Процессы и явления в разных областях науки часто анализируются с использованием математических моделей. Последние широко применяются не только в физических или технологических науках, но также в биологии, фармакологии и в других науках, которые ранее считались исключительно экспериментальными. Однако широкое использование математических моделей и компьютерных кодов выявляет и новые проблемы. Одной из таких проблем являются эффективная оценка неопределенности результатов математической модели и анализ чувствительности параметров. Целью данной статьи является обзор статистических методов, используемых при анализе чувствительности параметров и неопределенности результатов математических моделей.

**Ключевые слова:** математические модели, неопределенность результатов, статистический анализ, индексы чувствительности параметров, коэффициенты регрессии