

多學科優化方法和穩健性分析的方式

Feb 2024, 安矽思台灣

第一章 引言

在工業產品的虛擬開發中，優化和穩健性分析已成為重要工具。在參數優化中，通過數學算法系統地修改優化變量，以改進現有設計或尋找全局最優解。設計變量由其下限和上限或若干可能的離散值定義。在實際的工業優化問題中，設計變量的數量往往非常大。不幸的是，隨著設計變量數量的增加，數學優化算法的效率會下降。因此，一些方法僅限於中等數量的變量，如基於梯度的方法和適應性響應面方法。借助敏感性分析，設計者確定對優化目標可能改進最大的變量。基於這種識別，設計變量的數量可能會大幅減少，從而可以進行高效的優化。除了關於重要變量的信息外，敏感性分析可能有助於決定優化問題是否適當地提出，以及數值CAE求解器的行為是否符合預期。

尋找更好設計或計算“最佳”設計的現代方法必須引入所有可用的工程知識，並自動化多學科優化過程。通過將設計標準指定為目標和約束，並用優化參數指定所有可能設計的空間，可以定義數值優化的框架。定義多學科優化問題的一部分挑戰將是不同設計組之間關於衝突目標、固定標準或加權妥協目標函數的溝通。因此，必須在優化過程中考慮非線性的程度。因為這個原因，所得到的優化問題可能變得非常嘈雜，對設計變更非常敏感，或者對數學函數分析來說條件不良（非可微、非凸、不光滑）。

這就定義了現代優化工具的要求。必須連接任意求解器，為平滑以及非平滑甚至不良提出的問題提供優化策略。除了找到最佳設計的問題外，對穩健性的評估，即由於結構反應，設計變量不可避免的波動的敏感性，變得越來越重要。經常優化設計很容易受到參數的小（有時是隨機的）波動的影響。這種現象可能由於結構中的系統不穩定性，如分叉問題而發生。設計的穩健性可以通過基於隨機生成的設計樣本集進行的系統性擾動分析來檢查。對樣本集的統計分析允許評估優化設計的穩健性。

第二章 敏感性分析

根據定義，敏感性分析是研究模型輸出的不確定性如何定性或定量地分配給模型輸入中的不同變化來源。為了量化這種貢獻，基於方差的方法非常合適。利用這些方法，可以直接量化隨機輸入變量所引起的輸出方差的比例。基於方差的敏感性分析也非常適合作為優化的前處理工具。通過將連續優化變量表示為均勻分佈，而不考慮變量間的交互作用，基於方差的敏感性分析可以量化優化變量對可能改進模型響應的貢獻。與基於局部導數的敏感性方法相比，基於方差的方法根據定義的變量範圍量化貢獻。

不幸的是，足夠準確的基於方差的方法需要巨大的數字計算工作，因為需要大量的模擬運行。因此，通常使用元模型來代表模型響應，這些模型響應以模型輸入的代理函數表示。然而，有許多元模型方法可供選擇，並且通常不清楚哪一種方法最適合哪種問題。元模型的另一個缺點是它限制了輸入變量的數量。由於所謂的“維數的詛咒”，所有元模型類型的近似質量都會隨著維數的增加而急劇下降。因此，需要大量的樣本來以足夠的準確度表示高維問題。為了克服這些問題，Dynardo開發了最佳預測的元模型（Most and Will 2008）。在這種方法中，使用一個客觀且模型獨立的質量度量——預測係數——來確定最佳的輸入變量子空間以及最佳的元模型。在接下來的章節中，通過討論現有的其他敏感性分析方法，解釋了這種程序的必要性。在詳細介紹了MOP概念後，通過與常見的元模型方法（如克里金和神經網絡）的比較，闡明了這種方法的優勢。



Figure 2.1: Flowchart of optiSLang sensitivity analysis

在圖2.1中顯示了optiSLang敏感性分析的一般流程：在定義設計變量和模型響應後，通過實驗設計或抽樣方法掃描設計空間。這些樣本由求解器評估，並為每個設計確定模型響應。為每個模型響應構建近似模型並評估其質量。最後，通過使用近似模型估計基於方差的敏感性指數。

2.1 掃描輸入變量的空間

為了進行全局敏感性分析，需要通過离散實現來掃描設計變量的空間。每個實現是屬於指定輸入的一組值。作為設計探索，通常應用確定性的實驗設計 (Designs of Experiments · DoE) (Myers和Montgomery · 2002年)。這些設計方案主要基於樣本的規則排列，如全因子設計。通常情況下，樣本數量隨著維度的增加呈指數增長。分數因子設計只使用全因子樣本的一部分，但每個方向的級數是有限的。圖2.2展示了一些典型的DoE方案。中心複合設計除了2k全因子設計點外，還包括每個超立方體表面的中點。D-最佳設計是為了用最佳準確度表示線性或二次函數而生成的。關於經典DoE方案的更多細節，也可以在optiSLang中找到 (Myers和Montgomery · 2002年)。

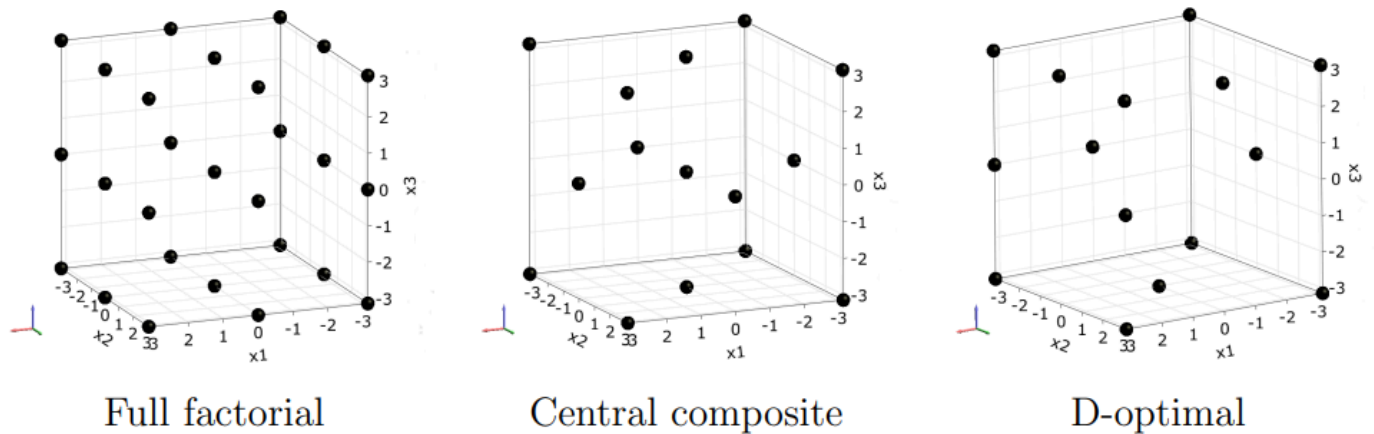


Figure 2.2: Classical Design of Experiment schemes

作為確定性設計探索方法的替代方案，可以應用隨機抽樣方案。一個非常常見的方法是隨機抽樣，稱為蒙特卡羅模擬 (Monte Carlo Simulation · MCS)。對於設計探索，假設設計變量遵循給定的下限和上限的均勻分佈。隨機樣本是在給定的設計空間中獨立生成的。如果只使用少量樣本，通常可以在MCS抽樣集中觀察到群落和空洞，如圖2.3所示。更關鍵的是輸入變量之間不期望的相關性的出現。這些相關性可能對估計的敏感性度量產生重要影響。

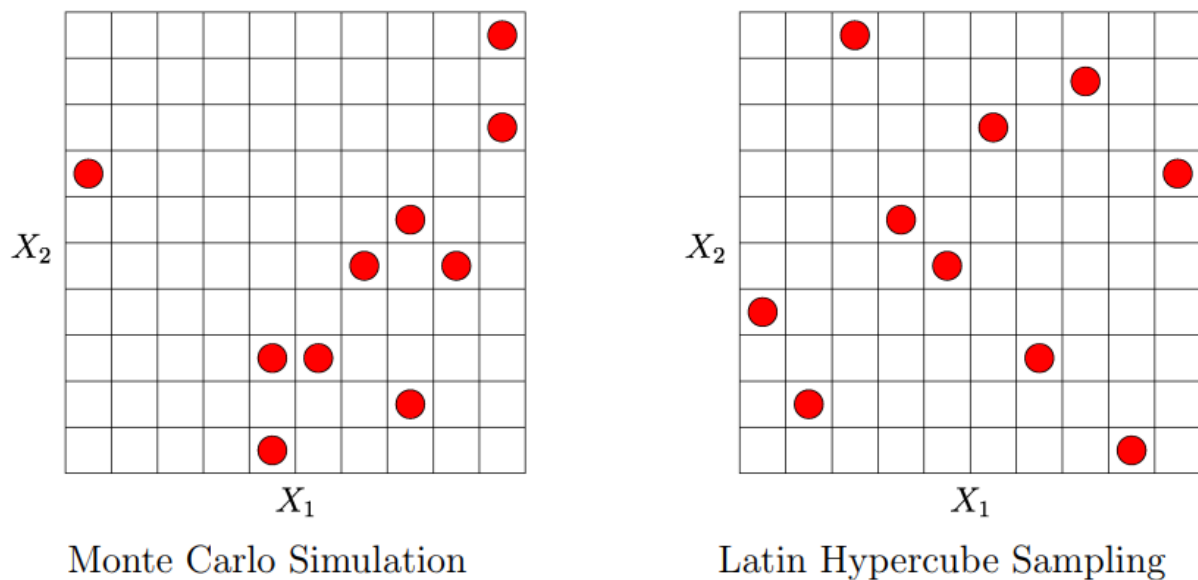


Figure 2.3: Stochastic sampling schemes

為了克服這些問題，optiSLang提供了優化的拉丁超立方抽樣 (Latin Hypercube Sampling · LHS) (McKay Beckman和Conover · 1979年)，其中即使對於少量樣本，輸入分佈和指定的輸入相關性也能非常準確地表示。在標準拉丁超立方方法中，通過使用 (Iman和Conover · 1982年) 的方法來執行不期望的相關性的最小化。此外，還提供了高級拉丁超立方抽樣 (Advanced Latin Hypercube Sampling · ALHS)，其中通過隨機演化策略最小化相關性錯誤 (Hungtington和Lyrintzis · 1998年)。如果輸入變量的數量少於50，則推薦使用此方法。

與拉丁超立方抽樣相比，確定性設計方案有兩個主要缺點：由於在增加模型維度時所需樣本數量迅速增加，它們僅限於少量變量。此外，減少輸入數量並不提高從樣本中獲得的信息，因為每個維度中只使用兩個或三個層次。這在圖2.4中有所說明。在這個圖中，評估了一個具有

一個主要變量和四個幾乎不重要變量的非線性函數。使用LHS，可以在縮減空間中非常好地表示非線性。在全因子設計的情況下，每個方向包含三個層次，縮減空間中再次只剩下三個位置，維度的降低不允許更好地表示模型響應。

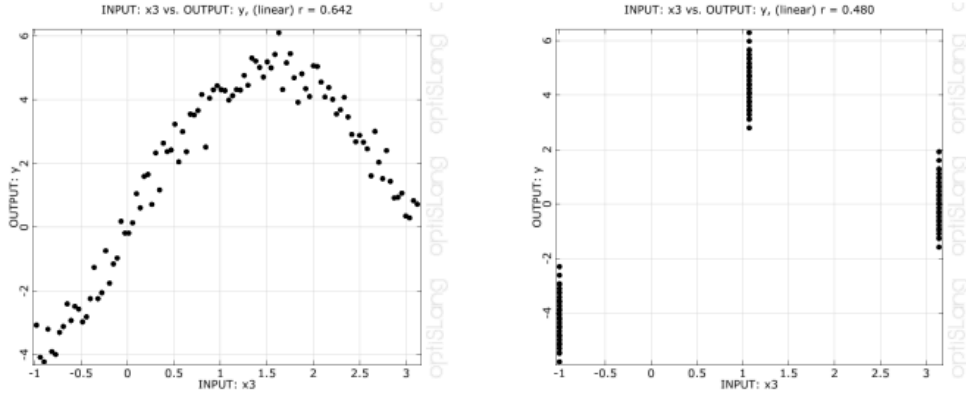


Figure 2.4: Dimension reduction for a nonlinear function with five inputs based on Latin Hypercube Sampling (left) with 100 samples and full factorial design (right) with $3^5 = 243$ samples

2.2.1 一階和總效應敏感性指數

假設一個模型有一個標量輸出 Y ，作為一組給定的 m 個隨機輸入參數 X_i 的函數：

$$Y = f(X_1, X_2, \dots, X_m) \quad (2.1)$$

一階敏感性指數定義為：

$$S_i = \frac{V(Y|X_i)}{V(Y)} \quad (2.2)$$

其中 $V(Y)$ 是模型輸出的無條件方差，而 $V(Y|X_i)$ 是僅由 X_i 的變化所導致的 Y 的方差。

由於一階敏感性指數僅測量每個變量的獨立影響，因此需要擴展以包括更高階的耦合項。因此，引入了總效應敏感性指數：

$$ST_i = 1 - \frac{V(Y|X_{\sim i})}{V(Y)} \quad (2.3)$$

其中 $V(Y|X_{\sim i})$ 是由所有模型輸入（不包括 X_i ）引起的 Y 的方差。

為了估計一階和總效應敏感性指數，矩陣組合方法非常常見（Saltelli等人，2008）。這種方法對每個變量使用新的抽樣集來計算條件方差。為了獲得一定的準確度，這個過程通常需要對每個估計的條件方差進行1000多個樣本。因此，對於變量數量巨大且求解器調用耗時的模型，這種方法無法有效地應用。

2.2.2 相關係數

相關係數是兩個隨機變量 X 和 Y 之間的標準化共變數：

$$\rho(X, Y) = \frac{\text{COV}(X, Y)}{\sigma_X \sigma_Y} \quad (2.4)$$

其中 $\text{COV}(X, Y)$ 是共變數， σ 是標準偏差。這個量，被稱為線性相關係數，測量兩個變量之間線性關係的強度和方向。它可以從給定的抽樣集估計如下：

$$\rho(X, Y) \approx \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \left(\frac{(x_i - \hat{\mu}_X)(y_i - \hat{\mu}_Y)}{\hat{\sigma}_X \hat{\sigma}_Y} \right) \quad (2.5)$$

其中 N 是樣本數， x_i 和 y_i 是樣本值， $\hat{\mu}_X$ 和 $\hat{\sigma}_X$ 分別是平均值和標準偏差的估計值。估計的相關係數在其值接近零時變得不準確，可能會錯誤地剔除表面上不重要的變量。

如果兩個變量有強烈的正相關，相關係數接近一。對於強烈的負相關， ρ 接近負一。平方相關係數可以被解釋為一階敏感性指數，假設存在線性依賴。線性相關係數的缺點是它只假設線性依賴。基於估計的係數僅，無法判斷這種假設的有效性。假設更高階依賴或使用等級轉換的相關係數僅部分解決這個問題。此外，輸入變量之間的交互作用經常很重要，這些交互作用不能用線性和更高階的相關係數來量化。

我們可以總結說，儘管相關係數可以從單一抽樣集簡單估計，但它只能量化假設依賴性的一階效應，而沒有對這種假設的任何質量控制。

2.3 基於多項式的敏感性分析

2.3.1 多項式回歸

一個常用的近似方法是多項式回歸，其中模型響應通常由線性或二次階的多項式基函數近似，有無耦合項均可。對於給定的輸入參數集 \mathbf{X} 的輸出 y_i ，可以表示為近似值 \hat{y}_i 和誤差項 e_i 之和：

$$y(x_i) = \hat{y}(x_i) + \epsilon_i = p^T(x_i)\beta + \epsilon_i, \quad (2.6)$$

其中 $\mathbf{p}(\mathbf{x})$ 是多項式基，

$$p^T(x) = [1 \quad x_1 \quad x_2 \quad x_3 \quad \dots \quad x_1^2 \quad x_2^2 \quad x_3^2 \quad \dots \quad x_1x_2 \quad x_1x_3 \quad \dots \quad x_2x_3 \quad \dots] \quad (2.7)$$

且 β 是包含未知回歸係數的向量。這些係數通常是從給定的抽樣支撐點集合中估計出來的，假設在每個點上的誤差是獨立且方差相等。使用矩陣表示法，得出的最小二乘解為：

$$\hat{\beta} = (\mathbf{P}^T \mathbf{P})^{-1} \mathbf{P}^T \mathbf{y} \quad (2.8)$$

其中 \mathbf{P} 是包含支撐點樣本基多項式的矩陣，而 \mathbf{y} 是支撐點值的向量。

附註

這裡是公式的解釋：

- $y(x_i)$ 是在點 x_i 的實際目標函數值。
- $\hat{y}_i(x_i)$ 是在點 x_i 的逼近目標函數值。
- ϵ_i 是實際值與逼近值之間的誤差。
- $p^T(x_i)$ 是基函數向量在 x_i 評估後的轉置。
- β 是未知參數的向量，我們需要通過最小化誤差 ϵ_i 來求解它。

2.3.2 決定係數

決定係數 (CoD) 可以用來評估多項式回歸模型的近似質量。這個度量被定義為由近似所解釋的變異量相對於總變異量的比例 (Montgomery 和 Runger 2003)。

$$R^2 = \frac{SS_R}{SS_T} = 1 - \frac{SS_E}{SS_T}, \quad 0 \leq R^2 \leq 1 \quad (2.9)$$

其中 SS_T 等同於輸出 Y 的總變異， SS_R 代表由回歸所導致的變異，而 SS_E 衡量未被解釋的變異，

$$SS_R = \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2, \quad SS_T = \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2, \quad SS_E = \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (2.10)$$

如果 CoD 接近一，多項式近似代表了對支撐點值的小誤差。然而，如果支撐點的數量等同於係數 p 的數量，那麼多項式模型會完美地擬合這些支撐點，此時，CoD 將等於一，不考慮真正的近似質量。為了懲罰這種過度擬合，調整後的決定係數被引入 (Montgomery 和 Runger 2003)

$$R_{adj}^2 = 1 - \frac{N-1}{N-p} (1 - R^2) \quad (2.11)$$

然而，對近似質量的過估無法完全避免。

附註

N 代表資料點的總數，即樣本的大小； p 是模型中獨立變量的數量，它也包括多項式項數 (比如線性、二次、交互項等)。

為了證明這個陳述，進行了一個非線性分析功能的調查。五個獨立且均勻分布的輸入變量的函數如下所示

$$Y = 0.5X_1 + X_2 + 0.5X_1X_2 + 5.0 \sin(X_3) + 0.2X_4 + 0.1X_5, \quad -\pi \leq X_i \leq \pi \quad (2.12)$$

五個輸入對總變異的貢獻分別為： X_1 : 18.0%， X_2 : 30.6%， X_3 : 64.3%， X_4 : 0.7%， X_5 : 0.2%。這表示，三個變量 X_1 、 X_2 和 X_3 是最重要的。

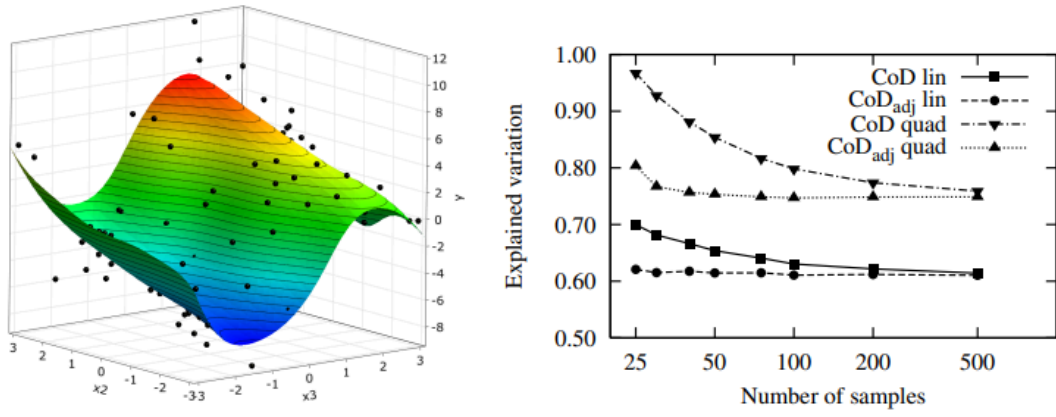


Figure 2.5: Subspace plot of the investigated nonlinear function (Eq. 2.12) and convergence of the CoD measures with increasing number of support points

圖 2.5 顯示了標準 CoD 的線性和二次響應曲面的收斂，當樣本數量相對較少時，可以看出近似質量的強烈過估。即使樣本數量較多時，調整後的 CoD 也表現出相似的行為。這個事實限制了 CoD 只適用於支撐點數量相對於多項式係數數量時的情況。然而，在工業應用中，這通常不是情況。CoD 度量的另一個缺點是它限制於多項式回歸。對於其他局部近似模型，如插值 Kriging，這個度量可能接近或等於一，但近似質量可能並不理想。然而，在工業應用中，這通常不是情況。另一個 CoD 測量的缺點是它僅限於多項式回歸。對於其他局部近似模型，如插值克里金法，該測量可能等於或接近於一，但近似質量可能很差。

2.3.3 重要性係數

重要性係數 (Col) 是由 Dynardo 開發的，用於利用 CoD 測量來量化輸入變數的重要性。基於包括所有調查變數的多項式模型，單一變數 X_i 對於響應 Y 的 Col 定義如下

$$CoI(X_i, Y) = CoI_{Y, X_i} = R_{Y, X}^2 - R_{Y, X \sim i}^2 \quad (2.13)$$

其中 $R_{Y, X}^2$ 是包括 \mathbf{X} 中所有變數的全模型的 CoD，而 $R_{Y, X \sim i}^2$ 是簡化模型的 CoD，該模型中移除了屬於 X_i 的所有線性、二次和交互作用項。在這兩種情況下，都使用相同的取樣點集。如果變數的重要性低，其 Col 接近於零，因為全模型和簡化的多項式回歸模型具有相似的質量。Col 相當於單一輸入變數相對於的解釋變異，因為 CoD 量化了多項式近似的解釋變異。因此，它是方程 2.3 中給出的總效應敏感度測量的估計。如果多項式模型包含重要的交互作用項，則 Col 值的總和應大於全模型的 CoD。

由於基於 CoD，Col 也僅限於多項式模型。如果 CoD 過高估計了總解釋變異，Col 也可能對單個變數的方差貢獻給出錯誤估計。然而，與相關係數相比，Col 可以處理包括輸入變數交互作用在內的線性和二次依賴。此外，可以評估多項式基礎的適用性。儘管如此，由於高維問題所需的大量樣本，通常無法使用完整的二次多項式估計 Col 值。

2.4 最佳預測的元模型

2.4.1 移動最小平方法近似

在移動最小平方法 (MLS) 近似法中 (Lancaster 和 Salkauskas 1981)，通過引入位置依賴的徑向加權函數來獲得回歸的局部特性。MLS 近似可被理解為多項式回歸的擴展。同樣地，基函數也可以包含任何類型的函數，但通常只使用線性和二次項。近似函數定義為

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{a}(\mathbf{x}) \quad (2.14)$$

其中變化的 ("移動") 的係數 $\mathbf{a}(\mathbf{x})$ 與多項式回歸的常數全局係數相反。最終近似函數表示為

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})(\mathbf{P}^T\mathbf{W}(\mathbf{x})\mathbf{P})^{-1}\mathbf{P}^T\mathbf{W}(\mathbf{x})\mathbf{y} \quad (2.15)$$

其中對角矩陣 $\mathbf{W}(\mathbf{x})$ 包含了與每個支持點相對應的加權函數值。引入了距離依賴的加權函數 $w = u(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|)$ ，其中最常用的是著名的高斯加權函數

$$w_{\exp}(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2}{\alpha^2 D^2}\right) \quad (2.16)$$

影響半徑 D 直接影響近似誤差，而 α 是一個數值常數。適當選擇這個量可以有效地平滑噪聲數據。在圖 2.6 中展示了局部加權原則和平滑效應。

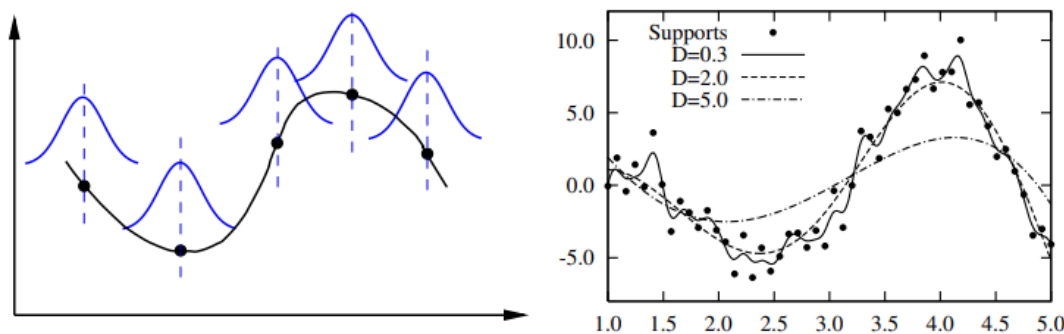


Figure 2.6: Local weighting of support point values (left) and influence of the influence radius D on the smoothing of the MLS approximation function (right)

MLS方法的優勢在於，在評估近似點之前不需要訓練。在每個點，只需計算加權因子和局部多項式係數即可。這使得這種方法與其他近似技術相比非常快速。

附註

假設我們有一組數據點，這些點在二維空間中分布，表示某種現象的變化，比如一天中氣溫的變化。我們的數據點可能是這樣的：

時間 (小時)	氣溫 (攝氏度)
0	15
1	15.5
2	16
3	16.5
4	17
...	...

我們希望使用一個函數來逼近這些數據點，以便我們可以預測任何給定時間的氣溫。

在MLS逼近中，我們首先選擇基函數 $p(x)$ 。為了簡單起見，讓我們使用線性和二次基函數：

$$p(x) = \begin{bmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{bmatrix}$$

接下來，我們需要定義一個徑向權重函數，它將決定數據點如何根據它們與 x 的距離被加權。這個權重函數通常是距離的函數，例如使用高斯函數或其他類似的函數。

現在，對於每個要逼近的點 x （在這個例子中， x 是時間），我們計算 $a(x)$ ，這是一組使加權最小平方誤差最小化的係數。**這涉及到解一個最優化問題**，其中我們尋找最佳的 $a(x)$ ，以使近似曲線在給定的 x 值附近的數據點上有最小的加權誤差。

在找到 $a(x)$ 後，我們可以計算 $\hat{Y}(x)$ ，這是氣溫的預測值。這個值是通過將基函數向量 $p(x)$ 與係數向量 $a(x)$ 相乘得到的。在這個具體的例子中，這可能意味著：

$$\hat{Y}(x) = [1, x, x^2] \begin{bmatrix} a_0(x) \\ a_1(x) \\ a_2(x) \end{bmatrix} = a_0(x) + a_1(x)x + a_2(x)x^2$$

這裡的 $\hat{Y}(x)$ 會給出我們在時間 x 的氣溫預測。每個 $a_i(x)$ 係數是根據加權最小平方計算出來的，其中權重是基於距離 x 的徑向距離函數。

這種方法的優點是它允許局部數據點對逼近結果有更大的影響，從而在數據點密集的地方獲得更好的逼近，並允許逼近曲線更加靈活地適應數據的局部變化。

2.4.2 預測系數

在(Most 和 Will 2008)中，提出了一種模型獨立的測量以評估模型品質的方法。這個測量是預測系數 (CoP)，其定義如下

$$CoP = 1 - \frac{SS_E^{Prediction}}{SS_T} \quad (2.17)$$

其中 $SS_E^{Prediction}$ 是預測誤差的平方和。這些誤差是基於交叉驗證估算的。在交叉驗證過程中，支持點集被映射到 q 個子集。然後通過從支持點集中移除子集 i 並使用剩餘點集來建立近似模型。這意味著模型品質僅在那些未用於建立近似模型的點上估計。由於預測誤差而非擬合被使用，這種方法適用於回歸和插值模型。

評估交叉驗證子集所需的額外數值工作通常在5至10集之間，為了計算CoP而額外付出。然而，對於多項式回歸和移動最小平方法，這額外的的工作量仍然很小，因為不需要複雜的訓練演算法。對於神經網路、克里金法甚至支持向量回歸等模型方法，時間消耗大的訓練演算法必須對每個子集組合進行。

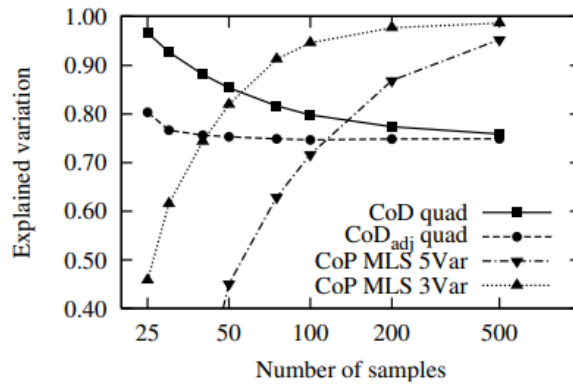


Figure 2.7: Convergence of the CoP measure by using MLS approximation compared to the polynomial CoD measure

在圖2.7中，CoP值對於MLS近似的非線性耦合函數在方程2.12的比較中顯示了收斂。圖表顯示CoP值並未像CoD那樣對少數樣本的近似品質進行過估計。MLS近似的影響半徑是通過最大化CoP測量來找到的。如圖2.7所示，近似品質的收斂速度比模型中使用的三個最重要變數的其他近似技術要快得多。

2.4.3 最佳預後的元模型

如前一節所展示，如果從模型中移除不重要的變數，近似模型的預測品質可能會提高。這一理念被採用在 (Most 和 Will 2008) 提出的最優預測元模型 (MOP) 中，該模型基於尋找最優輸入變數集合以及最適合的近似模型 (多項式或具有線性或二次基底的MLS)。由於CoP測量的模型獨立性和客觀性，它非常適合比較不同子空間中的不同模型。在圖2.8中，為分析性非線性函數示例展示了所有可能子空間和所有可能近似模型的CoP值。圖表顯示存在一個最佳折衷，即可用資訊、支持點與模型複雜度之間的關係，即輸入變數的數量。僅使用三個主要重要變數的MLS近似，其CoP值顯著高於其他組合。然而，對於具有許多輸入變數的更複雜應用，需要測試大量的近似模型。為了減少這項工作，在 (Most 和 Will 2008) 中提出了先進的過濾技術，這些技術減少了必要的模型測試次數。儘管如此，大量輸入要求非常快速且可靠地構建近似模型。出於這個原因，多項式和MLS由於其快速評估而被優先選擇。

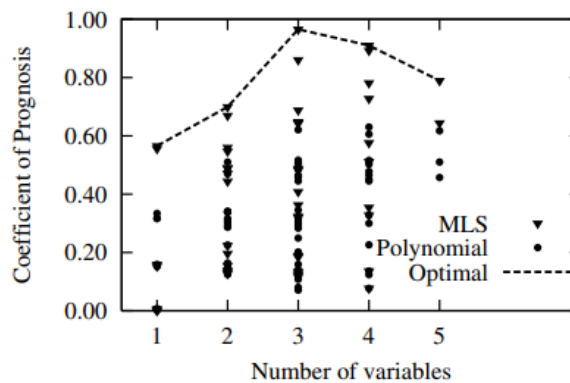


Figure 2.8: CoP values of different input variable combinations and approximation methods obtained with the analytical nonlinear function

作為MOP的結果，我們獲得了一個包含最重要變數的近似模型。基於這個元模型，使用第2.2.1節提出的總效應敏感度指數來量化變數的重要性。單個輸入變數的方差貢獻通過近似模型估計的CoP和總效應敏感度指數的乘積來量化

$$CoP(X_i) = CoP \cdot S_T^{MOP}(X_i) \quad (2.18)$$

由於輸入變數之間的交互作用可以通過MOP方法來表示，因此在敏感度指數中自動考慮了這些交互作用。如果單個指數之和顯著大於總CoP值，這樣的交互作用項具有重要意義。

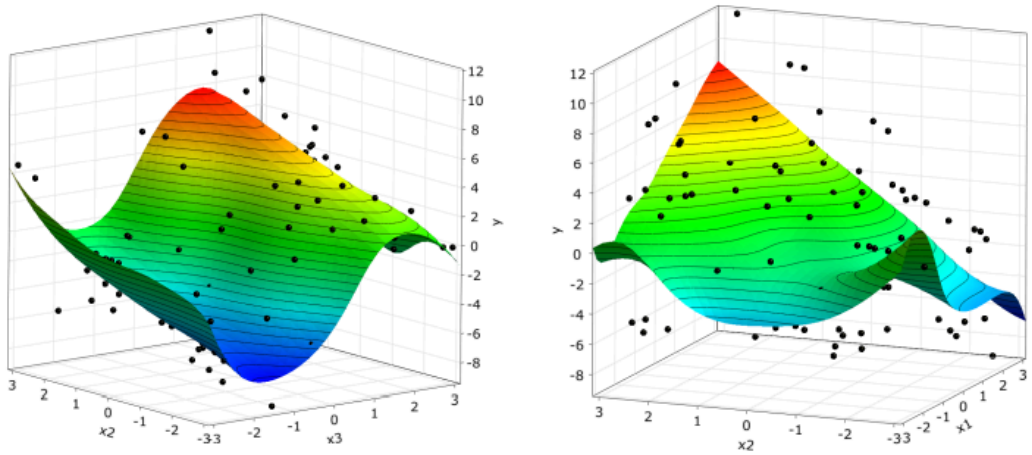


Figure 2.9: X_2 - X_3 and X_1 - X_2 subspace plots of the MOP of the nonlinear analytical function given in Eq. (2.12)

除了量化變數重要性外，MOP還可用於可視化2D和3D子空間中的依賴關係。這幫助設計者理解並驗證求解模型。在圖2.9中顯示了分析測試函數的MOP的兩個子空間圖。在 X_2 - X_3 和 X_1 - X_2 子空間圖中，可以觀察到正弦函數行為和耦合項。額外的參數研究，例如全域最佳化，也可以直接在MOP上執行。儘管如此，應該使用單次求解運行來驗證這種參數研究或最佳化的最終結果。

2.5 與其他近似與選擇方法的比較

本節中，我們將MOP方法與其他近似與變數選擇方法進行比較。在使用先進的元模型之前，我們先利用多項式和移動最小平方法調查測試案例。第2.3.2節中介紹的分析性非線性函數，通過不同數量的輸入變數進行研究：僅三個主要重要變數、所有五個變數，以及其他沒有任何貢獻的變數。在圖2.10中，展示了使用100個支持點和100個測試點所獲得的多項式和MLS近似的解釋變異，並根據變數總數進行了比較。

由於所謂的“維度的詛咒”，隨著維度的增加，近似品質迅速下降。如果應用MOP，則會保留重要的變數，並在最佳子空間中構建近似，即使在更大的輸入維度下也能獲得高近似品質。

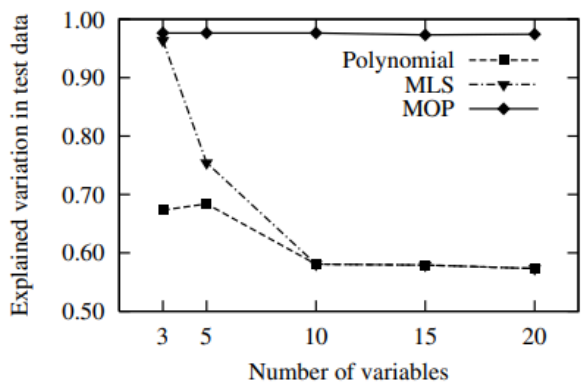


Figure 2.10: Approximation quality for polynomial and MLS approximation compared to the MOP approach for the analytical function with increasing number of input variables

在下一步，我們研究了克里金近似法，也就是所謂的高斯過程模型。在圖2.11中，顯示了對於測試函數的普通克里金方法的近似品質。解釋變異的顯著下降與MLS方法類似。此外，還研究了支持向量回歸（SVR）和人工神經網絡（ANN）。這些方法的詳細介紹可以在(Roos等人，2007)中找到。所獲得的結果也在圖2.11中繪製出來，展示了與克里金和MLS相似的行為。所有呈現的結果表明，複雜元模型方法的使用並不能克服維度的詛咒。然而，MOP使得可以使用快速和可靠的近似方法來確定最佳的變數子空間。在大多數情況下，這種變數減少導致了顯著更好的近似品質。

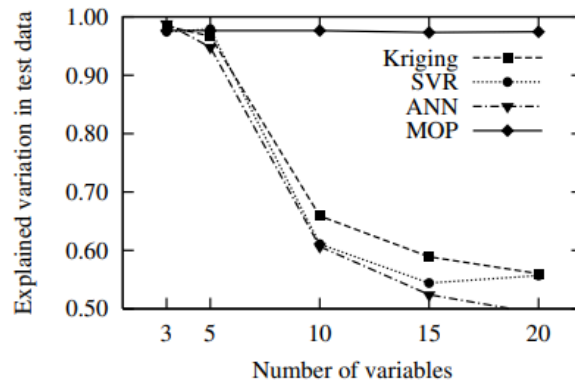


Figure 2.11: Approximation quality for Kriging, Support Vector Regression (SVR) and Artificial Neural Networks (ANN) compared to the MOP approach for the analytical function

最後，將MOP方法與多項式逐步選擇方法進行比較。在這種方法中，通過不同的重要性標準選擇多項式係數，以檢測重要的變數。作為比較，使用了(MATLAB 2010)中的最新實現。在這個實現中，根據給定的多項式程度，通過F檢驗統計選擇重要的多項式係數。圖2.12中給出的結果表明，選擇程序只適用於線性多項式基礎。使用完整的二次基礎時，選擇的係數數量急劇增加，近似品質下降。這個例子闡明了在MOP方法內部應用的基於預測的變數選擇的力量。

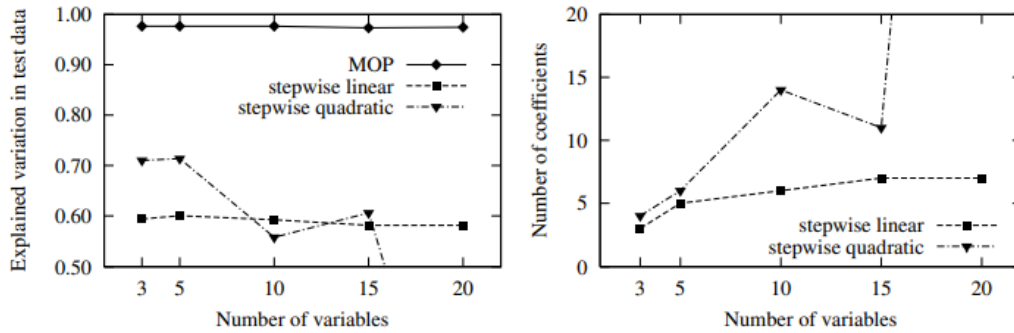


Figure 2.12: Approximation quality and variable selection of MATLAB's stepwise regression approach compared to the MOP results