



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem  
Villamosmérnöki és Informatikai Kar

**Bingler Arnold**

Érzékenységvizsgálat az elektromágneses  
részecske mentes anyagvizsgálatban modern  
statisztikai módszerekkel

TDK dolgozat

Konzulens:

Dr. Bilicz Sándor

Szélessávú Hírközlés és Villamosságtan Tanszék

2017

# Tartalomjegyzék

<b>1. Bevezetés</b>	<b>4</b>
<b>2. Roncsolásmentes anyagvizsgálat</b>	<b>6</b>
2.1. Általános leírás . . . . .	6
2.2. Elektromágneses elvű vizsgálatok . . . . .	6
<b>3. Érzékenységvizsgálat</b>	<b>9</b>
3.1. Bevezetés . . . . .	9
3.2. Sobol-indexek . . . . .	10
3.3. Sobol indexek kiterjesztése . . . . .	13
3.3.1. Vektor értékű kimenetek . . . . .	13
3.3.2. Összefüggő bemeneti tartományok . . . . .	18
<b>4. Helyettesítő modellek</b>	<b>21</b>
4.1. Általános felépítés . . . . .	21
4.2. Polinomiális káosz sorfejtés . . . . .	22
4.3. Sparse grid . . . . .	24
<b>5. Numerikus példák</b>	<b>27</b>
5.1. Fluxusszórás teszt példa . . . . .	27
5.2. Örvényáramú teszt példa . . . . .	28
<b>6. Összefoglalás</b>	<b>35</b>

# Kivonat

A közlekedési eszközök, nagy értékű ipari berendezések biztonságos és gazdaságos üzemeltetéséhez alapvető fontosságú az őket felépítő szerkezetek, alkatrészek integritásának megállapítása és a még hátralevő élettartamuk megítélése. Ezen kérdéseket számos tényező befolyásolhatja, amelyek közül igen fontos az esetlegesen bennük található anyaghibák méretének és helyének minél pontosabb ismerete. Az iparban erre a célra széles körben alkalmaznak ún. roncsolásmentes anyagvizsgálati eljárásokat. Az elektromágneses elvű vizsgálatoknál az anyagjellemzőktől függően rendszerint két módszert alkalmaznak. Ferromágneses anyagoknál a mágneses fluxusszórást, míg a nem feltétlenül ferromágneses, de mindenképpen vezető anyagoknál az örvényáramú módszert (eddy-current testing, ECT) használják. Az anyaghiba jelenléte előbbinél a permeabilitás, míg utóbbinál a vezetőképesség lokális megváltozását okozza, ami egy jól megválasztott, mérhető kimeneti jel (pl. impedancia) változásán keresztül kimutatható.

A kimeneti jel ugyanakkor nem csak anyaghiba jelenlétében változhat. A konfiguráció valamennyi paraméterének (pl. mérési elrendezés, nem pontosan ismert anyagjellemzők, stb.) ingadozása befolyásolhatja a mért jel értékét, tehát bizonyos esetekben meghamisíthatja az eredményeket. Így az eljárás optimalizálásához a bemeneti paraméterek bizonytalanságainak a kimenetre gyakorolt hatását ismerni kell. Erre a problémára kínál elegáns és hatékony matematikai megoldást az érzékenységvizsgálat. Az egyik elterjedten alkalmazott technika, az ún. Sobol-indexek számításának elméleti alapjait már a 90-es években kidolgozták. A módszer alkalmazásához a vizsgált elrendezést rendszerint a bemeneti változók sok értéke mellett modellezni kell, ami bonyolult feladatok esetén igen időigényes lehet. A módszer elterjedéséhez ezért hozzájárult számos olyan matematikai eredmény, amelyekkel a számítási igény tovább csökkenthető és az eredeti definíció túlmutató, összetettebb problémák vizsgálhatók vele.

A dolgozatom célja a Sobol-indexeken alapuló érzékenységvizsgálat, valamint az ahhoz szorosan kapcsolódó legfrissebb matematikai eredmények (pl. helyettesítő modellek) bemutatása, ezek részbeni kiterjesztése saját eredményekkel, valamint illusztrálásuk az elektromágneses roncsolásmentes anyagvizsgálat témakörébe tartozó releváns tesztfeladatokon keresztül.

# Abstract

The statement of the integrity of the structures and components, and the determination of their remaining lifetime have fundamental importance in the safe and efficient operation of the means of transport and high value industrial appliances. These questions can be influenced by many parameters, of which a very important one is the determination of the accurate location and size of the possibly occurring material flaws inside them. For this purpose, the so-called non-destructive testing is widely used in industry.

In the case of the methods based on electromagnetic principle, two kinds of testing are commonly used depending on the material properties. In ferromagnetic materials the magnetic flux-leakage method, while in non-ferromagnetic, but definitely conductive materials the eddy-current testing (ECT) is used. The presence of the material flaw results in the change of the permeability or the conductivity, respectively. This can be highlighted via the deviation of a properly chosen, measurable output signal (e.g., impedance).

However, the output signal can change not only due to the defects. The fluctuation of any parameter of the configuration (e.g., measurement setup, not exactly known material properties) may influence the value of the measured signal and so distort the results in certain cases. Thus, for the optimization of the method we need to know the effect on the output signal caused by the uncertainty of the input parameters; for this problem the sensitivity analysis provides an efficient, sophisticated mathematical solution.

The calculation of the so-called Sobol-indices is a widely applied technique of which theoretical background has already been developed in the 90's. The method requires the modelling of the examined configuration at several different settings of the input variables, which can be computationally demanding in complex problems. Therefore, it could only become widespread with the help of some further mathematical tools, by which the computational time can be further reduced and more complex problems—beyond the original definition—can be examined.

The purpose of my work is to introduce the sensitivity analysis based on the Sobol indices and the related up-to-date mathematical results (e.g., surrogate models), to partly extend them with own results and to illustrate them in the scope of electromagnetic non-destructive testing via some relevant test examples.

# 1. fejezet

## Bevezetés

A szerkezeti elemek rejtett anyaghibáinak feltárására az iparban előszeretettel alkalmaznak roncsolásmentes anyagvizsgálati eljárásokat. Ezek a vizsgálatok alapvető fontosságúak ahhoz, hogy a belőlük felépített épületek, ipari berendezések műszaki állapotát, még hátralévő élettartamát meg tudjuk állapítani és azokat biztonságos körülmények között, gazdaságosan tudjuk üzemeltetni.

A mérési eljárások lényege, hogy a mintadarabban fellelhető anyaghiba lokálisan megváltoztatja annak anyagjellemzőit. Külső gerjesztés alkalmazása mellett ez az eltérés kimutatható egy jól megválasztott kimeneti jel változásán keresztül. Az anyaghiba jelenlétének a kimenetre gyakorolt hatása így általában fizikai megfontolások alapján következik, azonban a detektálás során egy ellentétes irányú kapcsolatot tételezünk fel és a kimeneti jel változásából szeretnénk következtetni az anyaghiba létezésére és egyben pozíciójára is. Az ipari alkalmazásokban a defekt pozíciójának ismerete nem mindig elegendő és valójában egy jóval erősebb állítás megfogalmazására törekszünk: az anyaghiba-rekonstrukció során a kimeneti jel alapján próbáljuk meghatározni azt a fizikai konfigurációt, amelyhez a mért értékek tartoznak, ez matematikai értelemben az inverz probléma megoldását jelenti.

A kimeneti jel ugyanakkor nemcsak anyaghiba jelenlétében változhat. A konfiguráció többi paraméterének bizonytalansága, vagy a névleges értékétől való eltérése is módosíthatja a mért értékeket. A bizonytalan paraméterek forrásai lehetnek pl. a nem pontosan ismert anyagjellemzők (pl. az anyag inhomogén viselkedése, felületi egyenetlensége) vagy a mérési elrendezés ingadozása (pl. a mérőfej távolsága a mintadarabtól). Ezek a hatások többnyire nem determinisztikus eredetűek, a figyelembe vételük ugyanakkor feltétlenül szükséges, hiszen egy ún. konfigurációs zaj formájában folyamatosan terhelik a kimeneti jelet. Ha a zaj okozta jelszintváltozás összemérhető azzal a változással, amit az anyaghiba önmagában okozna, akkor ezzel nemcsak lehetetlenné tehetik az anyaghiba-rekonstrukcióját, de magát a detektálás tényét is módosíthatják. Ezen nem determinisztikus hatások figyelembe vétele csak statisztikus úton lehetséges. A mérési eljárás köré egy olyan modellt kell felépítenünk, amelynek a bemenetei a konfiguráció és az anyaghiba

bizonytalan paraméterei és arra keressük a választ, hogy a kimeneti jel bizonytalanságát milyen mértékben okozzák az egyes bemeneti változók.

Erre a problémára kínál egy elegáns és hatékony megoldást a matematika egyik ága, az érzékenységvizsgálat. A szakirodalomban fellelhető számos módszer közül jelen dolgozatban egy olyan eljárást alkalmazunk, ami az ún. Sobol-indexek számításán alapszik. A módszer a bizonytalanságokat a kimenet varianciáján keresztül próbálja számszerűsíteni azáltal, hogy azt maradéktalanul felosztja az egyes bemeneti változók (és csoportjaik) között a hozzájárulásuknak megfelelően. A technika alkalmazásához a vizsgált elrendezést rendszerint a bemeneti változók sok értéke mellett modellezni kell és az összetartozó bemeneti-kimeneti párok (továbbiakban minták) felhasználásával érhető el az előbb említett felosztás. Emiatt szükségessé válik, hogy adott fizikai konfiguráció mellett meg tudjuk határozni a hozzá tartozó kimeneti jelet, tehát ismerjük a direkt probléma megoldását. Egy pontos modell felépítésének az ára rendszerint a nagy számítási igényben és a hosszú futási időben nyilvánul meg, ami különösen kedvezőtlen akkor, ha nagy számú mintára van szükségünk. A megoldás az ún. helyettesítő modellek alkalmazásában rejlik, amelyek a számítási modelleket egy alacsony költségű, ekvivalens algebrai formulával képesek kiváltani. Felépítésükhöz rendszerint kevesebb mintára van szükség, és miután felépültek, tetszőleges számú minta generálható a segítségükkel az érzékenységvizsgálat elvégzéséhez.

Jelen dolgozat középpontjában az elektromágneses elvű roncsolásmentes anyagvizsgálati eljárások állnak, a célja pedig az érzékenységvizsgálat bemutatása néhány, ipari szempontból releváns teszt példán keresztül. Az érzékenységvizsgálat legmodernebb eszközeiből kiindulva, azokon bizonyos kiterjesztéseket végrehajtva jutunk olyan módszerekhez, amelyek hatékonyan bizonyulnak a tesztfeladataink megoldására. Az eredmények segítségével feltérképezhetjük a bemeneti paramétereknek a kimenetre gyakorolt hatását, amivel egyszerre mind általános jellemzést adhatunk a detektálás pontosságáról és az inverz probléma megoldhatóságának elvi kérdéseiről. A 2. fejezetben egy részletesebb leírást adunk a roncsolásmentes vizsgálatokról, különös tekintettel az elektromágneses elvűekre. A 3. és 4. fejezetekben foglaljuk össze mindazon matematikai ismereteket és friss eredményeket, amik az érzékenységvizsgálat elvégzésének elméleti háttereként szolgálnak. Kitérünk arra is, hogyan lehet a Sobol-indexeken alapuló érzékenységvizsgálat eredeti definícióját kiterjeszteni a roncsolásmentes vizsgálat szempontjából fontos általánosabb esetekre is (pl. vektor értékű kimenetek egy felületi szkennelés eredményeként vagy nem független bemeneti változók kezelése). Végül az 5. fejezetben kerülnek ismertetésre a numerikus teszt példák és a hozzájuk kapcsoló eredmények, amit a 6. fejezetben az érzékenységvizsgálatból az anyagvizsgálati eljárásra vonatkozó általános következtetések levonásával zárunk.

## 2. fejezet

# Roncsolásmentes anyagvizsgálat

### 2.1. Általános leírás

Roncsolásmentesnek (Non-destructive testing—NdT) nevezzük mindazon anyagvizsgálati eljárásokat, amelyek célja a mintadarab belső szerkezetéről, rejtett hibáiról való információszerzés anélkül, hogy abban maradandó károsodást okoznának. Az iparban nagy igény van az ilyen vizsgálatokra, elegendő például az épületek, hidak szerkezeti elemeire, tartóoszlopaira vagy nagy igénybevételnek kitett berendezésekre (pl. repülőgépek turbinalapátjai) gondolni. A rejtett hibák (törés, repedés) ismeretének hiánya, műszaki állapotuk és hátralévő élettartamuk helytelen megítélése komoly károkhoz, szélsőséges esetben katasztrófákhoz vezethetnek.

Ilyen vizsgálatok elvégzésére számos lehetőség kínálkozik, a teljesség igénye nélkül megemlíthetjük, hogy létezik festékpenetrációs eljárás, ultrahanggal vagy röntgensugárral működő vizsgálat, Barkhausen-zaj mérésen alapuló eljárás valamint elektromágneses elvű vizsgálat is. Utóbbin belül kiemelendők az örvényáramú módszerek és a fluxusszórás alapú eljárások; jelen dolgozatban ezen két módszerrel foglalkozunk és ezeket részletesebben fogjuk bemutatni. Mindkét módszer közös jellemzője, hogy a hiba lokálisan megváltoztatja a mintadarab valamely elektromágneses jellemzőjét (vezetőképesség, permeabilitás), amely jól nyomon követhető a kimeneti jel változásában.

### 2.2. Elektromágneses elvű vizsgálatok

A mágneses fluxusszórás módszer (Magnetic Flux Leakage – MFL) ferromágneses, nem feltétlenül vezető anyagoknál használható és a permeabilitás lokális megváltozásán alapul. A mintadarabot állandó mágneses térrel gerjesztjük, ami létrehozható például egy permanens mágnes vagy egy egyenáramú gerjesztőtekercsrel körbevett mágnesező járom pólusai között. Egy lehetséges megvalósítás szerint a mágneset adott magasságban (amire az angol szakirodalom *lift-off*-ként hivatkozik) mozgatjuk a mintadarab felett és mérjük a mágneses fluxus változását, amely hibamentes esetben – eltolásra invariáns munkadarab

esetén (lemez, cső) – állandó kimeneti jelet eredményez. Az anyaghiba permeabilitása több nagyságrenddel is eltérhet az őt körülvevő ferromágneses anyagétól, melynek következtében a mágneses erővonalak kiszorulnak az anyaghiba belsejéből és ez lokálisan megváltoztatja az erővonalak szerkezetét. Ez a változás a levegőben fellépő mágneses indukció mérésén keresztül közvetlenül kimutatható.

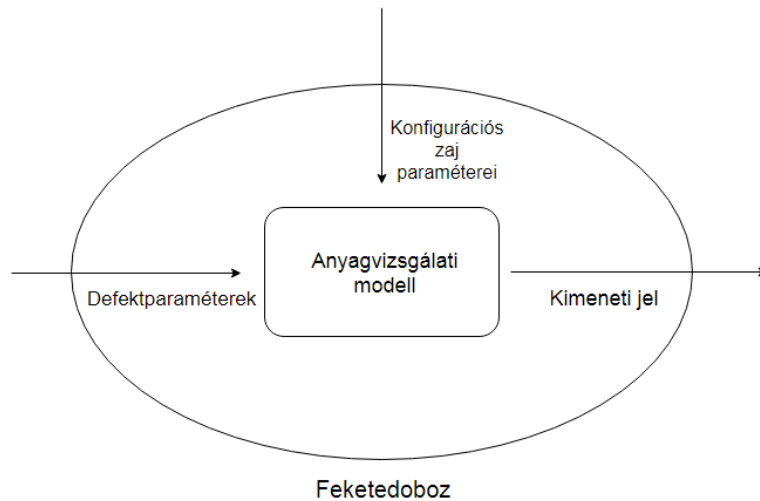
Az örvényáramú eljárások (Eddy-current Testing – ECT) mindenképpen vezető, de nem feltétlenül ferromágneses mintadarabok vizsgálatánál fordulnak elő és a vezetőképesség megváltozásán alapulnak. Ezt a technikát alkalmazzák pl. atomerőművek hőcserélőjének vizsgálatakor. A mintadarabot időben változó mágneses térrel gerjesztik egy külső forrás segítségével, ami a vezetőképes anyagban örvényáramokat indukál. Az anyaghiba az eltérő (sokszor nagyságrendekkel kisebb) vezetőképessége miatt módosítja az örvényáramú pályák szerkezetét, amiről információt hordoz az általuk indukált mágneses tér. Igen gyakori, hogy a gerjesztés időharmonikus és ekkor a gerjesztő forrás lehet egy mérőtekerecs, amelynek impedanciájának változásán keresztül észlelhető az anyaghiba jelenléte.

A detekciót nehezítheti, ha a mérés során egyéb, nem az anyaghibával kapcsolatos paraméterek is megváltoznak, amik ugyanúgy képesek módosítani a kialakuló elektromágneses teret. Tipikusan ilyen a gerjesztőtekerecs vagy mágnes távolsága a mintadarabtól, de módosító tényező lehet az anyag felületének egyenetlensége is. A mintadarab inhomogenitásából adódóan az anyagjellemzők változását is tévesen anyaghibaként lehet detektálni. Mindezekre tekinthetünk úgy, hogy a mérés során a kimeneti jelet zaj terheli, amit a továbbiakban konfigurációs zajnak nevezünk.

Említettük, hogy az érzékenységvizsgálat elvégzéséhez ismerni kell a direkt probléma megoldását, azaz egy adott fizikai konfiguráció mellett meg kell tudnunk határozni a kialakuló elektromágneses teret. Ez a gyakorlatban numerikus úton, a Maxwell-egyenletek diszkrétizálásán keresztül történik, pl. a végeselem módszer vagy az integrálegyenlet módszer segítségével. Ezen módszereket elérhetjük általános célú térszámító szoftverekben (pl. Comsol<sup>®</sup>, CST Studio Suite<sup>®</sup>), de bizonyos esetekben célszerűbb kifejezetten az adott problémára optimalizált térszámító kód elkészítése. A numerikus módszerek igen pontos eredményekkel is szolgálhatnak, aminek ára leggyakrabban a hosszú futási idő és a nagy erőforrásigény; ez lesz az, amit a későbbiekben a helyettesítő modellek segítségével igyekszünk csökkenteni.

Fontos megemlíteni, hogy az anyaghiba-rekonstrukcióhoz szükséges inverz probléma megoldása – ellentétben a direkt problémával – általában nem egyértelmű. A tény, hogy a kimeneti jelet konfigurációs zaj terheli, csak tovább rontja a rekonstrukció lehetőségét. Általánosságban azt a megállapítást tehetjük, hogy minél jobban befolyásolja egy bemeneti paraméter a kimeneti jelet, – azaz minél érzékenyebb rá – annál valószínűbben következtethetünk ennek a paraméternek az értékére a kimenet megváltozásán keresztül. Így a továbbiakban célszerű a bementi paramétereket két csoportra osztani:





2.1. ábra. Az anyagvizsgálati eljárás feketedoboz modellje.

1. anyaghiba paraméterek: olyan változók, amik a hiba pozícióját, méretét, anyagjellemzőit hivatottak leírni
2. konfigurációs paraméterek: minden olyan változó, amely nem anyaghiba paraméter, de befolyásolja a kimeneti jelet, pl. a hibamentes mintadarab méretei és anyagjellemzői

Az érzékenységvizsgálat során az elektromágneses modellünkre egy fekete dobozként fogunk tekinteni, melynek bemenete a fent említett bizonytalan változók és arra keressük a választ, hogy mely paraméter(ek) felelős(ek) leginkább a kimenet bizonytalanságáért. Ennek matematikai hátterét a következő fejezetben ismertetjük.

## 3. fejezet

# Érzékenységvizsgálat

### 3.1. Bevezetés

Legyen  $y = f(\boldsymbol{x})$  egy matematikai modell, ami bemeneti változóknak egy

$$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$$

halmazától függ. Ha ezen változók pontos értéke nem ismert, akkor értéükre csak valamilyen bizonytalansági intervallumot adhatunk meg, amit pl. a változók valószínűségi eloszlásfüggvényével írhatunk le. A bemeneti változók ingadozása miatt az  $f$  leképezésen keresztül a kimenet is egy bizonytalan változóvá válik. Az érzékenységvizsgálat általános célja, hogy jellemezze a bemeneti változók bizonytalanságának a kimenetre gyakorolt hatását azáltal, hogy olyan kvantitatív értékeket (mérőszámokat) rendel hozzájuk, amik arányosak az okozott hatás mértékével.

Az effajta vizsgálatok rendkívül hasznosak, hiszen értékes információt adnak a modell belső szerkezetéről, az eredmények felhasználásának pedig számos módja létezik. Első példaként a modellredukciót említjük meg. A modellalkotás egyik központi feladata, hogy az adott jelenséget a lehető legkevesebb paraméter segítségével legyünk képesek a lehető legpontosabban leírni. Az érzékenységvizsgálat segíti elkülöníteni a modellalkotás kezdetén a fontos és kevésbé fontos paramétereket. Azokat a változókat, amik nem befolyásolják érdemben a kimeneti jelet, nem kell ismeretleneknek tekintenünk és figyelembe vehetjük pusztán a névleges értékükkel. Egy másik felhasználás előfordulhat a gyártástechnológiában, ahol a termék bizonyos tulajdonságaira szigorú előírások vonatkoznak. A határértékek betartását segítheti, ha ismerjük, hogy ezek bizonytalanságát mely bemeneti paraméterek okozzák, így a hozzájuk kapcsolódó folyamatokhoz szigorúbb gyártási toleranciákat tudunk előírni.

Az érzékenységvizsgálatnak különösen nagy jelentősége van a roncsolásmentes anyagvizsgálatban. Az  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  bemenő paraméterek jelenthetnek anyaghiba és konfigurációs paramétereket,  $f(\boldsymbol{x})$  pedig a mérés kimenetét szimbolizálja. Ekkor igen lényeges, hogy az egyes paraméterek változása egymáshoz képes milyen hatással van a kimenet

ingadozásában. Ebből lehet ugyanis következtetni arra, hogy az egyes anyaghiba paraméterek rekonstruálására mekkora esélyünk van, ill. hogy mindezt mennyire terheli az egyes konfigurációs paraméterek bizonytalansága.

A szakirodalomban fellelhető módszerek közös jellemzője, hogy egy ún. *feketedoboz* megközelítést alkalmaznak. Ennek értelmében nem szükséges ismerni a modell belső működését, szerkezetét és csupán az összetartozó bemeneti és kimeneti minták felhasználásával elvégezhető az érzékenységvizsgálat. Ez a megközelítés teszi a módszereket alkalmassá, hogy műszaki, természettudományos és gazdasági területeken egyaránt széles körben alkalmazhatóak legyenek.

Végül a teljesség igénye nélkül megemlíjtük, hogy léteznek többek között regresszió alapuló eljárások, korrelációs elvű megközelítések és lokális módszerek, ahol pl. a modell, mint függvény Taylor-sorfejtését felhasználva a gradienseken keresztül definiálhatók a bizonytalanság mérőszámai. A különböző eljárásokról az érdeklődő olvasó bővebb leírást talál pl. az [1] irodalomban. Jelen dolgozat a Sobol-indexek számításán alapuló technikával foglalkozik, melynek részletes bemutatása a következő alfejezetben történik.

## 3.2. Sobol-indexek

A Sobol-indexek számítása egy igen elterjedt globális technika, amelynek a célja a kimenet varianciájának felosztása az egyes bemeneti változók és azok csoportjai között ún. részvarianciákra a csoportok hozzájárulásának megfelelően. A szakirodalomban eredetileg variancia alapú érzékenységvizsgálatként tüntették fel, de mára az eljárás kifejlesztője, az orosz matematikus I. M. Sobol után tiszteletből Sobol-indexekként hivatkoznak rá. A módszer elméleti alapjait már a 90-es években kidolgozták, igazi jelentőségre és népszerűsége azonban csak az elmúlt évtizedben tett szert. Kezdetben az eljárás még igen számításigényes volt, ezért az elterjedéshez hozzájárult számos olyan matematikai eredmény (pl. helyettesítő modellek), amelyek a számítási igényeket tovább csökkentették. Az elmúlt években kezdtek el olyan tanulmányok megjelenni, amelyek a Sobol-indexek kiterjesztésével foglalkoznak (vektor értékű kimenetek, összefüggő bemeneti tartományok), ezáltal az eredeti definíción túlmutató, általánosabb problémák is kezelhetővé váltak, elősegítve a technika elterjedését. A továbbiakban Sobol-indexek matematikai hátterének bemutatása következik.

Legyen  $y = f(\mathbf{x})$  egy négyzetesen integrálható többváltozós függvény, amely az  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$  bemeneti változóktól függ. Az általánosság megszorítása nélkül feltehetjük, hogy a változók függetlenek és egyenletes eloszlásúak az egység hiperkockában, tehát a függvény értelmezési tartománya  $\mathcal{D}_{\mathbf{x}} = [0, 1]^n$ . A Sobol-indexek számítása azon az ötleten alapszik, hogy felbontjuk a függvényt egyre növekvő dimenziójú részfüggvények összegeként az alábbi módon:

$$f(\mathbf{x}) = f_0 + \sum_{i=1}^n f_i(x_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq n} f_{ij}(x_i, x_j) + \cdots + f_{1,2,\dots,n}(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (3.1)$$

A (3.1) egyenletre szokás Sobol-féle felbontásként hivatkozni. A bemeneti változók minden egyes részalmazához pontosan egy részfüggvényt rendelünk hozzá, ami kizárólag ezektől a változóktól függ,  $n$  darab változó esetén ez így  $2^n$  részfüggvényt jelent, melyekkel szemben két követelményt írunk elő:

1. Az összeg első tagja egyezzen meg  $f(\mathbf{x})$  várható értékével:

$$f_0 = \int_{\mathcal{D}_{\mathbf{x}}} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}^1 \quad (3.2)$$

2. A tagfüggvények integrálja bármely, az argumentumukban szereplő változóra nézve 0 legyen, egyben ez azt is jelenti, hogy a függvények ortogonálisak.

Megmutatható, hogy ezen megkötések mellett a felbontás egyértelműen létezik [2], továbbá a részfüggvények megkaphatók rekurzív módon a (3.3)-nek megfelelően:

$$f_0 = \int_{\mathcal{D}_{\mathbf{x}}} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (3.3a)$$

$$f_i(x_i) = \int_0^1 \cdots \int_0^1 f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}_{\sim i} - f_0 \quad (3.3b)$$

$$f_{ij}(x_i, x_j) = \int_0^1 \cdots \int_0^1 f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}_{\sim i,j} - f_0 - f_i(x_i) - f_j(x_j), \quad (3.3c)$$

ahol  $\mathbf{x}_{\sim i}$  egy  $x_i$  nélküli halmazt jelöl. A magasabb rendű tagok analóg módon előállíthatók. Érdeemes megfigyelni, hogy  $f_i(x_i)$  nem más, mint  $f(\mathbf{x})$   $x_i$ -re vonatkozó feltételes várható értékének és  $f_0$ -nak a különbsége,  $f_{ij}(x_i, x_j)$  pedig az  $x_i, x_j$ -re vonatkozó feltételes várható érték, levonva  $x_i$  és  $x_j$  saját feltételes és  $f$  globális várható értékét. Tehát a rekurzív definíció következménye, hogy az új, magasabb dimenziója tagok olyan hatásokat próbálnak leírni, amik kizárólag a bemeneti változók kölcsönhatásának következménye, és nem tartalmazza a kisebb elemszámú csoportjaik hatását. A függvények ortogonalitásából adódik, hogy az  $f(\mathbf{x})$  függvény varianciája felbomlik a tagfüggvények varianciájának összegére:

$$D = \sum_{v \subseteq \mathbf{x} \setminus \{0\}} D_v, \quad (3.4)$$

---

<sup>1</sup>Megjegyezzük, hogy általános esetben a különböző sztochasztikus momentumok számításánál az integrandus még megszorozódna a változók együttes sűrűségfüggvényével. Jelen esetben, egyenletes eloszlású változóknál ez azonosan 1 értékű, így külön nem jelöltük.

ahol

$$D = \int_{\mathcal{D}_{\mathbf{x}}} f^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - f_0^2 \quad (3.5)$$

jelöli  $f$  teljes varianciáját és  $D_v$  pedig annak a tagfüggvénynek a varianciáját, amelyet a bemeneti változók egy  $\mathbf{v} = (x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_s}) \subseteq \mathbf{x}$  halmaza definiál. A változók egy  $\mathbf{v} = (x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_s})$  csoportjához tartozó Sobol-index, mint érzékenységi faktor így a következőképpen definiálható:

$$S_v = D_v / D \quad (3.6)$$

A definíció értelmében az összes létező Sobol-index összege 1-et ad, ami könnyen értelmezhetővé teszi a mérőszámokat.

Kiemelt jelentősége van annak az esetnek, amikor a csoport egyetlen változóból áll, az így kapott indexeket elsőrendű Sobol-indexeknek nevezzük:

$$S_i = D_i / D \quad (3.7)$$

A tagfüggvényekre tett korábbi megállapítás alapján az indexek értelmezése a következő. Az  $S_i$  elsőrendű indexek jelölik azt a hatást, amit az  $x_i$  változó önmagában létrehoz. Az  $S_{ij}$  másodrendű indexek olyan hatások leírásért felelnek, amelyek kizárólag  $x_i$  és  $x_j$  kölcsönhatásának az eredményei, azaz nem tartalmazzák azokat a hatásokat, amiket a változók már önmagukban is létrehozhatnak. A magasabb rendűek analóg módon értelmezhetők.

Az elsőrendű indexek párjaként tartják számon a totális Sobol-indexeket, amelyek az összes olyan hatást tartalmazzák, amelyek kapcsolatba hozhatók  $x_i$ -vel, így megmutatják  $x_i$  teljes hozzájárulását a kimenet bizonytalanságához.

$$ST_i = \sum_{\mathbf{v} \subseteq \mathbf{x}: x_i \in \mathbf{v}} S_v \quad (3.8)$$

Kihasználva, hogy az indexek összege 1-et ad, a fenti formula egy egyszerűbb alakban is felírható:

$$ST_i = 1 - S_{\mathbf{x}_{\sim i}} \quad (3.9)$$

A definíció alapján az elsőrendű és a totális indexek között fennáll a következő reláció:

$$0 \leq S_i \leq ST_i \leq 1 \quad (3.10)$$

Egy változó, aminek az egyéni hozzájárulása a kimenet varianciájához kicsi, még lehet fontos paraméter a többi változóval való interakcióján keresztül. Ezért egy változó csak akkor rögzíthető a névleges értékén, ha mind az egyéni, mind a totális Sobol-indexe nulla, vagy ahhoz közeli értékű.

A Sobol-indexek számítása hagyományosan Monte Carlo becslő formulák segítségével

vel történik megfelelő számú véletlen be-és kimeneti minta felhasználásával:

$$\hat{f}_0 = \sum_{k=1}^M f(\mathbf{x}^{(k)}) \quad (3.11a)$$

$$\hat{D} = \sum_{k=1}^M f(\mathbf{x}^{(k)})^2 - \hat{f}_0^2 \quad (3.11b)$$

$$\hat{D}_i = \sum_{k=1}^M f(x_i^{(k)}, \mathbf{x}_{\sim i}^{(k)}) f(x_i^{(k)}, \mathbf{x}'_{\sim i}^{(k)}) - \hat{f}_0^2, \quad (3.11c)$$

ahol  $\mathbf{x}^{(k)}$  jelöli a  $k$ -dik mintát a maximális  $M$ -ből,  $\mathbf{x}'_{\sim i}^{(k)}$  pedig egy olyan mintát jelöl, ami független  $\mathbf{x}_{\sim i}^{(k)}$ -től.

A Monte Carlo formulák konvergenciájának biztosítása rendszerint csak nagy mintaszámmal érhető el, azaz a vizsgált modellt a bemeneti változók sok értéke mellett kell kiértékelni. Ez adja a módszer fő nehézségét, hiszen pl. egy bonyolult elektromágneses modell kiértékelése számításigényes feladat, és a futási idő másodpercekben, vagy akár percekben is mérhető lehet, míg a mintaszám elérheti a százezres vagy milliós nagyságrendet. Lényegében ez az oka, amiért a Sobol-indexek elterjedése csak jóval a megjelenése után következett be és szintén ez indokolja a helyettesítő modellek alkalmazásának szükségességét. Megemlíjtük, hogy a konvergencia kismértékben növelhető a formulák módosításával és pl. a hagyományos értelemben vett véletlen minták helyett álvéletlen (pszeudorandom) minták alkalmazásával; ez esetben kvázi- Monte Carlo módszerről beszélünk.

### 3.3. Sobol indexek kiterjesztése

Az elegáns matematikai háttére és az érzékenységi faktorok könnyű értelmezhetősége a Sobol-indexek technikáját széles körben népszerűvé tették, alkalmazhatóságának azonban megvannak a korlátai. Az eredeti definíció ugyanis kizárólag a független bemeneti változók és skalár értékű kimenet esetére szorítkozik, azaz nem alkalmazható olyan esetekben, ahol a változók összefüggőek (pl.  $x_1 + x_2 \leq B$  geometriai megkötésen keresztül) vagy a kimenet vektor értékű (pl. több mérési pontból álló felületi szkennelés eredménye, ami tipikus a roncsolásmentes vizsgálatoknál). A definíciót így ki kell terjeszteni és általánosítani kell ezen esetekre is, amennyiben a roncsolásmentes vizsgálatokra is szeretnénk a Sobol-indexeket alkalmazni.

#### 3.3.1. Vektor értékű kimenetek

Tegyük fel, hogy a kimeneti jel egy  $P$  dimenziós vektor, amit felírhatunk egy  $P$  darab skalár kimenetű komponensfüggvényből álló vektorként:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = (F_1(\mathbf{x}), F_2(\mathbf{x}), \dots, F_P(\mathbf{x})) \quad (3.12)$$

A Sobol-indexek legegyszerűbb, heurisztikus kiterjesztését jelenti, ha minden komponensfüggvényre meghatározzuk a Sobol-indexeket, majd a kapott eredményeket átlagoljuk. Jelöljük  $S_i^{(j)}$ -vel a  $j$ . komponens  $x_i$  változójához tartozó elsőrendű indexet, ekkor a vektor kimenetre kiterjesztett átlagos indexek a következőképpen definiálhatók:

$$S_i^{\text{avg}} = \sum_{j=1}^P S_i^{(j)} = \sum_{j=1}^P \frac{D_i^{(j)}}{D^{(j)}} \quad (3.13)$$

Az átlagolás teljesen analóg módon alkalmazható a totális indexekre is. Az így definiált érzékenységi faktorok arányosak lesznek a bemeneti paraméterek hatásaival, jóllehet nem tekinthetők teljes körűnek, mivel nem veszik figyelembe a kimenet vektoriális természetét és ebből adódóan a komponensfüggvények közötti olykor szoros kapcsolatot. Különösen fontos ez abban az esetben, amikor a vektoriális kimenet egy felületi vagy vonali szkennelés eredménye. Ekkor ugyanis az egymáshoz közel eső mérési pontokhoz, mint skalár kimenetekhez tartozó komponensfüggvények igen hasonlóak lesznek és a mért értékek között erős korreláció van jelen. Így jogosan mondhatjuk, hogy ezekben az esetekben a kimenet több, mint pusztán skalárfüggvények összessége és a mérési eljárást jobban jellemezné, ha a Sobol-indexeket közvetlenül a vektor értékű kimenetekre terjesztenénk ki.

Egy ezen szempontokat figyelembe vevő, friss matematikai eredménynek számító módszer található a [3] irodalomban, amely a modellfüggvény ún. Hoeffding-felbontásán alapszik. Ebben a dolgozatban bemutatok egy saját kiterjesztést, amely közvetlenül a Sobol-féle felbontáson alapul. A matematikai összefüggéseket, tételeket itt csak kimondjuk, részletes bizonyítást a Függelékben mellékelünk. Az előző fejezetben rámutattunk a Sobol-féle felbontás tagfüggvényeinek a feltételes várható értékekkel való kapcsolatára, ami alapján az elsőrendű indexek felírhatók az alábbi formában is.

$$S_i = \text{Var}_{x_i} [\mathbb{E}_{\mathbf{x}_{\sim i}} [f(\mathbf{x}) | x_i]] / \text{Var} [f(\mathbf{x})]. \quad (3.14)$$

A kiterjesztés kulcsa a varianciák megfelelő definiálásában rejlik. Egy dimenzióban a varianciát úgy is elképzelhetjük, mint egy hibafüggvény négyzetének a várható értékét, amely hiba a vizsgált függvénynek a saját várható értékétől való eltéréseként definiálható. A feltételes várható érték varianciája ugyanezt a négyzetes hibát számszerűsíti azzal a különbséggel, hogy bizonyos változókat rögzít, míg másokat szabadon enged ingadozni a saját intervallumukban. Ugyanez a gondolatmenet alkalmazható magasabb dimenziókban is, mindössze annyi az eltérés, hogy itt a várható érték egy vektor (és a komponensfüggvények várható értékeinek vektoraként definiálható) és így a hibafüggvény is vektor értékű lesz:

$$\mathbf{H}(\mathbf{x}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}) - \mathbf{F}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{F}_0(\mathbf{x}) = (f_0^{(1)}, f_0^{(2)}, \dots, f_0^{(n)}) \quad (3.15)$$

A feladat továbbra is ennek a hibának a számszerűsítése, tehát a hibát át kell alakítanunk egy skalár mennyiséggé, amely arányos annak nagyságával. Ez könnyen megtehető, ha például a távolságot (hosszúságot) a kettes norma segítségével definiáljuk (amely egydimenziós esetben abszolútérték-képzést jelent), így a variancia a hibafüggvény kettes normája négyzetének várható értékeként definiálható:

$$D^{\text{vec}} = \text{Var}[\mathbf{F}(\mathbf{x})] = \mathbb{E}[\|\mathbf{H}(\mathbf{x})\|_2^2] = \mathbb{E}[\|\mathbf{F}(\mathbf{x}) - \mathbf{F}_0\|_2^2], \quad (3.16)$$

ahol egy  $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_k)$  vektor kettes normájának definíciója:

$$\|\mathbf{y}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^k |y_i|^2} \quad (3.17)$$

A feltételes várható értékek többdimenziós esetben a komponensfüggvények feltételes várható értékeiből álló vektorként definiálhatóak, a varianciájuk pedig ugyanígy értelmezhető a kettes norma segítségével. Az  $x_i$  változóhoz tartozó elsőrendű vektoriális Sobol-index definíciója a következő:

$$S_i^{\text{vec}} = \text{Var}_{x_i}[\mathbb{E}_{\mathbf{x}_{\sim i}}[\mathbf{F}(\mathbf{x})|x_i]] / \text{Var}[\mathbf{F}(\mathbf{x})] = D_i^{\text{vec}} / D^{\text{vec}}. \quad (3.18)$$

Ez a definíció kiterjeszhető a magasabb rendű indexekre is és valójában egy jóval erősebb állítást is megfogalmazhatunk. Legyen az  $F_k(\mathbf{x})$ ,  $1 \leq k \leq P$  függvény Sobol-féle felbontása a következő:

$$F_k(\mathbf{x}) = f_0^{(k)} + \sum_{i=1}^n f_i^{(k)}(x_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq n} f_{ij}^{(k)}(x_i, x_j) + \dots + f_{1,2,\dots,n}^{(k)}(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (3.19)$$

Ekkor az  $\mathbf{F}(\mathbf{x})$  vektorfüggvénynek is definiálhatjuk a Sobol-féle felbontását a következő módon:



$$\begin{aligned}
\mathbf{F}(\mathbf{x}) &= \begin{pmatrix} F_1(\mathbf{x}) \\ F_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ F_P(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0^{(1)} \\ f_0^{(2)} \\ \vdots \\ f_0^{(P)} \end{pmatrix} + \sum_{i=1}^n \begin{pmatrix} f_i^{(1)}(x_i) \\ f_i^{(2)}(x_i) \\ \vdots \\ f_i^{(P)}(x_i) \end{pmatrix} + \\
&+ \sum_{1 \leq i < j \leq n} \begin{pmatrix} f_{ij}^{(1)}(x_i, x_j) \\ f_{ij}^{(2)}(x_i, x_j) \\ \vdots \\ f_{ij}^{(P)}(x_i, x_j) \end{pmatrix} + \dots + \begin{pmatrix} f_{1,2,\dots,n}^{(1)}(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_{1,2,\dots,n}^{(2)}(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_{1,2,\dots,n}^{(P)}(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Ekkor a következő állítások érvényesek:

(1)  $\mathbf{F}(\mathbf{x})$  varianciája felbomlik a komponensfüggvényei varianciájának összegére:

$$\text{Var} [\mathbf{F}(\mathbf{x})] = \sum_{j=1}^P \text{Var} [F_j(\mathbf{x})] \tag{3.21}$$

(2) A  $\mathbf{F}_{I(\mathbf{v})}(\mathbf{v})$  tagfüggvény szintén felbomlik a komponensei varianciájának összegére:

$$\text{Var} [\mathbf{F}_{I(\mathbf{v})}(\mathbf{v})] = \sum_{j=1}^P \text{Var} [f_{I(\mathbf{v})}^{(j)}(\mathbf{v})] \tag{3.22}$$

(3) A kiterjesztett Sobol-féle felbontás *teljes*, azaz  $\mathbf{F}(\mathbf{x})$  varianciája is felbomlik a tagfüggvények varianciájának összegére:

$$\text{Var} [\mathbf{F}(\mathbf{x})] = \sum_{\mathbf{v} \subseteq \mathbf{x} \setminus \{0\}} \text{Var} [\mathbf{F}_{I(\mathbf{v})}(\mathbf{v})] \tag{3.23}$$

A tételeknek nagyon fontos következménye van, ugyanis a segítségükkel a vektoriális Sobol-indexek előállíthatóak a skalár komponensfüggvények Sobol-indexei segítségével. Egy  $\mathbf{v} \subseteq \mathbf{x} \setminus \{0\}$  csoport indexe így:

$$S_{I(\mathbf{v})} = \frac{\text{Var} [\mathbf{F}_{I(\mathbf{v})}(\mathbf{v})]}{\text{Var} [\mathbf{F}(\mathbf{x})]} = \frac{\sum_{j=1}^P D_{I(\mathbf{v})}^{(j)}}{\sum_{j=1}^P D^{(j)}} \tag{3.24}$$

és ezek összege továbbra is 1-et ad. Speciálisan ha  $\mathbf{v} = \{x_i\}$ , akkor megkaphatjuk az elsőrendű Sobol-indexeket:

$$S_i^{\text{vec}} = \frac{\text{Var} [\mathbf{F}_i(x_i)]}{\text{Var} [\mathbf{F}(\mathbf{x})]} = \frac{\sum_{j=1}^P D_i^{(j)}}{\sum_{j=1}^P D^{(j)}} \quad (3.25)$$

Érdemes megjegyezni, hogy ez a végső formula megegyezik a fejezet elején hivatkozott irodalomban fellelhető eredménnyel, noha a két eset alapvetően más megközelítést használt. A képlet nagyon hasonlít az átlagos indexek számításához, hiszen mindkettő előállítható az egydimenziós komponensfüggvények varianciájának és részvarianciájának felhasználásával, csupán az összegzés és a hányadosképzés sorrendjében térnek el. Éppen ezért tekinthető egy érdekes eredménynek, hogy a hasonlóság ellenére az egyik számítási mód jobban illeszkedik a vektoriális problémákhoz.

Az elsőrendű indexekhez teljesen hasonlóan előállítható  $x_i$  totális indexei is, ehhez mindösszesen a számlálóban a részvarianciákat ki kell cserélnünk az  $x_i$  összes hatását magába foglaló totális részvarianciákra:

$$ST_i^{\text{vec}} = \frac{\sum_{j=1}^P D_i^{\text{T}(j)}}{\sum_{j=1}^P D^{(j)}}, \quad (3.26)$$

ahol  $D_i^{\text{T}(j)}$ -re fennáll, hogy  $D_i^{\text{T}(j)} / D^{(j)} = ST_i^{(j)}$ .

A Monte Carlo becslő formulák is kiterjeszthetők a vektor kimenetekre, ha a 3.11 képletben a négyzetre emelést kettes norma négyzettel, míg a szorzást a vektorok között értelmezett skaláris szorzással helyettesítjük:

$$\hat{\mathbf{F}}_0 = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)}) \quad (3.27a)$$

$$\hat{D}^{\text{vec}} = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \|\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)})\|_2^2 - \|\hat{\mathbf{F}}_0\|_2^2 \quad (3.27b)$$

$$\hat{D}_i^{\text{vec}} = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \mathbf{F}(x_i^{(k)}, \mathbf{x}_{\sim i}^{(k)}) \bullet \mathbf{F}(x_i^{(k)}, \mathbf{x}'_{\sim i}{}^{(k)}) - \|\hat{\mathbf{F}}_0\|_2^2 \quad (3.27c)$$

Ezek a formulák később ugyanúgy használhatóak lesznek a Sobol-indexek becslésére és ellenőrzésére.

A vektor kimenetű függvények egy különleges esetének tekinthetők a komplex értékű kimenetek (pl. az ECT vizsgálatnál a mérőtekeres impedanciájának változása egy komplex mennyiség). A fenti gondolatmenet itt ugyanúgy alkalmazható, vagyis végső soron egy — ezúttal komplex értékű — hiba nagyságát szeretnénk meghatározni. A távolság korábbi kettes normával történő kiterjesztése jól illeszkedik a komplex esethez, hiszen egy  $x_1 + jx_2$  komplex szám és egy  $(x_1, x_2)$  vektor nagyságát is ugyanúgy a  $d = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$  for-

mula alapján határoznánk meg. Tehát a hiba nagyságának szempontjából mindegy, hogy egy új skalárfüggvényt egy kimeneti komponens képzetes részeként vagy egy új, független komponensként veszünk figyelembe, hiszen a távolság képzése ugyanúgy történik. Így egy  $\mathbf{F}(\mathbf{x}) \in \mathbb{C}^P$  függvény a  $\mathbf{F}(\mathbf{x}) \Rightarrow [\text{Re}\{\mathbf{F}(\mathbf{x})\}; \text{Im}\{\mathbf{F}(\mathbf{x})\}]$  transzformációval átalakítható egy  $2P$  dimenziójú valós függvénné és minden gond nélkül elvégezhető rajta az érzékenységvizsgálat.

### 3.3.2. Összefüggő bemeneti tartományok

A Sobol-indexek definíciójában a bemeneti változók függetlenek és egyenletes eloszlásúak az egység hiperkockában, jóllehet a valóságos alkalmazásoknál ezek a feltételek általában nem teljesülnek. A paraméterek értelmezési tartománya nem feltétlenül a  $[0, 1]$  intervallum és az eloszlásuk sem feltétlenül egyenletes (pl. Gauss, log-normál eloszlás). Továbbá előfordulhatnak olyan esetek, ahol a változók nem függetlenek egymástól, például egy  $x_1 + x_2 \leq B$  megkötés eredményeként az  $x_1, x_2$  változók együttes értelmezési tartománya háromszög alakú, ellentétben a független esetre jellemző négyzetes alakkal. Igen frissnek mondható az a Kucherenko cikk [4], amely a Sobol-indexek számításának lehetőségeit éppen ilyen nem négyzetes jellegű bemeneti tartomány esetén tárgyalja. A továbbiakban az [5] irodalomban javasolt módszert mutatjuk be, ami az ún. Rosenblatt-transzformációt (RT) használja. Első lépésként még a független, ám tetszőleges eloszlású változók esetére szorítkozunk. Jelölje  $p(\mathbf{x})$  a változók együttes sűrűségfüggvényét, továbbá jelölje  $p(x_i)$  az  $x_i$  változó saját eloszlásához tartozó (marginális) sűrűségfüggvényét. Ekkor a függetlenségük miatt az együttes sűrűségfüggvényük megegyezik a marginálisaik szorzatával:

$$p(\mathbf{x}) = p(x_1)p(x_2)p(x_3) \dots p(x_n). \quad (3.28)$$

A  $p(x_i)$  sűrűségfüggvényhez tartozó eloszlásfüggvényt jelöljük  $F_i(x_i)$ -vel. Az eloszlásfüggvény tulajdonsága, hogy a hozzá tartozó valószínűségi változót kölcsönösen egyértelműen képezi le az egyenletes eloszlású  $[0, 1]$  intervallumba, tehát bijektív leképezést biztosít az eredeti értelmezési tartomány és az egység hiperkocka között:

$$F_1(x_1) = u_1, \quad F_2(x_2) = u_2, \quad \dots, \quad F_n(x_n) = u_n. \quad (3.29)$$

Ekkor  $u_i \sim E(0, 1) \forall i$ -re, tehát az  $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n) \sim [0, 1]^n$  transzformált vektor egyenletes eloszlású az egység hiperkockában. Az  $u_i$  változókra ekkor már elvégezhető a Sobol-indexeken alapuló érzékenységvizsgálat, az  $x_i \leftrightarrow u_i$  összerendelés révén pedig a kapott indexeket hozzátársíthatjuk az eredeti  $x_i$  változókhoz. A függetlenség miatt ez a transzformáció egyértelmű, ami a Sobol-indexek unicitás tételével együtt eredményezi, hogy  $x_i$  indexei is egyértelműek maradnak.

Nem független változókra ez a gondolatmenet közvetlenül nem alkalmazható, mivel a

marginális sűrűségfüggvényeik szorzata nem egyenlő az együttes sűrűségfüggvényükkel. A Rosenblatt-transzformáció alap gondolata, hogy a változókat a feltételes sűrűségfüggvényeik segítségével jellemezzük. Legyen  $\mathbf{x}^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$  az  $\mathbf{x}$  vektor egy permutációja és jelöljük  $p(x_i|\mathbf{v})$ -vel az  $x_i^*$  változónak a  $\mathbf{v} \subseteq \mathbf{x}_{\sim i}^*$  csoportra vonatkozó feltételes sűrűségfüggvényét. Ekkor  $\mathbf{x}^*$  együttes sűrűségfüggvénye felírható az alábbi alakban:

$$p(\mathbf{x}^*) = p(x_1^*)p(x_2^*|x_1^*)p(x_3^*|x_1^*, x_2^*) \dots p(x_n^*|\mathbf{x}_{\sim n}^*). \quad (3.30)$$

Jelöljük a  $p(x_i|\mathbf{v})$ -hez tartozó feltételes eloszlásfüggvényt  $F_i(x_i^*|\mathbf{v})$ -vel. Ekkor az  $x_i^*$  változók továbbra is kölcsönösen egyértelműen leképezhetőek az egység hiperkockába:

$$F_1(x_1^*) = u_1, \quad F_2(x_2^*|x_1^*) = u_2, \quad \dots, \quad F_n(x_n^*|\mathbf{x}_{\sim n}^*) = u_n. \quad (3.31)$$

A bemeneti változókat tehát most nem a marginális, hanem a feltételes sűrűségfüggvényeiken keresztül vesszük figyelembe és ennek megfelelően a transzformáció is feltételes eloszlásfüggvényeken keresztül történik, amikre továbbra is igaz, hogy a valószínűségi változókat egyenletes transzformálják a  $[0, 1]$  intervallumba. A transzformációt követően a Sobol-indexek számítása már elvégezhető és az  $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_n) \sim [0, 1]^n$  változókon, számított értékeket pedig ugyanúgy hozzárendelhetjük rendre az  $x_i^*$  változóhoz. Vegyük észre, hogy abban a speciális esetben, amikor a változók függetlenek, visszakapjuk a korábbi esetben tárgyaltakat.

Bár a Sobol-indexek számítása egyértelmű, a Rosenblatt-transzformáció nem az; az  $n$  darab változónak  $n!$  különböző permutációja létezik, azaz  $n!$  módon végezhető el a RT és az indexek kiértékelése. Egy  $x_i$  változó szempontjából azonban csak két igazán lényeges esettel kell foglalkoznunk. Ha  $x_i = x_1^*$ , akkor  $x_i$ -t a saját marginális sűrűségfüggvényén keresztül vettük figyelembe és transzformáltuk a  $[0, 1]$ -be, így a hozzá tartozó egyéni és totál indexek tartalmazni fogják mind a többi változóval való kölcsönhatásból, mind a velük való kötöttségekből származó hatásokat. Ezen tulajdonság miatt a nevezhetjük őket teljes (angol: full) Sobol-indexeknek és  $S_i^{\text{full}}$ ,  $ST_i^{\text{full}}$  módon jelöljük őket. A másik speciális eset, amikor  $x_i = x_n^*$ , ilyenkor ugyanis  $x_i$ -t az összes többi változóra vonatkozó feltételes sűrűségfüggvényén keresztül vesszük figyelembe, azaz a hozzá tartozó Sobol-indexek nem fogják tartalmazni a megkötésekből eredő hatásokat, mivel azokat a feltételes sűrűségfüggvényénél már korábban figyelembe vettük. Ezeket az indexeket egyéni (angol: individual –ind) indexeknek nevezzük és jelölésük  $S_i^{\text{ind}}$ ,  $ST_i^{\text{ind}}$ . A Sobol-indexek között továbbra is fennállnak a  $0 \leq S_i^{\text{full}} \leq ST_i^{\text{full}} \leq 1$  és  $0 \leq S_i^{\text{ind}} \leq ST_i^{\text{ind}} \leq 1$  relációk, ugyanakkor az eredeti szerzők is fontosnak tartották kiemelni, hogy az egyéni és a teljes indexek között általában nincs kapcsolat, azaz nem létezik reláció, pl.  $S_i^{\text{ind}}$  és  $S_i^{\text{full}}$  között. Egy adott bemeneti változó érzékenységvizsgálatánál mind a négy indexet célszerű kiszámolni, és a modellredukció szempontjából egy változó csak akkor rögzíthető a névleges értékére, ha az egyéni és teljes indexei is nullával egyenlőek.

Az általam olvasott cikkek nem foglalkoztak a kétféle irányú kiterjesztés összekap-

csolásával. Bizonyos szerzők (lásd [3]) független bemeneti változókat tételtek fel, míg mások (lásd [5]) skalár kimenetű függvényeket vettek alapul. A kétféle kiterjesztés egyidejű használatának azonban nincsen elvi akadálya, mivel ezek az érzékenységvizsgálat különböző fázisaiban jelennek meg. A vizsgálat központi eleme az egység hiperkockán értelmezett skalárfüggvények Sobol-indexeinek számítása. A nem független változók figyelembe vétele egy előzetes Rosenblatt-transzformáció segítségével történik, míg a vektoriális indexek az egydimenziós értékekből egyszerű utófeldolgozással megkaphatóak. Tehát ezen két műveletet teljesen elválasztja a „belső” Sobol-index számítás, így összekapcsolható a kétféle irányú kiterjesztés.

## 4. fejezet

# Helyettesítő modellek

### 4.1. Általános felépítés

Az érzékenységvizsgálat elvégzéséhez a vizsgált elektromágnes modellt (integrálegyenlet modell, végeselem modell) a bemeneti változók sokféle értéke mellett kell kiértékelni (ezzel biztosítva a Monte Carlo becslés pontosságát), amely bonyolult modellek esetén igen idő- és számításigényes művelet lehet. A probléma leküzdésére helyettesítő modellek használhatók, amelyek kiváltják az eredeti modellt egy alacsony költségű, ekvivalens algebrai formulával. Megjegyezzük, hogy az elektromágneses inverz problémák megoldása szintén a direkt probléma többszöri kiértékelését igényli, így a felépített helyettesítő modellek szélesebb körben is felhasználhatóak. Jelöljük  $\Omega$ -val az  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  változók értelmezési tartományát és legyen  $f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$  egy valós értékű skalárfüggvény, amely az  $\Omega$  tartományon van értelmezve. A helyettesítő modellek ekkor egy  $\hat{f}(\mathbf{x})$  funkcionális közelítést adják  $f(\mathbf{x})$ -nek oly módon, hogy

$$\hat{f}(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (4.1)$$

A közelítő függvény rendszerint megfelelően választott  $n$ -dimenziós ortogonális bázisfüggvények lineáris kombinációjaként áll elő. A helyettesítő modell felállítása az alábbi négy lépésben foglalható össze.

(i) Először létre kell hozni egy egydimenziós ortogonális bázisfüggvényekből álló halmazt:

$$\Psi(x) = \{\Psi_1(x), \Psi_2(x), \dots, \Psi_l(x)\} \quad (4.2)$$

(ii) A többdimenziós bázisfüggvények halmaza az egydimenziósak tenzor szorzataként áll elő, ez összesen  $l^n$  darab bázisfüggvényt jelent:

$$\Phi(\mathbf{x}) = \Psi(x_1) \otimes \Psi(x_2) \otimes \dots \otimes \Psi(x_n). \quad (4.3)$$

(iii) Mivel az  $n$ -dimenziós bázisfüggvények száma  $n$  exponenciális függvénye és a magasabb fokszámúak szerepe általában kisebb, ezért lehetőség van ennek a halmaznak és kisebb számosságú halmazra való csonkítására valamilyen stratégia szerint.

(iv) Végül a megmaradt bázisfüggvények lineáris kombinációjaként előállítható az  $f(\mathbf{x})$  függvény közelítése:

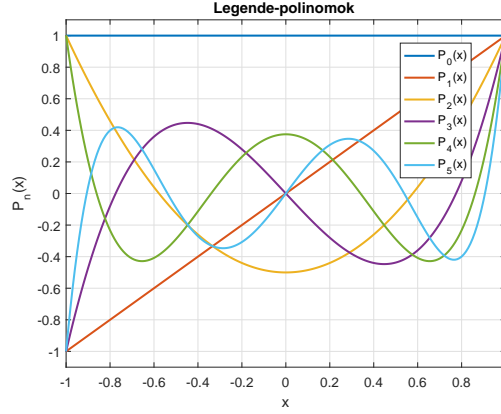
$$f(\mathbf{x}) \approx \hat{f}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha \in \mathcal{A}} c_{\alpha} \Phi_{\alpha}(\mathbf{x}), \quad (4.4)$$

ahol  $c_{\alpha}$  polinomegyüttható,  $\mathcal{A}$  egy indexhalmaz amiből  $\alpha$  egyértelműen azonosít egy bázisfüggvényt. Az egyedüli számításigényes művelet az együtthatók becslése, amihez természetesen ugyanúgy az  $f(\mathbf{x})$  függvény mintavételezésére van szükség. Az ehhez szükséges minták száma azonban nagyságrendekkel kisebb, mint amennyi a Monte Carlo becsléshez szükséges, és a helyettesítő modell felépítését követően már tetszőleges számú új minta generálható. A szakirodalomban fellelhető különböző típusú helyettesítő modellek alapvetően az egydimenziós bázisfüggvények létrehozásában, a csonkítás módjában és az együtthatók becslésében térnek el, de mindegyik erre a most bemutatott sémára épül. A következő bemutatunk két széles körben alkalmazott technikát, a polinomiális káosz sorfejtést és a sparse grid interpolációt.

## 4.2. Polinomiális káosz sorfejtés

A polinomiális káosz sorfejtést (Polynomial Chaos Expansion – PCE) kifejezetten azzal a céllal dolgozták ki, hogy a Sobol-indexeket gyorsan és hatékonyan lehessen kiszámolni [6]. A módszer alapvetően egy sztochasztikus megközelítést alkalmaz és a bázisfüggvényeket úgy választja meg, hogy azok ortonormáltak legyenek a bemeneti változók együttes sűrűségfüggvényére nézve. Példaként, ha a változók a  $[-1,1]$  intervallumon egyenletes eloszlásúak, akkor a Legendre-polinomcsalád, ha gaussi eloszlásúak, akkor a Hermite-polinomcsalád használható, stb. Ez kezdetben szükségessé tette, hogy a bemeneti változók függetlenek és azonos eloszlásúak legyenek, vagy transzformálhatóak legyenek egy ilyen ismert eloszlású változókká. A Rosenblatt-transzformációval azonban mindig leképezhető a bemeneti valószínűségi mező az egység hiperkockába (onnan pedig a  $[-1,1]$  intervallumba), így a Legendre-polinomcsalád nagy általánosságban alkalmazhatóvá válik.

A PCE esetében a többváltozós bázisfüggvényeket azonosító  $\alpha$  index valójában egy  $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$  indexvektor. Az egyváltozós bázisfüggvények tenzor szorzata úgy képződik, hogy mind az  $n$  darab változónál kiválasztunk egy bázispolinomot a lehetséges  $l$  darab közül, majd ezeket összeszorozva adódnak a többváltozós bázisfüggvények. Ezt a generálást szisztematikusan fel lehet építeni úgy, hogy az  $\alpha$  indexvektor éppen a kiválasztott polinomok fokszámát tartalmazza, tehát pl.  $\alpha_i$  azt mondja meg, hogy az  $x_i$  változó



4.1. ábra. Az első hat Legendre-polinom a  $[-1, 1]$  intervallumban.

esetében melyik Legendre-polinomot használtuk fel a többváltozós függvény készítésekor. A bázisfüggvények csonkolásának legegyszerűbb módja, ha a felhasznált Legendre-polinomok fokszámát egy  $p$  értékben maximalizáljuk:

$$\alpha \in \mathcal{A} \iff \forall i \in 1, 2, \dots, n | \alpha_i \leq p \quad (4.5)$$

$n$  dimenziós bementi tartomány esetén ez  $(p+1)^n$  darab bázisfüggvényt jelent (a nullad-fokú polinomok a konstans 1 függvények).

Az együtthatók becslése a függvény véletlen mintái alapján a legkisebb négyzetek módszerével elvégezhető, tehát az alábbi problémát szeretnénk megoldani:

$$\hat{c} \approx \arg \min \mathbb{E} \left[ \left( f(\mathbf{x}) - \sum_{\alpha \in \mathcal{A}} c_{\alpha} \Phi_{\alpha}(\mathbf{x}) \right)^2 \right]. \quad (4.6)$$

Tegyük fel, hogy rendelkezésünkre áll  $M$  darab bemeneti minta,  $\mathbf{X} = (\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(M)})$ , és a hozzájuk tartozó  $y^{(i)} = f(\mathbf{x}^{(i)})$  kimeneti minták,  $Y = (y^{(1)}, y^{(2)}, \dots, y^{(M)})$ . Ekkor a legkisebb négyzetek problémájára adható zárt alakban optimális becslés:

$$\hat{c} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} Y^T, \quad (4.7)$$

ahol

$$\mathbf{A}_{i,j} = \Phi_j(\mathbf{x}^{(i)}), \quad j = 0, 1, \dots, P \equiv |\mathcal{A}| \quad (4.8)$$

Az együtthatók becslésének legkisebb négyzetes módszere jól illeszkedik az anyagvizsgálatok vektoriális kimenetéhez, ugyanis a kimenet vektor jellege csak az utolsó lépésben, a kimeneti minták oszlopvektorának jobbról való szorzásakor jelenik meg. Így, ha ezen a ponton  $Y$  egy mátrix, akkor  $\hat{c}$  szintén mátrix lesz, és lényegében egy lépésben megkapjuk az összes további kimenethez, mint skalárfüggvényhez tartozó együtthatókat. A PCE együtthatók és a Sobol-indexek között rendkívül szoros a kapcsolat. Ha a vizsgálandó függvényt a PCE modelljével helyettesítjük, akkor a második momentum számításakor a



bázisfüggvények ortonormális viselkedése miatt kiesnek a kétszeres szorzatok, és csak a polinomegyütthatók négyzetösszege marad. Így a variancia és a részvarianciák is előállnak az együtthatók megfelelő csoportosításával és a négyzetösszegük képzésével, melyről részletes leírás található például a [6] irodalomban. A fenti tulajdonság további fontos következménye, hogy a PCE jól illeszkedik a vektoriális Sobol-indexek számításához, hiszen megmutattuk, hogy az átlagos és a vektoriális indexek is előállnak a komponensfüggvények teljes és részvarianciájának segítségével [7].

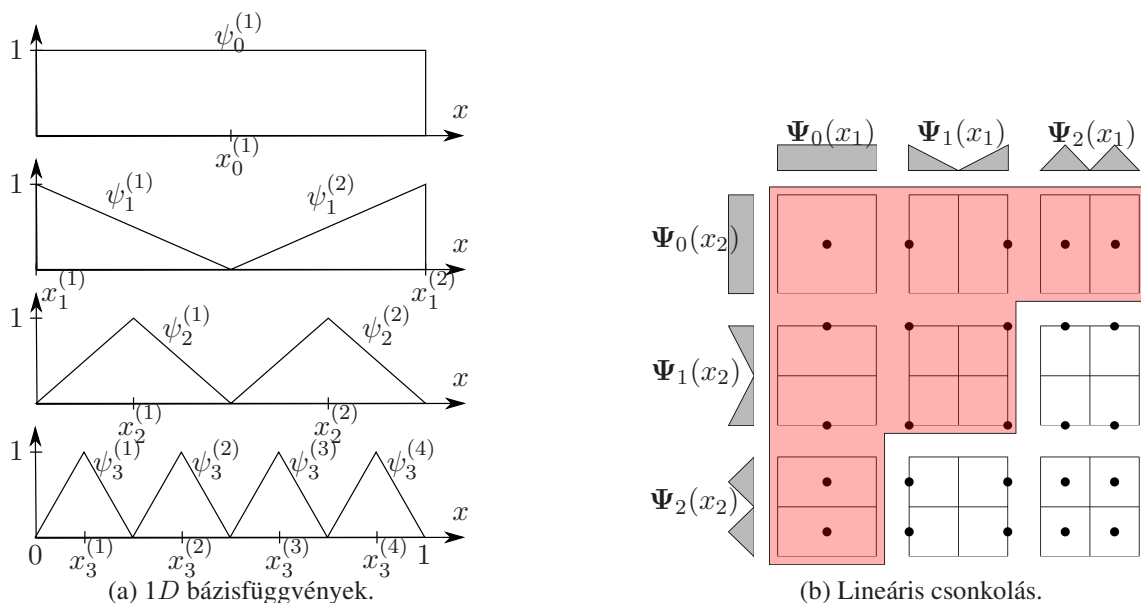
### 4.3. Sparse grid

A helyettesítő modellek létrehozásában rejlő nehézséget az együtthatók becslése adja, ugyanis a szükséges minták száma a bemeneti változók számának exponenciális függvénye; így a magasabb dimenziós problémák (ami  $N \geq 6$ -tól már annak tekinthető) hamar kezelhetetlenné válnak. Egy mostanában megjelent cikkben éppen annak lehetőségét kutatták, hogy hogyan lehet Sparse Grid segítségével pontos helyettesítő modelleket felépíteni a elektromágneses roncsolásmentes vizsgálatok inverz feladatainak megoldásához [8]. A Sparse Grid (SG) egy kollokáción alapuló interpolációs technika, amit kifejezetten a dimenzionalitás leküzdésére dolgoztak ki [9]. A módszer lényege, hogy az  $\Omega = [0, 1]^n$  tartományban a függvényt speciális mintavételi helyeken, ún. bázispontokon (supporting node-okon) értékeli ki, amelyek fölé egy hierarchikusan szervezett bázisfüggvény-rendszert definiál. A felépítést először egydimenzióban ismertetjük, ahol az értelmezési tartomány a  $[0, 1]$  intervallum.

A bázispontok felépítését ekvidisztáns rácspontokra mutatjuk be. Kezdetben definiálunk egy nulladik és egy első szintet, amelyek rendre a tartomány középpontjából, illetve két szélső pontjából állnak, jelöljük ezeket  $x_0^{(1)}$ -gyel, valamint  $x_1^{(1)}, x_1^{(2)}$ -vel. A következő szint bázispontjai mindig az előző szintek bázispontjai által meghatározott szakaszok felezőpontjaiként adódnak. Ezzel a bázispontok rendszere egy kettő hatványai szerint fokozatosan finomodó felosztást ad számunkra. Jelöljük az  $l$ -dik szint  $i$ -dik bázispontját  $x_l^{(i)}$ -vel. Minden bázisponthoz kölcsönösen egyértelműen hozzárendelünk egy  $\Psi_l^{(i)}(x)$  bázisfüggvényt azza a megkötéssel, hogy  $\Psi_l^{(i)}(x_l^{(j)}) = \delta_{ij}$ , ahol  $\delta_{i,j}$  a Kronecker-delta. A hierarchikus felépítésről ekvidisztáns rácspontok és szakaszonként lineáris bázisfüggvények esetén látható egy illusztráció a 4.2a ábrán. A  $d$  mélységű interpoláló függvény tartalmazza az összes bázisfüggvényt az  $l = 0, 1, \dots, d$  szintekről és egy rekurzív formula segítségével adható meg:

$$\hat{f}_d(x) = \hat{f}_{d-1}(x) + \sum_{i=1}^{n_d} \psi_d^{(i)}(x) \underbrace{\left[ f(x_d^{(i)}) - \hat{f}_{d-1}(x_d^{(i)}) \right]}_{v_d^{(i)}} \quad (4.9)$$

és  $\hat{f}_0(x) = \psi_0^{(1)}(x)f(x_0^{(1)})$ . A  $v_d^{(i)}$  bázisfüggvény-együtthatót *surplus*-nak szokás nevezni



4.2. ábra. Sparse grid. Szakasonként lineáris bázisfüggvények (a) és lineáris csonkítási séma (b)

és megadja a  $\psi_d^{(i)}(x)$  bázisfüggvény hozzájárulását az interpolációhoz. Mivel ezt éppen a megelőző szint interpolációs hibájaként definiáltuk az  $x_d^{(i)}$  bázispontban, továbbá itt  $\psi_d^{(i)}(x_d^{(i)}) = 1$ , ezért a közelítés mindig pontos értékeket ad a rácspontokon. Azt is érdemes megjegyezni, hogy az új szint bázisfüggvényeinek hozzáadása nem rontja a közelítést a régi bázispontokban, mivel a régi szintek rácspontjain az új szintek bázisfüggvényei mindig nullát vesznek fel. Ez a rekurzív formula így minden újabb szint hozzáadásakor újabb rácspontokat biztosítja a pontos interpolációt, aminek hatására a köztes tartományokban is konvergens lesz a függvény.

Jelöljük  $N_d$ -vel a  $d$  mélységig ( $l = d$  szintig) megtalálható összes egydimenziós bázisfüggvény számát. Ahogy említettük, az  $n$ -dimenziós bázisfüggvényeik az egydimenziós változatok tenzor szorzatából képezhető, minden változónál  $N_d$  lehetőségünk lenne az 1D bázisfüggvény kiválasztására, így összes  $N_d^n$ -féle  $n$ -dimenziós függvényt kaphatunk. Ez az eljárás az ún. teljes tenzor szorzat képzését jelentené és az eredménye egy „full grid” lenne, amely bázispontjainak száma  $n$  exponenciális függvénye; ez az az exponenciális függés, ami általában kezelhetetlenné teszi a magasabb dimenziójú modellek megfelelő mintavételezését. A sparse grid éppen attól válik „ritkává”, hogy egy alkalmas pl. lineáris megkötéssel korlátozza a lehetséges bázisfüggvények számát:

$$\Phi_d(\mathbf{x}) = \{ \Psi_{l_1}(x_1) \otimes \Psi_{l_2}(x_2) \otimes \cdots \otimes \Psi_{l_n}(x_n) \mid \sum_{i=1}^n l_i \leq d \} \quad (4.10)$$

A csonkítás alapján a  $d$  mélységű interpolációban csak azok a többdimenziós bázisfüggvények fognak szerepelni, amelyeknél az őket felépítő egydimenziós változatok szintjeinek összege nem haladja meg  $d$ -t. A csonkítás működését 2-dimenzióban a 4.2b ábrán illusztráltuk. A többdimenziós esetben a SG interpoláció ugyanolyan rekurzív

folyamat, mint 1-dimenzióban, a különbség csak annyi, hogy a *node*-ok most vektor értékek lesznek.

A SG egy érdekes alkalmazási lehetősége, ha a PCE-hez hasonlóan numerikus kvadraturaként használjuk és közvetlenül próbáljuk meghatározni a Sobol-indexeket definiáló integrálokat 3.3-ban. Erről a felhasználásról bővebb leírás található az irodalomban, lásd pl. [10]. A későbbi teszt példákban illusztrálásként az elsőrendű Sobol-indexek számítását elvégeztem ezzel a módszerrel is.

# 5. fejezet

## Numerikus példák

Ebben a fejezetben fogjuk részletesen ismertetni azokat az elektromágneses modelleket, amiket eddig az érzékenységvizsgálat során feketedoboznak tekintettünk. Két teszt példát fogunk bemutatni: az első egy 4-paraméteres mágneses fluxusszórásos vizsgálat, ami még alacsonyon dimenziós problémának tekinthető. Ezen keresztül fogjuk bemutatni a Sobol-indexek különböző definíciójában és számítási módjában rejlő lehetőségeket. Az itt megszerzett tapasztalatokat a bonyolultabb örvényáramú vizsgálaton fogjuk alkalmazni, mely 6 bemeneti paramétere miatt már magasabb dimenziós problémának számít.

### 5.1. Fluxusszórás teszt példa

Egy  $t = 2$  mm vastag,  $\mu_r = 100$  relatív permeabilitású végtelen kiterjedésű fémlemez egy barázda jellegű anyaghibával terhelt az  $x$ -tengelyére merőlegesen szintén végtelen hosszán. Az elrendezésről egy, a barázdára merőleges síkban vett metszet látható a 5.1a ábrán. A barázdát  $N = 4$ -paraméteres szakaszonként görbével írjuk le, melynek paramétereit az  $a_{1,2} \in [0.6, 1.2]$  mm és  $d_{1,2} \in [0.2, 1.6]$  mm tartományokban változnak. A lemezt homogén  $H_{x0} = 1$  A/m mágneses térrel gerjesztjük és mérjük ennek a változását ( $\Delta H_x$ )  $P = 51$  kimeneti pontban a lemez felszínén azonos távolságokra egymástól. A numerikus szimulációt egy, a tanszéken kifejlesztett és rendelkezésemre bocsátott, integrálegyenleteken alapuló programmal végeztem.

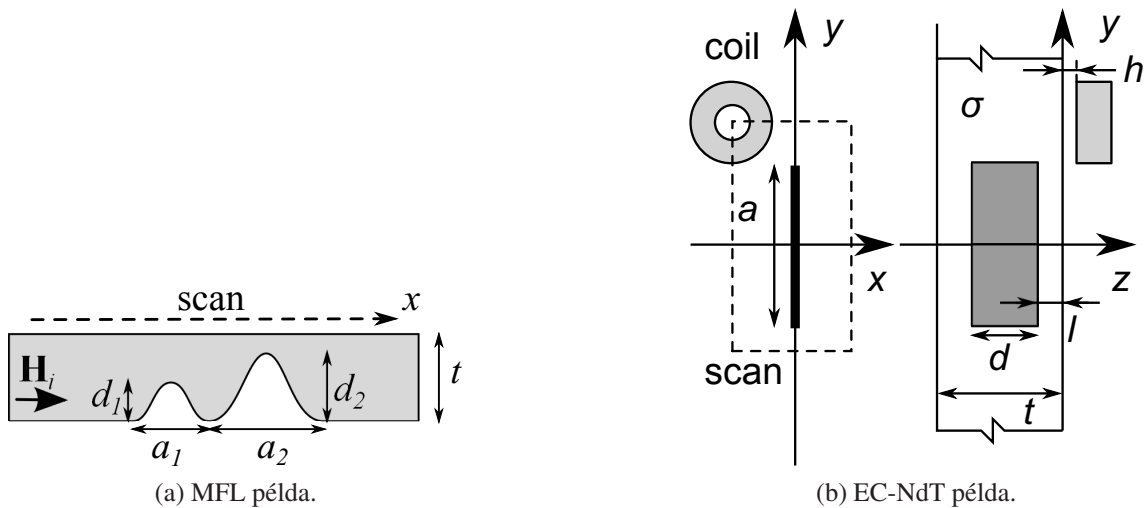
A paraméterek intervallumon belüli eloszlásáról nincsenek a-priori ismereteink, így az egyszerűség kedvéért egyenletes eloszlásúnak tételezzük fel őket. Az érzékenységvizsgálatot háromféleképpen végeztük el: a rövid (néhány tizedmásodperces) futási idő megengedi, hogy viszonylag nagyoknak mondható  $M^{MC} = 1.000.000$  mintából számoljuk a Monte Carlo becslést. Ugyanezen ok miatt felépíthetünk egy pontos, 6-mélységű ( $M^{SG} = 2929$ ) Sparse grid modellt, amit használhatunk numerikus kvadratúráként. Legfeljebb másodfokú ( $p = 2$ ) Legendre-polinomokból építkező PCE együtthatóinak *least-square* becsléséhez minimum  $(p + 1)^N = 81$  minta szükséges, amit a nagyobb pontosság érdekében nyugodtan megemelhetünk  $M^{PCE} = 1000$ -re. Az egyes módszereket az átlá-

gos elsőrendű Sobol-indexek segítségével hasonlítottuk össze, az eredmények (5.2a ábra) azt mutatják, hogy a három módszer stabilan ugyanazokat az indexeket adta eredményül, az értékek egymáshoz képest 1%-os relatív hibán belül helyezkednek el. Ez egyfelől pozitív visszajelzés az eredmények helyességéről, hiszen a módszerek alapvetően más megközelítést használnak. Másfelől levonhatjuk azt a nagyon fontos következtetést, hogy az alacsony dimenziós problémák mindhárom módszerrel egyformán jól kezelhetők. A vizsgálat másik tárgya Sobol-indexek kétféle kiterjesztésének, az átlagos és a vektoriális indexeknek az összehasonlítása. A 5.2b ábrán láthatóak az egyes paraméterekre vonatkozó indexek. Az anyagvizsgálat szempontjából megállapítható, hogy a hiba mélységére érzékenyebb a kimeneti jel, mint a szélességére, ami azt is jelenti, hogy a rekonstrukció során kimeneti jeltől elsősorban a hiba mélységére tudunk nagy valószínűséggel következtetni. Ezt az eredményt mindkét módszer igazolja, ugyanakkor nem azonos mértékben. A vektoriális indexek jobban kiemelik az anyaghiba mélységének fontosságát, amely nagyobb összhangban van az előzetes fizikai képpel: a lemezbe felszínéről a belsejébe behatoló mágneses erővonalakban nagyobb torzulást képes okozni egy függőleges irányítottságú elzárt tartomány, mint egy vízszintes, ezért az anyaghiba mélysége jogosan adódott fontosabb változónak.

A problémához való jobb illeszkedése és precízebb matematikai kidolgozottsága miatt továbbiakban az érzékenységszámításhoz kizárólag a vektoriális indexeket fogjuk használni. A SG kvadratúrával jelenleg csak az elsőrendű indexek számítása lehetséges, mivel az alkalmazásához az indexeket definiáló integrálok zárt alakú ismerete szükséges; ez a totális indexeknél viszonylag bonyolult többes integrálokhoz vezet, amelyek kezelése még megoldandó probléma, és nem képezi jelen dolgozat tárgyát. A második tesztpélda teljes körű jellemzéséhez ugyanakkor fontosak lesznek a totális indexek, ezért a SG kvadratúrát nem fogjuk használni. Végül megjegyezzük, hogy egy összetettebb, szintén mágneses fluxusszóráson alapuló probléma teljes vizsgálatát mutattuk be a közelmúltban megjelent [11] cikkben. Az elrendezés tervezését és elektromágneses modellezést a társszerzők végezték, de az érzékenységvizsgálat a saját munkám a cikkben.

## 5.2. Örvényáramú tesztpélda

Egy  $t = 1.25 \pm 1\%$  mm vastagságú,  $\sigma = 1 \pm 1\%$  MS/m vezetőképességű, végtelen kiterjedésű nem-ferromágneses lemez anyaghibával terhelt. A vastagság ingadozása a felületi egyenetlenséget, a vezetőképességé pedig a mintadarab inhomogén viselkedését hivatott modellezni. Az anyaghibát ideálisnak (infinitezimálisan vékony, légitöltésű) tételezzük fel és 3 paraméterrel írjuk le az 5.1b ábrán látható módon. A szélessége az  $a \in [2, 10]$  mm, míg mélysége és a lemez felszínétől való távolsága a  $d, l \in [0.125, 1]$  mm tartományban változik. Utóbbi kettő összege nem haladhatja meg a lemez mélységét, így érvényes rájuk egy  $d+l \leq t$  megkötés; emiatt feltétlenül összefüggő változókként kell őket kezelni, tehát



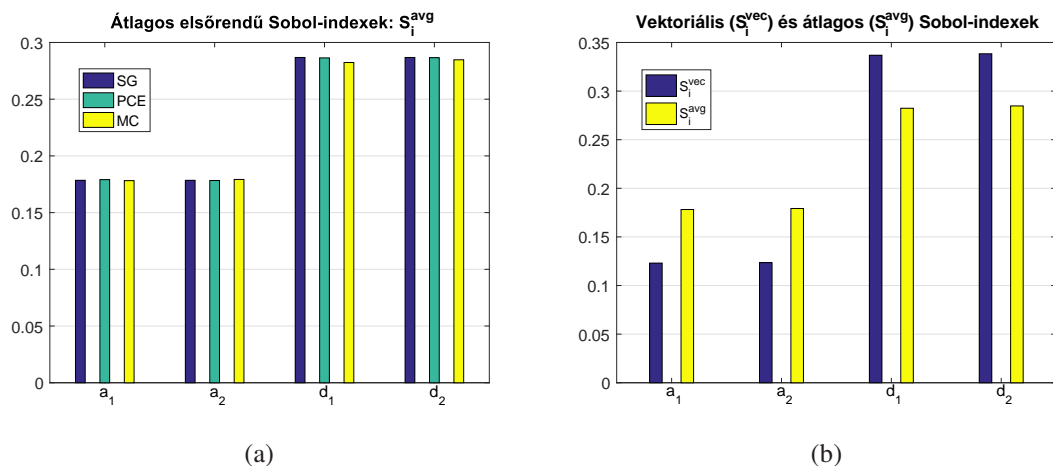
5.1. ábra. A vizsgált konfigurációk vázlatai

a Rosenblatt-transzformáció alkalmazása szükséges. A lemez felett  $h = (0.5 \pm 10\%)$  mm magasságban egy 150 kHz-es időharmonikus gerjesztésű tekercset mozgatunk és mérjük az impedanciájának változását ( $\Delta Z$ ) az  $(x, y) \in \{-2 : 0.5 : 2\} \times \{-8 : 0.5 : 8\}$  mm rácspontok által definiált, összesen 297 darab mérési pontban. A kimenet itt egyszerre vektor és komplex értékű, így szükségessé válik a 3.3.1. fejezet végén leírtak alkalmazása. A direkt probléma megoldása az integrálegyenletek módszerével történt a tanszéken kifejlesztett és rendelkezésemre bocsátott programmal [12], és egyetlen modell kiértékelés ideje átlagosan 12 és 15 másodperc között változik<sup>1</sup>. A hosszú futási idő miatt nincs rá lehetőség, hogy százezres vagy milliós nagyságú mintát hozzunk létre a MC becsléshez, így a helyettesítő modellek használata az egyetlen járható út; a közvetlen kiértékelésből adódó minták kiválthatóak pl. egy kellően pontos SG helyettesítő modellből generált mintákkal. Az érzékenységvizsgálatnál a 2. fejezetnek megfelelően célszerű kezdetben két részre bontani a változókat úgy, mint anyaghiba paraméterek ( $a, d, l$ ) és konfigurációs zaj paraméterei ( $h, t, \sigma$ ), majd végül elvégezni egy 6-paraméteres vizsgálatot is, ahol az általuk okozott bizonytalanságokat össze tudjuk hasonlítani.

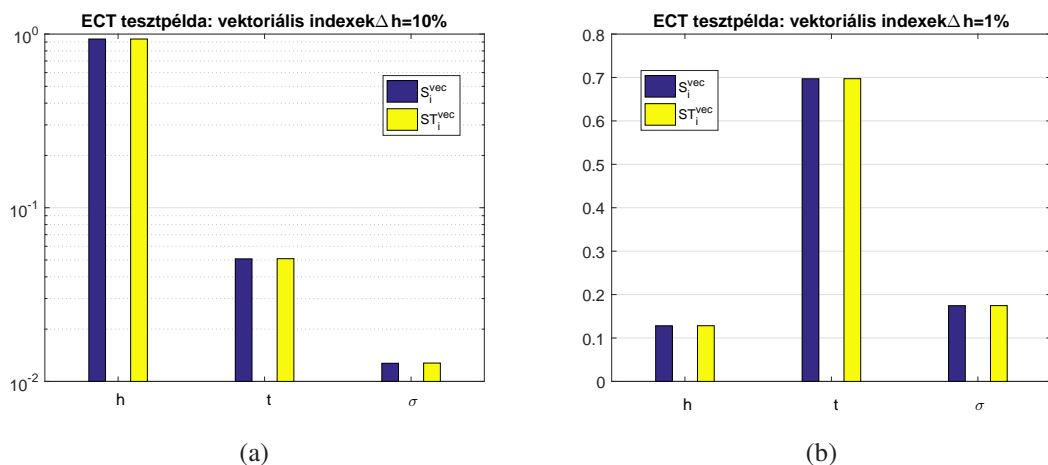
Elsőként vizsgáljuk a zaj paramétereit, az anyaghiba paramétereit pedig rögzítsük a kijelölt tartomány szerinti középértékükön. A Sobol-indexek számításához (az előző feladatból levont tapasztalatok alapján) használjunk  $p = 2$ ,  $M^{PCE} = 1000$  paraméterű PCE modellt. A futási idő kritikus volta miatt ez esetben fontos, hogy a SG alapú MC becslést nagyjából azonos számú modell-kiértékelés alapján végezzük el: a választás a 6-mélységű SG-re esett, mivel ez  $M^{SG} = 1073$  mintát igényel. A Monte Carlo becsléshez a SG modellből 100.000 mintát fogunk generálni.

A PCE-vel számolt eredmények (5.3a ábra) alapján a *lift-off* egyértelműen a legfontosabb paraméter, Sobol-indexe közel van a maximális 1-hez, miközben a másik két paraméteré legalább egy nagyságrenddel kisebb. Mindez az anyagvizsgálat szempontjából

<sup>1</sup>Minden számítást i7 CPU-val és 32...64 GB memóriával rendelkező PC-ken végeztem.



5.2. ábra. Az MFL példában kapott Sobol-indexek: átlagos elsőrendű indexek MC, SG és PCE módszerekkel (a) és a vektoriális indexek összehasonlítása az átlagosakkal (b)

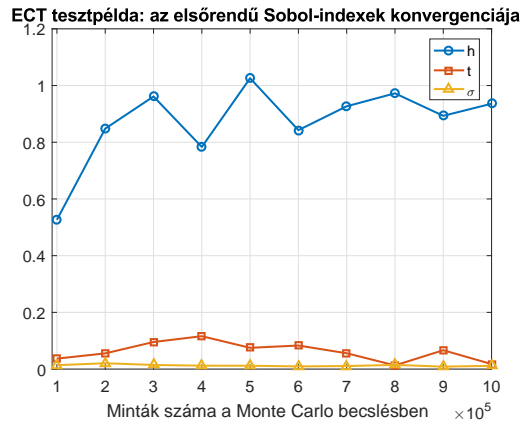


5.3. ábra. A konfigurációs zaj paramétereireihez tartozó Sobol-indexek a *lift-off* 10%-os (a) és 1%-os (b) relatív megváltozása mellett.

azt jelenti, hogy a mérőtekerces távolságának ingadozása a mérési bizonytalanság legfőbb forrása, így a mérés pontosságának növeléséhez ezt a paramétert kell a legstabilabban a névleges értékén tartani. Érdeemes megfigyelni, hogy az elsőrendű és a totális Sobol-indexek mindhárom változónál közel esnek egymáshoz, vagyis a változóknak lényegében nincsen semmilyen kölcsönhatása, ami befolyásolhatná a kimeneti jelet; a hatásaik így a többitől *függetlenül* adódnak hozzá a kimeneti jelhez és az egyik paraméter intervallumának csökkentése egyértelműen maga után vonja a Sobol-indexének csökkenését, és a másik két paraméterének növekedését. Ezt illusztrálja az 5.3b ábra, ahol a *lift-off* ingadozását a névleges értékétől 1%-ra csökkentettük. Ez láthatóan a felszíni ingadozás hatása alá vitte a Sobol-indexét, tehát biztosan növeltük vele a mérés pontosságát.

A SG-alapú Monte Carlo becslés nagyjából 6% pontosan adta ugyanazokat az eredményeket, mint a PCE, a két módszer ugyanakkor nem mondható egyformán stabilnak.





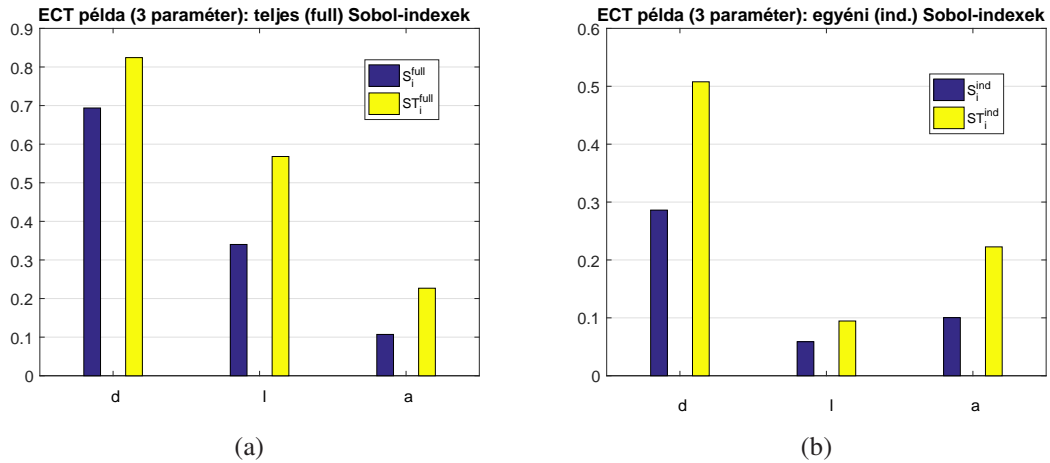
5.4. ábra. A MC becslés konvergenciája 6-mélységű SG mellett.

A PCE elsőfokú polinomok és mindösszesen 100 minta alapján már 3 tizedesjegyre pontosan megadták a Sobol-indexeket, amik rendkívül jó konvergenciáról tanúskodnak. A SG-nél ugyanakkor az eredmények még 60.000 minta felett is kissé szórnak, aminek az oka a Monte Carlo módszer gyengébb konvergenciája (5.4. ábra). Kellő számú minta hiányában viszonylag nagy is lehet numerikus pontatlanság, például  $M = 50.000$  mintánál a Sobol-index nagyobb 1-nél! A PCE a valószínűségi eloszlásra nézve bontja fel ortogonális bázisban a vizsgált függvényt, ami a statisztikai momentumok becslésénél eredményesebbnek bizonyult. Megjegyzendő, hogy a SG ezzel szemben jobb interpolációs tulajdonságokkal rendelkezik. 1000 további véletlen minta alapján számolt keresztvalidáció a PCE-nél  $10^{-4}$ , a SG-nél  $10^{-5}$  nagyságrendű relatív hibát eredményezett, tehát ugyanannyi modell kiértékelést felhasználva a SG egy nagyságrenddel pontosabb approximációt biztosít.

A következő 3-paraméteres esetben a konfigurációs zaj paramétereit rögzítjük a névleges értékükön és az anyaghiba paramétereit vizsgáljuk. Ezzel a szimulációval arra kapunk választ, hogy mi az inverz probléma megoldhatóságának elvi határa. Ideális, zajmentes esetben ugyanis közvetlen képet kapunk a defektparaméterek fontosságáról: egy nagy index alapján nagyobb valószínűséggel lehet következtetni az adott paraméter értékére, ugyanakkor a nullához közeli indexű paraméterek visszafejtésére az esély minimális. A számításhoz az előzőek alapján pontosabbnak megállapított PCE-t fogjuk használni. A teljes és az egyéni indexek az 5.5. ábrán láthatóak.

Az eredmények alapján itt is az anyaghiba mélysége a legfontosabb paraméter; akár a teljes (5.5a), akár az egyéni (5.5b) indexeket nézzük, jelentősen nagyobb érték tartozik hozzá, így ennek a paraméternek a meghatározására van a legnagyobb valószínűség a kimeneti jel alapján. A visszafejtés azonban nem egyértelmű. Ha a Sobol-indexeket elsőrendű/totális viszonylatban hasonlítjuk össze, akkor látható, hogy közöttük jelentős az eltérés, azaz ebben a példában a paraméterek különböző kölcsönhatásainak is jelentős szerepe van, így nem lehet őket függetlennek tekinteni egymástól. Hasonló a helyzet, ha a teljes/egyéni indexeket vetjük össze: a  $d$  és  $l$  paraméterek indexeinek jelentős ré-

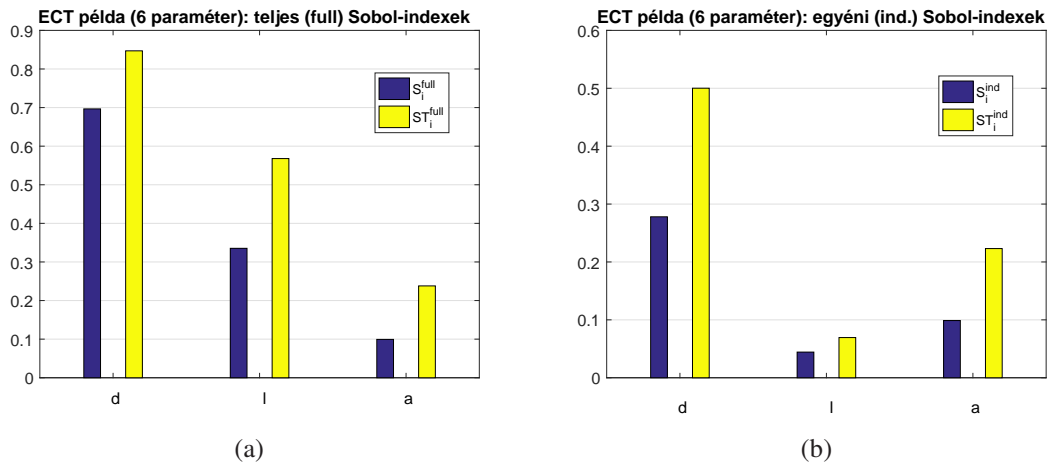




5.5. ábra. Az anyaghiba Sobol-indexei 3-paraméteres szimulációban: (a) teljes (full) indexek és (b) egyéni (ind.) indexek.

szét teszik ki az egymástól való függésből származó hatások. A kölcsönhatásokból és kötöttségekből eredő hatások feltétlenül nehezítik egy paraméter detektálhatóságát, mivel a kimeneti jel változását nem tudjuk egyértelműen ennek a paraméternek a megváltozásához hozzárendelni. Általánosságban akkor mondhatóak optimálisnak a Sobol-indexek, ha az elsőrendű, egyéni index értéke közel esik a totális, teljes indexhez: ez az eset pontosan azt jelenti, hogy a paraméter önmagában vett, kötöttségektől mentes hatása közel azonos a mindent egybevéve vett hatásokkal, tehát jól következtethetünk e paraméter saját megváltozására. A  $d$  anyaghibamélység esetén ez az  $S_i^{ind}/ST_i^{full}$  viszony  $0.28/0.85 < 0.5$  semmiképpen sem mondható jónak, hiszen a paraméter saját hozzájárulása nem teszi ki az összhatás felét sem. A többi változónál hasonlóan rossz a helyzet, de ott még a Sobol-indexek a  $d$  paraméter indexéhez képest is elmaradnak. Összességében azt mondhatjuk, hogy a hiba  $d$  mélységét bizonyos mértékig képesek lehetünk becsülni, de az anyaghiba  $a, d, l$  paraméterekre való szimultán felbontására nincs elvi lehetőség. Ezt a lehetőséget már korábban is felvetettük a 2. fejezetben: a direkt problémával ellentétben az inverz probléma megoldása nem mindig egyértelmű. Nem lehetetlen azonban, hogy  $a, d, l$  valamilyen függvényére jó közelítést tudunk mondani, pl. az  $a \times d$  szorzatra, és ekkor a hiba *területe* lehet egy jól becsülhető változó: ennek eldöntése természetesen további alapos kutatást igényel.

Végül néhány további megjegyzés, amit a Sobol-indexekből szintén levonhatunk: az  $l$  anyaghiba pozíció egyéni indexei kicsik, míg teljes indexei már nagyobbak. Ez azt jelenti, hogy az anyaghiba pozíciója önmagában nem fontos paraméter; csak akkor válik fontossá, ha az adott mélységben eleve kellő méretű anyaghiba van jelen. Egy másik érdekesség, hogy az  $a$  defektszélesség indexei egyéni/teljes viszonylatban azonosak: ennek oka, hogy ez a paraméter független a másik kettőtől, így egyértelműen transzformálható a  $[0, 1]$  intervallumba, ezáltal csak egyféle Sobol-indexei léteznek. Érdekes még megemlíteni, hogy a kötöttségekből adódó hatások csak azért vannak jelen a modellben, mert a lemez

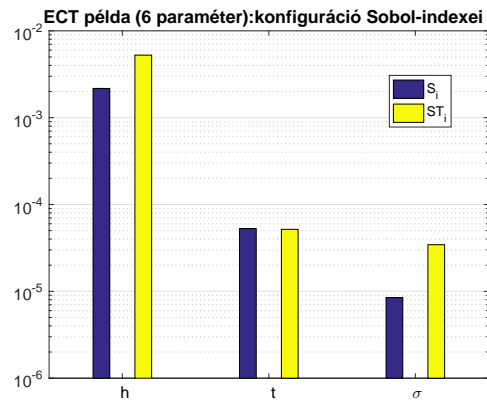


5.6. ábra. Az anyaghiba Sobol-indexei 6 paraméteres szimulációban: (a) teljes (full) indexek és (b) egyéni (ind.) indexek.

vékony és a  $d + l$  összeg elméletben túllépheti a lemez vastagságát. Amennyiben a lemez vastagabb  $d + l$  maximális értékénél, úgy a változók függetlennek kezelhetők, ezáltal növelhető a Sobol-indexeknek a fent említett aránya és a rekonstrukció valószínűsége.

Az utolsó tesztp probléma a 6-paraméteres eset, amiben minden változót bizonytalan-ként veszünk figyelembe: a cél, hogy összehasonlítsuk a defekt és a konfigurációs paraméterek hatásait. A Sobol-indexek számítására itt is kézenfekvő lenne a PCE, azonban még harmadfokú Legendre-polinomok esetén sem csökkent az interpolációs hiba a 20% alá. Negyedfokú polinomoknál már  $5^6 = 15625$  mintára lenne szükség a becsléshez, ami közel 4 napos szimulációt jelentene, ennek ellenére a jobb interpolációs hiba nem garantált. Az alapvető probléma, hogy a PCE egy *globális* bázissal dolgozik, így ha a függvény lokálisan gyorsan változik, akkor ennek pontos közelítése csak a teljes tartományon értelmezett bázisfüggvények fokszámának növelésével lehetséges, ami nagyban növeli a bázisfüggvények számát, de nem feltétlenül biztosít pontosabb eredményeket. A mi tesztfüggvényünk tipikusan ilyen, hiszen az anyaghibától távol és annak közelében jelentősen ugrik a kimeneti jel. A SG ezzel szemben rácspontjai (*node*-jai) révén egy *lokális* bázist biztosít, így fokozatosan növelhető a pontosság a függvény kritikus részein anélkül, hogy jelentősen több bázisfüggvényt kelljen felvenni a teljes tartományon. 5-mélységű SG felépítéséhez 4865 mintára van szükség, tehát egy napon belüli a szimulációs idő.

A SG interpoláció alkalmazásával 4%-os illetve 6%-os interpolációs hibát sikerült elérni, ami kellően jónak mondható ahhoz, hogy mintákat generálhassunk belőlük a MC becsléshez. A defektparaméterek indexei az 5.6. ábrán, míg a konfigurációs zaj indexei az 5.7. ábrán láthatóak. Megállapíthatjuk, hogy utóbbiak bő egy nagyságrenddel kisebb értékűek, így nincsen érdemi befolyásuk a kimeneti jel bizonytalanságában. Így az anyagvizsgálati eljárásnak optimálisnak mondható abból a szempontból, hogy a konfigurációs zaj nem befolyásolja számottevően a kimenetet bizonytalanságát, egyúttal nem rontják az inverz probléma megoldhatóságára tett korábbi megállapításinkat és értékük rögzíthető a



5.7. ábra. A konfigurációs paraméterek Sobol-indexei 6 paraméteres szimulációban.

névleges értékükre.

Megjegyezzük, hogy hasonló vizsgálatot mutattunk be a közelmúltban egy nemzetközi konferencián (*22nd International Workshop on Electromagnetic Nondestructive Evaluation*), amelyhez kapcsolódóan cikket nyújtottunk be a konferencia válogatáskötetébe [13].

## 6. fejezet

### Összefoglalás

A dolgozat fő célja az érzékenységvizsgálat bemutatása és illusztrálása volt az elektromágneses roncsolásmentes anyagvizsgálat témakörébe eső tesztfeladatokon keresztül. Friss matematikai eredményekből kiindulva, azokat részben kiegészítve hoztam létre az elektromágneses roncsolásmentes anyagvizsgálat speciális követelményeinek megfelelő érzékenységvizsgálati módszereket. Az elektromágneses szimulációkat a tanszéken rendelkezésemre bocsátott programokkal végeztem, de az érzékenységvizsgálat és a helyettesítő modellezés algoritmusaihoz saját implementációt készítettem Matlab környezetben.

Megállapítható, hogy az érzékenységvizsgálat hatékony eszköznek bizonyult a különböző eljárások jellemzésére és fontos következtetéseket tudtam levonni mind az anyaghiba detektálásának, mind az inverz probléma megoldhatóságának elvi kérdéseiről. Rámutattam, hogy az anyaghiba mélysége a vizsgált feladattípus (nagy kiterjedésű lemez) esetén általánosságban egy könnyebben kimutatható paraméter, ugyanakkor az anyaghiba valamennyi paraméterének egyidejű meghatározása pusztán a kimeneti jel alapján elvi okokból nem megoldható. A mérési eljárás pontosításának egy lehetséges módja a mérőszensor (pl. tekercs) távolságának minél precízebb beállítása.

Az eredmények és az azokból levonható gyakorlati következtetések számot tartanak tudományos és ipari érdeklődésre is, ahogyan azt az eddig folyóirat és konferencia publikációink tükrözik.

A dolgozat továbbfejlesztési lehetőségei között egyértelműen az érzékenységvizsgálat pontosítását kell megemlíteni. Egyrészt láttuk, hogy a PCE numerikusan stabil a kis dimenziójú problémákra; egy hatékonyabban megválasztott (pl. lineárisan csonkított) polinomiális bázissal növelhető az általa még kezelhető problémák dimenziója. Nagy dimenzióknál már a SG használata szükséges, ami egyfelől szintén pontosítható, pl. az itt ismertetett konvencionális rács helyett adaptív rács alkalmazásával, másfelől a SG kvadratúra kiterjesztésével, ami a későbbiekben az egyik leghatékonyabb eszköz lehet az érzékenységvizsgálat alkalmazásához. Ezen feladatok elvégzése és optimalizálása jelentik a jövőbeni kihívásokat.

# Irodalomjegyzék

- [1] UQLab: The framework for uncertainty quantification. Chair of Risk, Safety and Uncertainty Quantification. [Online]. Available: [www.uqlab.com](http://www.uqlab.com)
- [2] I. M. Sobol', „Sensitivity estimates for nonlinear mathematical models,” *Mathematical Modelling and Computational Experiments*, vol. 1, no. 4, pp. 407–414, 1993.
- [3] F. Gamboa and A. L. Alexandre Janon, Thierry Klein, „Sensitivity indices for multivariate outputs,” *Comptes Rendus Mathematique*, vol. 351, no. 7-8, pp. 307–310, 2013.
- [4] S. Kucherenko, O. Klymenko, and N. Shah, „Sobol' indices for problems defined in non-rectangular domains,” *Reliability Engineering and System Safety*, vol. 167, pp. 218–231, 2017.
- [5] T. A. Mara, S. Tarantola, and P. Annoni, „Non-parametric methods for global sensitivity analysis of model output with dependent inputs,” *Environmental Modelling and Software*, Elsevier, vol. 72, pp. 173–183, 2015.
- [6] B. Sudret, „Global sensitivity analysis using polynomial chaos expansions,” *Reliability Engineering and System Safety*, vol. 93, no. 7, pp. 964–979, 2008.
- [7] A. V. Oscar Garcia-Cabrejo, „Global sensitivity analysis for multivariate output using polynomial chaos expansion,” *Reliability Engineering and System Safety*, vol. 126, pp. 25–36, 06 2014.
- [8] S. Bilicz, „Sparse grid surrogate models for electromagnetic problems with many parameters,” *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 52, no. 3, pp. 1–4, 2016.
- [9] H.-J. Bungartz and M. Griebel, „Sparse grids,” *Acta Numerica*, vol. 13, pp. 147–269, 2004.
- [10] G. T. Buzzard, „Global sensitivity analysis using sparse grid interpolation and polynomial chaos,” *Reliability Engineering & System Safety*, vol. 107, pp. 82–89, 2012.
- [11] G. Vértesy, B. Bálint, A. Bingler, S. Gyimóthy, S. Bilicz, and J. Pávó, „Simulation of magnetic flux distribution for the measurement of the local thinning of ferromagne-

tic plates,” *International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics*, vol. Preprint, no. Preprint, pp. 1–16, 2017.

- [12] J. Pávó and D. Lesselier, „Calculation of eddy current testing probe signal with global approximation,” *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 42, no. 4, pp. 1419–1422, 2006.
- [13] A. Bingler and S. Bilicz, „Sensitivity analysis using a sparse grid surrogate model in electromagnetic nde,” in *Electromagnetic Nondestructive Evaluation*, ser. Studies in Applied Electromagnetics and Mechanics. IOS Press, 2018, vol. XXI, pp. 1–8.

# Függelék

Ebben a fejezetben fogjuk megadni a 3.3.1. fejezetben kimondott és a numerikus példánál felhasznált tételek bizonyítását. A könnyebb érthetőség kedvéért itt még egyszer feltüntetjük a definíciókat, amikkel a tételek kapcsolatosak.

Legyen adott egy

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = (F_1(\mathbf{x}), F_2(\mathbf{x}), \dots, F_P(\mathbf{x})) \quad (6.1)$$

vektor kimenetű függvény. A függvény varianciáján a

$$D^{\text{vec}} = \text{Var}[\mathbf{F}(\mathbf{x})] = \mathbb{E} [\|\mathbf{H}(\mathbf{x})\|_2^2] = \mathbb{E} [\|\mathbf{F}(\mathbf{x}) - \mathbf{F}_0\|_2^2] \quad (6.2)$$

várható értéket értjük, ahol

$$\mathbf{F}_0 = (f_0^{(1)}, f_0^{(2)}, \dots, f_0^{(n)}) \quad (6.3)$$

a komponensfüggvények várható értékeiből álló vektor. Az  $F_k(\mathbf{x})$ ,  $1 \leq k \leq P$  komponensfüggvény Sobol-féle felbontásának definíciója a következő:

$$F_k(\mathbf{x}) = f_0^{(k)} + \sum_{i=1}^n f_i^{(k)}(x_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq n} f_{ij}^{(k)}(x_i, x_j) + \dots + f_{1,2,\dots,n}^{(k)}(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (6.4)$$

Az  $\mathbf{F}(\mathbf{x})$  vektor kimenetű függvény Sobol-féle felbontásán azt a szintén  $2^n$  tagú összeget értjük, melynek minden tagja egy vektor és ezek megegyeznek a komponensfüggvények Sobol-féle felbontásában azonos helyen szereplő tagfüggvényekből álló oszlopvektorokkal:

$$\begin{aligned}
\mathbf{F}(\mathbf{x}) &= \begin{pmatrix} F_1(\mathbf{x}) \\ F_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ F_P(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0^{(1)} \\ f_0^{(2)} \\ \vdots \\ f_0^{(P)} \end{pmatrix} + \sum_{i=1}^n \begin{pmatrix} f_i^{(1)}(x_i) \\ f_i^{(2)}(x_i) \\ \vdots \\ f_i^{(P)}(x_i) \end{pmatrix} + \\
&+ \sum_{1 \leq i < j \leq n} \begin{pmatrix} f_{ij}^{(1)}(x_i, x_j) \\ f_{ij}^{(2)}(x_i, x_j) \\ \vdots \\ f_{ij}^{(P)}(x_i, x_j) \end{pmatrix} + \dots + \begin{pmatrix} f_{1,2,\dots,n}^{(1)}(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_{1,2,\dots,n}^{(2)}(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_{1,2,\dots,n}^{(P)}(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{6.5}$$

(1). *Tétel.*  $\mathbf{F}(\mathbf{x})$  varianciája előáll a komponensfüggvények varianciájának összegeként.

*Bizonyítás:*

$$\begin{aligned}
D^{\text{vec}} = \text{Var}[\mathbf{F}(\mathbf{x})] &= \mathbb{E}[\|\mathbf{F}(\mathbf{x}) - \mathbf{F}_0\|_2^2] = \mathbb{E}\left[\left\|\begin{pmatrix} F_1(\mathbf{x}) - f_0^{(1)} \\ F_2(\mathbf{x}) - f_0^{(2)} \\ \vdots \\ F_n(\mathbf{x}) - f_0^{(n)} \end{pmatrix}\right\|_2^2\right] = \\
&= \mathbb{E}\left[\sum_{j=1}^P (F_j(\mathbf{x}) - f_0^{(j)})^2\right] = \sum_{j=1}^P \mathbb{E}(F_j(\mathbf{x}) - f_0^{(j)})^2 = \sum_{j=1}^P D(F_j(\mathbf{x}))
\end{aligned} \tag{6.6}$$

A lépések során kihasználtuk a 2-es norma definícióját és a várható érték, mint operátor lineáris voltát, valamint az utolsó lépésben felismertük a skalár függvényeken értelmezett variancia definícióját.

Jelöljük az  $\mathbf{F}(\mathbf{x})$  függvény Sobol-féle felbontásában a  $\mathbf{v} \in \mathbf{x}$  csoporthoz tartozó tagfüggvényt

$$\mathbf{F}_{I(\mathbf{v})}(\mathbf{v}) = \begin{pmatrix} f_{I(\mathbf{v})}^{(1)}(\mathbf{v}) \\ f_{I(\mathbf{v})}^{(2)}(\mathbf{v}) \\ \vdots \\ f_{I(\mathbf{v})}^{(P)}(\mathbf{v}) \end{pmatrix} \text{-vel,} \tag{6.7}$$

ahol  $I(\mathbf{v})$  egy indexhalmaz és  $\mathbf{v} = (x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_s})$ ,  $1 \leq i_1 \leq i_2 \leq \dots \leq i_s \leq n$  esetén  $I(\mathbf{v}) = \{i_1, i_2, \dots, i_s\}$ .

(2).*Tétel.*  $\mathbf{F}_{I(\mathbf{v})}(\mathbf{v})$  varianciája előáll a komponensfüggvények varianciájának összegeként.

*Bizonyítás.* Azt kell felismernünk, hogy  $\mathbf{F}_{I(\mathbf{v})}(\mathbf{v})$  komponensfüggvényei mind korábbi skalár kimenetű függvények Sobol-felbontásának tagjai, amik a felbontás definíciója alapján zérus várható értékűek. Így  $\mathbf{F}_{I(\mathbf{v})}(\mathbf{v})$  várható értéke az azonos nulla vektor lesz,



tehát varianciája megegyezik a saját kettes normája négyzetének várható értékével.

$$\begin{aligned} \text{Var} [\mathbf{F}_{I(\mathbf{v})}(\mathbf{v})] &= D [\mathbf{F}_{I(\mathbf{v})}(\mathbf{v})] = \mathbb{E} \left[ \|\mathbf{F}_{I(\mathbf{v})}(\mathbf{v})\|_2^2 \right] = \\ &= \mathbb{E} \left[ \sum_{j=1}^P \left( f_{I(\mathbf{v})}^{(j)}(\mathbf{v}) \right)^2 \right] = \sum_{j=1}^P \mathbb{E} \left[ f_{I(\mathbf{v})}^{(j)}(\mathbf{v})^2 \right] = \sum_{j=1}^P D \left( f_{I(\mathbf{v})}^{(j)}(\mathbf{v}) \right) \end{aligned} \quad (6.8)$$

Az utolsó lépésben ismételten kihasználtuk, hogy a komponensfüggvények varianciája valójában megegyezik a második momentumukkal. Abban a speciális esetben, amikor  $\mathbf{v} = \{x_i\}$  az előző állítással együtt éppen azt kapjuk, hogy az általunk definiált elsőrendű Sobol-indexek vektoriális kimenetnél előállíthatók a komponensfüggvények varianciája és részvarianciái segítségével:

$$S_i^{\text{vec}} = \frac{\text{Var} [\mathbf{F}_i(x_i)]}{\text{Var} [\mathbf{F}(\mathbf{x})]} = \frac{\sum_{j=1}^P D_i^{(j)}}{\sum_{j=1}^P D^{(j)}} \quad (6.9)$$

(3).*Tétel.* A vektoriális esetben definiált Sobol-féle felbontás *teljes*, azaz  $\mathbf{F}(\mathbf{x})$  varianciája továbbra is felbomlik a  $\mathbf{F}_{I(\mathbf{v})}(\mathbf{v})$  tagfüggvények varianciájának összegére.

*Bizonyítás.* Az állítás igazolásához már minden segédteétel a rendelkezésünkre áll: igazoltuk, hogy  $\mathbf{F}(\mathbf{x})$  varianciája felbontható az  $F_j(\mathbf{x})$  komponensek varianciájának összegére. Ezekről tudjuk a Sobol-féle felbontás eredeti definíciója alapján, hogy felbomlanak a tagfüggvényeik varianciájának összegére. Utóbbiakról pedig éppen most láttuk be, hogy azonos indexhalmazhoz tartozó részvarianciák összege megadja az  $\mathbf{F}_{I(\mathbf{v})}(\mathbf{v})$  részfüggvény varianciáját. Mindez egyenletek formájában:

$$\begin{aligned} \text{Var} [\mathbf{F}(\mathbf{x})] &= \sum_{j=1}^P \text{Var} [F^{(j)}(\mathbf{x})] = \sum_{j=1}^P \sum_{\mathbf{v} \subseteq \mathbf{x} \setminus \{0\}} \text{Var} [F_{I(\mathbf{v})}^{(j)}(\mathbf{v})] = \\ &= \sum_{\mathbf{v} \subseteq \mathbf{x} \setminus \{0\}} \sum_{j=1}^P \text{Var} [F_{I(\mathbf{v})}^{(j)}(\mathbf{v})] = \sum_{\mathbf{v} \subseteq \mathbf{x} \setminus \{0\}} \text{Var} [\mathbf{F}_{I(\mathbf{v})}(\mathbf{v})] \end{aligned} \quad (6.10)$$

Ez az összefüggés teremti meg a lehetőséget arra, hogy a *totális* Sobol-indexeket vektoriális függvényeknél is ugyanúgy számolhassuk, mint az elsőrendűeket. Az eltérés mindössze annyi, hogy a számlálóban a komponensfüggvények  $D_i^{\text{T}(j)}$  totális részvarianciáit kell összeadni, amely mindazon részvarianciák összege, amelyek kapcsolatban állnak az  $x_i$  változóval:

$$ST_i^{\text{vec}} = \frac{\sum_{j=1}^P D_i^{\text{T}(j)}}{\sum_{j=1}^P D^{(j)}}, \quad (6.11)$$

ahol  $D_i^{\text{T}(j)}$ -re fennáll, hogy  $D_i^{\text{T}(j)} / D^{(j)} = ST_i^{(j)}$ .