Journal of Education and Science (ISSN 1812-125X), Vol: 30, No: 2, 2021 (148-164)

Bayesian Approach for Analyzing Computer Models using Gaussian Process Model

Hasan Mohammedali Saied[1*], Younus Al-Taweel[2]

[1*,2]Department of Mathematics, College of Education of Pure Science, University of Mosul, Mosul, IRAQ

E-mail: [1*]asan.esp81@student.uomosul.edu.iq, [2]younus.altaweel@uomosul.edu.iq

(Received January 18, 2021; Accepted March 22, 2020; Available online June 01, 2021)

DOI: 10.33899/edusj.2021.129374.1138,

ABSTRACT

Mathematical models, usually implemented in computer programs known as computer models, are widely used in all areas of science and technology to represent complex systems in the real world. However, computer models are often so complex in such that they require a long time in computer to be implemented. To solve this problem, a methodology has been developed that is based on building a statistical representation of a computer model, known as a Gaussian process model. As any statistical model, the Gaussian process model is based on some assumptions. Several validation methods have been used for checking the assumptions of the Gaussian process model to obtain the best probabilistic model as an alternative to the computer model. These validation methods are based on a comparison between the output of the computer model and the output of the Gaussian process model for some test data. In this work, we present the Bayesian approach for constructing a Gaussian process model. We also suggeste and compare validation methods that consider the correlation between the output of the computer model and the Gaussian process model predictions with those that do not consider the correlation between these data. We apply the Gaussian process model with the suggested validation methods to real data represented by the robot arm function. We have found that the methods that consider the correlation give more accurate and reliable results. We achieved the calculations using the R program.

Keywords: Bayesian Approach, Gaussian Process Model, Computer Model, Cholesky Decomposition, Robot Arm Function.

اسلوب بيز في تحليل النماذج الحاسوبية باستخدام نماذج عمليات كاوس

حسن محمد علي سعيد، يونس حازم الطويل

قسم الرياضيات، كلية التربية للعلوم الصرفة، جامعة الموصل، الموصل ، العراق

الملخص

تُستخدم النماذج الرياضية، التي يتم تنفيذها عادةً في برامج الحاسوب المعروفة باسم النماذج الحاسوبية، على نطاق واسع في جميع مجالات العلوم والتكنولوجيا لتمثيل الظواهر المعقدة في العالم الحقيقي. النماذج الحاسوبية غالبًا ما تكون معقدة لدرجة أنها تتطلب وقتا كبيرًا من وقت الحاسوب لتنفيذها. لحل هذه المشكلة، تم تطوير منهجية تعتمد على بناء تمثيل إحصائي للنموذج الحاسوبي، يُعرف باسم نموذج عملية كاوس. نموذج عملية كاوس مبني على بعض الفرضيات، لذا تم استخدام عدة طرق للتحقق من صحة الفرضيات

المستخدمة في بنائه من أجل الحصول على أفضل نموذج احتمالي كبديل للنموذج الحاسوبي. تستند طرق التحقق هذه إلى المقارنة بين مخرجات النموذج الحاسوبي ومخرجات نموذج عملية كاوس لبعض بيانات الاختبار. في هذا العمل نقدم اسلوب بيز لبناء نموذج عملية كاوس بالإضافة الى بعض طرق التحقق من صحة الفرضيات التي استخدمت. إضافة إلى ذلك، نقارن بين طرق التحقق التي تأخذ بنظر الاعتبار الارتباط بين بيانات الاختبار وبين الطرق التي لا تأخذ بنظر الاعتبار الارتباط بين تلك البيانات. تم تطبيق نموذج عملية كاوس وطرق التحقق المقترحة على بيانات حقيقية متمثلة بدالة ذراع الروبوت حيث وجدنا ان طرق التحقق التي تأخذ بنظر الاعتبار الارتباط بين بيانات الاختبار تعطي نتائج دقيقة وموثوقة. جميع الحسابات تم اجراها باستخدام برنامج R.

<u>الكلمات المفتاحية:</u> اسلوب بيز، نموذج عملية كاوس، النموذج الحاسوبي، تجزئة كولسكي, دالة ذراع الروبوت.

---

1. المقدمة

النماذج الحاسوبية (Computer Models) والمعروفة ايضا باسم المحاكيات (Simulators) هي دوال رياضية لنظام رياضي معين أو علاقة معينة يتم تنفيذها في الحاسوب. تم استخدام النماذج الحاسوبية كنماذج بديلة عن الانظمة الواقعية في جميع مجالات العلوم والتكنولوجيا تقريبا [1]. التجارب الواقعية عادة ما تكون مكلفة أو تستغرق وقتا اطول, لذلك فانه يتم عمل محاكاة عن طريق تنفيذ نموذج حاسوبي لقيم مختلفة من البيانات. عادةً ما تكون النماذج الحاسوبية حتمية للإدخال والاخراج, حيث يؤدي تنفيذ النموذج الحاسوبي مرة اخرى لنفس قيم الادخال الى إعطاء المخرجات نفسها دائماً. ان قيم الاخراج غير معلومة من منظور بيز قبل تنفيذ النموذج الحاسوبي لمجموعة ادخال معينة ويمكن التعبير عن عدم اليقين (Uncertainty) حول ناتج النموذج الحاسوبي من خلال عملية عشوائية, اي من خلال تكوين توزيع احتمالي. النتيجة هي تمثيل احصائي لنموذج حاسوبي يعرف بإسم نموذج عملية كاوس (Gaussian Process Model). ان نماذج عمليات كاوس تم تطويرها في ثمانينيات القرن الماضي من قبل خبراء برمجيات الحاسوب منهم على سبيل المثال [1] و[2] و[3]. وصف[4] كيفية استخدام عملية كاوس لتمثيل دالة غير معروفة, وعمليات كاوس هي الاداة الرئيسية لبناء نموذج عملية كاوس لتمثيل احكامنا حول النموذج الحاسوبي. يمكن بناء نموذج عملية كاوس باستخدام مجموعة من قيم النموذج الحاسوبية تعرف بالبيانات الاولية او بيانات التدريب (Training Data). بمجرد إنشاء نموذج عملية كاوس يمكن إجراء تحليلات مختلفة دون تنفيذ النموذج الحاسوبي مرة أخرى. أبسط هذه التحليلات هو التنبؤ بقيم المخرجات للمدخلات التي لم يتم تنفيذها بالنموذج الحاسوبي. قدم [5] تطبيقا لعمليات كاوس على اختيار المتغيرات والتنبؤ في نماذج حاسوبية. عندما يكون هناك عدم يقين بشأن المدخلات يمكن ان تكون طرق مونتي كارلو (Monte Carlo) المطبقة على النموذج الحاسوبي مكلفة جدا, استخدم [6] نموذج عملية كاوس لتحديد عدم اليقين في مخرجات النموذج الناتجة من عدم اليقين في المدخلات.

لاستكشاف كيفية تأثير التغيرات في المدخلات على المخرجات, وصف كل من [7] بعض المقاييس المختلفة لقياس الحساسية (Sensitivity) باستخدام نموذج حاسوبي. قدم [8] تحليل الحساسية باستخدام نموذج عملية كاوس من منظور استدلال بيز

(Bayesian Inference) حول مقاييس الحساسية بالاعتماد على التباين. استعرض [9] بعض التطبيقات الحديثة التي تم فيها استخدام نموذج عملية كاوس كبديل للنموذج الحاسوبي, وقدموا ثلاث دراسات حالة حيث تم فيها توضيح تحليل الحساسية وتحليل عدم اليقين. تم استخدام نموذج عمليات كاوس كتقريبات عشوائية لنموذج حاسوبي عالي الكلفة في العديد من مجالات العلوم, لكن بناء نموذج عملية كاوس يتطلب بعض الافتراضات والتقريبات. مالم يكن نموذج عملية كاوس يمثل النموذج الحاسوبي بشكل صحيح, فإن الاستدلالات التي تم إجراؤها باستخدام نموذج عملية كاوس ستكون غير صالحة. وبالتالي يحتاج نموذج عمليات كاوس الى ان يخضع لاختبار التحقق من صحته (Validation). في هذ البحث نستعرض اسلوب بيز لبناء نموذج عملية كاوس كبديل للنموذج الحاسوبي بالإضافة الى بعض طرق التحقق من صحة الفرضيات التي استخدمت في بنائه من أجل الحصول على أفضل نموذج احتمالي سنطبق بعض المقاييس العددية والرسومية للتحقق من صحة هذه الفرضيات المستخدمة في بناء نموذج عملية كاوس. كما تم عمل مقارنة بين المقاييس التي تأخذ بعين الاعتبار الارتباط وبين تلك التي لا تراعي الارتباط بين بيانات النموذج الحاسوبي.

في القسم الثاني نستعرض الافكار الرئيسية لنموذج عملية كاوس وفي القسم الثالث نصف بإيجاز بعض الطرق التي تم اقتراحها للتحقق من صحة النماذج الحاسوبية, ثم نقترح بعض طرق التحقق العددية والرسوم البيانية لنموذج عملية كاوس. في القسم الرابع نطبق طرق التحقق على مثال حقيقي لدالة ذراع الروبوت. في القسم الخامس نقدم الخاتمة مع بعض التوصيات.

2. نموذج عملية كاوس (Gaussian Process Model):

نموذج عملية كاوس هو عملية عشوائية لتمثيل النموذج الحاسوبي، إذ يُنظر إلى النموذج الحاسوبي على أنه دالة رياضية غير معلومة. على الرغم من أن النموذج الحاسوبي معروف من حيث المبدأ، إلا أن تعقيده يسمح بإعتبار مخرجاته دالة رياضية غير معلومة لمدخلاته. من وجهة نظر بيز [10]و[4]، يتم استخدام عمليات كاوس لوصف سلوك دالة رياضية غير معلومة. في الثمانينيات من القرن الماضي، تم تقديم الفكرة الأساسية لبناء نموذج إحصائي باستخدام عمليات كاوس في اطار غير بايزي بواسطة [1] وفي اطار بايزي بواسطة [2] و[3].

1.2 بناء نموذج عملية كاوس

هنا نستعرض بإيجاز الأفكار الرئيسة لبناء نموذج عملية كاوس من منظور بيز, لمزيد من التفاصيل انظر[11] و [12]. النموذج الحاسوبي والمتمثل بـ $f(\bullet)$ والتي من المفترض ان تكون دالة لمجموعة من المدخلات المُشار اليها بـ $\mathbf{x}=(x_1,\dots,x_p)\in\chi_1\times\dots\times\chi_p=\chi\subset\Re^p$, حيث $p=1,2,3,\dots$ مع قيم المخرجات المتمثلة بـ $y\in\Re$, لبناء نموذج عملية كاوس, عدم اليقين حول مخرجات النموذج الحاسوبي يوصف بأنه عملية كاوسية بدالة توقع (وسط) معينة $m(\bullet)$ (Mean Function) ودالة تغاير $V(\bullet,\bullet)$ (Covariance Function). بصورة عامة اذا كان $f(\bullet)$ لها توزيع عملية كاوس فعندئذ لكل $n=1,2,\dots$ يكون التوزيع المشترك لـ $f(\mathbf{x}_1), f(\mathbf{x}_2),\dots, f(\mathbf{x}_n)$ هو توزيع طبيعي متعدد المتغيرات (Multivariate Normal Distribution) لجميع قيم $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\dots\mathbf{x}_n\in\chi$. ان دالة التوقع $m(\bullet)$ يمكن ان تكون أي دالة لـ $\mathbf{x}\in\chi$, لكن $V(\bullet,\bullet)$ يجب ان تحقق خاصية كون كل مصفوفة تغاير مع العناصر $\{V(\mathbf{x_i},\mathbf{x_j})\}$ تكون غير سالبة التعريف (Nonnegative Definite) [13].

بداية يتم تمثيل التوزيع الاولي حول $f(\bullet)$ بواسطة نموذج عملية كاوس بدالة توقع $m_0(\bullet)$ وتغاير $V_0(\bullet,\bullet)$. باستخدام صيغة هرمية:

$$f(\bullet)\,|\,\boldsymbol{\beta},\sigma^2,\psi \sim \mathrm{GP}(m_0(\bullet),V_0(\bullet,\bullet)), \qquad (1)$$

حيث ان دالة التوقع $m_0(\bullet)$ تعطى بالشكل التالي:

$$m_0(x)=h(x)^T\boldsymbol{\beta}, \qquad (2)$$

وان $h(\bullet):\chi\subset\Re^p\mapsto\Re^q$ هي دالة مدخلات معلومة, حيث يمكن ان يكون بعد q مختلف عن بعد الادخال p , وان $\boldsymbol{\beta}$ هي متجه غير معلوم للمعاملات. يجب اختيار الدالة $f(\bullet)$ حسب رأي الخبير حول شكل الدالة $f(\bullet)$. كما ان دالة التغاير $V_0(\bullet,\bullet)$ تكون بالشكل:

$$V_0(x,x')=\sigma^2C(x,x';\psi), \tag{3}$$

حيث σ^2 هي معلمة قياس التباين العام غير معلومة و $C(\bullet,\bullet;\psi)$ هي دالة ارتباط معلومة مع معلمة ارتباط غير معلومة. في هذا العمل نستخدم دالة ارتباط كاوس (Gaussian Correlation Function) $C(x,x';\boldsymbol{\psi})=\exp\{-\sum_{k=1}^{p}(\frac{x_k-x'_k}{\psi_k})\}$ حيث ان $(\psi_1,\psi_2,....,\psi_p)$ تسمى معلمات الارتباط. نفرض ان $\mathbf{y}=[y_1=f(\mathbf{x_1}),....,y_n=f(\mathbf{x_n})]$ مخرجات النموذج الحاسوبي عند نقاط التصميم $\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,....\mathbf{x}_n$ في مجال الادخال χ , هذه البيانات تمثل مجموعة البيانات الاولية. طبقا لمعادلة **(1)** يكون توزيع المخرجات توزيع طبيعي متعدد المتغيرات:

$$\mathbf{y}\,|\,\boldsymbol{\beta},\sigma^2,\boldsymbol{\psi}\sim \mathrm{N_n}(H\boldsymbol{\beta},\sigma^2A), \tag{4}$$

حيث

$$H=[h(\mathbf{x_1}),....,h(\mathbf{x_n})]^T, \tag{5}$$

وكذلك A هي مصفوفة عناصرها $A_{i,j}$ حيث:

$$A_{i,j}=C(\mathbf{x_i},\mathbf{x_j},\boldsymbol{\psi}), \tag{6}$$

باستخدام التوزيع الطبيعي الشرطي متعدد المتغيرات نحصل على:

$$f(\bullet)\,|\,\boldsymbol{\beta},\sigma^2,\boldsymbol{\psi},\mathbf{y}\sim \mathrm{GP}(m_0^*(\bullet),V_0^*(\bullet,\bullet)), \tag{7}$$

حيث

$$m_0^*(x)=h(t)^T\boldsymbol{\beta}+t(x)^TA^{-1}(\mathbf{y}-H\boldsymbol{\beta})$$

$$V_0^*(x,x')=\sigma^2[C(x,x';\boldsymbol{\psi})-t(x)^TA^{-1}t(x')],$$

عندما

$$t(x)=(C(x,\mathbf{x_1};\boldsymbol{\psi}),....,C(x,\mathbf{x_n};\boldsymbol{\psi}))^T.$$

باستخدام توزيع اولي قليل المعلومات (noninformative Prior) لـ $(\boldsymbol{\beta},\sigma^2)$, $p(\boldsymbol{\beta},\sigma^2)\propto\sigma^{-2}$ وضربها مع معادلة (4) باستخدام نظرية بيز (Bayesian Theorem), فإن التوزيع اللاحق لـ $(\boldsymbol{\beta},\sigma^2)$ هو التوزيع الطبيعي معكوس كاما (Normal Inverse-Gamma Distribution), حيث ان

$$\boldsymbol{\beta}\,|\,\mathbf{y},\sigma^2,\boldsymbol{\psi}\sim \mathrm{N}(\hat{\boldsymbol{\beta}},\sigma^2(H^TA^{-1}H)^{-1}), \tag{8}$$

حيث

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}=(H^TA^{-1}H)^{-1}H^TA^{-1}\mathbf{y},$$

وايضا

$$\sigma^2\,|\,\mathbf{y},\boldsymbol{\psi}\sim \mathrm{InvGam}\left(\frac{n-q}{2},\frac{(n-q-2)\hat{\sigma}^2}{2}\right), \tag{9}$$

حيث
$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\mathbf{y}^{\mathbf{T}}(A^{-1} - A^{-1}H(H^T A^{-1} H)^{-1} H^T A^{-1})\mathbf{y}}{n-q-2}.$$

بضرب المعادلتين (7) و (8) والتكامل بالنسبة لـ $\boldsymbol{\beta}$ يمكننا الحصول على

$$f(\bullet)\,|\,\mathbf{y},\sigma^2,\boldsymbol{\psi} \sim \mathrm{GP}(m_1(\bullet),V_1^*(\bullet,\bullet)), \tag{10}$$

$$m_1(x) = h(x)^T \hat{\boldsymbol{\beta}} + t(x)^T A^{-1}(\mathbf{y} - \mathrm{H}\hat{\boldsymbol{\beta}}), \tag{11}$$

حيث

$$V_1^*(x,x') = \sigma^2[C(x,x';\boldsymbol{\psi}) - t(x)^T A^{-1} t(x') + (h(x) - t(x)^T A^{-1} H) \\ \times (H^T A^{-1} H)^{-1} \times (h(x') - t(x')^T A^{-1} H)^T\ ]. \tag{12}$$

ان نموذج عمليات كاوس يتم الحصول عليه من تكامل حاصل ضرب المعادلتين (9) و (10) بالنسبة لـ σ^2 ويكون بالشكل الاتي:

$$f(\bullet)\,|\,\mathbf{y},\boldsymbol{\psi} \sim \text{Student process}(n-q, m_1(\bullet), V_1(\bullet,\bullet)), \tag{13}$$

حيث

$$V_1(x,x') = \frac{\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} V_1^*(x,x'). \tag{14}$$

تمثل $V_1(x,x')$ مصفوفة التغاير التنبؤي, ان متجه معلمة الارتباط $\boldsymbol{\Psi}$ غير معلوم, الان بأخذ $p(\boldsymbol{\psi})$ كتوزيع اولي له يمكن ان نحصل على

$$p(\boldsymbol{\psi}\,|\,\mathbf{y}) \propto p(\boldsymbol{\psi}) \iint p(\mathbf{y}\,|\,\boldsymbol{\beta},\sigma^2,\boldsymbol{\psi})\, p(\boldsymbol{\beta},\sigma^2)\ d\boldsymbol{\beta}\, d\sigma^2 \\ \propto p(\boldsymbol{\psi})\,|A|^{-\frac{1}{2}}\,|H^T A^{-1} H|^{-\frac{1}{2}} (\hat{\sigma}^2)^{\frac{-(n-q)}{2}} \tag{15}$$

حيث A و $\hat{\sigma}^2$ هي دوال لـ $\boldsymbol{\Psi}$. ان تحليل بيز بالكامل يكون بضرب دالة الكثافة في معادلة (13) و (15) وتكامل الناتج بالنسبة لـ ψ, لكن التوزيع اللاحق (Posterior Distribution) لـ $\boldsymbol{\Psi}$ في (15) هو دالة يكون من الصعوبة ايجادها تحليليا. اقترح [11] اشتقاق تقدير معقول لمتجه معلمة الارتباط $\boldsymbol{\Psi}$ ثم استخدام التقدير كما لو كان القيمة الحقيقية لـ $\boldsymbol{\Psi}$. باستخدام توزيع اولي منتظم لكل معلمة من معلمات الارتباط فان معادلة (15) تصبح بالشكل التالي

$$p(\psi\,|\,\mathbf{y}) \propto |A|^{-\frac{1}{2}}\,|H^T A^{-1} H|^{-\frac{1}{2}} (\hat{\sigma}^2)^{\frac{-(n-q)}{2}} \tag{16}$$

وبالتالي فان مقدر الامكان الاعظم (MLE) لمعلمات الارتباط يمكن الحصول عليه بتعظيم المعادلة (16) . نموذج عملية كاوس الجديد هو نفسه في (13) مع القيمة المقدرة لـ A و $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ و $\hat{\sigma}^2$ المحسوبة باستخدام القيمة المقدرة لـ $\boldsymbol{\Psi}$. وسنعتمد في عملنا هنا على هذا الاسلوب.

2.2 تصميم توليد البيانات

تتمثل استراتيجيتنا في توليد قيم X باختيار تصميم ملء الفراغات في محاولة لضمان شمول كل المجال في عملية الاختيار, والخيار الشائع لدينا هو تصميم المكعب اللاتيني الأقصى (Maximin Latin Hypercube Design) المقترح في [14] والمشار له

اختصارا Maximin LHD، والذي يتضمن تعظيم الحد الأدنى للمسافة بين أي نقطتي تصميم داخل تصميم المكعب اللاتيني. نفرض ان V عبارة عن مصفوفة $n \times p$ ونفرض ان U_{ij} $(i = 1,2, \dots, n;\ j = 1,2 \dots, p)$ متغير عشوائي يتوزع توزيع منتظم ومستقل على الفترة (0,1) والتي تكون ايضا مستقلة عن V, وبالتالي يمكن ايجاد $n \times p$ تصميم مكعب لاتيني X بواسطة $X_{ij} = \frac{V_{ij}+U_{ij}}{n}$. تصميم Maximin LHD يمكن الحصول عليه من خلال $X = \max_{X \subset \Omega} \min_{\{x,x'\} \in X} dis(x_i, x_j)$.

2.3 المشاكل المحتملة مع نماذج عمليات كاوس

على الرغم من ان نموذج عملية كاوس هو توزيع مرن لتمثيل المعلومات الاولية حول النموذج الحاسوبي, الا ان نموذج عملية كاوس (13) يمكن ان يعطي تنبؤات غير دقيقة لمخرجات النموذج الحاسوبي. يتم تمثيل النموذج الحاسوبي بواسطة نموذج عملية كاوس, لذا يجب ان تكون فرضية التوزيع الطبيعي المشترك لمخرجات النموذج الحاسوبي معقولة. بالاضافة الى فرضية التوزيع الطبيعي المشترك يتم افتراض صيغ محددة لدالة التوقع والتغاير. اذا كانت صيغة التوقع في (2) خاطئة بسبب استخدام نموذج انحدار غير مناسب في $h(\bullet)$ او تم تقدير المعلمات بشكل سيء فقد تكون تنبؤات نموذج عملية كاوس منخفضة جدا او مرتفعة جداً بشكل منتظم في بعض المناطق من مجال الادخال. في معادلة (2) يفترض استقرارية دالة التغاير, مما يعني اننا نتوقع ان تكون مخرجات النموذج الحاسوبي ملساء لجميع النقاط في مجال الادخال. نفترض تباين عام (σ^2) وان دالة الارتباط تعتمد فقط على $(x - x')$. وبالتالي اما ان مشكلة التباين غير متساوي او شكل دالة الارتباط الذي يعتمد على الموقع المكاني بدلا من الاختلاف $(x - x')$ فقط يسبب فشل في افتراض الاستقرار. من الناحية العملية النماذج الحاسوبية قد تستجيب بسرعة اكبر للتغيرات في المدخلات في بعض اجزاء المجال اكثر من غيرها. في حالة عدم الاستقرار, يمكن ان تكون فترات الثقة لتنبؤات نموذج عملية كاوس واسعة جداً في المناطق ذات الاستجابة المنخفضة او ضيقة جداً في المناطق التي فيها الاستجابة اكثر ديناميكية. اخيراً على الرغم من ان شكل دالة التغاير قد يكون مناسبا فقد يكون تقدير المعلمات σ^2 و $\boldsymbol{\psi}$ غير دقيق. عندما يكون لدينا تقدير غير دقيق للتباين تكون فترات الثقة لتنبؤات نموذج عملية كاوس واسعة جداً او ضيقة جداً في المنطقة جوار نقاط البيانات الاولية. في القسم التالي نقدم بعض طرق التحقق التي يمكن ان تكون مفيدة لتحديد المشاكل في تنبؤات نموذج عملية كاوس, تستند هذه الطرق الى مقارنات احصائية بين القيم الحقيقية الجديدة للنموذج الحاسوبي والقيم المتنبئة.

3. طرق التحقق من نموذج عمليات كاوس

تم استخدام نموذج عمليات كاوس كتقريب عشوائي لنموذج حاسوبي عالي الكلفة في العديد من مجالات العلوم لكن بناء هذا النموذج يتطلب بعض الفرضيات والتقديرات, واذا لم يمثل نموذج عمليات كاوس النموذج الحاسوبي بشكل صحيح فان التحليلات التي يتم اجرائها باستخدام هذا النموذج ستكون غير صالحة وبالتالي يجب ان يخضع نموذج عملية كاوس لاختبار التحقق من الصحة.

ان التحقق من الصحة هو عملية تحديد الدرجة التي يمثل فيها النموذج تمثيلا دقيقا للعالم الحقيقي من منظور الاستخدامات المقصودة للنموذج [15]. هناك العديد من وجهات النظر والاساليب للتحقق من الصحة بما في ذلك النظريات الفلسفية حول التحقق من الصحة, والتقنيات الاحصائية والبرمجيات وما الى ذلك. تناول بعض المؤلفين التحقق من صحة نموذج عمليات كاوس من خلال مقارنة قيم تنبؤات النموذج مع القيم الحقيقية. قدم [16] عملية من ست خطوات للتحقق من صحة النموذج الحاسوبي استنادا الى اسلوب بيز. قدم [17] طريقة "اهمال واحد" حيث أزالوا عنصرا واحدا من البيانات الاولية وحاولوا التنبؤ به وكرروا هذا الاجراء لجميع العناصر ورسموا فترات ثقة لكل عنصر, وقدموا ايضا طريقة اخرى قاموا فيها بإهمال اكثر من عنصر واحد.

استخدم [11] المخططات البيانية المسماة رسومات Q-Q (Quantile-Quantile Plots) للبواقي المعيارية لنموذج المعايرة الخاصين بهم, واستخدموا الجذر التربيعي لمتوسط اخطاء التنبؤات لمقارنة نماذج مختلفة. قدم[18] طريقة تعتمد على الانحراف بين القيم

الحقيقية وتنبؤات بيز الخطية للنموذج الحاسوبي. تهتم طرق التحقق من الصحة بمقارنة النموذج الحاسوبي بالواقع وتفترض وجود اخطاء مستقلة في البيانات, في حين نركز في العمل الحالي على طرق التحقق من صحة نموذج عملية كاوس كبديل للنموذج الحاسوبي عالي الكلفة وبالتالي فان عملية التحقق الخاصة بنا تستند الى مقارنة نموذج عملية كاوس مع النموذج الحاسوبي. ان تنبؤات نموذج عملية كاوس ليست مستقلة ومن المهم ان تاخذ هذه الطرق الارتباط في نظر الاعتبار.

3.1 طرق التحقق للنماذج الخطية ذات البواقي المرتبطة

يمكن التحقق من صحة نموذج عملية كاوس بدراسة النماذج الخطية ذات الاخطاء غير المستقلة, لان عملية كاوس هي حتمية للنموذج الخطي العام. نظرا لان نموذج عملية كاوس يصوغ دالة حتمية فان التنبؤات بالقيم الحقيقية المستخدمة لبناء النموذج تكون مثالية وبالتالي يمكن الحصول على البواقي باستخدام مجموعة بيانات جديدة, لذلك يجب تكييف طرق التحقق المستخدمة في النماذج الخطية العامة لتكون قابلة للتطبيق في اطار نموذج حاسوبي. في سياق النماذج الخطية العامة قدم [19] نظرية عامة للبواقي واصفا القيم المتبقية الهامشية والشرطية. القيم المتبقية الهامشية(Marginal Residuals) هي الاخطاء بين القيم الحقيقية والقيم المتنبئة في حين ان القيم المتبقية الشرطية(Conditional Residuals) هي الاخطاء بين القيم التنبؤية للقيم الحقيقية الجديدة غير المستخدمة لبناء النموذج. قدم [20] طرق تحقق رسومية لقيم البواقي الهامشية والشرطية في سياق انحدار السلاسل الزمنية, حيث قاموا بتحليل وتجزئة مصفوفة التباين المقدرة للبقايا باستخدام طريقة تجزئة كوليسكي للحصول على بواقي غير مرتبطة بتباين الوحدة. استخدم [21] تحلل كوليسكي لمصفوفة مقلوب التغاير لتدوير بقايا النماذج المختلطة الخطية والسلسلة الزمنية. لقد قدموا رسوماتQ-Q لهذه الاخطاء غير المترابطة مما يوفر خصائص مقاربة للتوزيع التراكمي واخطاء معيارية نقطية. ان نموذج عملية كاوس هو دالة حتمية مما يشير الى عدم وجود اخطاء هامشية كما حددها [19]. على وجه التحديد فان تنبؤات نموذج عملية كاوس للمخرجات المستخدم لبناء النموذج ستساوي تماما المخرجات المعنية مع عدم وجود تباينات. يمكننا الحصول على اخطاء التنبؤ فقط لتنفيذ النموذج الحاسوبي للقيم غير المستخدمة في بناء نموذج عملية كاوس, الاخطاء الشرطية لـ[19]. ميزة اخرى مهمة يجب اخذها في الاعتبار في طرق التحقق من صحة النماذج هي ارتباط الخطأ بسبب بنية الارتباط. في هذا البحث نستخدم طرق التحقق الرسومية التي قدمها[20] والذين رسموا الاخطاء الشرطية الغير مرتبطة مقابل ترتيب البيانات ومن قبلهم [21] الذين استخدموا رسم Q-Q للاخطاء الشرطية غير المرتبطة. لقد قام [20] بفهرسة البيانات حسب الوقت، ولكن في نمذجة الحاسوب يكون ترتيب البيانات عادة عشوائيا, لذلك نحتاج الى تقديم بعض طرق التحلل الثابتة لترتيب البيانات. تحلل كوليسكي (Cholesky Decomposition) يعتمد على ترتيب البيانات وفي هذا العمل نستخدم تحلل كوليسكي المحوري لبناء الاخطاء غير المرتبطة.

للتحقق من صحة نموذج عملية كاوس تستند طريقتنا الى مقارنات بين تنبؤات النموذج والقيم الحقيقية للنموذج الحاسوبي لمجموعة بيانات جديدة. لتكن $\mathbf{X}^*=(\mathbf{x}_1^*,\mathbf{x}_2^*,...,\mathbf{x}_m^*)$ تشير الى مجموعة المدخلات الجديدة, تسمى بيانات الاختبار, نرمز لمخرجات النموذج الحاسوبي لبيانات الاختبار بواسطة $\mathbf{y}^*=f(\mathbf{X}^*)$ حيث $\mathbf{y}^*=(y_1^*,y_2^*,....,y_m^*)$ و $f(\mathbf{X}^*)=(f(\mathbf{x}_1^*),f(\mathbf{x}_2^*),....,f(\mathbf{x}_m^*))$ يجب اختيار بيانات الاختبار لتغطي كل مجال الادخال التي نرغب في استخدام نموذج عملية كاوس عليها, خلاف ذلك قد يكون التحقق من صحة نموذج عملية كاوس لمجموعة جزئية معينة فقط من مجال الادخال. ان طريقة التحقق العام $D(\bullet)$ هي دالة لمخرجات بيانات الاختبار وتقترح مقارنة $D(\mathbf{y}^*)$ بالتوزيع المرجعي لـ$D(f(\mathbf{X}^*))$ المشروط بالبيانات الاولية. $D(\mathbf{y}^*)$ تقع في منطقة مختارة بشكل مناسب مع احتمال ضئيل يشير الى وجود تعارض بين نموذج عملية كاوس والنموذج الحاسوبي. يجب اختيار منطقة (مناطق) الاختبار لـ $D(\bullet)$ بحيث ترتبط $D(\mathbf{y}^*)$ التي تقع في المنطقة بفشل معين في بناء

نموذج عملية كاوس. إذا لم تكن هناك مؤشرات على وجود تعارض عبر مجموعة من طرق التحقق هذه فيمكننا اعتبار ان نموذج عملية كاوس يمثل النموذج الحاسوبي بدقه.

3.2 اخطاء التنبؤ الفردية المعيارية (Individual Standardized Prediction Errors)

يتم ايجاد اخطاء التنبؤ الفردية المعيارية لبيانات الاختبار $D_i^I(\mathbf{y}^*)$ من خلال الفرق بين مخرجات النموذج الحاسوبي الحقيقة والمخرجات المتنبئة لنفس المدخلات مقسوما على جذر التباين:

$$D_i^I(\mathbf{y}^*) = \frac{y_i^* - E[f(\mathbf{x}_i^*)\,|\,\mathbf{y}]}{\sqrt{V(f(\mathbf{x}_i^*)\,|\,\mathbf{y})}}, \qquad (17)$$

حيث $i=1,2,\dots,m$ وان m هي عدد بيانات الاختبار، وان $E[f(\mathbf{x}_i^*)\,|\,\mathbf{y}]$ هو عناصر الوسط التنبئي معادلة (11) و $V[f(\mathbf{x}_i^*)\,|\,\mathbf{y}]$ عناصر التباين التنبؤي المتمثلة بالقطر الرئيسي لمصفوفة التغاير معادلة (14). يمكن النظر لكل خطأ تنبؤي معياري كطريقة للتحقق من الصحة. اذا كان نموذج عملية كاوس يمكنه تمثيل النموذج الحاسوبي بشكل صحيح, فان اخطاء التنبؤ المعيارية لها توزيعات t القياسي مشروطة على البيانات الاولية ومعلمات الارتباط المقدرة $\boldsymbol{\psi}$, من الناحية العملية يكون عدد البيانات الاولية كبير بحيث تكون درجة الحرية كبيرة ويمكن اعتبار اخطاء التنبؤ المعيارية لها توزيع طبيعي قياسي. وبالتالي تشير الاخطاء المعيارية الكبيرة على سبيل المثال بقيم مطلقة اكبر من 2 الى وجود تعارض بين النموذج الحاسوبي و نموذج عملية كاوس, قد يتم تجاهل القيم الشاذة المتطرفة من هذا النوع او قد يشير الى مشكلة محلية حول تلك النقطة فقط من بيانات الاختبار, ويمكن اجراء مزيد من التحقق في ذلك من خلال الحصول على عدد قليل من بيانات الاختبار التي يتم تنفيذها حول تلك النقطة. يشير عدد اكبر من الاخطاء المعيارية الكبيرة الى وجود مشكلة اكثر منهجية, كما تشير الاخطاء الكبيرة للعلامة نفسها التي تظهر في جزء ما من مجال الادخال الى اختيار غير مناسب لدالة الوسط او سوء تقدير $\boldsymbol{\beta}$, وقد يكون ايضا مؤشرا على فشل افتراض استقرارية دالة الارتباط. تشير الأخطاء الكبيرة التي تظهر بشكل أساسي في نقاط الاختبار القريبة من نقاط البيانات الاولية إلى أنه تم المبالغة في القيمة التقديرية لواحدة او اكثر من معلمات الارتباط، بحيث تتأثر تنبؤات نموذج عملية كاوس بشدة بنقاط البيانات الاولية القريبة. اذا لم تكن هناك مثل هذه المشاكل الواضحة في حدوث الأخطاء الكبيرة، فقد تكمن المشكلة في سوء تقدير المعلمة σ^2. وتجدر الإشارة إلى أن وجود الأخطاء المعيارية الصغيرة بشكل غير متوقع قد تشير إلى وجود تضارب. على سبيل المثال، تشير نقاط الاختبار القريبة من نقاط البيانات الاولية التي تقدم أخطاء معيارية صغيرة بشكل غير متوقع إلى النقصان في القيمة التقديرية لمعلمات الارتباط. يمكن أن توفر العروض الرسومية أداة قوية لاكتشاف أنماط الأخطاء الكبيرة أو الصغيرة، كما تمت مناقشته في القسم 3.5.

3.3 مسافة مهالانوبيس (Mahalanobis Distance)

على الرغم من ان مجموعة الاخطاء المعيارية الفردية $D^I(\mathbf{y}^*)$ توفر مجموعة من طرق التحقق المفيدة, الا ان القدرة على تلخيصها بقيمة واحدة هو امر مهم. استخدم [22], [23] اختبار χ^2 لمقارنة مخرجات النموذج الحاسوبي مع القيم الحقيقية, ويمكن استخدام نفس الفكرة كطريقة تحقق لمقارنة تنبؤات نموذج عملية كاوس بمخرجات النموذج الحاسوبي ضمن نفس المدخلات, طريقة مربع كاي للتحقق من الصحة تعطى بواسطة:

$$D_{\chi^2}(\mathbf{y}^*) = \sum_{i=1}^{m} D_i^I(\mathbf{y}^*)^2 \qquad (18)$$

بالنسبة لمجموعة بيانات اولية كبيرة (على سبيل المثال، عندما $n\to\infty$) مع قيم إخراج مستقلة، يتقارب توزيع $D_{\chi^2}(f(\mathbf{X}^*))$ إلى توزيع مربع كاي مع m درجات الحرية, لكن هنا افتراض الاستقلال قوي جدا. على سبيل المثال إذا كان النموذج الحاسوبي عبارة عن دالة

ملساء فمن المتوقع أن تكون المخرجات مماثلة عندما تكون العناصر قريبة من بعضها البعض في مجال الإدخال. يتم التحكم بالارتباط في نموذج عملية كاوس من خلال دالة التغاير (11). التعميم الطبيعي للمعادلة (18) الذي يسمح بالارتباط بين المخرجات هو مسافة مهالانوبيس $D_{MD}(\mathbf{y}^*)$ بين نموذج عملية كاوس ومخرجات النموذج الحاسوبي لمجموعة بيانات الاختبار، والتي يتم تقديمها بواسطة:

$$D_{MD}(\mathbf{y}^*) = (\mathbf{y}^* - E[f(\mathbf{X}^*)\,|\,\mathbf{y}])^T \times (V[f(\mathbf{X}^*)\,|\,\mathbf{y}])^{-1}(\mathbf{y}^* - E[f(\mathbf{X}^*)\,|\,\mathbf{y}]) \qquad (19)$$

حيث ان $E[f(\mathrm{X}^*)\,|\,\mathbf{y}]$ هو عناصر متجه الوسط التنبئي و $V[f(\mathbf{X}^*)\,|\,\mathbf{y}]$ مصفوفة التغاير التنبؤية لنموذج عملية كاوس معطاة بالمعادلتين (11) و (14). في ظل فرضيات نموذج عملية كاوس فان توزيع $D_{MD}(f(\mathbf{X}^*))$ المشروط على البيانات الاولية وتقدير معلمة الارتباط ψ هو توزيع F مع درجات حرية m و $n-q$ [24]

$$\frac{(n-q)}{m(n-q-2)} D_{MD}(f(\mathbf{X}^*))\,|\,\mathbf{y},\boldsymbol{\psi} \sim \mathrm{F}_{m,n-q} \qquad (20)$$

تشير القيمة الصغيرة او الكبيرة بشكل غير متوقع لـ $D_{MD}(\mathbf{y}^*)$ الى وجود تعارض بين نموذج عملية كاوس والنموذج الحاسوبي. اذا ظهرت مثل هذه المشكلة فمن المهم استكشاف الاخطاء الفردية للبحث عن انماط ذات قيم كبيرة او صغيرة من اجل تحديد السبب الاكثر احتمالا للمشكلة وهذا ما سنتطرق اليه القسم التالي.

3.4 تجزئة مصفوفة التباين

إن أخطاء التنبؤ الفردية المعيارية في المعادلة (17) مترابطة، مما يؤدي إلى بعض المجازفة في تفسيرها. بالإضافة إلى ذلك، قد لا يؤدي مجرد النظر إلى الأخطاء الفردية إلى تحديد بعض التعارض بين نموذج عملية كاوس والنموذج الحاسوبي. على سبيل المثال، قد لا يكون هناك خطآن كبيران بشكل فردي، ولكن إذا كانت لديهما إشارات معاكسة عندما يكونان مترابطين بشكل إيجابي، فهذا يشير إلى وجود تعارض. لنفترض أن $\mathbf{G}$ هي مصفوفة انحراف معياري بحيث تكون $V[f(\mathbf{X}^*)\,|\,\mathbf{y}] = \mathbf{G}\mathbf{G}^T$. فإن متجه الأخطاء المحولة:

$$D_{\mathsf{G}}(\mathbf{y}^*) = \mathbf{G}^{-1}(\mathbf{y}^* - E[f(\mathbf{X}^*)\,|\,\mathbf{y}]), \qquad (21)$$

يحتوي على عناصر غير مرتبطة. إذا كان الافتراض الطبيعي للمخرجات معقولاً، فإن كل خطأ من هذه الأخطاء يتوزع توزيع t القياسي مع درجة حرية $n-q$. يمكننا اعتبار هذه كمجموعة بديلة من طرق التحقق من الصحة. كما هو الحال مع الأخطاء $D^I(\mathbf{y}^*)$، فإننا نبحث عن الأخطاء الفردية الكبيرة المحولة وأنماط القيم الكبيرة والصغيرة. إن بنية $\mathbf{G}$ تعطي تفسيرات مختلفة لهذه الأنماط. خاصية أخرى لطريقة التحقق هذه هي ان $D_{MD}(\mathbf{y}^*) = D_{\mathsf{G}}(\mathbf{y}^*)^T D_{\mathsf{G}}(\mathbf{y}^*)$ أي أن مجموع مربعات عناصر $D_{\mathsf{G}}(\mathbf{y}^*)$ هو مسافة مهالانوبيس. وبالتالي يمكننا تفسير طرق التحقق هذه على أنها تجزئة $D_{MD}(\mathbf{y}^*)$.

توجد عدة طرق لتحليل أو تجزئة مصفوفة محددة موجبة إلى حاصل ضرب مصفوفة الجذر التربيعي ومنقولها والخيار السائد هو تجزئة كوليسكي والتجزئة الذاتية [25]. تحظى التجزئة الذاتية باستخدام واسع لكن تجزئة كوليسكي أبسط من الناحية الحسابية.

3.4.1 تجزئة كوليسكي (Cholesky Decomposition): هي حالة خاصة حيث تكون $\mathbf{G}^T$ هي المصفوفة المثلثية العليا الوحيدة $\mathbf{R}$ حيث ان $V[f(\mathrm{X}^*)\,|\,\mathbf{y}] = \mathbf{R}^T\mathbf{R}$. نرمز إلى عناصر المتجه $D_{\mathsf{G}}(\mathbf{y}^*)$ بـ $D_i^C(\mathbf{y}^*)$ ونطلق عليها أخطاء كوليسكي، كذلك $\mathbf{G}^{-1}$ هي أيضًا مصفوفة مثلثة, و $D_i^C(\mathbf{y}^*)$ هي التركيبة الخطية الوحيدة لـ (i) الاولى من أخطاء كوليسكي بحيث يكون التباين التنبئي الخاص به هو التباين الشرطي لخطأ كوليسكي مشروطا على الأخطاء $(i-1)$ السابقة. على الرغم من أن هذا له فائدة في إنتاج مجموعة من الأخطاء المحولة غير المترابطة، غير ان تجزئة كوليسكي ليست ثابتة للطريقة التي نرتب بها نقاط الاختبار, وايضا أنماط القيم العالية أو المنخفضة ليس لها تفسير واضح.

3.4.2 تجزئة كوليسكي المحوري (Pivoted Cholesky Decomposition)

من خلال اعادة ترتيب مجموعة بيانات الاختبار، نحصل على تجزئات كوليسكي المختلفة. قد يكشف أي اعادة ترتيب من هذا القبيل حالات شاذة مختلفة ولكن للاستفادة من تجزئة (تحلل) كوليسكي، يتم الحصول على طرق التحقق الأكثر فعالية من خلال تبديل البيانات بحيث يكون العنصر الأول هو الذي له أكبر تباين، والعنصر الثاني هو الذي له أكبر تباين تنبؤي مشروط بالعنصر الأول، وهكذا. نرمز إلى عناصر المتجه $D_{\mathsf{G}}(\mathbf{y}^*)$ بـ $D_i^{PC}(\mathbf{y}^*)$ ونطلق عليها أخطاء كوليسكي المحورية. يمكن الحصول على هذا الترتيب من خلال تطبيق تجزئة كوليسكي المحوري، والذي يُعيد مصفوفة الترتيب P والمصفوفة المثلثية العليا الوحيدة **R** بحيث $\mathrm{P}^T V[f(\mathbf{X}^*)|\mathbf{y}]\mathrm{P} = \mathbf{R}^T\mathbf{R}$, أي ان $\mathbf{G} = \mathrm{P}\mathbf{R}^T$. لمزيد من التفاصيل حول التحليل العددي لتجزئة كوليسكي المحوري انظر [26].

تشير مجموعة أخطاء كوليسكي المحورية (الكبيرة جدا أو الصغيرة جدا) في الجزء الأول من سلسلة الاخطاء إلى تقدير ضعيف لـ σ^2 أو مشكلة عدم التجانس، بينما تشير مجموعة الأخطاء الكبيرة جدا أو الصغيرة جدا في الجزء الأخير من سلسلة الاخطاء إلى تقدير ضعيف لـ ψ أو بنية ارتباط غير مناسبة. بالإضافة إلى ذلك، لدينا ميزة أن كل من $D_i^{PC}(\mathbf{y}^*)$ يرتبط بنقطة بيانات اختبار معينة، مما يجعل من السهل التحقق من الأخطاء الفردية الكبيرة.

3.5 الطرق البيانية

توفر العروض الرسومية طريقة فعالة للتحقق في مدى دقة تنبؤات نموذج عملية كاوس والتحقق من بعض الافتراضات التي تم استخدامها عند بناء نموذج عملية كاوس (13). نقترح هنا بعض الطرق الرسومية باستخدام كل من الأخطاء المعيارية الفردية (17) والأخطاء المعيارية غير المترابطة (21).

3.5.1 رسم الأخطاء مقابل الدليل: يعتمد معنى الدليل على الخطأ الذي نرسمه. بالنسبة للأخطاء الفردية $D^I(\mathbf{y}^*)$ وأخطاء كوليسكي $D_i^C(\mathbf{y}^*)$ فإن الدليل $\boldsymbol{i}$ هو ترتيب بيانات الاختبار. بالنسبة لأخطاء كوليسكي المحورية يكون الدليل هو الترتيب المحوري، والذي يعطي ترتيب $D_i^{PC}(\mathbf{y}^*)$ مع أكبر تباين تنبؤي شرطي. بالنسبة لكل هذه الرسومات من المتوقع أن تتقلب الأخطاء حول الصفر مع تباين ثابت ولا توجد أنماط خاصة. يشير وجود عدد كبير جدًا من الأخطاء إلى التقليل من القيمة المقدرة للتباين ويشير وجود عدد كبير جدًا من الأخطاء الصغيرة إلى المبالغة في تقدير التباين. يمكن أن تشير كلتا الحالتين أيضًا إلى أن النموذج الحاسوبي غير املس. يوفر تحلل كوليسكي المحوري تفسيرًا إضافيًا يمكننا ربطه ببنية الارتباط. تشير الأخطاء الكبيرة أو الصغيرة جدًا في بداية الرسم البياني (أي على الجانب الأيسر) إلى سوء تقدير تنبؤ التباين أو عدم الاستقرار. ومع ذلك ، تشير الأخطاء الكبيرة (أو الصغيرة جدًا) في نهاية الرسم (أي على الجانب الأيمن) إلى المبالغة في تقدير (أو التقليل من) معلمات الارتباط أو أن شكل الارتباط المختار غير مناسب.

3.5.2 رسومات Q-Q (Quantile-Quantile Plots): في ظل افتراض التوزيع الطبيعي للنموذج الحاسوبي فإن الأخطاء المعيارية غير المترابطة $D_{\mathsf{G}}(\mathbf{y}^*)$ لها توزيع t القياسي مع درجة الحرية $(n-q)$ وبالتالي فإن رسم **Q-Q** باستخدام هذا التوزيع يصبح طريقة تحقق رسومية. في رسم **Q-Q** إذا كانت النقاط قريبة من خط 45 درجة من خلال الأصل فإن فرضية التوزيع الطبيعي لمخرجات النموذج الحاسوبي تكون معقولة. إذا كانت النقاط تتجمع حول خط ذي ميل أقل (أو أكبر) من 1، فإن المعنى الضمني هو أن التباين التنبئي قد تم المبالغة فيه (أو تم التقليل من شأنه). يشير الانحناء في الرسم البياني إلى وجود خلل، بينما تشير القيم المتطرفة في أي من طرفي الرسم البياني إلى وجود مشاكل محلية أو عدم استقرار (غير ملساء). يعتبر تفسير رسم **Q-Q** باستخدام أخطاء معيارية غير مرتبطة مفيدًا بشكل عام لتحلل كوليسكي المحوري. على الرغم من أن توزيع كل خطأ معياري فردي $D_i^I(\mathbf{y}^*)$ هو أيضًا توزيع قياسي لـ t، فإن حقيقة أن الأخطاء مترابطة تجعل تفسير رسم **Q-Q** أكثر صعوبة.

4. مثـــال دالة ذراع الروبوت:

في هذا القسم سيتم اعتبار دالة ذراع الروبوت Robot Arm كمثال على نموذج حاسوبي, دالة ذراع الروبوت Robot Arm استخدمها [27] كمثال على تنفيذ طرق شبه الانحدار واستخدمها [28] كمثال لبناء نموذج كركنك. تعمل دالة ذراع الروبوت على تصميم موضع ذراع الروبوت الذي يحتوي على أربعة أجزاء, يعتبر الكتف ثابتًا عند الأصل في حين أن كل جزء من الأجزاء الأربعة له طول L_i ويتم ضبطه على زاوية ϑ_i لـ $i=1,\ldots,4$. دالة ذراع الروبوت تعطى بالشكل التالي:

$$f(\mathbf{x}) = \left(\omega^2 + \delta^2\right)^{\frac{1}{2}} \qquad (22)$$

حيث

$$\omega = \sum_{i=1}^{4} L_i \cos\left(\sum_{j=1}^{i} \vartheta_j\right) \quad , \quad \delta = \sum_{i=1}^{4} L_i \sin\left(\sum_{j=1}^{i} \vartheta_j\right)$$

ناتج دالة ذراع الروبوت هو المسافة بين أصل ونهاية ذراع الروبوت. تحتوي دالة ذراع الروبوت على ثمانية متغيرات إدخال وهي $\mathbf{x} = (\vartheta_1, \vartheta_2, \vartheta_3, \vartheta_4, L_1, L_2, L_3, L_4)$. مجال متغيرات الإدخال هي $\vartheta_i \in [0,2\pi]$ حيث $\vartheta_3, \vartheta_2, \vartheta_1$ و ϑ_4 هي زوايا الأجزاء الأولى والثانية والثالثة والرابعة من الذراع على التوالي, $L_i \in [0,1]$ حيث L_3, L_2, L_1 و L_4 هي أطوال الأجزاء الأولى والثانية والثالثة والرابعة من الذراع على التوالي. في هذا المثال, تم استخدام مجموعتين من البيانات الاولية لبناء نموذج عملية كاوس لدالة ذراع الروبوت. تم توليد مجموعة من اربعين نقطة تمثل البيانات الاولية $(\mathbf{x_1}, \mathbf{x_2}, \mathbf{x_3}, \ldots, \mathbf{x_{40}})$, بواسطة (Maximin LHD) بعد ذلك تم الحصول على مخرجات دالة ذراع الروبوت عند هذه النقاط الاربعين, $\mathbf{y} = [y_1 = f(\mathbf{x_1}), \ldots, y_{40} = f(\mathbf{x}_{40})]$ قبل بناء نموذج عملية كاوس تم تحويل مجال دالة ذراع الروبوت ليكون في $[0,1]^8$.

استخدمنا دالة الوسط الخطي $h(\mathbf{x})^{\mathrm{T}} = (1; \mathbf{x}^{\mathrm{T}})$ المعادلة (2) ودالة التغاير مع ارتباط كاوس المعادلة (3) وقدرنا معلمات الارتباط باستخدام طريقة (MLE) معادلة (16) بناءً على نقط البيانات الاولية الاربعين وهي $\hat{\boldsymbol{\psi}}_{MLE} = (0.323, 105.015, 0.535, 89.201, 111.027, 104.977, 60.209, 0.884)$. يمكن ملاحظة أن بعض المدخلات لها معاملات ارتباط كبيرة، مما يشير إلى أن دالة النموذج الحاسوبي تكون ملساء أكثر مع هذه المدخلات.

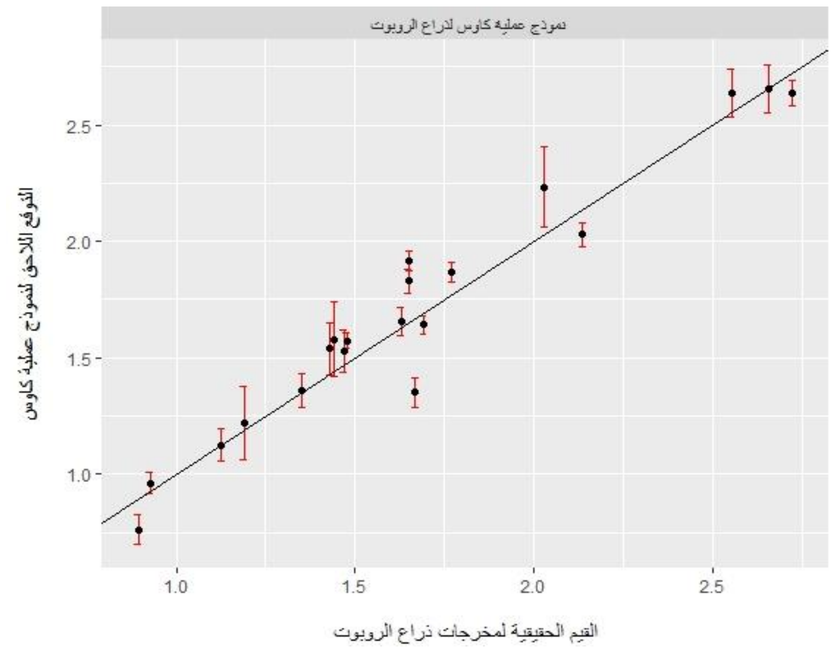
للتحقق من صحة نموذج عملية كاوس تم استخدام مجموعة من (20) نقطة $\mathrm{X}^* = (\mathbf{x}_1^*, \mathbf{x}_2^*, \mathbf{x}_3^*, \ldots, \mathbf{x}_{20}^*)$ تمثل نقط الاختبار والتي تم توليدها ايضا باستخدام (Maximin LHD). بعد ايجاد متجه الوسط التنبئي $E[f(\mathrm{X}^*) | \mathbf{y}]$ ومصفوفة التغاير التنبؤية $V[f(\mathrm{X}^*) | \mathbf{y}]$ لنموذج عملية كاوس كما في المعادلتين (11) و (14) على التوالي فان شكل 1 يمثل القيم الحقيقية لمخرجات الروبوت مقابل التوزيع التنبؤي عند فترة ثقة 0.95.

جدول (1): يوضح مسافة مهالانوبيس المحسوبة وطريقة تحقق مربع كاي لأربعين نقطة من البيانات الاولية ، إلى جانب بعض الإحصائيات عن توزيعاتهما التنبؤية.

	Obs.	Min	1st Qu	Median	Mean	3rd Qu	Max
$D_{MD}(\bullet)$	1120.532	5.733	14.143	18.803	20.361	24.985	81.529
$D_{\chi^2}(\bullet)$	436.163	5.068	15.960	19.766	20.326	24.047	44.220

نلاحظ أن معظم النقاط المتوقعة لا يقع على خط (y=x) بالاضافة الى ذلك، يبدو أن عدم اليقين(Error Bars) لبعض النقاط كبير نوعا ما مما يشير إلى أن تنبؤات نموذج عملية كاوس هي تقديرات تقريبية غير دقيقة لمخرجات النموذج الحاسوبي بفترة ثقة

(0.95). باستخدام طرق التحقق من الصحة, تم حساب مسافة مهالانوبيس (Mahalanobis Distance) حسب المعادلة (19) وكانت القيمة لها تساوي $[D_{MD}(\mathbf{y}^*)=1120.532]$, نلاحظ انها بعيدة جدا عن القيمة المتوقعة لها و هي $[D_{MD}(f(\mathrm{X}^*)\,|\,\mathbf{y},\boldsymbol{\psi})=20.361]$ والتي تم حسابها حسب المعادلة (20) مما يشير الى وجود تعارض كبير بين النموذج الحاسوبي ونموذج عمليات كاوس. تم ايضا حساب طريقة تحقق مربع كاي ($D_{\chi^2}(\mathbf{y}^*)=436.1634$) ولاحظنا انها تكون بعيدة جدًا

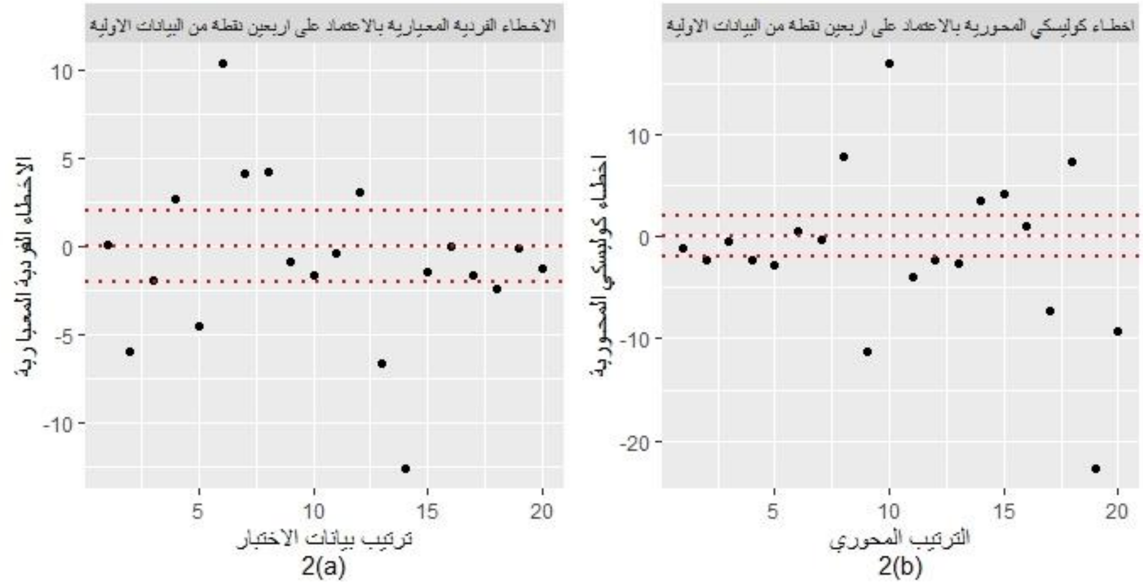


(شكل 1) يمثل القيم الحقيقية لمخرجات الروبوت مقابل التوزيع التنبؤي عند فترة ثقة 0.95 بالاعتماد على اربعين نقطة من البيانات الاولية

من القيمة المتوقعة ($E[D_{\chi^2}(\mathbf{y}^*)]=20$) مما يشير إلى أن نموذج عملية كاوس هو تقريب غير جيد للنموذج الحاسوبي. لكن هذه الطريقة للتحقق تتجاهل حقيقة أن النواتج مترابطة.

استخدمنا طرقاً اخرى للتحقق من الصحة حيث تم حساب الاخطاء المعيارية الفردية بحسب المعادلة (17) كما موضحة بالشكل 2(a) وحساب اخطاء كوليسكي المحورية المتضمنة في المعادلة (21) كما موضحة بالشكل2(b). نلاحظ في شكل2(a) ان نصف الاخطاء المعيارية تقع في الفترة [2,−2] لكن النصف الاخر منها تقع خارج الفترة وان قسماً من هذه الاخيرة تكون متطرفة مما يشير الى وجود تعارض بين النموذج الحاسوبي و نموذج عملية كاوس, وفي نفس السياق نلاحظ في الشكل 2(b) ان غالبية اخطاء كوليسكي المحورية تقريبا تقع خارج الفترة [2,−2] مما يشير ايضا الى وجود تعارض بين النموذج الحاسوبي و نموذج عملية كاوس.

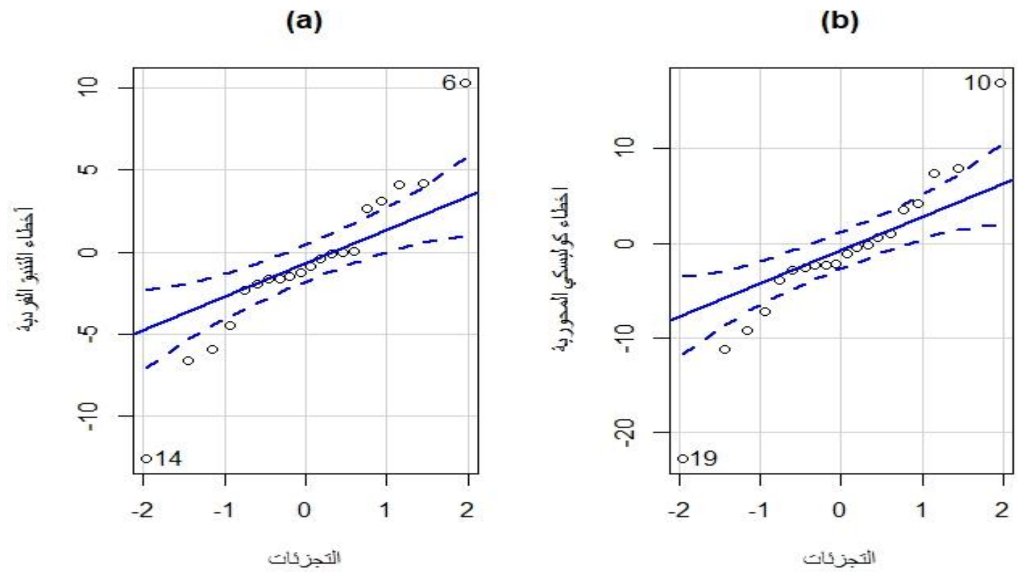
نلاحظ في شكل 2(b) انه يوجد بعض الاخطاء الكبيرة في الجهة اليمنى من الرسم مما ربما يدل على سوء تقدير معلمات الارتباط او ان دالة ارتباط كاوس غير ملائمة لهذه البيانات. نلاحظ من شكل2(a) و شكل2(b) ان اخطاء كوليسكي المحورية اكبر واكثر تطرفا من الاخطاء المعيارية والسبب في ذلك ان اخطاء كوليسكي المحورية مستقلة اما الاخطاء المعيارية فهي مرتبطة. لذلك يكون تفسير اخطاء كوليسكي المحورية اكثر دقة من الاخطاء المعيارية.



(شكل 2): يوضح شكل 2(a) الاخطاء المعيارية الفردية مقابل ترتيب بيانات الاختبار
يوضح شكل 2(b) اخطاء كوليسكي المحورية مقابل الترتيب المحوري

استخدمنا رسم Q-Q كطريقة تحقق اضافية من صحة نموذج عملية كاوس كما هو موضح في الشكل(3), حيث يتم عرض أخطاء كوليسكي المحورية في الشكل3(b) واخطاء التنبؤ الفردية في الشكل3(a) فتظهر أخطاء كبيرة في طرفي الرسم البياني مما يشير إلى وجود مشكلة في شكل او بنية الارتباط. لأن هناك قيمتين كبيرتين فقط وفيه نلاحظ وجود ميلان في الرسم البياني مما يشير الى وجود خلل كما ان وجود قيم متطرفة في طرفي الرسم يشير الى وجود مشاكل محلية لتلك النقط. ايضا نلاحظ من شكل3(a) و شكل3(b) ان القيم المتطرفة في طرفي الرسم من اخطاء كوليسكي المحورية اكبر واكثر تطرفا من الاخطاء المعيارية وهذا ايضا بسبب ان اخطاء كوليسكي المحورية مستقلة اما الاخطاء المعيارية فهي مرتبطة.

كخطوة لاحقة من عملية التحقق تم زيادة الان من عدد البيانات الاولية حيث ولدنا ثمانين نقطة من نقط البيانات الاولية $(\mathbf{x_1}, \mathbf{x_2}, \mathbf{x_3}, ..., \mathbf{x_{80}})$ بواسطة (Maximin LHD) بعد ذلك تم الحصول على مخرجات دالة ذراع الروبوت عند هذه النقاط الثمانين, $\mathbf{y} = [y_1 = f(\mathbf{x_1}), ..., y_{40} = f(\mathbf{x}_{40})]$, وبناءً على تلك النقط الثمانين من البيانات الاولية تم تقدير معلمات الارتباط باستخدام طريقة (MLE) معادلة(15) وهي $\hat{\boldsymbol{\psi}}_{MLE} = (5.899, 1.930, 2.005, 1.595, 1.836, 2.324, 5.13, 1.826)$, للتحقق من نموذج عملية كاوس الجديد نعيد خطوات التحقق السابقة. نلاحظ في شكل(4) والذي يمثل القيم الحقيقية لمخرجات الروبوت مقابل التوزيع التنبؤي عند فترة ثقة 0.95, ان النقاط تبدو المتوقعة معقولة لأن معظمها يقع على خط y = x. علاوة على ذلك، يبدو أن عدم اليقين الذي تمثله أشرطة الخطأ صغير جدًا مما يشير إلى أن تنبؤات نموذج عملية كاوس هي تقديرات تقريبية جيدة لمخرجات النموذج الحاسوبي بفترات ثقة 0.95.



(شكل3): يوضح شكل (a)3 اخطاء التنبؤ الفردية بطريقة رسوم Q-Q

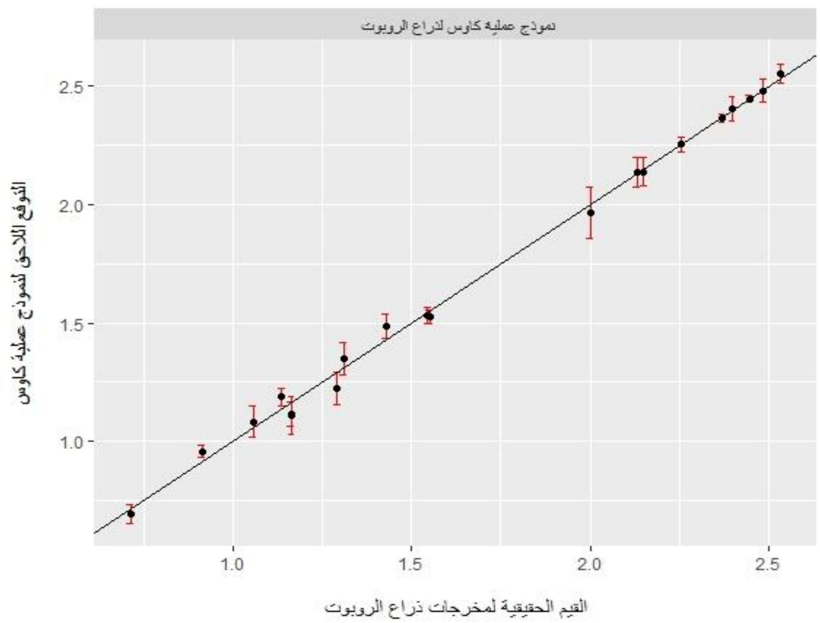
يوضح شكل(b)3 اخطاء كوليسكي المحورية بطريقة رسوم Q-Q(بالاعتماد على اربعين نقطة من البيانات الاولية)

نلاحظ ايضا بعد حساب مسافة مهالانوبيس (Mahalanobis Distance) وكانت القيمة لها تساوي $[D_{MD}(\mathbf{y}^*)= 23.83374]$, وهي قريبة جدا من القيمة المتوقعة لها $[D_{MD}(f(X^*)|\mathbf{y},\psi)= 20.356]$ مما يشير الى وجود توافق بين النموذج الحاسوبي ونموذج عمليات كاوس. وجدنا كذلك في طريقة تحقق مربع كاي $(D_{\chi^2}(\mathbf{y}^*)=40.97208)$ انها تكون ذات قيمة اقل قياسا بالمرة السابقة لكنها تكون بعيدة نوعا ما من القيمة المتوقعة $(E[D_{\chi^2}(\mathbf{y}^*)]=20)$ مما يشير إلى أن طريقة التحقق هذه من صحة نموذج عملية كاوس غير موفقة مع وجود فرضية الترابط بين نواتج النموذج.

تم ايضا حساب الاخطاء المعيارية الفردية وتوضيحها في الشكل (a)5 وحساب اخطاء كوليسكي المحورية كما موضحة في الشكل(b)5. حيث نلاحظ في الشكل (a)5 أن اكثرية الاخطاء المعيارية تكون ضمن الفترة $[-2,2]$, في هذا اشارة واضحة الى التوافق بين نموذج عملية كاوس والنموذج الحاسوبي والذي تؤكده ايضا اخطاء كوليسكي المحورية الموضحة في الشكل(b)5 حيث تكون غالبية الاخطاء ضمن الفترة $[-2,2]$. نلاحظ من شكل(a)2 و شكل(b)2 انه يوجد خطآن فقط من اخطاء كوليسكي المحورية يقع خارج الفترة $[-2,2]$ بينما يوجد ثلاثة اخطاء معيارية يقع خارج الفترة $[-2,2]$ والسبب في ذلك كما ذكرنا سابقا ان اخطاء كوليسكي المحورية مستقلة اما الاخطاء المعيارية فهي مرتبطة.

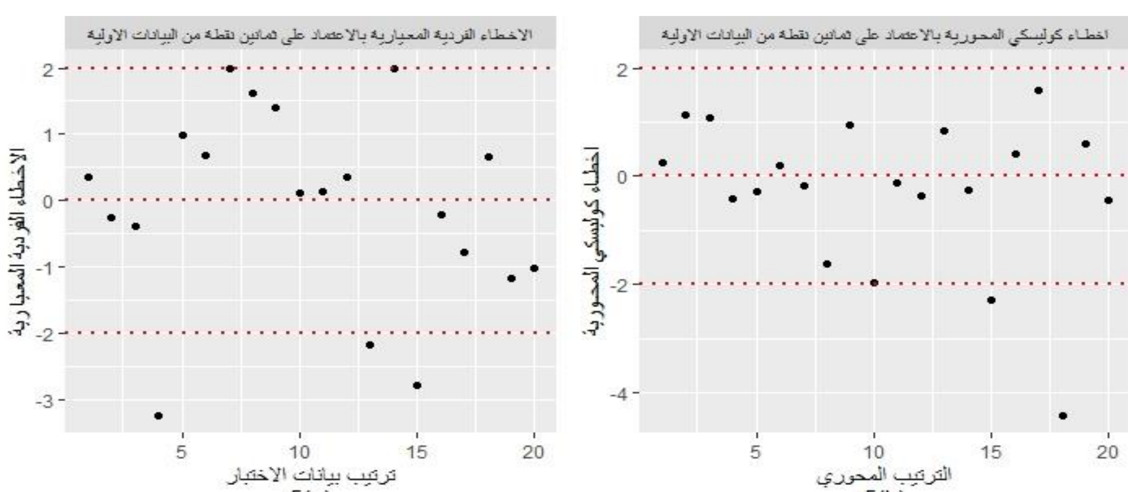
جدول (2):هذا الجدول يوضح مسافة مهالانوبيس المحسوبة وطريقة تحقق مربع كاي لثمانين نقطة من البيانات الاولية، إلى جانب بعض الإحصائيات عن توزيعاتهما التنبؤية

	Obs.	Min	1st Qu	Median	Mean	3rd Qu	Max
$D_{MD}(\bullet)$	20.356	5.039	14.674	19.359	20.356	24.495	52.945
$D_{\chi^2}(\bullet)$	40.97208	5.068	15.960	19.766	20.334	24.047	44.220



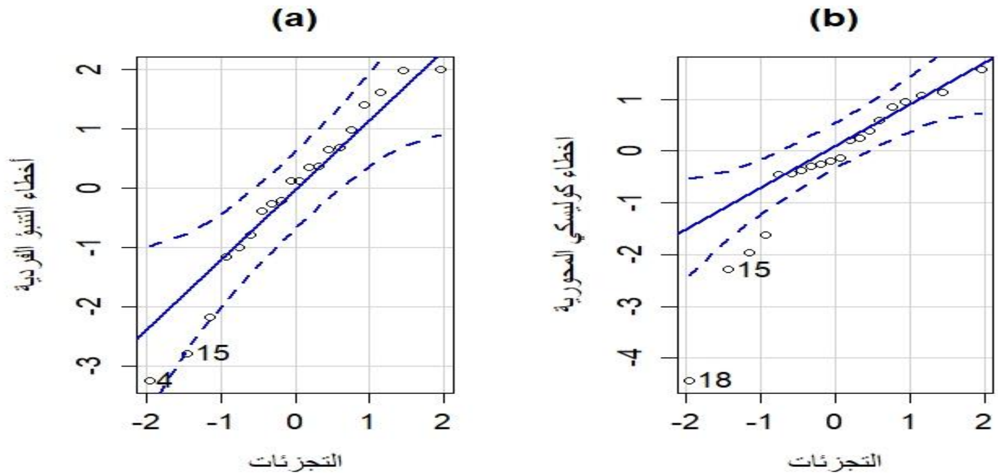
(شكل 4) يوضح يمثل القيم الحقيقية لمخرجات الروبوت مقابل التوزيع التنبؤي عند فترة ثقة 0.95
بالاعتماد على ثمانين نقطة من البيانات الاولية

لذا فانه من خلال اخطاء كوليسكي المحورية نستطيع تحديد نقاط الاختبار التي قد يكون فيها مشكلة محلية حول تلك ال نقاط. نستخدم رسوم (Q-Q) للتحقق من صحة نموذج عملية كاوس كما هو موضح في (الشكل 6) وفيه نلاحظ ان النقاط تكون قريبة من خط 45 درجة من خلال الأصل وبهذا فإن فرضية التوزيع الطبيعي لمخرجات النموذج الحاسوبي تكون معقول, وبهذا نستطيع القول بانه كلما زاد عدد البيانات الاولية كان الحصول نموذج عملية كاوس متقارب من النموذج الحاسوبي امر ممكن.



5(a) 5(b)

(شكل 5): يوضح شكل 5(a) الاخطاء المعيارية الفردية مقابل ترتيب بيانات الاختبار
يوضح شكل 5(b) اخطاء كوليسكي المحورية مقابل الترتيب المحوري



(شكل 6): يوضح شكل (a)6 اخطاء التنبؤ الفردية بطريقة رسوم Q-Q

يوضح شكل (b)6 اخطاء كوليسكي المحورية بطريقة رسوم Q-Q (بالاعتماد على ثمانين نقطة من البيانات الاولية)

5. الاستنتاجات

تم في هذا البحث تقديم اسلوب بيز في بناء نماذج عملية كاوس كنماذج بديلة للنماذج الحاسوبية المعقدة, عن طريق توليد بيانات عشوائية ضمن مجال محدد واستنتجنا بانه اذا كان عدد البيانات يساوي تقريبا عشرة اضعاف عدد المتغيرات تكون تقريبات النموذج الحاسوبي افضل. تم ايضا اختبار كفاءة نموذج عملية كاوس عن طريق استخدام طرق التحقق من الصحة، واستنتجنا انه من الافضل استخدام على الاقل طريقتان. تم عمل مقارنة بين طرق التحقق التي تراعي الارتباط في مخرجات النموذج الحاسوبي والطرق التي لا تراعي الارتباط في مخرجات النموذج الحاسوبي. لتوضح نموذج عملية كاوس وطرق التحقق المقترحة، اخذنا مثال حقيقي متمثل بدالة ذراع الروبوت وعملنا على بناء نموذج عملية كاوس خاص به وتم تطبيق طرق التحقق عليه موضحة بالرسوم البيانية. من خلال النتائج التي حصلنا عليها، استنتجنا ان طريقة كوليسكي المحورية للتحقق من الصحة تعطي افضل النتائج في تشخيص الضعف والقوة في كفاءة نموذج عملية كاوس لنموذج دالة ذراع الروبوت لأنها تولد اخطاء غير مرتبطة مع بعضها.

شكر و تقدير (Acknowledgement)

يتقدم الباحثون بالشكر و التقدير الى قسم الرياضيات في كلية التربية للعلوم الصرفة – جامعة الموصل لتقديم التسهيلات اللازمة لاكمال هذا البحث

المصادر

[1] J. Sacks, W. J. Welch, T. J. Mitchell, and H. P. Wynn, “Design and analysis of computer experiments,” *Stat. Sci.*, pp. 409–423, 1989.

[2] C. Currin, T. Mitchell, M. Morris, and D. Ylvisaker, “A Bayesian approach to the design and analysis of computer experiments”. Technical Report ORNL-6498, Oak Ridge National Laboratory. 1988.

[3] C. Currin, T. Mitchell, M. Morris, and D. Ylvisaker, “Bayesian prediction of deterministic functions, with applications to the design and analysis of computer experiments,” *J. Am. Stat. Assoc.*, vol. 86, no. 416, pp. 953–963, 1991.

[4] A. O’Hagan, “Curve fitting and optimal design for prediction,” *J. R. Stat. Soc. Ser. B*, vol. 40, no. 1, pp. 1–24, 1978.

[5] W. J. Welch, R. J. Buck, J. Sacks, H. P. Wynn, T. J. Mitchell, and M. D. Morris, “Screening, predicting, and computer experiments,” *Technometrics*, vol. 34, no. 1, pp. 15–25, 1992.

[6] J. Oakley and A. O'Hagan, "Bayesian inference for the uncertainty distribution of computer model outputs," *Biometrika*, vol. 89, no. 4, pp. 769–784, 2002.
[7] A. Saltelli, K. Chan, and E. M. Scott, *Sensitivity Analysis*. Wiley, 2009.
[8] J. E. Oakley and A. O'Hagan, "Probabilistic sensitivity analysis of complex models: a Bayesian approach," *J. R. Stat. Soc. Ser. B (Statistical Methodol.*, vol. 66, no. 3, pp. 751–769, 2004.
[9] M. C. Kennedy, C. W. Anderson, S. Conti, and A. O'Hagan, "Case studies in Gaussian process modelling of computer codes," *Reliab. Eng. Syst. Saf.*, vol. 91, no. 10–11, pp. 1301–1309, 2006.
[10] G. S. Kimeldorf and G. Wahba, "A correspondence between Bayesian estimation on stochastic processes and smoothing by splines," *Ann. Math. Stat.*, vol. 41, no. 2, pp. 495–502, 1970.
[11] M. C. Kennedy and A. O'Hagan, "Bayesian calibration of computer models," *J. R. Stat. Soc. Ser. B (Statistical Methodol.*, vol. 63, no. 3, pp. 425–464, 2001.
[12] A. O'Hagan, "Bayesian analysis of computer code outputs: A tutorial," *Reliab. Eng. Syst. Saf.*, vol. 91, no. 10–11, pp. 1290–1300, 2006.
[13] Y. Al-Taweel, "Diagnostics and Simulation-Based Methods for Validating Gaussian Process Emulators" PhD. Thesis, college of science, University of Sheffield, 2018.
[14] M. D. Morris and T. J. Mitchell, "Exploratory designs for computational experiments," *J. Stat. Plan. Inference*, vol. 43, no. 3, pp. 381–402, 1995.
[15] W. Oberkampf and T. Trucano, "Validation methodology in computational fluid dynamics," in *Fluids 2000 Conference and Exhibit*, 2000, p. 2549.
[16] M. J. Bayarri *et al.*, "A framework for validation of computer models," *Technometrics*, vol. 49, no. 2, pp. 138–154, 2007.
[17] J. Rougier, D. M. H. Sexton, J. M. Murphy, and D. Stainforth, "Analyzing the climate sensitivity of the HadSM3 climate model using ensembles from different but related experiments," *J. Clim.*, vol. 22, no. 13, pp. 3540–3557, 2009.
[18] M. Goldstein and J. Rougier, "Bayes linear calibrated prediction for complex systems," *J. Am. Stat. Assoc.*, vol. 101, no. 475, pp. 1132–1143, 2006.
[19] J. Haslett and K. Hayes, "Residuals for the linear model with general covariance structure," *J. R. Stat. Soc. Ser. B (Statistical Methodol.*, vol. 60, no. 1, pp. 201–215, 1998.
[20] R. Fraccaro, R. J. Hyndman, and A. Veevers, "Theory & Methods: Residual Diagnostic Plots for Checking for Model Mis-specification in Time Series Regression," *Aust. N. Z. J. Stat.*, vol. 42, no. 4, pp. 463–477, 2000.
[21] E. A. Houseman, L. M. Ryan, and B. A. Coull, "Cholesky residuals for assessing normal errors in a linear model with correlated outcomes," *J. Am. Stat. Assoc.*, vol. 99, no. 466, pp. 383–394, 2004.
[22] R. G. Hills and T. G. Trucano, "Statistical validation of engineering and scientific models: Background," *Sandia Natl. Lab. Albuquerque, NM, Rep. No. SAND99-1256*, 1999.
[23] R. G. Hills and T. G. Trucano, "Statistical Validation of Engineering and Scientific Models: A Maximum Likelihood Based Metric"; TOPICAL, United States 2002.
[24] L. S. Bastos and A. O'Hagan, "Diagnostics for Gaussian process emulators," *Technometrics*, vol. 51, no. 4, pp. 425–438, 2009.
[25] G. H. Golub and C. F. Van Loan, "Matrix Computations Johns Hopkins University Press," *Balt. London*, 1996.
[26] N. J. Higham, *Accuracy and stability of numerical algorithms*. SIAM, 2nd Ed, Philadelphia, 2002.
[27] J. An and A. Owen, "Quasi-regression," *J. Complex.*, vol. 17, no. 4, pp. 588–607, 2001.
[28] Y. H. Al-Taweel and N. Sadeek, "A comparison of different methods for building Bayesian kriging models," *Pakistan J. Stat. Oper. Res.*, pp. 73–82, 2020.