

國立成功大學理學院

111 學年度第二學期模組化課程

電腦實驗與不確定性的量化

Computer Experiments and Uncertainty Quantification

授課教師

任職單位

畢業學校

林立祥

Louisiana State University
(路易斯安那州立大學)

Georgia Institute of Technology GA, USA
(喬治亞理工學院)

課程類別

學分數

選必修

開課人數

其他注意事項

Lecture
+
Recitation

1.5

選修

25

建議學生可自備筆電，並事先自行安裝 R 和 R-studio
請至以下網站下載並安裝

R: <https://www.r-project.org/>

R-studio: <https://posit.co/>

先修課程或先備能力

建議修過一學期統計學

課程難易度

難 中偏難 中偏易 易

建議修課學生背景

理學院，工學院，電資學院，管理學院

教學方法

講授 50%，實作 25%，討論 25%

補充說明：

每天課程中，9:00-12:00 主要為觀念與方法課堂講解，13:00-15:30 會透過電腦與 R 語言對上午所學的觀念與方法進行實作。課程進行中會對重要觀念，設計討論題並提供實際例子與學生討論，加深學生對重要觀念的熟稔度。

評量方式

報告 60%，出席 12%，練習卷 28%

補充說明：

- (i) 練習卷 (worksheet) ($4 \times 7\% = 28\%$)：對於前四天的課程，每次課程開始前，授課老師會給於學生一份包含二到四題習題的練習卷，解決這些練習題的觀念或 R 語言技巧會在當日課堂中充分討論。每份練習卷於取得隔日中午前繳交。每份練習卷佔課程總成績 7%，共四份練習卷。
- (ii) 報告 (60%)：學生於課程結束後一周內需繳交一份課程報告，該報告需清楚地描述報告的研究問題與目標並包含詳細設計、建模、及分析電腦實驗的流程。學生可選擇自己感興趣領域相關的電腦實驗例子，課程進行時亦會提供許多可用的例子。該報告需以線上方式繳交，詳細繳交方式與報告格式會在課堂公布。

學習規範

無

國立成功大學理學院

111 學年度第二學期模組化課程

課程概述

隨著數學建模和計算機結構的進步，在科學和工程學中越來越常使用電腦實驗來量化複雜物理系統中的不確定性。本課程將介紹電腦實驗和不確定性量化（Uncertainty Quantification, UQ）的基本觀念與方法，並幫助學生有能力解決自己所感興趣應用領域中的 UQ 問題。課程將講解電腦實驗與 UQ 中基本概念和方法，而學生於 R 實驗室課程中將學習如何將所學方法應用於實際設計、建模和分析電腦實驗（透過 R 語言）。此外，本課程還將討論最新電腦實驗文獻和提供實際應用範例。

課程概述(英文)

With advances in mathematical modeling and computer architecture, computer experiments become a popular technique in science and engineering for quantifying uncertainty in complex physical systems. This course presents the basic concepts and methods in computer experiments and uncertainty quantification (UQ) with the goal of helping students resolve UQ questions in their application areas of interest. Lectures include concepts and methods that the students can apply to design, model, and analyze computer experiments in the R-lab courses (through R programming). In addition, some advanced results in recent computer experiments literature and real-world application examples will also be discussed in this course.

課程進度

堂次	時間	進度說明
2023/1/9(一)	9:00-15:30	9:00-10:00 Introduction to uncertainty quantification and computer experiments 10:00-11:00 Examples and motivating datasets 11:00-12:00 Likelihood based concepts 12:00-13:00 Lunch break 13:00-14:30 R Lab: Basic programming 14:30-15:30 R Lab: Numerical methods for maximizing likelihood functions
2023/1/10(二)	9:00-15:30	9:00-10:00 Introduction to emulation 10:00-12:00 Deterministic and stochastic modeling approaches 12:00-13:00 Lunch break 13:00-14:30 R Lab: Fitting a kriging model 14:30-15:30 R Lab: Building an emulator for UQ with interpretation
2023/1/11(三)	9:00-15:30	9:00-10:00 Goals in designing computer experiments 10:00-12:00 Space-filling and criterion-based designs 12:00-13:00 Lunch break 13:00-14:00 R Lab: Generating designs for computer models 14:00-15:30 R Lab: Augmenting an existing design.

國立成功大學理學院

111 學年度第二學期模組化課程

2023/1/12(四)	9:00-15:30	9:00-10:00 Introduction to model discrepancy 10:00-12:00 Methods for model calibration and parameter calibration 12:00-13:00 Lunch break 13:00-14:30 R Lab: Implementing calibration methods with applications 14:30-15:30 R Lab: Examples for course projects
2023/1/13(五)	9:00-15:30	9:00-11:00 Sensitivity analysis: Functional ANOVA decomposition and sensitivity indices (Global and Local). 11:00-12:00 Overview on advanced topics 12:00-13:00 Lunch break 13:00-14:00 R Lab: model-based optimizations 14:30-15:30 R Lab: multifidly modeling

課程學習目標

1. Learning UQ methods for designing, modeling, and analyzing computer experiments.
2. Incorporating computer models with observed physical data for conducting statistical inference in complex physical systems.
3. Developing data analysis skills for interdisciplinary research.

課程的重要性、跨域性與時代性

電腦實驗目前已被廣泛的應用於許多科學及工程領域中，這類實驗往往由於昂貴的計算成本，僅能獲得有限的樣本，此時如何利用這些有限的實驗數據進行有效的統計建模與推論變成一個重要的研究議題，也是本課程介紹的重點。本課程亦將介紹近期電腦實驗在不同領域應用的實例，希望幫助學生從收集電腦實驗資料、建模到實際分析了解電腦實驗，並建立能力將電腦實驗應用在自己的專業領域中。

其他備註

參考書目：

- Santner, T. J., Williams, B. J., and Notz, W. I., (2018). *The Design and Analysis of Computer Experiments (Second Edition)*. New York: Springer
- Gramacy, R. B. (2020) *Surrogates: Gaussian Process Modeling, Design, and Optimization for the Applied Sciences*. Boca Raton, FL: Chapman and Hall/CRC