

目 录

1 基本理论与方法	1
1.1 全局敏感性分析技术	1
1.1.1 Morris 法	1
1.1.2 基于方差分解的全局敏感性分析	3
1.1.3 Sobol' 法	5
1.1.4 基于稀疏多项式混沌展开的方法	9
1.1.5 稀疏多项式混沌展开的构建算法	11
参考文献	18

1 基本理论与方法

摘自本人研究生毕业论文相关章节。

1.1 全局敏感性分析技术

全局敏感性分析技术有很多种，比较典型的有元效应方法和基于方差的方法。元效应方法通过计算各参数的元效应来评估参数的敏感性，如 Morris 法。基于方差的方法在方差分解的基础上引入 Sobol' 指数来评估参数的敏感性，主要有 Sobol' 法，稀疏多项式混沌展开法等。下面将分别对这些典型的全局敏感性分析方法进行介绍，并根据它们的特点选取相应的全局敏感性分析技术来对桥域多尺度方法展开分析。

1.1.1 Morris 法

1991 年，Morris^[1] 对局部敏感性分析方法进行改进，提出了一种简单又有效的评估敏感性的方法，用以在多参数模型中识别出少数几个重要的参数，这种方法就是 Morris 法。Morris 法基于一次变化法的实验设计，在相邻的实验方案中只有其中一个参数的取值发生变化，而其他参数保持不变。在此基础上，可计算各参数的元效应，并得到各参数元效应的均值 μ 与标准差 δ 。均值 μ 代表该参数对模型响应的整体影响，而标准差 δ 则表征了该参数对模型响应的非线性作用及与其他参数间的交互作用。因此，这两个参数被用作 Morris 法中评估参数敏感性的指标。

假设所研究模型的输入为向量 $\mathbf{x} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ ，其输出为标量 Y ：

$$Y = M(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \quad (1.1)$$

其中，各输入参数是相互独立的随机变量。为了表述方便，接下来我们假设各输入参数的取值范围已被映射到区间 $[0, 1]$ 上，因此参数空间为 n 维的单位立方体，即 $\mathbb{K}^n = \{\mathbf{x} : 0 \leq x_i \leq 1, i = 1, \dots, n\}$ 。

根据 Morris 法，我们首先设定划分水平 m ，并在每一个参数对应的维度均匀布置 m 个点，也就是将每个输入参数的取值区间 $(m - 1)$ 等分。形状为 n 维单位立方体的参数空间由此被划分为众多个小网格。对于参数空间中选定的网格节点 $\mathbf{x}^* =$

$(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)^T$, 第 i 个参数的元效应如下:

$$EE_i = \frac{M(x_1^*, x_2^*, \dots, x_{i-1}^*, x_i^* + \Delta, \dots, x_n^*) - M(x_1^*, x_2^*, \dots, x_{i-1}^*, x_i^*, \dots, x_n^*)}{\Delta} \quad (1.2)$$

其中, 步长 Δ 的值可在 $\{1/(m-1), 2/(m-1), \dots, 1-1/(m-1)\}$ 中选取。从元效应的计算公式, 我们可以看到局部敏感性分析的影子。其定义类似于割线斜率, 计算的是参数空间中网格节点 \mathbf{x}^* 和 $\mathbf{x}^* + \mathbf{e}_i \Delta$ 的模型响应的变化对步长 Δ 的增长率。其中, \mathbf{e}_i 是除了第 i 个元素为 1, 其他元素都为 0 的单位向量。

在整个参数空间中, 元效应 EE_i 服从一定的概率分布。通过随机取样, 计算参数 x_i 在输入参数空间中不同网格节点处的元效应, 再根据所得的样本数据, 就可计算出元效应的均值 μ 和标准差 δ 。例如, 若 m 为偶数, 且步长 Δ 取为 $m/(2(m-1))$, 那么参数 x_i 的元效应的个数就为 $m^{n-1}[m-1-\Delta(m-1)]$ 。图1.1展示了二维输入参数空间 ($n=2$) 在划分水平 $m=4$, 步长 $\Delta=2/3$ 时, 参数 x_1 元效应的计算情况。图中对于参数 x_1 和 x_2 均有 4 种可能取值, 参数空间因此共有 16 个节点。其中, 蓝色箭头标识出了每次参与计算参数 x_1 元效应的两个点, 它们的 x_2 的值不变而 x_1 的值相差 $2/3$, x_1 元效应的个数共有 8 个。

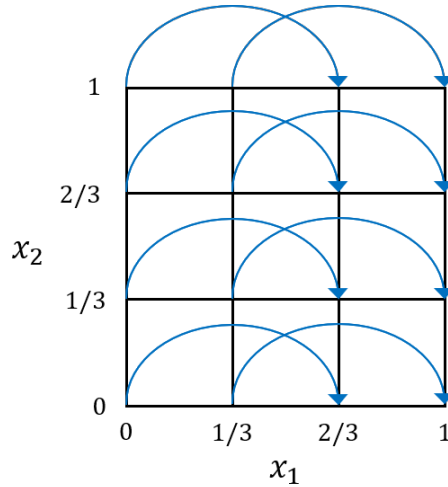


图 1.1: 元效应计算示意图 ($n=2, m=4, \Delta=2/3$)

参数的元效应表征了参数的局部敏感性, 而 Morris 法通过随机取样, 计算参数在输入参数空间中各样本点处的元效应来研究参数的全局敏感性。对于参数 x_i 而言, 其元效应的均值 μ 是对其在输入参数空间中各样本点局部敏感性的平均, 因此表征了参数 x_i 对模型响应的整体影响。而参数 x_i 元效应的标准差 δ 则表明了参数 x_i 元效应的离散程度。参数 x_i 元效应的离散程度较大也就意味着参数 x_i 元效应的计算严重依赖于样本点的位置, 即其他参数的取值。相反, 若标准差 δ 较小, 也就意味着输入参数空间中各样本点处 x_i 的元效应的值很接近, 即参数 x_i 对模型响应的影响几乎独立

于其他的输入参数。显然，均值 μ 越大，参数对模型响应的整体影响越大；而标准差 δ 越大，参数的非线性作用及交互作用越大。但需要指出的是，采用均值 μ 度量参数敏感性在某些情况下可能会错误地估计参数的敏感性，而将本应该是很重要的参数识别为影响较小的参数。例如，当元效应的分布包含正值和负值，即模型不单调或存在相互作用时，一些元效应可能在计算均值 μ 的过程中相互抵消，从而使得对于一个较为重要的参数只能得到一个较低的平均值 μ 。为此，Morris 提出通过同时考察均值 μ 和标准差 δ 来评估参数的敏感性。因为，计算均值 μ 时即使出现元效应相互抵消导致其值很小，标准差 δ 也不会受到影响，其值会相对较大。

Morris 法形式简洁、计算方便，在处理模型计算成本较大、输入参数较多的问题时显示出很高的效率，故其常被用于多参数模型的参数筛选问题，或与其他敏感性分析方法配套，作为其预处理程序。通过采用 Morris 法，可快速筛除多参数模型中对模型响应影响较小的参数，从而将所需考察的输入参数的个数减少到一个比较合理的范围以降低进一步分析的计算量和复杂性。接着，可采用其他敏感性分析方法，比如，基于方差分解的方法做更加深入和精确的分析。我们也需指出，Morris 法是对分析效率和精度的折中，尽管元效应的均值和标准差能较好地表征参数的整体效应和交互作用，但依然无法精准地捕捉参数的一阶效应及高阶效应。同时，其分析结果也会受取样和模型类型的影响，而需要进行多次取样分析再对得到的均值和标准差取平均来减小它们的影响。

1.1.2 基于方差分解的全局敏感性分析

化学家 Cukier 等人^[2] 首先使用方差进行全局敏感性分析。随后，俄罗斯数学家 I. M. Sobol' ^[3,4] 对基于方差的全局敏感性分析方法做了系统的研究和论证，在方差分解的基础上引入 Sobol' 指数来评估参数的敏感性。方差分解就是将模型响应的总方差归结为各个输入参数的作用，这样就可以通过评估参数对总方差的贡献来量化参数的敏感性。采用这种基于方差的方法，不仅能计算参数的一阶效应，还能捕捉参数的高阶效应及参数间的交互作用。

仍考虑式1.1中的模型，并假设 $M(\mathbf{x})$ 是可积的。方差分解定理表明，任何可积函数 $M(\mathbf{x})$ 都可以分解为维数不断增加的各项之和^[3]：

$$M(\mathbf{x}) = M_0 + \sum_{i_1=1}^n M_{i_1}(x_{i_1}) + \sum_{i_2>i_1}^n M_{i_1 i_2}(x_{i_1}, x_{i_2}) + \cdots + M_{12\dots n}(\mathbf{x}) \quad (1.3)$$

其中，每个被加项对其任意一个自变量的积分为零，即：

$$\int_0^1 M_{i_1\dots i_t}(x_{i_1}, \dots, x_{i_t}) dx_{i_k} = 0, \quad 1 \leq k \leq t \quad (1.4)$$

可见，式1.3中被加项的个数为：

$$\sum_{j=1}^n \binom{n}{j} = 2^n - 1 \quad (1.5)$$

式1.4保证了式1.3分解的唯一性，并使得方差分解中的各被加项以如下的形式相互正交：

$$\int_{\mathbb{K}^n} M_{i_1 \dots i_k}(x_{i_1}, \dots, x_{i_k}) M_{j_1 \dots j_t}(x_{j_1}, \dots, x_{j_t}) d\mathbf{x} = 0 \quad \text{for} \quad \{i_1 \dots i_k\} \neq \{j_1 \dots j_t\} \quad (1.6)$$

为了表示简洁，我们记 $d\mathbf{x} = dx_1 \dots dx_n$ 。

式1.3中每一被加项都能通过解析的方式推导出来。例如，式中的常数项、单变量项和双变量项的计算公式为：

$$M_0 = \int_{\mathbb{K}^n} M(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (1.7)$$

$$M_{i_1}(x_{i_1}) = \int_{\mathbb{K}^{n-1}} M(\mathbf{x}) d\mathbf{x}_{\sim i_1} \quad (1.8)$$

$$M_{i_1 i_2}(x_{i_1}, x_{i_2}) = \int_{\mathbb{K}^{n-2}} M(\mathbf{x}) d\mathbf{x}_{\sim i_1, i_2} - M_{i_1}(x_{i_1}) - M_{i_2}(x_{i_2}) - M_0 \quad (1.9)$$

表达式 $\int_{\mathbb{K}^{n-1}} d\mathbf{x}_{\sim i_1}$ 表示对除了 x_{i_1} 以外的所有其他变量进行积分。同样地， $\int_{\mathbb{K}^{n-2}} d\mathbf{x}_{\sim i_1, i_2}$ 表示对除了 x_{i_1} 和 x_{i_2} 以外的所有其他变量进行积分。更一般地，符号“ \sim ”表示序列中除了后面项以外的部分。

进一步，若 $M(\mathbf{x})$ 是平方可积的，即 $M(\mathbf{x}) \in \mathcal{L}^2$ ，且输入参数在区间 $[0, 1]$ 上服从均匀分布：

$$\mathbf{x} = \{x_1, \dots, x_n\}, \quad x_i \sim \mathcal{U}[0, 1], \quad i = 1, \dots, n \quad (1.10)$$

由于模型输入 \mathbf{x} 是随机变量序列，那么模型响应 Y 也是随机变量，其方差 D ：

$$D = \mathbb{V}[M(\mathbf{x})] \equiv \int_{\mathbb{K}^n} M^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - M_0^2 \quad (1.11)$$

将式1.3代入式1.11中，并由式1.6中的正交性， Y 的总方差可被分解成如下形式：

$$D = \int_{\mathbb{K}^n} M^2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - M_0^2 = \sum_{i_1=1}^n D_{i_1} + \sum_{i_2 > i_1}^n D_{i_1 i_2} + \dots + D_{12 \dots n} \quad (1.12)$$

其中，偏方差 $D_{i_1 \dots i_t}$ ：

$$D_{i_1 i_2 \dots i_t} = \int_{\mathbb{K}^s} M_{i_1 \dots i_t}^2(x_{i_1}, \dots, x_{i_t}) dx_{i_1} \dots dx_{i_t} \quad (1.13)$$

参数敏感性指数 Sobol' 指数的定义如下：

$$S_{i_1 \dots i_t} = \frac{D_{i_1 \dots i_t}}{D} \in [0, 1] \quad (1.14)$$

显然，所有的 Sobol' 指数之和为 1：

$$\sum_{i_1=1}^n S_{i_1} + \sum_{i_2 > i_1}^n S_{i_1 i_2} + \dots + S_{12 \dots n} = 1 \quad (1.15)$$

由 Sobol' 指数的定义可知，Sobol' 指数通过衡量各参数对总方差的贡献来表征参数的敏感性。一阶敏感性指数 S_i 表示参数 x_i 单独作用下对模型响应的影响。 S_{ij} 表示参数 x_i 和 x_j 的交互作用对模型响应的影响。类似地， $S_{i_1 i_2 \dots i_t}$ 表示参数 $\{x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_t}\}$ 间的交互作用对模型响应的影响。显然，Sobol' 指数越接近于 1 表明相应参数对总方差的贡献越大，也就意味着相应参数的敏感性越高。一般地，人们采用一阶敏感性指数 S_i 和总敏感性指数 S_{Ti} 来衡量耦合参数的敏感性。其中，总敏感性指数 S_{Ti} 考虑了参数 x_i 对模型响应 Y 的所有影响，包括其单独作用和与其他参数间的交互作用：

$$S_{Ti} = \sum_{g: i \in g} S_g = 1 - S_{\sim i} \quad (1.16)$$

相比其他的方法，基于方差的全局敏感性分析有如下优点^[5]：

- 1) 模型无关性，即衡量参数敏感性的指标是通用的而不依赖于所分析模型的类型。采用 Sobol' 指数衡量参数的敏感性对模型是否是线性或单调没有任何要求，这也是 Sobol' 指数一经提出就被广泛使用的重要原因。
- 2) 能够评估参数在整个样本空间内变化时对模型响应的影响。
- 3) 能够捕捉参数间的交互作用。
- 4) 能够处理逻辑类型不同的输入参数，比如可同时处理离散的和连续的输入参数。

因此，本文将采用基于方差的全局敏感性分析技术，通过计算 Sobol' 指数来评估桥域多尺度方法中耦合参数的敏感性，进而优化耦合参数的选取范围。为了高效地计算 Sobol' 指数，人们进行了大量的研究并发展了多种求解方法，比如，谱方法^[2, 6-8]、非参数法^[3, 9-11]和基于仿真器的方法^[12-14]等等。在众多计算方法中，基于统计模拟的 Sobol' 法和基于元建模思想的稀疏多项式混沌展开法受到了广泛的关注。在下文中，我们将分别对这两种方法进行介绍。

1.1.3 Sobol' 法

为了计算 Sobol' 指数，I. M. Sobol' ^[3, 4] 基于统计模拟的思想提出了 Sobol' 法。作为一种蒙特卡洛法，Sobol' 法采用随机取样，通过计算样本的数字特征（如随机事件出现的频率）来估算随机变量的数字特征（如随机事件的概率）。

将模型的输入参数 $\mathbf{x} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 划分为互补且不相交的两部分 $\hat{\mathbf{x}}$ 和 $\tilde{\mathbf{x}}$:

$$\hat{\mathbf{x}} = \{x_{i_1}, \dots, x_{i_k}\}, \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}, \quad 1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq n \quad (1.17)$$

可见, $\mathbf{x} = (\hat{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}})$ 。

令 $\mathbf{e} = (i_1, i_2, \dots, i_k)$, 则只由 $\hat{\mathbf{x}}$ 中参数作用产生的方差为:

$$D_{\hat{\mathbf{x}}} = \sum_{t=1}^k \sum_{(i_1 < \dots < i_t) \in \mathbf{e}} D_{i_1 \dots i_t} \quad (1.18)$$

同理, 记只由 $\tilde{\mathbf{x}}$ 中参数作用产生的方差为 $D_{\tilde{\mathbf{x}}}$ 。

考虑 $\hat{\mathbf{x}}$ 中参数的所有作用, 包括与 $\tilde{\mathbf{x}}$ 中参数的交互作用产生的方差:

$$D_{T\hat{\mathbf{x}}} = D - D_{\tilde{\mathbf{x}}} \quad (1.19)$$

同理, 记所有的由 $\tilde{\mathbf{x}}$ 中参数参与作用而产生的方差为 $D_{T\tilde{\mathbf{x}}}$ 。

方差 $D_{\hat{\mathbf{x}}}$ 可由如下公式计算得到:

$$D_{\hat{\mathbf{x}}} = \int M(\mathbf{x})M(\hat{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}}')d\mathbf{x}d\tilde{\mathbf{x}}' - M_0^2 \quad (1.20)$$

证明 对式1.20中的积分进行如下变换:

$$\int M(\mathbf{x})M(\hat{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}}')d\mathbf{x}d\tilde{\mathbf{x}}' = \int d\hat{\mathbf{x}} \int M(\hat{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}})d\tilde{\mathbf{x}} \int M(\hat{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}}')d\tilde{\mathbf{x}}' = \int d\hat{\mathbf{x}} \left[\int M(\hat{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}})d\tilde{\mathbf{x}} \right]^2$$

又由式1.4可得:

$$\int M(\hat{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}})d\tilde{\mathbf{x}} = M_0 + \sum_{t=1}^k \sum_{(i_1 < \dots < i_t) \in \mathbf{e}} M_{i_1 \dots i_t}(i_1, \dots, i_t)$$

将此式代入前式, 平方并积分后可得:

$$\int M(\mathbf{x})M(\hat{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}}')d\mathbf{x}d\tilde{\mathbf{x}}' = M_0^2 + \sum_{t=1}^k \sum_{(i_1 < \dots < i_t) \in \mathbf{e}} D_{i_1 \dots i_t}$$

移项后又由式1.18即得式1.20。 □

类似于式1.20, 可得:

$$D_{\tilde{\mathbf{x}}} = \int M(\mathbf{x})M(\hat{\mathbf{x}}', \tilde{\mathbf{x}})d\mathbf{x}d\hat{\mathbf{x}}' - M_0^2 \quad (1.21)$$

至此, 为了得到 $D_{\hat{\mathbf{x}}}$ 和 $D_{T\hat{\mathbf{x}}} = D - D_{\hat{\mathbf{x}}}$, 需要计算如下四个积分:

$$\int M(\mathbf{x})d\mathbf{x}, \quad \int M^2(\mathbf{x})d\mathbf{x}, \quad \int M(\mathbf{x})M(\hat{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}}')d\mathbf{x}d\tilde{\mathbf{x}}' \quad \text{和} \quad \int M(\mathbf{x})M(\hat{\mathbf{x}}', \tilde{\mathbf{x}})d\mathbf{x}d\tilde{\mathbf{x}}'$$

上述各个积分可采用蒙特卡洛法进行计算。考虑在样本空间 \mathbb{K}^n 中均匀分布的两个随机样本点 ζ 和 ζ' , 且对应有 $\zeta = (\varsigma, \tau)$ 和 $\zeta' = (\varsigma', \tau')$ 。每次蒙特卡洛实验需要计算模型的三个输出, 即 $M(\varsigma, \tau)$, $M(\varsigma, \tau')$ 和 $M(\varsigma', \tau)$ 。在进行 N_d 次实验后, 得到相应的蒙特卡洛估计如下:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_d} \sum_{j=1}^{N_d} M(\zeta_j) &\xrightarrow{\mathcal{P}} M_0, & \frac{1}{N_d} \sum_{j=1}^{N_d} M(\zeta_j)^2 &\xrightarrow{\mathcal{P}} D + M_0^2 \\ \frac{1}{N_d} \sum_{j=1}^{N_d} M(\zeta_j)M(\varsigma_j, \tau_j') &\xrightarrow{\mathcal{P}} D_{\hat{\mathbf{x}}} + M_0^2, & \frac{1}{N_d} \sum_{j=1}^{N_d} M(\zeta_j)M(\varsigma_j', \tau_j) &\xrightarrow{\mathcal{P}} D_{\tilde{\mathbf{x}}} + M_0^2 \end{aligned} \quad (1.22)$$

式中 $\xrightarrow{\mathcal{P}}$ 表示依概率收敛, 这表明符号左右两端存在一定差距的可能性将会随着样本数量 N_d 的增大而趋向于零。

同时, 为了计算方差 $D_{T\hat{\mathbf{x}}}$, 除了采用上述方法通过计算 D 和 $D_{\tilde{\mathbf{x}}}$ 再由二者相减外, 还可由如下公式直接计算得到:

$$D_{T\hat{\mathbf{x}}} = \frac{1}{2} \int [M(\hat{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}}) - M(\hat{\mathbf{x}}', \tilde{\mathbf{x}})]^2 d\mathbf{x}d\tilde{\mathbf{x}}' \quad (1.23)$$

证明 将式1.23中积分中的平方展开, 并进行如下变换:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \int [M(\hat{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}}) - M(\hat{\mathbf{x}}', \tilde{\mathbf{x}})]^2 d\mathbf{x}d\tilde{\mathbf{x}}' \\ &= \frac{1}{2} \int M^2(\mathbf{x})d\mathbf{x} + \frac{1}{2} \int M^2(\hat{\mathbf{x}}', \tilde{\mathbf{x}})d\hat{\mathbf{x}}'d\tilde{\mathbf{x}} - \int M(\mathbf{x})M(\hat{\mathbf{x}}', \tilde{\mathbf{x}})d\mathbf{x}d\tilde{\mathbf{x}}' \\ &= \int M^2(\mathbf{x})d\mathbf{x} - \int M(\mathbf{x})M(\hat{\mathbf{x}}', \tilde{\mathbf{x}})d\mathbf{x}d\tilde{\mathbf{x}}' \end{aligned}$$

又由前文可得:

$$D_{\tilde{\mathbf{x}}} = \int M(\mathbf{x})M(\hat{\mathbf{x}}', \tilde{\mathbf{x}})d\mathbf{x}d\tilde{\mathbf{x}}' - M_0^2$$

将此式移项后代入前式可得:

$$\frac{1}{2} \int [M(\hat{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}}) - M(\hat{\mathbf{x}}', \tilde{\mathbf{x}})]^2 d\mathbf{x}d\tilde{\mathbf{x}}' = \int M^2(\mathbf{x})d\mathbf{x} - (D_{\tilde{\mathbf{x}}} + M_0^2)$$

又由式1.11, 可知:

$$\frac{1}{2} \int [M(\hat{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}}) - M(\hat{\mathbf{x}}', \tilde{\mathbf{x}})]^2 d\mathbf{x}d\tilde{\mathbf{x}} = D - D_{\tilde{\mathbf{x}}} = D_{T\hat{\mathbf{x}}}$$

式1.23得证。 □

同理可得, $D_{T\tilde{\mathbf{x}}}$ 的计算公式如下:

$$D_{T\tilde{\mathbf{x}}} = \frac{1}{2} \int [M(\hat{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}}) - M(\hat{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}}')]^2 d\mathbf{x} d\tilde{\mathbf{x}}' \quad (1.24)$$

类似地, 可采用蒙特卡洛法直接计算 $D_{T\hat{\mathbf{x}}}$ 和 $D_{T\tilde{\mathbf{x}}}$:

$$\frac{1}{2N_d} \sum_{j=1}^{N_d} [M(\zeta_j) - M(\zeta'_j, \tau_j)]^2 \xrightarrow{P} D_{T\hat{\mathbf{x}}}, \quad \frac{1}{2N_d} \sum_{j=1}^{N_d} [M(\zeta_j) - M(\zeta_j, \tau'_j)]^2 \xrightarrow{P} D_{T\tilde{\mathbf{x}}} \quad (1.25)$$

此时, 在得到 $D_{T\hat{\mathbf{x}}}$ 和 $D_{T\tilde{\mathbf{x}}}$ 后又可由 $D_{\hat{\mathbf{x}}} = D - D_{T\tilde{\mathbf{x}}}$ 和 $D_{\tilde{\mathbf{x}}} = D - D_{T\hat{\mathbf{x}}}$ 计算出 $D_{\hat{\mathbf{x}}}$ 和 $D_{\tilde{\mathbf{x}}}$ 。

至此, 分别发展了两套求解 $D_{\hat{\mathbf{x}}}$ 和 $D_{T\hat{\mathbf{x}}}$ 的蒙特卡洛计算公式。第一种方案是采用式1.22直接计算 $D_{\hat{\mathbf{x}}}$ 和 $D_{\tilde{\mathbf{x}}}$, 并由式 $D_{T\hat{\mathbf{x}}} = D - D_{\tilde{\mathbf{x}}}$ 间接地计算出 $D_{T\hat{\mathbf{x}}}$ 。而第二种方案则是由式1.25直接计算出 $D_{T\hat{\mathbf{x}}}$ 和 $D_{T\tilde{\mathbf{x}}}$, 再由式 $D_{\hat{\mathbf{x}}} = D - D_{T\tilde{\mathbf{x}}}$ 间接地计算出 $D_{\hat{\mathbf{x}}}$ 。我们需要指出的是, 在实际情况中通常是结合两种计算方案, 由式1.22直接计算 $D_{\hat{\mathbf{x}}}$, 并由式1.25直接计算 $D_{T\hat{\mathbf{x}}}$ 。因为, 可以证明, 无论是在计算 $D_{\hat{\mathbf{x}}}$ 时还是在计算 $D_{T\hat{\mathbf{x}}}$ 时, 采用间接算法比直接算法的方差要大。因此, 为了取得更好的计算结果, 我们通常是结合上述两种计算公式, 选取对应的直接算法求解。

需要注意的是, 若均值 M_0 很大, 则由式1.22计算方差时其精度会很低。因此, 通常建议取一个粗略的估计 $C_0 \approx M_0$ 进而研究模型 $M(\mathbf{x}) - C_0$ 而不是 $M(\mathbf{x})$ 。对于新模型来说, 其均值 $M_0 - C_0$ 相比之前的均值 M_0 已显著减小。

由上述方法可以求得所有的 Sobol' 指数, 比如, 一阶 Sobol' 指数 $S_i = S_{(i)}$, 二阶 Sobol' 指数 $S_{ij} = S_{(ij)} - S_i - S_j$, 依次类推。其中, $S_{(i)}$ 和 $S_{(ij)}$ 分别为 $\hat{\mathbf{x}} = i$ 和 $\hat{\mathbf{x}} = (i, j)$ 时对应的敏感性指数 $D_{\hat{\mathbf{x}}}/D$ 。显然, 采用这种方法, 越是高阶的 Sobol' 指数其计算精度越低, 但我们感兴趣的那些较大的 Sobol' 指数的精度损失并不大。如上一小节所述, 我们仍然选用 S_i 及 S_{Ti} 来衡量某一参数的敏感性。

基于上述理论, Sobol' 法的算法如下:

1) 首先进行随机取样, 如采用 Sobol' 序列, 生成两个 $N_d \times n$ 阶的样本矩阵, 分别记为 A 和 B 。其中, N_d 为样本个数, n 为输入参数的个数。

2) 用样本矩阵 B 中的第 i 列替换样本矩阵 A 中的第 i 列, 构造样本矩阵 $AB^i (i = 1, 2, \dots, n)$ 。由此, 可得 A 、 AB^1 、 AB^2 、 \dots 、 AB^n 、 B 共计 $n + 2$ 个样本矩阵。

3) 计算模型在样本矩阵 A 和 B 中各样本点处的值, 得到 $2n$ 个模型响应, 并计算这些模型响应的方差 D 。

4) 对第 i 个输入参数 ($i = 1, 2, \dots, n$), 其 Sobol' 指数可由如下的计算步骤依次输出:

a. 估计方差 D_i :

$$D_i \approx \frac{1}{N_d} \sum_{j=1}^{N_d} M(B)_j (M(AB^i)_j - M(A)_j) \quad (1.26)$$

其中, $M(B)_j$ 表示将样本矩阵 B 中第 j 行的样本点输入到模型中, $M(AB^i)_j$ 和 $M(A)_j$ 的含义类似。

b. 估计方差 D_{Ti} :

$$D_{Ti} \approx \frac{1}{2N_d} \sum_{j=1}^{N_d} (M(AB^i)_j - M(A)_j)^2 \quad (1.27)$$

c. 输出敏感性指数 S_i 和 S_{Ti} :

$$S_i = \frac{D_i}{D}, \quad S_{Ti} = \frac{D_{Ti}}{D} \quad (1.28)$$

Sobol' 法作为一种蒙特卡洛法, 在计算敏感性指数时会存在蒙特卡洛误差, 而只有当样本数趋于无穷大时, 误差才会收敛为 0。为此, Sobol' 法需要有足够多的样本予以支撑, 否则会出现计算不精确甚至 Sobol' 指数大于 1 的情况。因而, 在面临模型计算成本较大的情况时, Sobol' 法会面临样本数量严重不足的问题。针对这一问题, 可通过构建真实模型的替代模型来高效地生成样本数据, 再采用 Sobol' 法进行求解。而采用这种元建模的方法除了存在蒙特卡洛误差外, 还会因使用替代模型近似原模型而引入额外的误差。但需要指出的是, 若采用稀疏多项式混沌展开来构建原模型的替代模型, 则 Sobol' 指数可以由多项式的系数以解析的方式计算出来, 从而直接避免了蒙特卡洛误差。除此之外, 基于稀疏多项式混沌展开还可以很方便地获得输入参数对模型响应的边际效应曲线, 从而为参数的优化取值提供参考, 而这是 Sobol' 法所不能实现的。下面将介绍基于稀疏多项式混沌展开的全局敏感性分析, 并给出一种高效的稀疏多项式混沌展开构建算法。

1.1.4 基于稀疏多项式混沌展开的方法

Sudret [6] 最早引入多项式混沌展开来进行全局敏感性分析。这类方法通过构建多项式混沌展开以替代原模型, 而各输入参数 Sobol' 指数的计算可认为只是多项式系数的一个后处理过程, 因此其计算十分便捷。

仍考虑式 1.1, 模型响应可被多项式基函数以如下的形式展开:

$$Y = M(\mathbf{x}) \equiv \sum_{\mathbf{b} \in \mathbb{N}^n} a_{\mathbf{b}} \psi_{\mathbf{b}}(\mathbf{x}), \quad \psi_{\mathbf{b}}(\mathbf{x}) = \psi_{b_1 \dots b_n}(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^n \psi_{b_i}(x_i) \quad (1.29)$$

其中 $\mathbf{b} = b_1 \dots b_n$ ($b_i \in \mathbb{N}, 1 \leq i \leq n$) 表示一个 n 维索引, $a_{\mathbf{b}}$ 是多项式的系数。

多项式基函数 $\psi_{\mathbf{b}}(\mathbf{x})$ 是 n 个单变量标准移位 Legendre 多项式的累积。其中, 索引 \mathbf{b} 的第 i 个元素 b_i 给出了基函数中 x_i 项的 Legendre 多项式的阶数。例如, 阶数最低的三个 Legendre 多项式是: $\psi_0(x) = 1, \psi_1(x) = \sqrt{3}(2x - 1), \psi_2(x) = \frac{3\sqrt{5}}{2}(2x - 1)^2 - \frac{\sqrt{5}}{2}$ 。

式1.29被称为模型响应 Y 的多项式混沌展开。在实际情况中, 出于计算的考虑, 多项式混沌展开通常被截断而只保留有限项。一个总阶数 $|\mathbf{b}| \equiv \sum_{i=1}^n b_i$ 不超过给定阶数 p 的被截断的多项式混沌展开如下:

$$Y \simeq M_p(\mathbf{x}) \equiv \sum_{\mathbf{b} \in \mathcal{A}^{p,n}} a_{\mathbf{b}} \psi_{\mathbf{b}}(\mathbf{x}), \quad \mathcal{A}^{p,n} \equiv \{\mathbf{b} \in \mathbb{N}^n : |\mathbf{b}| \leq p\} \quad (1.30)$$

易知, 式1.30中多项式系数的个数 P 与最高阶数 p 和输入参数的数量 n 有关:

$$P = \binom{n+p}{p} = \frac{(n+p)!}{n!p!} \quad (1.31)$$

随着 p 和 n 的增大, 多项式系数的数量 P 会呈几何级数急剧增加。这样就会导致在针对高维高阶模型构建多项式混沌展开时需要大量的样本数据, 而这对计算成本较大的模型来说显然是不可行的。另外, 数量庞大的多项式系数还可能导致过拟合的问题。为了克服这些困难, 我们在式1.30的基础上进一步引入稀疏多项式混沌展开的概念来表征原模型的输入/输出关系:

$$Y \simeq M_{\mathcal{A}}(\mathbf{x}) \equiv \sum_{\mathbf{b} \in \mathcal{A}} a_{\mathbf{b}} \psi_{\mathbf{b}}(\mathbf{x}), \quad \mathcal{A} \subseteq \mathcal{A}^{p,n} \text{ 且 } \frac{\text{card}(\mathcal{A})}{\text{card}(\mathcal{A}^{p,n})} \ll 1 \quad (1.32)$$

其中, 运算符 card 表示计算集合的基。

由上述定义可知, 稀疏多项式混沌展开只保留少数的多项式项, 大量的多项式项被舍弃, 而这也与实际情况相符。一般地, 在实际操作过程中多项式混沌展开中存在着大量系数较小或为零的项, 而这些项对模型响应的影响很小或几乎没有。因此, 稀疏多项式混沌展开选择忽略掉这些系数较小或为零的项, 而只保留那些反映了模型响应主要特征的少数项。关于如何构建稀疏多项式混沌展开将在下一小节详细地介绍。在下一小节中, 我们将基于贝叶斯模型选择理论从 N_m 个备选的稀疏多项式混沌展开模型 $\{M_{\mathcal{A}_k}, k = 1, \dots, N_m\}$ 中高效准确地挑选出最优的, 也就是最能反映模型响应特征的稀疏多项式混沌展开模型。

现在, 假设我们已经得到了最优的稀疏多项式混沌展开并记为 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$ 。我们将基于已构建的最优稀疏多项式混沌展开来计算 Sobol' 指数。为了便于描述, 我们首先定义符号 $I_{i_1 \dots i_s}$:

$$I_{i_1 \dots i_s} = \left\{ \mathbf{b} \in \mathcal{A}^{opt} : \begin{array}{ll} b_k > 0, & k \in (i_1 \dots i_s), \quad \forall k = 1, \dots, n \\ b_k = 0, & k \notin (i_1 \dots i_s), \quad \forall k = 1, \dots, n \end{array} \right\} \quad (1.33)$$

借助符号 $I_{i_1 \dots i_s}$ 改写所构建的最优的稀疏多项式混沌展开 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$:

$$\begin{aligned}
 M_{\mathcal{A}^{opt}} = & a_0 + \sum_{i_1=1}^n \sum_{b \in I_{i_1}} a_b \psi_b(x_{i_1}) + \sum_{i_2 > i_1}^n \sum_{b \in I_{i_1 i_2}} a_b \psi_b(x_{i_1}, x_{i_2}) \\
 & + \dots + \sum_{i_s > \dots > i_1}^n \sum_{b \in I_{i_1 \dots i_s}} a_b \psi_b(x_{i_1}, \dots, x_{i_s}) \\
 & + \dots + \sum_{b \in I_{1, \dots, n}} a_b \psi_b(\mathbf{x})
 \end{aligned} \tag{1.34}$$

对比稀疏多项式混沌展开式1.34和方差分解式1.3的形式,并考虑到多项式基函数的正交性,可知两式各被加项之间存在着如下对应关系: $M_{i_1 \dots i_t}(x_{i_1}, \dots, x_{i_t}) = \sum_{b \in I_{i_1 \dots i_t}} a_b \psi_b(x_{i_1}, \dots, x_{i_t})$ 。因此,一旦模型响应的最优稀疏多项式混沌展开被成功构建,根据式1.13、式1.14、式1.16以及多项式基函数的正交性,输入参数 x_i 的一阶和总 Sobol' 指数就可由多项式系数计算得到:

$$S_i^{\mathcal{A}^{opt}} = \frac{D_i^{\mathcal{A}^{opt}}}{D^{\mathcal{A}^{opt}}} = \frac{\sum_{b \in I_i} a_b^2}{\sum_{b \in \mathcal{A}^{opt} \setminus \{0\}} a_b^2} \tag{1.35}$$

$$S_{Ti}^{\mathcal{A}^{opt}} = \sum_{b: b_i > 0} S_b^{\mathcal{A}^{opt}} \tag{1.36}$$

可以看到,采用稀疏多项式混沌展开进行全局敏感性分析既能避免“维数灾难”的问题,又能很好地捕捉模型输入/输出间的关系,是一种高效精确的全局敏感性分析方法。而且,在稀疏多项式混沌展开的基础上,输入参数的一阶和总敏感性指数能由式1.35和式1.36通过对多项式系数进行简单的四则运算而得出。至此,问题的关键就在于如何正确高效地构建出模型响应的稀疏多项式混沌展开。接下来,本文将对稀疏多项式混沌展开的构建方法进行介绍,并详细地给出一种基于贝叶斯模型选择理论的构建算法^[15]。

1.1.5 稀疏多项式混沌展开的构建算法

早期,人们通常基于伽辽金投影的思想来构建多项式混沌展开,即嵌入式方法。这类方法将多项式混沌展开代入到待研究模型的控制方程中,利用多项式基函数的正交性构建一个以多项式系数为未知数的新的控制方程并予以求解。这种方法需要针对具体模型进行相应的推导,因而面临繁重的模型修改和植入工作,通用性较低。为此,人们又发展了非嵌入式方法。非嵌入式方法可分为两类,一类是投影法,另一类是回归法。下面将分别介绍这两类方法的基本思想,并在概率统计的框架下给出一种基于贝叶斯模型选择理论的回归算法^[15]。

我们首先考察投影法，对式1.29中的模型响应及其多项式混沌展开同时乘以某一项式基函数并在参数空间内进行积分：

$$\int_{\mathbb{K}^n} \psi_b(\mathbf{x}) M(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{K}^n} \psi_b(\mathbf{x}) \sum_{b \in \mathcal{A}_k} a_b \psi_b(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (1.37)$$

由多项式基函数的正交性，上式左边 $\int_{\mathbb{K}^n} \psi_b(\mathbf{x}) \sum_{b \in \mathcal{A}_k} a_b \psi_b(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = a_b$ ，则此多项式基函数的系数：

$$a_b = \int_{\mathbb{K}^n} \psi_b(\mathbf{x}) M(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (1.38)$$

投影法利用多项式基函数的正交性，将问题转化为式1.38中的数值积分问题。由此，可采用蒙特卡洛积分法或高斯积分法等方法求解。可以看到，投影法之所以是一种非嵌入式的方法是因为在求解过程中只需根据计算数值积分的要求由原模型生成相应样本点的数据，而无需对原模型进行植入或修改。

回归法则是通过将模型响应和多项式混沌展开间的误差最小化来求解多项式系数：

$$\mathbf{a}_p = \operatorname{argmin}(\mathcal{L}(M(\mathbf{x})|M_p(\mathbf{x}))) \quad (1.39)$$

其中， \mathbf{a}_p 表示多项式系数向量，算子 $\mathcal{L}(M(\mathbf{x})|M_p(\mathbf{x}))$ 衡量了原模型 $M(\mathbf{x})$ 与多项式混沌展开 $M_p(\mathbf{x})$ 之间的误差。不同的误差定义方式可以发展出不同的算法。比如，可基于最小二乘法^[6]的思想来定义误差：

$$\mathcal{L}(M(\mathbf{x})|M_p(\mathbf{x})) = \int_{\mathbb{K}^n} (M(\mathbf{x}) - M_p(\mathbf{x}))^2 d\mathbf{x} \quad (1.40)$$

又如，在概率统计的框架中， $\mathcal{L}(\cdot)$ 则用来表征多项式混沌展开与原模型匹配的可能性。本文所采用的稀疏多项式混沌展开构建算法正是在概率统计的框架中进行的。

假设有如下 N_m 个待选择的稀疏多项式混沌展开 $M_{\mathcal{A}_k}$ ：

$$M_{\mathcal{A}_k} \equiv \sum_{b \in \mathcal{A}_k} a_b \psi_b(\mathbf{x}) = \mathbf{a}_k \boldsymbol{\psi}_k, \quad k = 1, \dots, N_m \quad (1.41)$$

其中， \mathbf{a}_k 和 $\boldsymbol{\psi}_k$ 分别表示多项式系数向量和多项式基函数向量。

令 $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}^1, \dots, \mathbf{x}^{N_d}\}$ ， $\mathcal{Y} = \{Y^1, \dots, Y^{N_d}\}^T$ 分别表示获得的输入样本数据和输出样本数据。其中， N_d 与前文一致仍然表示样本数量，且 $Y^r = M(\mathbf{x}^r)$ ($r = 1, \dots, N_d$)。显然，稀疏多项式混沌展开模型与原模型拟合得越好，则其复现这些样本数据的能力越强。为此，本文采用一种基于贝叶斯理论的统计学方法——贝叶斯模型选择来实现待选稀疏多项式混沌展开模型的量化比较和排序。贝叶斯模型选择理论结合待选模型的先验概率和观察到的样本数据来评估每个模型的后验概率。根据贝叶斯理论，后验概率 $\mathcal{P}(M_{\mathcal{A}_k}|\mathcal{Y})$ 计算公式如下：

$$\mathcal{P}(M_{\mathcal{A}_k}|\mathcal{Y}) = \frac{\mathcal{P}(\mathcal{Y}|M_{\mathcal{A}_k})\mathcal{P}(M_{\mathcal{A}_k})}{\sum_{i=1}^{N_m} \mathcal{P}(\mathcal{Y}|M_{\mathcal{A}_i})\mathcal{P}(M_{\mathcal{A}_i})} \quad (1.42)$$

其中, $\mathcal{P}(M_{\mathcal{A}_k})$ 为先验概率, 表示在取得样本数据之前模型 $M_{\mathcal{A}_k}$ 是最优的概率。若先验信息缺失, 一般地取先验概率为等概率, 即 $\mathcal{P}(M_{\mathcal{A}_k}) = 1/N_m$ 。 $\mathcal{P}(\mathcal{Y}|M_{\mathcal{A}_k})$ 为观测数据的似然性, 表示数据对不同模型的偏好。式1.42中的分母是一个归一化的常数, 保证了式右边的后验分布的合法性和归一性。忽略掉分母这一归一化的常数, 后验概率 $\mathcal{P}(M_{\mathcal{A}_k}|\mathcal{Y}) \propto \mathcal{P}(\mathcal{Y}|M_{\mathcal{A}_k})\mathcal{P}(M_{\mathcal{A}_k})$ 。因此, 问题的关键在于对 $\mathcal{P}(\mathcal{Y}|M_{\mathcal{A}_k})$ 这一项的定义。

可通过对模型系数向量在其可能的取值空间内进行积分来计算 $\mathcal{P}(\mathcal{Y}|M_{\mathcal{A}_k})$, 其公式如下:

$$\mathcal{P}(\mathcal{Y}|M_{\mathcal{A}_k}) = \int_{\mathbb{R}^{P_k}} \mathcal{P}(\mathcal{Y}|M_{\mathcal{A}_k}, \mathbf{a}_k) \mathcal{P}(\mathbf{a}_k|M_{\mathcal{A}_k}) d\mathbf{a}_k \quad (1.43)$$

其中, P_k 是模型 $M_{\mathcal{A}_k}$ 多项式系数的个数 ($P_k = \text{card}(\mathcal{A}_k)$)。 $\mathcal{P}(\mathbf{a}_k|M_{\mathcal{A}_k})$ 表示多项式系数向量 \mathbf{a}_k 的先验分布。 $\mathcal{P}(\mathcal{Y}|M_{\mathcal{A}_k}, \mathbf{a}_k)$ 描述了模型 $M_{\mathcal{A}_k}$ 在系数向量 \mathbf{a}_k 的不同设置下观测到样本数据的可能性大小。

式1.43在整个模型系数向量空间上的积分很难通过解析的方式计算, 特别是在高维系数向量空间中。为了克服积分上的困难, 可对式1.43进行泰勒级数展开, 并在此基础上进行拉普拉斯近似。拉普拉斯近似假设系数向量的后验分布为高斯分布, 且在其峰值处高度集中, 即 $\mathcal{P}(\mathbf{a}_k|\mathcal{Y}, M_{\mathcal{A}_k}) \sim \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{a}}_k, \mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{a}}\tilde{\mathbf{a}}})$ 。后验均值 $\tilde{\mathbf{a}}_k$ 为对应参数的最大后验估计 (maximum a posteriori estimate, MAP), 即考虑参数的先验分布和模型与样本数据的拟合程度后, 稀疏多项式混沌展开 $M_{\mathcal{A}_k}$ 最可能的多项式系数设置。协方差矩阵 $\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{a}}\tilde{\mathbf{a}}}$ 是当多项式系数向量取其最大后验估计, 即 $\mathbf{a}_k = \tilde{\mathbf{a}}_k$ 时对应的值。

根据上面的思路, 首先对 $\ln \mathcal{P}(\mathcal{Y}|M_{\mathcal{A}_k})$ 在 $\tilde{\mathbf{a}}_k$ 处进行泰勒展开, 忽略三阶及三阶以上的项, 接着对展开结果取指数, 并结合拉普拉斯近似计算式中积分, 最终可得:

$$\mathcal{P}(\mathcal{Y}|M_{\mathcal{A}_k}) \simeq \mathcal{P}(\mathcal{Y}|M_{\mathcal{A}_k}, \tilde{\mathbf{a}}_k) \mathcal{P}(\tilde{\mathbf{a}}_k|M_{\mathcal{A}_k}) (2\pi)^{P_k/2} |\tilde{\Sigma}|^{-1/2} \quad (1.44)$$

其中, $\tilde{\Sigma}$ 是 $P_k \times P_k$ 阶的 Hessian 矩阵:

$$[\tilde{\Sigma}]_{ij} = - \left. \frac{\partial^2 \ln \mathcal{P}(\tilde{\mathbf{a}}_k|\mathcal{Y}, M_{\mathcal{A}_k})}{\partial a_i \partial a_j} \right|_{\mathbf{a}_k = \tilde{\mathbf{a}}_k} \quad (1.45)$$

由式1.44可得:

$$-2 \ln \mathcal{P}(\mathcal{Y}|M_{\mathcal{A}_k}) \simeq -2 \ln \mathcal{P}(\mathcal{Y}|M_{\mathcal{A}_k}, \tilde{\mathbf{a}}_k) - 2 \ln \mathcal{P}(\tilde{\mathbf{a}}_k|M_{\mathcal{A}_k}) - P_k \ln(2\pi) + \ln |\tilde{\Sigma}| \quad (1.46)$$

根据拉普拉斯近似, 后验分布 $\mathcal{P}(\mathbf{a}_k|\mathcal{Y}, M_{\mathcal{A}_k}) \sim \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{a}}_k, \mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{a}}\tilde{\mathbf{a}}})$, 则可取 $\tilde{\Sigma} = \mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{a}}\tilde{\mathbf{a}}}$, 代入式1.46可得 Kashyap 信息准则^[16]:

$$KIC_k = -2 \ln \mathcal{P}(\mathcal{Y}|M_{\mathcal{A}_k}, \tilde{\mathbf{a}}_k) - 2 \ln \mathcal{P}(\tilde{\mathbf{a}}_k|M_{\mathcal{A}_k}) - P_k \ln(2\pi) + \ln |\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{a}}\tilde{\mathbf{a}}}| \quad (1.47)$$

相比式1.43, KIC_k 仅考察最可能的系数向量设置而不是对整个系数向量空间进行积分, 从而大大地降低了计算量, 使得计算具有可行性。因此, 可针对每个竞争模型 $M_{\mathcal{A}_k}$, 计算其 KIC_k , 而最优的稀疏多项式混沌展开 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$ 则具有最小的 KIC_k 。

接下来, 我们将基于一系列假设来计算 KIC_k 。为此, 我们定义索引 \mathbf{b} 的最高阶 $p_{\mathbf{b}}$ 和最大交互度 $h_{\mathbf{b}}$ 如下:

$$p_{\mathbf{b}} \equiv |\mathbf{b}| = \sum_{i=1}^n b_i, \quad h_{\mathbf{b}} \equiv \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{b_i > 0} \quad (1.48)$$

其中, 若 $b_i > 0$, 则 $\mathbf{1}_{b_i > 0} = 1$, 否则 $\mathbf{1}_{b_i > 0} = 0$ 。

不妨将模型响应标准化, 即令 $y = (Y - \mathbb{E}[Y])/\sqrt{\text{V}[Y]}$, 并令向量 \mathbf{y} 为模型响应的简单随机样本。稀疏多项式混沌展开 $M_{\mathcal{A}_k}$ 和原模型的 y 的误差 $\epsilon_k = y - M_{\mathcal{A}_k}$, 且令误差的简单随机样本为 $\epsilon_k = \mathbf{y} - \mathbf{a}_k \psi_k$ 。

假设在模型 $M_{\mathcal{A}_k}$ 的系数向量空间中 ϵ_k 为同方差的高斯随机变量, 即 $\epsilon_k \sim \mathcal{N}(0, \delta_k^2)$ 。由此可推得:

$$\mathcal{P}(\mathcal{Y} | M_{\mathcal{A}_k}, \tilde{\mathbf{a}}_k, \delta_k^2) \sim \mathcal{N}(M_{\mathcal{A}_k}, \delta_k^2) \quad (1.49)$$

考虑到 $M_{\mathcal{A}_k}$ 是对 y 的近似, 因此认为多项式系数都是非常接近于 0 是合理的。在拉普拉斯假设的基础上, 我们进一步假设参数 \mathbf{a}_k 的先验分布为如下的高斯分布:

$$\mathcal{P}(\mathbf{a}_k | M_{\mathcal{A}_k}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{C}_{aa}) \quad (1.50)$$

其中,

$$\mathbf{C}_{aa} = \begin{bmatrix} \delta_{b_1}^2 & 0 & \cdots & \cdots \\ 0 & \ddots & 0 & \cdots \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \delta_{b_{P_k}}^2 \end{bmatrix}, \quad \delta_{b_i}^2 = (p_{b_i} + h_{b_i} - 1)h_{b_i}^2 \quad (1.51)$$

$\delta_{b_i}^2$ 对应 \mathcal{A}_k 中第 i 项的方差。可见, 该先验假设对总阶数较高且交互度较高的多项式项赋予了较大的方差, 从而有利于为这些项分配较小的权重以降低多项式的总阶数和交互程度。因为 \mathbf{y} 是一个标准化后的向量, 所以 a_0 应总为 0。因此, 接下来我们令 $a_0 \notin \mathcal{A}_k$ 。在这里, 先验分布取的是高斯先验, 但拉普拉斯先验也是一种可取的方案。另外, 不考虑模型选取指标, 本文所采取方法等效于岭回归法^[17], 而采用拉普拉斯先验时的情况则等效于最小绝对收缩和选择算子法 (the Least Absolute Shrinkage and Selection Operator approach, LASSO)^[18]。

考虑到多项式混沌展开与其系数呈线性关系, 后验分布的解析式可经如下公式给出:

$$\mathcal{P}(\mathbf{a}_k | \mathbf{y}, M_{\mathcal{A}_k}, \delta_k^2) \sim \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{a}}_k, \mathbf{C}_{\tilde{a}\tilde{a}}) \quad (1.52)$$

$$\mathcal{P}(\delta_k^{-2}|\mathbf{y}, M_{\mathcal{A}_k}, \tilde{\mathbf{a}}_k) \sim \Gamma\left(\frac{N_d + 2}{2}, \frac{2}{N_d} \tilde{\delta}_k^{-2}\right) \quad (1.53)$$

其中, 统计量 $\tilde{\mathbf{a}}_k$ 、 $\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{a}}\tilde{\mathbf{a}}}$ 和 $\tilde{\delta}_k^2$ (模型误差的方差 δ_k^2 的最大后验估计) 的计算公式如下:

$$\tilde{\mathbf{a}}_k = \frac{\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{a}}\tilde{\mathbf{a}}} \boldsymbol{\psi}_k^T \mathbf{y}}{\tilde{\delta}_k^2} \quad (1.54)$$

$$\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{a}}\tilde{\mathbf{a}}} = \left(\frac{\boldsymbol{\psi}_k^T \boldsymbol{\psi}_k}{\tilde{\delta}_k^2} + \mathbf{C}_{\mathbf{a}\mathbf{a}}^{-1} \right)^{-1} \quad (1.55)$$

$$\tilde{\delta}_k^2 = \frac{(\mathbf{y} - \boldsymbol{\psi}_k \tilde{\mathbf{a}}_k)^T (\mathbf{y} - \boldsymbol{\psi}_k \tilde{\mathbf{a}}_k)}{N_d} \quad (1.56)$$

统计量 $\tilde{\mathbf{a}}_k$ 、 $\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{a}}\tilde{\mathbf{a}}}$ 和 $\tilde{\delta}_k^2$ 可由式1.54、1.55和1.56通过迭代的方式计算得到: 首先, 初始化 $\tilde{\delta}_k^2$, 可取 $\tilde{\delta}_k^2 = 1$; 接着, 由式1.54、1.55分别计算出 $\tilde{\mathbf{a}}_k$ 和 $\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{a}}\tilde{\mathbf{a}}}$, 并根据式1.56更新 $\tilde{\delta}_k^2$ 的值; 重复上述步骤, 直到 $\tilde{\delta}_k^2$ 的相对误差收敛到给定的精度 (比如 10^{-3}) 为止。一般而言, 通过这种解析的方式求解最大后验估计能够避免采用回归法处理小样本时经常遇到的矩阵条件数较差的问题。

在经过迭代计算得到统计量 $\tilde{\mathbf{a}}_k$ 、 $\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{a}}\tilde{\mathbf{a}}}$ 和 $\tilde{\delta}_k^2$ 后, 由式1.49和式1.50可分别计算出 $\mathcal{P}(\mathcal{Y}|M_{\mathcal{A}_k}, \tilde{\mathbf{a}}_k)$ 和 $\mathcal{P}(\tilde{\mathbf{a}}_k|M_{\mathcal{A}_k})$ 的值, 代入到式1.47中, 即可得到模型 $M_{\mathcal{A}_k}$ 的 KIC_k 。在众多的竞争模型中, KIC_k 最小的 $M_{\mathcal{A}_k}$ 就是最优模型 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$ 。我们记 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$ 对应的系数向量和模型误差方差分别为 $\mathbf{a}_{\mathcal{A}^{opt}}$ 和 $\delta_{\mathcal{A}^{opt}}^2$ 。类似地, 记 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$ 的最高阶、最大交互度和多项式系数的个数分别为 $p_{\mathcal{A}^{opt}}$ 、 $h_{\mathcal{A}^{opt}}$ 和 $P_{\mathcal{A}^{opt}}$ 。

由式1.52和1.53可知 $\mathbf{a}_{\mathcal{A}^{opt}}$ 和 $\delta_{\mathcal{A}^{opt}}^2$ 为随机变量。因此, 基于 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$ 计算得到的任何统计量, 包括 Sobol' 指数均为随机变量。由数理统计的知识可知, 随机变量存在置信区间。为了得到 Sobol' 指数的置信区, 我们可以先对 $\mathbf{a}_{\mathcal{A}^{opt}}$ 和 $\delta_{\mathcal{A}^{opt}}^2$ 根据其后验分布 (分别见式1.52和式1.53) 进行随机抽样。比如, 我们取 95% 的置信度, 考虑到 $\mathbf{a}_{\mathcal{A}^{opt}}$ 服从正态分布, 则可采用针对正态分布的拉丁超立方取样生成 100,000 个样本点。而 $\delta_{\mathcal{A}^{opt}}^2$ 服从 Gamma 分布, 则可根据其分布函数采集和 $\mathbf{a}_{\mathcal{A}^{opt}}$ 同等数量的样本点 (在 MATLAB 中, 可采用 gamrnd 函数生成服从 Gamma 分布的随机样本)。针对每个样本点, 由式1.35和式1.36计算相应的 Sobol' 指数, 最终可得到 Sobol' 指数相应置信度下的置信区间。显然, 基于稀疏多项式混沌展开, 这些计算能够很方便地进行。

根据上述理论, 基于样本数据 $(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$ 构建最优稀疏多项式混沌展开的算法如下:

1) 初始化。将原始的样本数据 $(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$ 转换为标准化数据 (\mathbf{x}, \mathbf{y}) 。设定初始多项式最高阶 p 及最大交互度 h 。一般地, 可根据模型响应的特性选择 $(p = 2, h = 1)$ 或 $(p = 4, h = 2)$ 。构造集合 $\mathcal{A}^{p,h} = \{\mathbf{a} \in \mathcal{N} : p_{\mathbf{a}} \leq p, h_{\mathbf{a}} \leq h\} \setminus \{\mathbf{0}\}$ 。基于 $\mathcal{A}^{p,h}$ 构造多项式基函数向量: $\boldsymbol{\psi} = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_P)$, 其中 $P = \text{card}(\mathcal{A}^{p,h})$ 。

2) 根据相关系数对多项式基函数进行排序。计算多项式基函数向量 $\boldsymbol{\psi}$ 中每个多项式基函数 $\psi_j (j = 1, \dots, P)$ 与模型响应向量 \mathbf{y} 的皮尔逊相关系数 r_j :

$$r_j = \frac{\text{COV}[\mathbf{y}, \psi_j(\mathbf{x})]}{\sqrt{\text{V}[\mathbf{y}] \text{V}[\psi_j(\mathbf{x})]}} \quad (1.57)$$

其中, COV 为协方差运算符。接着, 对 (r_1^2, \dots, r_P^2) 按降序进行排列, 并调整对应的多项式基函数的顺序得到 $\hat{\boldsymbol{\psi}} = (\hat{\psi}_1, \dots, \hat{\psi}_j, \hat{\psi}_{j+1}, \dots, \hat{\psi}_P)$, 其中, $\hat{r}_j^2 \geq \hat{r}_{j+1}^2$ 。

3) 根据偏相关系数对多项式基函数进行排序。在前一步排序的基础上, 计算每个基函数的偏相关系数:

$$\hat{r}_{j|1, \dots, j-1} = \frac{\text{COV}[\mathbf{y}, \hat{\psi}_j(\mathbf{x}) | \hat{\psi}_1(\mathbf{x}), \dots, \hat{\psi}_{j-1}(\mathbf{x})]}{\sqrt{\text{V}[\mathbf{y} | \hat{\psi}_1(\mathbf{x}), \dots, \hat{\psi}_{j-1}(\mathbf{x})] \text{V}[\hat{\psi}_j(\mathbf{x}) | \hat{\psi}_1(\mathbf{x}), \dots, \hat{\psi}_{j-1}(\mathbf{x})]}} \quad (1.58)$$

其中, $\text{COV}[\cdot | \cdot]$ 和 $\text{V}[\cdot | \cdot]$ 分别为条件协方差运算符和条件方差运算符。和第二步类似, 对 $(\hat{r}_{1|1}^2, \hat{r}_{2|1}^2, \hat{r}_{3|1,2}^2, \dots, \hat{r}_{P|1, \dots, P-1}^2)$ 按降序进行排列, 并调整对应的多项式基函数的顺序得到 $\tilde{\boldsymbol{\psi}} = (\tilde{\psi}_1, \dots, \tilde{\psi}_j, \tilde{\psi}_{j+1}, \dots, \tilde{\psi}_P)$, 其中, $\tilde{r}_{j|1, \dots, j-1}^2 \geq \tilde{r}_{j+1|1, \dots, j}^2$ 。

4) 基于当前的基函数向量, 构建稀疏多项式混沌展开。步骤如下:

- a. 令基函数集 $\boldsymbol{\psi}_{\mathcal{A}^{opt}} = \tilde{\psi}_1$, $KIC_1 = +\infty$, $k = 2$;
- b. 定义稀疏多项式混沌展开模型 $M_{\mathcal{A}_k}$, 其基函数集为 $\boldsymbol{\psi}_k = (\boldsymbol{\psi}_{\mathcal{A}^{opt}}, \tilde{\psi}_k)$ 。
- c. 由式1.54、1.55和1.56计算最大后验估计 $\tilde{\mathbf{a}}_k$ 、 $\mathbf{C}_{\tilde{\mathbf{a}}\tilde{\mathbf{a}}}$, 并由式1.47计算模型 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$ 的 KIC_k 。
- d. 比较 KIC_k 和 KIC_{k-1} 的大小, 若 $KIC_k \leq KIC_{k-1}$, 则在基函数集 $\boldsymbol{\psi}_{\mathcal{A}^{opt}}$ 中加入基函数 $\tilde{\psi}_k$, 并置 $\mathbf{a}_{\mathcal{A}^{opt}} = \tilde{\mathbf{a}}_k$; 否则, 令 $KIC_k = KIC_{k-1}$ 。
- e. 置 $k = k + 1$, 重复 b-e 步直到 $k = P$, 得到 $M_{\mathcal{A}^{opt}} = \mathbf{a}_{\mathcal{A}^{opt}} \boldsymbol{\psi}_{\mathcal{A}^{opt}}$ 。

5) 扩展基函数集 $\boldsymbol{\psi}$ 。对第四步构造的 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$, 若存在总阶数超过 $p - 1$ 或交互项的阶达到 h 的高阶项, 则说明最优的稀疏多项式混沌展开可能需有更高阶的基函数参与。此时, 令 $p = p + 2$ 或 $h = h + 1$, 对已识别出的多项式基函数向量 $\boldsymbol{\psi}_{\mathcal{A}^{opt}}$ 中的高阶项进行升阶操作, 在总阶数不超过 p 且交互项的阶不超过 h 的条件下构造出对应的更高阶的多项式基函数, 并加入到 $\boldsymbol{\psi}_{\mathcal{A}^{opt}}$ 中, 构成更新过后的多项式基函数向量 $\boldsymbol{\psi}$ 。接着, 重复 2)-5) 步; 否则停止计算, 输出最终的 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$ 。

上述算法从考察低阶低交互度的多项式基函数 (比如, $(p = 2, h = 1)$) 起步。这保证了最开始被考察的多项式基函数的数量较少。在计算 KIC_k 之前, 对基函数按照其重要性进行了两次排序。首先, 在第二步中, 计算了模型响应 \mathbf{y} 和每个基函数 ψ_j 间的皮尔逊相关系数 r_j 并据此对基函数进行了排序。皮尔逊相关系数衡量了 \mathbf{y} 和 ψ_j 间线性关系的强弱。因此, r_j^2 量化了基函数 ψ_j 和所要构建的稀疏多项式混沌展开之间的相关性。由于取样可能导致的伪相关性的影响, 采用皮尔逊相关系数量化模型响应

和基函数间的相关性可能会存在失效的情况。因此，在第三步中，基于偏相关系数对基函数进行了进一步排序。在第四步中，基于现有的基函数集 $\mathcal{A}^{p,h}$ 构建了最优的稀疏多项式混沌展开。最后，通过判断是否需要进一步扩展基函数集 $\mathcal{A}^{p,h}$ 来决定算法是否结束。若需要，则需在此基础上重新构建 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$ ，否则，输出最终的 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$ 。

在处理高维问题 ($n > 10$)，且在第五步中需令 $h = h + 1$ 并进行下一步迭代时，考虑所有可能的交互项会使得 $\mathcal{A}^{p,h}$ 中的项数过多以致难以处理。因此，当遇到这种情况时，在下一迭代步中，我们只考虑在当前迭代步中相关参数间可能存在的交互。比如，在当前迭代步中，考虑 \mathcal{A}^{opt} 中所有索引 $\mathbf{b} = b_1 \cdots b_n$ ，相关参数是指那些索引中至少存在一个不为零的参数。若 b_{i_1} 总是为零，则 b_{i_1} 就是不相关参数而被视作与其他参数没有交互性，并在令 $h = h + 1$ 的下一个迭代步中，构建 $\mathcal{A}^{p,h}$ 的交互项时不再考虑 b_{i_1} 这一项。

基于 KIC_k 的多项式混沌展开模型的构建是对模型简洁性和拟合程度的折中，因而可以避免过拟合的问题。同时，为了评估所构建的 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$ 是否较好地拟合了原始模型 M ，需进一步引入训练误差来对此进行判定。注意到模型响应向量 \mathbf{y} 是标准化的随机变量，因此训练误差就为 $\delta_{\mathcal{A}^{opt}}^2$ 的相对大小 ($\delta_{\mathcal{A}^{opt}}^2$ 除以 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$ 的总方差)。但是，将 $\delta_{\mathcal{A}^{opt}}^2$ 的相对大小作为训练误差是基于模型误差服从高斯分布这一假设，而这一假设并不总是成立的。为此，我们可以通过检查 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$ 的模型误差是否遵循预期分布，即 $\mathcal{N}(0, \delta_{\mathcal{A}^{opt}}^2)$ 来确认该假设是否成立。如果不成立，则所得到的 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$ 可能并不可靠。在这种情况下，建议增大样本数量 N_d 。一般地，基于更大数量的样本构建的稀疏多项式混沌展开会更加精确。这是因为相对更大的样本会使拉普拉斯假设更有可能成立。根据经验，训练误差小于或等于 0.05 表明所构建的 $M_{\mathcal{A}^{opt}}$ 拟合程度较好。若训练误差大于 0.05，则可设置更高的 p 和 h 并重新采用上述算法构建稀疏多项式混沌展开。此时，若训练误差仍然不满足条件，则需考虑增大样本数量 N_d 。

上述算法被证明具有十分优良的性能，能在样本数较少的情况下对多参数高维模型进行准确高效的全局敏感性分析。同时，作为一种非嵌入式方法，该算法以数据驱动，通过构建稀疏多项式混沌展开来挖掘模型输入数据与模型响应数据间的关系，从而可以屏蔽掉原模型的底层实现机理。考虑到桥域多尺度方法耦合参数优化问题在理论求解上面临的巨大困难，我们可以看到，使用该方法去探求耦合参数对耦合精度的影响方式及影响程度，并结合边际效应曲线优化耦合参数的取值区间具有天然的优势。因此，在本章的最后一小节中，我们将在本小节的基础上提出一种针对桥域多尺度方法耦合参数优化问题的数据驱动分析方法。

参考文献

- [1] M. D. Morris, Factorial sampling plans for preliminary computational experiments, *Technometrics* 33 (2) (1991) 161–174.
- [2] R. Cukier, C. Fortuin, K. E. Shuler, A. Petschek, J. Schaibly, Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. I Theory, *The Journal of Chemical Physics* 59 (8) (1973) 3873–3878.
- [3] I. M. Sobol', Sensitivity estimates for nonlinear mathematical models, *Mathematical Modelling and Computational Experiments* 1 (4) (1993) 407–414.
- [4] I. M. Sobol, Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates, *Mathematics and Computers in Simulation* 55 (1-3) (2001) 271–280.
- [5] A. Saltelli, M. Ratto, T. Andres, F. Campolongo, J. Cariboni, D. Gatelli, M. Saisana, S. Tarantola, *Global Sensitivity Analysis. The Primer*, John Wiley & Sons, 2008.
- [6] B. Sudret, Global sensitivity analysis using polynomial chaos expansions, *Reliability Engineering and System Safety* 93 (7) (2008) 964–979.
- [7] A. Saltelli, S. Tarantola, P. S. Chan, A quantitative model-independent method for global sensitivity analysis of model output, *Technometrics* 41 (1) (1999) 39–56.
- [8] T. A. Mara, Extension of the RBD-FAST method to the computation of global sensitivity indices, *Reliability Engineering and System Safety* 94 (8) (2009) 1274–1281.
- [9] M. J. W. Jansen, Analysis of variance designs for model output, *Computer Physics Communications* 117 (1-2) (1999) 35–43.
- [10] A. Saltelli, Making best use of model evaluations to compute sensitivity indices, *Computer Physics Communications* 145 (2) (2002) 280–297.
- [11] H. Rabitz, Ömer F. Aliş, J. Shorter, K. Shim, Efficient input-output model representations, *Computer Physics Communications* 117 (1) (1999) 11 – 20.
- [12] J. E. Oakley, A. O'Hagan, Probabilistic sensitivity analysis of complex models: a Bayesian approach, *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)* 66 (3) (2004) 751–769.

- [13] M. Ratto, A. Pagano, P. Young, State dependent parameter metamodeling and sensitivity analysis, *Computer Physics Communications* 177 (11) (2007) 863–876.
- [14] G. T. Buzzard, D. Xiu, Variance-based global sensitivity analysis via sparse-grid interpolation and cubature, *Communications in Computational Physics* 9 (3) (2011) 542–567.
- [15] Q. Shao, A. Younes, M. Fahs, T. A. Mara, Bayesian sparse polynomial chaos expansion for global sensitivity analysis, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 318 (2017) 474–496.
- [16] R. L. Kashyap, Optimal choice of AR and MA parts in autoregressive moving average models, *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* 4 (2) (1982) 99–104.
- [17] A. E. Hoerl, R. W. Kennard, Ridge regression: Biased estimation for nonorthogonal problems, *Technometrics* 12 (1) (1970) 55–67.
- [18] R. Tibshirani, Regression shrinkage and selection via the LASSO, *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)* (1996) 267–288.