

敏感性分析综述*

蔡毅¹⁾ 邢岩¹⁾ 胡丹^{2)†}

(1)北京师范大学数学科学学院; 2)北京师范大学信息科学与技术学院: 100875, 北京)

摘要 介绍了敏感性分析的定义,列出了许多基于数理统计、神经网络和粗糙集知识的敏感性分析方法,并且尝试着对一些常用方法的优缺点进行分析.结合敏感性分析的研究现状,对今后的研究工作提出了一些展望.

关键词 敏感性分析; 统计分析; 神经网络

0 引言

随着数字网络的兴起与广泛应用,数据的来源越来越丰富,人们获得数据的代价越来越小.在众多领域都产生了海量数据,但由于缺乏可用的数据分析工具,人们很难理解这些数据,出现了所谓的数据过剩.为了能从大量的数据中获取信息,把信息转化为知识,使知识付诸于应用这个想法,这就刺激了对强有力的数据分析工具的需求,数据分析方法逐渐增多.而敏感性分析法就是现在常用的一种数据分析方法.

敏感性分析(Sensitivity Analysis)(也有人翻译为灵敏度分析),就是假设模型表示为 $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ (x_i 为模型的第 i 个属性值),令每个属性在可能的取值范围内变动,研究和预测这些属性的变动对模型输出值的影响程度.我们将影响程度的大小称为该属性的敏感性系数.敏感性系数越大,说明该属性对模型输出的影响越大.敏感性分析的核心目的就是通过对模型的属性进行分析,得到各属性敏感性系数的大小,在实际应用中根据经验去掉敏感性系数很小的属性,重点考虑敏感性系数较大的属性.这样就可以大大降低模型的复杂度,减少数据分析处理的工作量,在很大程度上提高了模型的精度,同时研究人员可利用各属性敏感性系数的排序结果,解决相应的问题.

简而言之,敏感性分析就是一种定量描述模型输入变量对输出变量的重要性程度的方法.

根据敏感性分析的作用范围,我们可以将其分为局部敏感性分析和全局敏感性分析.局部敏感性分析只检验单个属性对模型的影响程度;而全局敏感性分析检验多个属性对模型结果产生的总影响,并分析属性之间的相互作用对模型输出的影响.局部敏感性分析因其在计算方面的简单快捷,固具有很强的可操作性,

现在大量实际应用中都是采用这种方法.

由于敏感性分析方法是在模型的基础上进行操作的,我们也可以根据建模方法的不同将其分为有模型的和无模型的2类.对于待解决的数据分析问题,若我们十分清楚它的内部机理,能够准确得到模型表示 $y = f(x)$,那我们就可以在此基础上直接进行敏感性分析;但是在实际问题中,这种情况十分少.在大部分情况下,面对庞大的数据,人们无法清楚的了解其内部规律,无法进行机理建模.于是在早期的研究中,人们借助统计知识来建立模型,最常见的模型就是多元线性回归模型.在此基础上,学者提出了很多方法:由Conover 1975年提出,并由McKay等^[1] 1979年正式发表的基于拉丁几何取样的多元回归方法;20世纪70年代提出的傅立叶敏感性检验法^[2-4];Saltelli和Marivoet^[5] 1990年提出的利用非参数统计方法进行敏感性分析的方法;Morris在1991年提出的Morris法^[6],Sobol^[7] 1993年提出的方差分解法等.随着各个研究领域内各种问题的涌现,利用统计方法建模逐渐显示出它的局限性:当模型属性太多或者得到的结果与属性之间是一种非线性关系时,采用统计方法处理得到的结果不理想,精度达不到要求.随之人们开始采用人工神经网络的方法来建立模型.对于神经网络模型来说,只需要知道输入变量数据和输出数据,并不需要先验知识的辅助,它自身能够对训练数据集进行训练和学习,用大量简单的人工神经元模拟数据间的非线性关系,并且能自适应调节神经元之间的连接权重,以此建立能够较好反映数据真实情况的网络结构.许多研究者在这个方面作出了杰出的贡献:Garson^[8]在1991年提出了Garson算法;Olden和Jackson^[9]在2002年提出了随机化检验方法;Muriel Gevery^[10]在2005年提出了PaD2方法等.

* 国家自然科学基金资助项目(60774049);“九七三”国家重大基础研究发展规划基金资助项目(2002CB312200)

† 通信作者

收稿日期:2007-04-12

在本文中,根据敏感性分析方法所采用分析工具的不同,我们把现有的主要的敏感性分析方法分为 2 部分:基于数理统计的和基于神经网络的。

近些年来,随着敏感性分析研究和深入,敏感性分析也被应用在许多领域。例如:1) 经济领域,在对投资项目风险估计的研究中应用敏感性分析方法对净现值(NPV)、内部收益率(IRR)等多个经济指标进行处理,为投资决策提供参考^[11-12]。2) 生态领域,对极其复杂的生态系统采用敏感性分析,筛选出对生态模型起主导作用的属性,在生态研究和保护中予以重视^[13]。3) 工程领域,敏感性分析可以为工程问题提供合理安排计算的依据,提高了计算效率,并且根据敏感性分析的结果,可以对勘测、施工质量的控制起指导作用,便于对结构安全性进行校验和评价^[14-15]。4) 化学领域,在许多可逆反应中会产生许多的潜在的相关化学反应,或者化学反应机理不是特别明确,敏感性分析在这些问题的处理中发挥了很大的作用^[16]。

本文主要从数理统计和神经网络的角度来介绍敏感性分析,详细的列出了现在人们广泛使用的一些方法,并且尝试着对它们的优缺点进行分析,希望能为国内敏感性分析的发展提供一个比较完善的敏感性分析方法库,给使用者带来方便,并结合敏感性分析研究发展的现状,对今后的研究工作提出了一些展望。由于学者们已经提出了大量的基于统计知识的敏感性分析方法,并且也有许多关于这方面的总结和综述^[17-20],我们在此就不赘述了,仅列出 2 种使用较广泛的方法。本文主要介绍基于神经网络的敏感性分析方法,由于敏感性分析方法也可看作一种属性重要性评价的方法,故本文也略微提了一下粗糙集中属性重要性分析方法。

1 基于数理统计的敏感性分析

1.1 基于非参数统计(Non-parametric Based)

Saltelli 和 Marivoet 在 1990 年就详细的提出了利用非参数统计方法进行敏感性分析。该方法^[5]首先对数据建立多元线性回归模型,再利用下面公式分别求出每个属性的敏感性系数。

$$\text{PEAR}(x_i) = \frac{\text{Cov}(y, x_i)}{s_y s_{x_i}} \quad (1)$$

或

$$\text{SRC}(x_i) = \frac{b_i^2}{s_y^2} \quad (2)$$

式中 s_x 和 s_y 分别表示 x_i 和 y 的标准方差, b_i 则表示 y 关于 x 的回归系数。

这种方法最大的优点就是计算上的便捷,但是它

主要用于线性模型。一旦数据间呈现一种非线性关系或者属性之间相互作用,它的结果将与数据的真实情况相差甚远。并且由表达式可以发现,该方法一次只能对一个变量进行分析,是一种典型的局部敏感性分析方法。

1.2 方差分解法(Variance Decomposition Based) 该方法^[7]的核心是把模型分解为单个属性及属性之间相互组合的函数。假设模型为 $y = f(x)$, 其中 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ 是模型的输入值,且 x_i 服从 $[0, 1]$ 均匀分布, y 是对应的输出值。

如果将 $f(x)$ 分解成不同维数的函数之和:

$$f(x) = f_0 + \sum_i f_i(x_i) + \sum_{i < j} f_{ij}(x_i, x_j) + \sum_{i < j < k} f_{ijk}(x_i, x_j, x_k) + \dots \quad (3)$$

其中 f_0 是常数,且每个分解项 $f_{i_1 \dots i_s}(x_{i_1}, \dots, x_{i_s})$ 满足

$$\int_0^1 \int_0^1 \dots \int_0^1 f_{i_1 \dots i_s}(x_{i_1}, \dots, x_{i_s}) dx_1 dx_2 \dots dx_{i_s} = 0 \quad (1 \leq s \leq n) \quad (4)$$

我们将其称为对 $f(x)$ 的分解,并且分解是唯一的。

令

$$S_{i_1 \dots i_s} = \frac{D_{i_1 \dots i_s}}{D} \quad (5)$$

其中

$$D = \int_{[0,1]^n} f^2(x) dx - f_0^2, \quad (6)$$

$$D_{i_1 \dots i_s} = \int_0^1 \dots \int_0^1 f_{i_1 \dots i_s}^2(x_{i_1}, \dots, x_{i_s}) dx_{i_1}, \dots, dx_{i_s} \quad (7)$$

显然 D 和 $D_{i_1 \dots i_s}$ 分别是 $f(x)$ 和 $f_{i_1 \dots i_s}(x_{i_1}, \dots, x_{i_s})$ 的方差。

令

$$S_{i_1 \dots i_k} = S_{i_1 \dots i_s} + S_{i_1 \dots i_k} \quad (k > s), \quad (8)$$

其中 $x_{i_1} \dots x_{i_s}$ 必须同时包含属性 $x_{i_1} \dots x_{i_k}$, 称 $S_{i_1 \dots i_k}$ 为变量 x_{i_1}, \dots, x_{i_k} 敏感性系数 $(1 \leq k \leq n)$ 。

根据公式(3),我们能够得到关于任意变量组合的函数表达式,再利用式(5)~(8),就可以计算出各属性的敏感性系数。基于方差分解的方法是一种全局性敏感性分析方法,它在处理单个变量或者少许变量的组合时,计算迅速,可操作性强,但是一旦涉及较多变量的组合,则计算量大,在实际应用中操作交困难。

2 基于神经网络的敏感性分析

神经网络已经在很多领域取得了广泛的成功,但其发展还不是十分成熟,还存在许多亟待解决的问题。如何增强网络的可理解性就是其中之一^[21]。文献^[10]指出:称为“黑匣子”的人工神经网络的主要缺点

是很难将神经网络中获得的知识解释清楚。神经网络经过训练可以获得输出变量关于输入变量的数值函数关系及层间神经元间的连接权值,而敏感性分析利用这个关系及连接权值可以得到输入变量对输出变量的重要性。

2.1 局部敏感性分析 神经网络中的局部敏感性分析通常有如下几种:基于连接权的敏感性分析方法;基于输出变量对输入变量的偏导的敏感性分析方法;和统计方法结合的敏感性分析方法;基于输入变量扰动的敏感性分析方法。

不失一般性,以下提到的神经网络都假定为一个三层前向网络,输入层、隐含层、输出层神经元个数分别为 N, L, M , (x_1, \dots, x_N) 为输入变量, (y_1, \dots, y_M) 为输出变量, $w = (w_{ij})_{N \times L}$ 为输入层与隐含层间连接权重, $v = (v_{jk})_{L \times M}$ 为隐含层与输出层间的连接权重, $f(\text{net}_j)$ 和 $f(\text{net}_k)$ 分别表示隐层激活神经元 j 的激活函数、输出神经元 k 的激活函数,隐层各神经元激活函数一致,输出层各神经元激活函数一致。网络有 m 个训练样本, n 个测试样本。

2.1.1 基于连接权的敏感性分析方法

1) Garson 算法。Garson^[8] 提出一种借助神经网络获得的连接权值所做的敏感性分析方法。Garson 算法是基于连接权的敏感性分析方法的一个代表,用连接权值的乘积来计算输入变量对输出变量的影响程度或者相对贡献值。输入变量 x_i 对输出变量 y_k 的影响程度(贡献)为:

$$Q_{ik} = \frac{\sum_{j=1}^L (w_{ij} v_{jk} g' / \sum_{r=1}^N w_{rj})}{\sum_{j=1}^L (w_{ij} v_{jk} g' / \sum_{r=1}^N w_{rj})} \quad (i = 1, \dots, N, k = 1, \dots, M). \quad (9)$$

由于连接权 w_{ij} 与 v_{jk} 的值有正有负, $\sum_{j=1}^L (w_{ij} v_{jk} g' / \sum_{r=1}^N w_{rj})$ 会弱化 x_i 对 y_k 的影响;同理 Q_{ik} 也有正有负,也不能反映出 x_i 相对 y_k 的敏感性系数。故无法根据这个公式所产生的结果进行排序。我们建议将 Garson 提出的公式进行改造,改造后的公式可以反映出 x_i 对 y_k 的相对影响程度(相对敏感性)。记 Q_{ik} 为 x_i 对 y_k 的敏感性系数

$$Q_{ik} = \frac{\sum_{j=1}^L (|w_{ij} v_{jk}| g' / \sum_{r=1}^N |w_{rj}|)}{\sum_{j=1}^L (|w_{ij} v_{jk}| g' / \sum_{r=1}^N |w_{rj}|)} \quad (i = 1, \dots, N, k = 1, \dots, M). \quad (10)$$

当输出变量固定时(k 固定),可以根据每个输入变量对 y_k 的敏感性系数来排序。

2) Tchaban 方法。Tchaban, T 及其合作者提出一种敏感性分析方法^[22],文中将其称为权积法(weight product)。则:

第 i 个输入神经元对第 j 个隐层神经元的影响为: $\frac{x_i w_{ij}}{o_j}$, 其中 o_j 表示隐层神经元 j 的输出值。

第 j 个隐层神经元对第 k 个输出神经元的影响为: $\frac{o_j v_{jk}}{o_k}$, 其中 $o_k = y_k$ 表示输出神经元 j 的输出值。

输入变量 x_i 对输出变量 y_k 的敏感性如下:

$$wp_{ik} = \sum_{j=1}^L \frac{x_i w_{ij}}{o_j} \cdot \frac{o_j v_{jk}}{o_k} = \sum_{j=1}^L \frac{x_i}{y_k} w_{ij} v_{jk}. \quad (11)$$

2.1.2 基于输出变量对输入变量的偏导的敏感性分析 这种方法主要针对前向网络。主要是利用网络激活函数的偏导数。偏导在计算输入变量对输出的影响时,计算简单快捷。 x_i 对 y_k 的敏感性表达式如下:

$$s_{ik} = \frac{\partial y_k}{\partial x_i} = f'(\text{net}_k) \sum_{j=1}^L w_{ij} v_{jk} f'(\text{net}_j), \quad (12)$$

其中 $f'(\text{net}_j)$ 和 $f'(\text{net}_k)$ 分别表示隐层激活神经元 j 的激活函数、输出神经元 k 的激活函数的偏导,此处激活函数经常采用 Sigmoid 激活函数。 s_{ik} 表示输入变量 x_i 对输出变量 y_k 的敏感性系数。

如果网络的输出变量只有一个,则上式可改造为:

$$s_i = \frac{\partial y}{\partial x_i} = f'(\text{net}_k) \sum_{j=1}^L w_{ij} v_{jk} f'(\text{net}_j). \quad (13)$$

一些学者针对具体的前向网络做了研究,得到了一些具体的结果。

1) Dimoponlos 敏感性分析。Dimoponlos 提到在多层感知器网络中的敏感性分析方法^[23]。设有 $N-L-1$ 多层感知器网络,隐层激活函数为 $f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$, 则输入变量 x_i 对输出变量的敏感性系数为:

$$s_i = s \sum_{j=1}^L w_{ij} v_{j1} f_j (1 - f_j), \quad (14)$$

其中 $s = f'(\text{net}_1)$, f_j 表示隐层神经元 j 对第 t 个样本的响应, $f'(\text{net}_j) = f_j (1 - f_j)$ 。

2) Ruck 敏感性分析。Ruck 提到了一种敏感性分析方法^[24]。设有 $N-L-1$ 前向网络,隐层激活函数为双曲正切函数,即 $f(x) = \frac{1 - e^{-x}}{1 + e^{-x}}$, 输出层激活函数为线性函数,则输入变量 x_i 对输出变量的敏感性为:

$$s_i = \sum_{j=1}^L w_{ij} v_{j1} (1 + f_j) (1 - f_j), \quad (15)$$

其中 $f = 1$, f_j 表示隐层神经元 j 对样本的响应,

$$f'(\text{net}_j) = 0.5 (1 + f_j) (1 - f_j).$$

上述公式其实为 $s_i = 2 \frac{\partial y}{\partial x_i}$ 。显然该公式整体扩大了输

入变量的敏感性系数.

3) 径向基网络中的敏感性. 假设有 $N-L-1$ 三层前向径向基网络, 隐含层激活函数为高斯函数, 输出层激活函数为线性函数. 则网络输出有如下形式, 即:

$$y = f(x_1, \dots, x_N) = \sum_{j=1}^L w_j \exp \left\{ \frac{(x_i - u_{ji})^2}{-2v_j^2} \right\},$$

其中 (u_{j1}, \dots, u_{jN}) 为第 j 个中心, v_j 为第 j 个中心的宽度, w_j 为输出层和第 j 个隐含层神经元之间的连接权.

$$s_i = \frac{\partial y}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^L w_j \frac{x_i - u_{ji}}{-v_j^2} \exp \left\{ \frac{(x_i - u_{ji})^2}{-2v_j^2} \right\}. \quad (16)$$

该网络中输入层与隐含层之间的连接权重为 1, 即

$$w_{ij} = 1, v_{j1} = w_j f' = 1,$$

$$f'(net_j) = \frac{x_i - u_{ji}}{-v_j^2} \exp \left\{ \frac{(x_i - u_{ji})^2}{-2v_j^2} \right\}.$$

可以将此方法扩展到多层前向网络, 参看文献[25].

其实公式(11)~(16)反映的只是单个样本点上输入变量对输出变量的敏感性系数, 反映不出该输入变量在所有样本点上对输出的总的影响程度. 我们将公式(11)中 $w p_{ik}$ 改为 $w p_{ik}^t$, 公式(12)中 s_{ik} 改为 s_{ik}^t , 公式(13)~(16)中 s_i 改为 s_i^t 中更合理. $w p_{ik}^t$ 、 s_{ik}^t 、 s_i^t 表示在样本 t 上输入变量 x_i 对输出变量的敏感性系数.

一般情况下, 需要一个综合函数把单个样本点上反映的输入变量对输出变量的敏感性综合起来. 下面提到的几个公式可以满足这个要求. 我们将 S_{ik} 称为输入变量 x_i 对输出变量 y_k 的敏感性系数, S_{ik} 与 s_{ik}^t , $t=1, n$ 之间的关系见如下几个公式:

$$\text{综合公式 1: } S_{ik} = \sqrt[n]{\sum_{t=1}^n (s_{ik}^t)^2}.$$

$$\text{上述公式可以变形为: } S_{ik} = \sqrt[n]{\sum_{t=1}^n (s_{ik}^t)^2}.$$

该数值为非负值, 可以根据这个数值来对输入变量对输出的敏感性进行排序, 确定出各个变量对输出结果的影响程度的先后顺序.

$$\text{综合公式 2: } S_{ik} = \sqrt[n]{\sum_{t=1}^n \frac{|s_{ik}^t|}{n}}.$$

$$\text{上述公式可以变形为: } S_{ik} = \sqrt[n]{\sum_{t=1}^n \frac{|s_{ik}^t|}{n}}.$$

$$\text{综合公式 3: } S_{ik} = \max_{t=1, \dots, n} \{s_{ik}^t\}.$$

上述 3 个公式由 Jacek. M 提出[26]. 第 1 个公式

中提到的度量指标文中称为 mean square average (MSA) sensitivities, 第 2 个称为绝对值平均敏感度, 第 3 个称为最大值敏感度.

和综合公式 2 相比, 综合公式 1 把样本点上 x_i 对 y_k 的敏感性系数绝对值大的点的作用放大了. 文献[26]指出了第 3 个综合公式的缺陷, 即输入变量对输出的影响的显著性被高估了. 网络中的敏感性分析可以删除对输出影响不大的变量, 但是过这个公式, 网络中不太重要的输入变量可能被保留下来.

$$\text{综合公式 4: } S_{ik} = \frac{\sum_{t=1}^n s_{ik}^t}{n}.$$

该公式是文献[27]提到的. T. Tchaban 在文献[28]中使用这种方法作为衡量输入变量对输出变量影响的衡量指标.

该公式将所有样本点上 x_i 对 y_k 的敏感性系数均值定义为 x_i 对 y_k 的敏感性系数. 某些情况下, 该公式使得样本点上输入变量对输出变量的敏感性系数相互中和. 例如当 s_{ik}^t 所有样本点上正负取值可以抵消时, $S_{ik} = 0$. 显然这种情况下得到 S_{ik} 值是不合理的. 而且 S_{ik} 取值可能有正有负, 将直接得到的输入变量对输出的敏感性系数排序并不合理. 该公式适用于 s_{ik}^t 值为非负值的情况.

$$\text{综合公式 5: } S_{ik} = \frac{\sum_{t=1}^n |s_{ik}^t|}{n}.$$

该公式由陆明提出[28]. 式中

$$= \frac{UB(x_i) - LB(x_i)}{UB(y_k) - LB(y_k)} \cdot \frac{\max(y_k) - \min(y_k)}{\max(x_i) - \min(x_i)} \cdot x_i,$$

其中 $UB(y_k)$ 、 $LB(y_k)$ 、 $UB(x_i)$ 、 $LB(x_i)$ 分别表示输出变量 y_k 、输入变量 x_i 在所有样本中的上下确界; $\max(y_k)$ 、 $\min(y_k)$ 、 $\max(x_i)$ 、 $\min(x_i)$ 为训练集中 y_k 、 x_i 的最大最小值; x_i 为步长, 它和输入变量 x_i 的性质有关系. 若 x_i 为等距离散变量, 则 x_i 为 x_i 两相邻数值间距; 若 x_i 为连续变量, 则

$$x_i = \frac{\max(x_i) - \min(x_i)}{10}.$$

该公式考虑全面. 当网络数据输入样本中离散变量和连续变量共存时, 可以借助这个公式比较这两类变量的敏感性系数.

$$\text{综合公式 6: } S_{ik} = E \left[\left(\frac{\partial y_k}{\partial x_i} \right)^2 \right].$$

本公式是从文献[30]中提炼出来的.

$$\text{综合公式 7: } S_{ik} = \text{var} \left[\left(\frac{\partial y_k}{\partial x_i} \right) \right].$$

该公式是从文献[31]中提炼出来的.

文献[30-31]对径向基网络中输入变量敏感性系数做了研究. 假设有一个 $N-L-1$ 径向基网络, 输入层

变量 x_1, \dots, x_N 满足正态分布即 $x_i \sim N(\mu_i, \sigma_i^2)$, $i = 1, \dots, N$, 且彼此互相独立, 输出变量 y 关于输入变量的函数及偏导数上面已提过. 用综合函数 4, 5 可以求得输入变量 x_i 的敏感性系数.

2.1.3 与统计方法结合的敏感性分析 Olden 和 Jackson 提出一种计算单个输入变量对输出变量的影响程度或者贡献程度的方法, 称为随机化检验方法 (randomization test approach)^[9]. 这种方法通过排除对网络模型没有显著影响的神经轴突连接, 简化了对神经网络模型机制的阐述. 这种方法是对 Garson 方法的改进和提高. 方法如下:

给定一组数据. 从该数据集中随机选取一部分数据作为网络的训练集, 构建出一个有好的预测能力的前向神经网络. 记录网络中的下列数值: 输入层 - 隐含层的连接权与隐含层 - 输出层的连接权值乘积 (输入层 - 隐含层 - 输出层的连接权值); 每个变量输入层 - 隐含层 - 输出层的连接权的总和; 用 Garson 算法计算每个变量的相对重要值. 再次随机地选取网络的训练数据集, 构建新的网络. 重复多次 (如 999 次). 每次都记录 、 、 描述的值, 这样就可以得到输入层 - 隐含层 - 输出层的连接权, 每个变量输入层 - 隐含层 - 输出层的连接权的总和及每个变量的相对重要性的统计显著性. 这样就可以在神经网络机制图中去掉对神经网络影响很小的连接权值, 更清晰地分析各输入变量对输出变量的影响.

该文献也指出了 Garson 方法有误导输入变量对输出变量贡献的隐患, 并用一个例子说明该问题.

2.1.4 基于输入变量扰动的敏感性分析 基本的方法是给网络的输入变量添加白噪声或扰动, 观察加入噪声前后输出变量结果的变化. 通常每次给一个输入变量添加噪声或者干扰, 而其他变量保持不变.

Scardi 和 Harding 提出, 给网络中每个输入变量加白噪声, 然后计算在该变量影响下输出变量变化的均值, 并将其作为该变量对输出变量的敏感性系数^[32].

Jin Young 提出给输入变量给加标准差为 、期望为 0 的噪声或者给输入变量乘满足上述分布的噪声, 考察输入变量改变前后对输出变量的影响, 将输出变量前后变化差异值的方差作为该输入变量对输出变量的敏感性系数^[33].

2.2 全局敏感性分析 根据现有神经网络的敏感性分析的文献资料, 发现学者们更多关注的是局部敏感性分析, 所做的网络中的全局敏感性分析较少. 在我们收集到的全局敏感性分析相关文献中, 发现下面这种方法比较好用, 具有计算速度快、操作简单的特点.

Muriel. Gevrey 提出了 PaD2 方法^[10]. 这种方法主要是针对前向网络, 如 BP 网络或者多层感知器网络, 考察输入变量中两个变量的交互作用对输出变量的影响程度. 该方法主要是借助输出变量关于输入变量的函数表达式来做的. 设有 $N-L-1$ 前向网络, 网络输出有如下形式: $y = f(x_1, \dots, x_N)$. 通过对该式子求二阶偏导来考察两个变量对输出变量的影响程度. 设网络隐层激活函数为 $f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$. 不失一般性, 我们考察一下第 t 个样本上变量 x_i 与 x_k 对输出变量 y 的敏感性.

$$s_{ik}^t = s \left[\sum_{j=1}^L w_{ij} v_{j1} I_j'(1 - I_j') \sum_{j=1}^L w_{kj} v_{j1} I_j'(1 - I_j') + \sum_{j=1}^L w_{ij} w_{kj} v_{j1} I_j'(1 - I_j') (1 - 2I_j') \right], \quad (17)$$

其中 s 表示输出层激活函数对其输入的导数, I_j' 表示隐层神经元 j 对第 t 个样本的输出值.

我们将这个结论重新推导了一下, 发现该公式有误, 正确的公式如下:

$$s_{ik}^t = s_2 \sum_{j=1}^L w_{ij} v_{j1} I_j'(1 - I_j') \sum_{j=1}^L w_{kj} v_{j1} I_j'(1 - I_j') + s_1 \sum_{j=1}^L w_{ij} w_{kj} v_{j1} I_j'(1 - I_j') (1 - 2I_j'), \quad (18)$$

其中 s_1 表示输出层激活函数对其输入的一阶导数, s_2 表示输出层激活函数对其输入的二阶导数.

根据 s_{ik}^t , 可以描绘出以输入变量 x_i 与 x_k 为自变量、 s_{ik}^t 为因变量的三维立体图. 若 s_{ik}^t 为负值, 表明输出值在减少; 而正值意味着输出值在增加. 三维图可以帮助我们更好地理解样本点上输入变量对输出的敏感性系数.

一般情况下, 对于输入变量 x_i 与 x_k 对输出变量的敏感性系数 S_i , 该文献是借助综合函数一的变形公式完成的, 用如下的方法可以提高输入变量对输出的敏感性系数的稳定性. 参照神经网络局部敏感性分析中提到的随机化方法的思路, 对本方法中的网络进行修改. 随机性修改网络训练训练数据, 多次重建网络, 得到一系列关于 2 个变量结合的对输出变量的敏感性系数. 求其均值, 即为这 2 个变量对输出变量的相对敏感性程度值. 在这种方法的基础上, 我们还可以考虑 3 个变量、4 个变量甚至更多个输入变量对输出变量的敏感性系数. 但是当网络包含了大量的输入变量时, 这种做法就不现实了, 多维变量交互作用的敏感性就很难获得.

3 粗糙集中的属性重要性分析

敏感性分析主要反映了输入变量 (条件属性) 对输

出变量(决策属性)的影响程度. 条件属性对模型的决策属性的影响程度可以反映出条件属性在模型中的重要性程度. 作为一种新的处理模糊性和不确定性知识的工具——粗糙集,也可以用来进行属性重要性评价. 粗糙集理论中认为知识是将对象进行分类的能力. 属性的重要性是建立在属性的分类能力上的. 为了衡量条件属性的重要性程度,可从条件属性集中删除这一属性,考察在没有这个属性的情况下信息系统的分类会产生怎样的变化. 如果去掉属性后相应分类变化大,则说明该属性重要程度高,如果去掉属性后相应分类变化小,则说明该属性的重要性低. 用 $C = \{c_1, \dots, c_n\}$ 表示一个对象集 U 的条件属性集, D 表示 U 的决策属性集. 条件属性 c_i 关于决策属性 D 的重要性可用下面公式来衡量:

$$cD(c_i) = c(D) - c_{- \{c_i\}}(D),$$

$$\text{其中 } c(D) = \frac{\text{card}(\text{Pos}_C(D))}{\text{card}(U)},$$

$$c_{- \{c_i\}}(D) = \frac{\text{card}(\text{Pos}_{C - \{c_i\}}(D))}{\text{card}(U)},$$

$\text{card}(\text{Pos}_C(D))$ 表示 D 的 C 正域中元素的个数, $\text{Pos}_{C - \{c_i\}}(D)$ 表示 D 的 $C - \{c_i\}$ 正域中元素的个数, $\text{card}(U)$ 表示对象集 U 中元素个数. 关于该方法的详细介绍请参看文献[34].

4 讨论及展望

现有的敏感性分析方法中,局部敏感性分析方法占了一大部分,而全局敏感性分析方法较少. 通过前面所列的局部敏感性分析方法,可以看出其操作便捷. 但其还存在一些缺点. 缺点一:忽略了变量间交互作用对输出的影响,只考察单个变量对输出的影响. 事实上,在敏感性分析实验设计中,对变量间的交互作用的考虑非常有必要^[10]. 缺点二:神经网络中得到的各输入变量对输出变量的敏感性系数缺乏稳定性. 神经网络中神经元的连接权值的随机性造成了敏感性分析结果的不稳定性. 借用前面提到的随机化检验方法可以增强神经网络中结果的稳定性. 和局部敏感性方法相比,全局敏感性分析有它独特的优势. 因其考虑了输入变量间共同作用对结果的影响,故而其更符合实际情况,从上面我们提到的一种全局敏感性分析方法——PaD2 方法可以看出,这种方法操作方便,计算简单.

基于敏感性分析发展现状,我们提出几点展望:

1) 国内外学者们提出的局部敏感性分析方法很多,而全局敏感性分析方法比较少,关于全局敏感性分析方法是一个研究趋势.

2) 对于数理统计中的敏感性分析方法来说,这些方法都要求输入变量的值是连续型. 当输入变量的值是离散型时,或者离散型与连续型并存时,方法就不适用了. 对于神经网络中的敏感性分析方法来说,当输入变量值类型不同,能否按敏感性系数对其进行排序,还是一个仍需要考虑的问题.

3) 我们可以得到输入变量集中单个变量对输出变量的敏感性,但是如何确定哪些输入变量是敏感性因素、哪些是不敏感性因素仍是一个问题. 选用什么指标来衡量输入变量的敏感性显著性,还是一个需要深入考虑的问题. 应该加强统计方法和智能分析方法的联系.

4) 对于神经网络中单个变量来说,我们可以得到该变量在单个样本点上对输出变量的敏感性系数,也就是该变量在取某个值时对输出变量的敏感性. 变量可能在某些值处敏感,某些值处不敏感. 我们可以考虑一下如何寻找变量的敏感性区间. 寻找变量的敏感性区间有很大的实际用途.

5) 神经网络中,需要构建一种敏感性分析方法,该方法可以反映出单变量对输出的敏感性系数,也可反映出多变量交互作用对输出的敏感性系数.

6) 尽管关于神经网络的敏感性分析方法已有很多,但每种方法对网络都有限定,对网络中神经元的激活函数都有要求. 目前还没有一种适用于大多数的神经网络模的敏感性分析方法. 寻找一种广泛适用神经网络的敏感性分析方法很必要.

5 参考文献

- [1] McKay M D, Beckman R J, Conover W J. A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code [J]. *Technometrics*, 1979, 21:239
- [2] Cukier R I, Fortuin C M, Shuler K E, et al. Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients I [J]. *Theory J Chem Phys*, 1973, 59: 3873
- [3] Cukier R I, Levine H B, Shuler K E. Nonlinear sensitivity analysis of multiparameter model systems [J]. *J Comput Phys*, 1978, 26:1
- [4] Cukier R I, Schaibly J H, Shuler K E, et al. Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients: analysis of the approximations [J]. *J Chem Phys*, 1975, 63:1140
- [5] Saltelli A, Marivoet J. Non-parametric statistics in sensitivity analysis for model output: A comparison of selected techniques [J]. *Reliability Engineering and System Safety*, 1990, 28:229

- [6] Morris M D. Factorial sampling plans for preliminary computational experiments [J]. *Technometrics*, 1991, 33:161
- [7] Sobol I M. Sensitivity estimates for nonlinear mathematical models [J]. *Math Modeling & Computational Experiment*, 1993(1):407
- [8] Garson G D. Interpreting neural-network connection weights[J]. *AI Expert*, 1991, 6(4):47
- [9] Julian D, Olden Donald A. Jackson: Illuminating the "black box": a randomization approach for understanding variable contributions in artificial neural networks [J]. *Ecological Modelling*, 2002, 154:135
- [10] Muriel Gevrea, Ioannis Dimopoulosb, Sovan Leka. Two-way interaction of input variables in the sensitivity analysis of neural network models [J]. *Ecological Modelling*, 2006, 195:43
- [11] 杨秀芝, 贾春梅. 投资项目因素敏感性分析[J]. *边疆经济与文化*, 2005(12):35
- [12] Borgonovo E, Peccati L. Uncertainty and global sensitivity analysis in the evaluation of investment projects[J]. *J of Production Economics*, 2006, 104:62
- [13] 徐崇刚. 生态模型的敏感性分析[J]. *应用生态学报*, 2004, 15(6):1056
- [14] 陈太聪. 参数灵敏度分析的神经网络方法及其工程应用[J]. *计算力学学报*, 2004, 21(6):752
- [15] 夏元友, 熊海丰. 边坡稳定性影响因素敏感性人工神经网络分析[J]. *岩石力学与工程学报*, 2004, 23(16):2703
- [16] 蒋勇. 敏感性分析在燃烧毒物和自由基生成机理研究中的作用[J]. *火灾科学*, 2002, 11(1):001
- [17] Cacuci D G, Ionescu-Bujor M. A comparative review of sensitivity and uncertainty analysis of large-scale systems + II: statistical methods [J]. *Nucl Sci Eng*, 2004, 147(3):204
- [18] Frey H C, Patil S R. Identification and review of sensitivity analysis methods [J]. *Risk Anal*, 2002, 22(3):553
- [19] Saltelli A, Chan K, Scott E M. Sensitivity analysis [M]. New York: Wiley, 2000
- [20] Hamby D M. A review of techniques for parameter sensitivity analysis of environmental models[J]. *Environ Monitor Assess*, 1994, 32(2):135
- [21] 王学武, 谭得健. 神经网络的应用与发展趋势[J]. *计算机工程与应用*, 2003, 3:98
- [22] Tchaban T, Taylor M J, Griffin A. Establishing impacts of the inputs in a feedforward neural network [J]. *Neural Compute Appl*, 1998, 7:309
- [23] Dimopoulos Y, Bourret P, Lek S. Use of some sensitivity criteria for choosing networks with good generalization ability[J]. *Neural Process Lett*, 1995, 2:1
- [24] Ruck D W, Rogers S K, Kabrisky M. Feature selection using multi layer perceptrons [J]. *Journal of Neural Network Computing*, 1990, 2:40
- [25] Katsuaki Koike, Setsuro Matsuda. New indices for characterizing spatial models of ore deposits by the use of a sensitivity vector and an influence factor [J]. *Mathematical Geology*, 2006, DOI: 10. 1007/s11004-006-9030-3
- [26] Jacek M, Zurada, Aleksander Malinowski, et al. Perturbation method for deleting redundant inputs of perceptron networks[J]. *Neurocomputing*, 1997, 14:177
- [27] Utans J, Moody J. Selecting neural network architectures via the prediction risk: application to corporate bond rating prediction [M]. Los Alamitos, CA: Proc Int Conf Artificial Intelligence Applications, 1991
- [28] Tchaban T, Taylor M J, Griffin J P. Establishing impacts of the inputs in a feedforward neural network [J]. *Neural Comput Applic*, 1998, 7:309
- [29] Lu Ming, Daniel S Yeung, Wing W Y Ng. Applying undistorted neural network sensitivity analysis in iris plant classification and construction productivity prediction[J]. *Soft Comput*, 2006, 10:68
- [30] Wang Xizhao, Zhang Hui. A novel input stochastic sensitivity definition of radial basis function neural networks and its application to feature selection [M]. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2006:1352-1358
- [31] Wang Xizhao, Li Chunguo. A new definition of sensitivity for RBFNN and its applications to feature reduction [M]. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2005:81-86
- [32] Scardi M, Harding. Developing an empirical model of phytoplankton primary productions: a neural network case study[J]. *Ecol Model*, 1999, 120:213
- [33] Jin Young Choi, Chong-HO Choi. Sensitivity analysis of multilayer perception with differentiable activation functions[J]. *IEEE Transactions on Networks*, 1992, 3(1):101
- [34] Yeung D S, Sun X. Using function approximation to analyze the sensitivity of MLP with antisymmetric squashing activation function[J]. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 2002, 13(1):34
- [35] Shi Daming, Gao Junbin, Daniel So Yeung, et al. Radial basis function network pruning by sensitivity analysis [M]. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2004

ON SENSITIVITY ANALYSIS

CAI Yi¹⁾ XING Yan¹⁾ HU Dan²⁾

(1) School of Mathematical Sciences; 2) College of Information Science and Technology: Beijing Normal University, 100875, Beijing, China)

Abstract Main methods of sensitivity analysis based on statistic, artificial neural networks and rough sets were reviewed in this paper. The advantages and disadvantages were analysed. The current status of sensitivity analysis and perspectives regarding further research were presented.

Key words sensitivity analysis; statistic analysis; neural networks

认知神经科学与学习国家重点实验室取得新进展

1月16日上午,我校脑成像中心举行揭牌仪式,该中心是认知神经科学与学习国家重点实验室的大型技术支撑平台,以服务于认知神经科学研究为核心目标,中心的正式运行必将进一步推动我国认知神经科学发展并与国际接轨。其设备的先进性、功能的系统性以及研究层次的多样性目前我国认知神经科学领域处于领先地位。中心自2007年5月1日开始试运行以来,已经为近40个受国家科技部“九七三”、“八六三”和国家基金委等项目资助的科学研究提供扫描服务,累计扫描时间已超过950 h。

同时,脑成像中心与德国西门子公司合作的“北京师范大学——西门子磁共振数据采集与分析技术联合实验室”挂牌成立。该实验室将借助西门子在磁共振领域硬件和软件开发的强大实力,结合我校“认知神经科学与学习国家重点实验室”的丰富的认知神经心理学研究经验,与西门子进行联合,实现优势互补,推动我国认知神经科学领域的发展。

我校认知神经科学与学习国家重点实验室还与美国Banner阿尔茨海默病研究所正式签署了合作协议,双方将在认知老化和老年痴呆等方面开展合作研究。美国Banner阿尔茨海默病研究所是国际顶尖的老年痴呆症研究机构,在老年痴呆症研究方面积累了丰富的经验。该研究所利用老年痴呆症的遗传机制和生物基础进行疾病的早期诊断,并且研发了能够有效治疗老年痴呆的药物和干预措施。这两所科研机构的强强联合对我国老年痴呆症的预防、诊断和治疗将起到推动作用,对于解决当前我国乃至全球所面临的老龄化问题具有积极意义。

(薛 包)