doi:10.11887/j.cn.201704024　　http://journal.nudt.edu.cn

多输出性能下的重要性测度指标及其求解方法*

徐立扬,吕震宙,王　飞,肖思男
(西北工业大学 航空学院, 陕西 西安　710072)

摘　要:针对基于马氏距离的重要性测度存在的问题,提出了基于谱分解加权摩尔彭罗斯马氏距离的重要性测度指标,通过构造多输出协方差阵的广义逆矩阵以及谱分解的策略,有效解决了协方差阵求逆奇异情况以及由于未能充分考虑多输出之间的相互关系而导致的错误识别重要变量的问题,克服了基于马氏距离指标的局限性。数值算例与工程算例结果表明:所提重要性测度可以更加准确地获得输入变量对结构系统多输出性能随机取值特征贡献的排序,从而为可靠性设计提供充分的信息。

关键词:多输出;重要性测度;马氏距离;广义逆矩阵;谱分解加权
中图分类号:TB114.3　　**文献标志码**:A　　**文章编号**:1001-2486(2017)04-154-07

Global sensitivity analysis for multiple outputs and their solutions

XU Liyang, *LYU Zhenzhou*, *WANG fei*, *XIAO Sinan*
(School of Aeronautics, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: Aiming at solving the existing drawbacks of indices of the Mahalanobis distance, an importance measure based on the Moore-Penrose Mahalanobis distance weighted by spectral decomposition was proposed. Through building the generalized matrix inversion of covariance matrix of multi-output and the spectral decomposition, the problems that the covariance matrix was be inversed and misidentification for lacking the adequate consideration about the relation among the multiple outputs were solved. Thus, the limitations of indices of Mahalanobis distance were overcome. The results of numerical examples and engineer instance show that the proposed importance measurement can accurately get the effects of input variables on the integrated performance of multi-output structure system, thus providing effective information for reliability design.

Key words: multivariate output; importance measure; Mahalanobis distance; generalized inverse matrix; weighted spectral decomposition

在结构系统可靠性设计中,普遍存在多输出性能的问题,为此需要同时对系统多个输出特性进行统一分析。如用于评估能源消耗模型[1]、评估环境模型中多指标化合物的影响作用[2]以及在飞机结构系统设计时需要同时考虑多个危险部位的位移、应变、应力及寿命等,这些都属于多个输出性能的问题。研究输入变量的不确定性对多个输出性能的综合影响,可以达到通过调整输入变量的不确定性来有效控制输出变量不确定性的目的,因此该研究是非常有意义的。目前针对结构系统多输出情况下的重要性测度分析主要包含以下三个方面:一种是基于方差而提出的指标,其中 Gamboa 等[3]定义了一种基于协方差分解的广义重要性测度指标,并采用蒙特卡洛法求解;另一种是在输出分解方法的基础上,Campbell 等[4]通过在一个合适的基函数上展开原模型并结合主成分来分析求解,以此进行重要性测度分析;最后一种是从多维空间中的距离度量出发,通过单输出方差分解的概念结合判别分析[5]及聚类分析的思想来估计结构系统多输出模型的不确定性,从而展开输入变量的重要性测度分析。本文根据这一特点定义了基于马氏距离的重要性测度指标。相对于欧式距离,它考虑到了多维输出之间相关性的影响和各个输出之间不同量纲的影响,并引入稀疏网格法来完成结构系统多输出模型的重要性测度的求解。但当多个输出性能中有线性相关的输出时,马氏距离是不存在的。陈欢等[6]通过奇异值分解构造了含有摩尔彭罗斯(Moore-Penrose, MP)广义逆矩阵的马氏距离,解决了马氏距离不存在的问题。本文受此启发,将广义逆矩阵引入马氏距离,并结合奇异值分解及矩阵的谱分解理论[7],用协方差加权 MP 广义逆代替传统的逆矩阵,提出了基于谱分解加权 MP 马氏距离的重要性测度,解决了协方差阵求逆时奇异的问题,以及输入输出维数相同时,基于马氏距离的重要性

* **收稿日期**:2016-03-04
项目基金:国家自然科学基金资助项目(NSFC51475370);中央高校基本科研业务费专项资金资助项目(3102015BJ(Ⅱ)CG009)
作者简介:徐立扬(1993—),男,甘肃兰州人,博士研究生,E-mail:xly@mail.nwpu.edu.cn;
吕震宙(通信作者),女,教授,博士,博士生导师,E-mail:zhenzhoulu@nwpu.edu.cn

测度指标不能正确识别线性输出 - 输入关系中输入变量重要性的问题。由于谱分解将输出性能间的统计特征体现得更好,因而其适应性更强。本文用蒙特卡洛数字模拟法与稀疏网格法[8]求解以上指标,并通过数值算例和工程算例说明了所提出的基于谱分解加权 MP 马氏距离重要性测度的合理性和可行性。在工程实践中,依据所提出的多输出下的重要性测度指标可以更加准确地给出变量的重要度排序,据此可以有针对性地改进贡献程度高的输入变量,以此达到有效控制输出性能的目的。

1　多输出下基于马氏距离的重要性测度

1.1　基于距离概念的多输出重要性测度的分析及定义

假设系统共有 m 个输出性能,则 m 维空间中的随机点 $\boldsymbol{Y}=[Y_1,Y_2,\cdots,Y_m]$ 与其均值向量 $E(\boldsymbol{Y})=[E(Y_1),E(Y_2),\cdots,E(Y_m)]$ 的距离 $d^2[\boldsymbol{Y},E(\boldsymbol{Y})]$ 可以反映随机多维输出性能 $\boldsymbol{Y}$ 偏离 $E(\boldsymbol{Y})$ 的程度,而这种距离的平均值 $E\{d^2[\boldsymbol{Y},E(\boldsymbol{Y})]\}$ 则可以综合衡量 m 维输出空间中 $\boldsymbol{Y}$ 的随机取值特性。一维输出情况下 Y 与其均值 $E(Y)$ 距离 $d^2[Y,E(Y)]$ 的平均值 $E\{d^2[Y,E(Y)]\}=E[Y-E(Y)]^2=V(Y)$ 为 Y 的方差。在输入随机变量 $X_i(i=1,2,\cdots,n)$ 相互独立的情况下,它可以分解为一阶贡献 $E[E(Y|X_i)-E(Y)]^2=V[E(Y|X_i)]$ 与高阶贡献之和。与之类似,多输出下 $E\{d^2[\boldsymbol{Y},E(\boldsymbol{Y})]\}$ 也可以分解为一阶贡献 $E\{d^2[E(\boldsymbol{Y}|X_i),E(\boldsymbol{Y})]\}$ 与高阶贡献之和的形式,表示为:

$$E\{d^2[\boldsymbol{Y},E(\boldsymbol{Y})]\}=\sum_{i=1}^{n}E_{X_i}\{d^2[E_{X_{-i}}(\boldsymbol{Y}|X_i),E(\boldsymbol{Y})]\}+\sum_{i_1=1}^{n}\sum_{i_2=i_1+1}^{n}(E_{X_{i_1},X_{i_2}}\{d^2[E_{X_{-(i_1,i_2)}}(\boldsymbol{Y}|X_{i_1},X_{i_2}),E(\boldsymbol{Y})]\}-E_{X_{i_1}}\{d^2[E_{X_{-i_1}}(\boldsymbol{Y}|X_{i_1}),E(\boldsymbol{Y})]\}-E_{X_{i_2}}\{d^2[E_{X_{-i_2}}(\boldsymbol{Y}|X_{i_2}),E(\boldsymbol{Y})]\})+\cdots \tag{1}$$

其中,$\boldsymbol{X}_{-i}$ 表示除 X_i 外其他所有输入随机变量的组合。

一阶贡献 $E\{d^2[E(\boldsymbol{Y}|X_i),E(\boldsymbol{Y})]\}$ 可以综合衡量输入变量 X_i 对多输出性能取值特征 $E\{d^2[\boldsymbol{Y},E(\boldsymbol{Y})]\}$ 的影响程度。因此,可采用如式(2)所示的重要性测度的主指标 S_i^m 来反映 X_i 对多输出随机取值特征 $E\{d^2[\boldsymbol{Y},E(\boldsymbol{Y})]\}$ 的重要性。

$$S_i^m=\frac{E\{d^2[E(\boldsymbol{Y}|X_i),E(\boldsymbol{Y})]\}}{E\{d^2[\boldsymbol{Y},E(\boldsymbol{Y})]\}} \tag{2}$$

从表达形式来看,主指标 S_i^m 可以表示当消除了输入随机变量 X_i 的不确定性后,系统输出响应的条件期望 $E(\boldsymbol{Y}|X_i)$ 偏离期望 $E(\boldsymbol{Y})$ 的平均程度;而从 $E\{d^2[\boldsymbol{Y},E(\boldsymbol{Y})]\}$ 分解的本质来说,S_i^m 反映了 X_i 对 m 维输出取值特征 $E\{d^2[\boldsymbol{Y},E(\boldsymbol{Y})]\}$ 的贡献。S_i^m 的值越大,表明输入随机变量 X_i 变异性对系统多输出取值特征的影响越大,在实际工程中优先考虑可以达到更有效地控制多输出性能的目的。

式(2)的指标在选择不同的多维空间距离时将得到不同的重要性测度结果。当选择 m 维空间的欧式距离时,其结果与文献[3]的协方差分解结果一致,但欧式距离完全没有反映输出之间的相互关系及各输出之间的相对重要性,并且欧氏距离的值与各个输出响应的量纲有关。而多维输出的马氏距离则可以在一定程度上反映各输出间的相互关系与相对重要性,并考虑了各个输出之间不同量纲的影响[9]。

1.2　基于马氏距离的多输出重要性测度的定义及其存在的问题

马氏距离 $d_{\mathrm{M}}^2[\boldsymbol{Y},E(\boldsymbol{Y})]$ 可以表示为:

$$d_{\mathrm{M}}^2[\boldsymbol{Y},E(\boldsymbol{Y})]=[\boldsymbol{Y}-E(\boldsymbol{Y})][Cov(\boldsymbol{Y})]^{-1}[\boldsymbol{Y}-E(\boldsymbol{Y})]^{\mathrm{T}} \tag{3}$$

其中,$Cov(\boldsymbol{Y})$ 是多输出的协方差矩阵。

把式(3)代入式(2),可以得到结构系统多输出情况下基于马氏距离的重要性测度主指标 S_i^m。

$$S_i^m=\frac{E\{[E(\boldsymbol{Y}|X_i)-E(\boldsymbol{Y})][Cov(\boldsymbol{Y})]^{-1}[E(\boldsymbol{Y}|X_i)-E(\boldsymbol{Y})]^{\mathrm{T}}\}}{E\{[\boldsymbol{Y}-E(\boldsymbol{Y})][Cov(\boldsymbol{Y})]^{-1}[\boldsymbol{Y}-E(\boldsymbol{Y})]^{\mathrm{T}}\}} \tag{4}$$

利用高维模型表示,可以将式(4)中的分母展开为:

$$\begin{aligned}&E\{[\boldsymbol{Y}-E(\boldsymbol{Y})][Cov(\boldsymbol{Y})]^{-1}[\boldsymbol{Y}-E(\boldsymbol{Y})]^{\mathrm{T}}\}\\&=E\{(\boldsymbol{\phi}_i+\boldsymbol{\phi}_{i,j}+\cdots+\boldsymbol{\phi}_{1,2,\cdots,n})[Cov(\boldsymbol{Y})]^{-1}(\boldsymbol{\phi}_i+\boldsymbol{\phi}_{i,j}+\cdots+\boldsymbol{\phi}_{1,2,\cdots,n})^{\mathrm{T}}\}=E\{\boldsymbol{\phi}_i[Cov(\boldsymbol{Y})]^{-1}\boldsymbol{\phi}_i^{\mathrm{T}}\}+E\{\boldsymbol{\phi}_{i,j}[Cov(\boldsymbol{Y})]^{-1}\boldsymbol{\phi}_{i,j}^{\mathrm{T}}\}+\cdots\end{aligned} \tag{5}$$

$$\boldsymbol{\phi}_i=E_{X_{-i}}(\boldsymbol{Y}|X_i)-E(\boldsymbol{Y})$$

$$\boldsymbol{\phi}_{i,j}=E_{X_{-i,j}}(\boldsymbol{Y}|X_i,X_j)-\boldsymbol{\phi}_i-\boldsymbol{\phi}_j-E(\boldsymbol{Y}),\cdots$$

由上述展开可以看出,式(4)中的分子项即是分母展开后关于 X_i 的分量,该分量即可看作是 X_i 的贡献项。

类似于单输出情况,结构系统多输出情况下基于马氏距离的重要性测度的总指标可以定义为:

$$ST_i^m = 1 - \frac{E\{[E(\boldsymbol{Y}|X_{-i}) - E(\boldsymbol{Y})][Cov(\boldsymbol{Y})]^{-1}[E(\boldsymbol{Y}|X_{-i}) - E(\boldsymbol{Y})]^{\mathrm{T}}\}}{E\{[\boldsymbol{Y} - E(\boldsymbol{Y})][Cov(\boldsymbol{Y})]^{-1}[\boldsymbol{Y} - E(\boldsymbol{Y})]^{\mathrm{T}}\}} \tag{6}$$

马氏距离本质上属于加权距离的一种，相当于对每个输出按照自身的方差以及它与其他输出的相关程度进行加权，$[Cov(\boldsymbol{Y})]^{-1}$同时也标准化了多输出数据。所以马氏距离同时考虑到了多维输出之间相关性的影响和各个输出之间不同量纲的影响。但是马氏距离在有以下三个缺陷：

1）某些情况是不存在的。如 $\boldsymbol{Y} = [Y_1, Y_2, \cdots, Y_m]$ 这 m 个输出中出现了两个或两个以上线性相关的输出时，$\det[Cov(\boldsymbol{Y})] = 0$，$Cov(\boldsymbol{Y})$不可逆，导致马氏距离不存在。

2）由于马氏距离考虑多输出之间的相互关系仍不够充分，会高估作用较小的变量的贡献。

3）在输入变量与输出变量的维数相同并且输入－输出之间全为线性关系时，基于马氏距离的重要性测度无法正确识别输入随机变量对总体的贡献程度。由于高于二维的输出计算量较大，下面通过一个二维的解析算例进行分析说明。

假设二维输入变量 $X_i (i = 1,2)$ 相互独立，且均服从正态分布，即 $x_i \sim N(\mu_i, \sigma_i)(i = 1,2)$。对于二维线性输入－输出关系 $\begin{cases} y_1 = ax_1 + bx_2 \\ y_2 = cx_1 + dx_2 \end{cases}$，其中，$a, b, c, d \in \mathbf{R}$，经推导可得输出向量 $\boldsymbol{Y} = [Y_1, Y_2]$ 的协方差阵为：

$$[Cov(\boldsymbol{Y})]^{-1} = \begin{pmatrix} \dfrac{c^2\sigma_1^2 + d^2\sigma_2^2}{a^2d^2\sigma_1^2\sigma_2^2 - 2abcd\sigma_1^2\sigma_2^2 + b^2c^2\sigma_1^2\sigma_2^2} & -\dfrac{ac\sigma_1^2 + bd\sigma_2^2}{a^2d^2\sigma_1^2\sigma_2^2 - 2abcd\sigma_1^2\sigma_2^2 + b^2c^2\sigma_1^2\sigma_2^2} \\ -\dfrac{ac\sigma_1^2 + bd\sigma_2^2}{a^2d^2\sigma_1^2\sigma_2^2 - 2abcd\sigma_1^2\sigma_2^2 + b^2c^2\sigma_1^2\sigma_2^2} & \dfrac{a^2\sigma_1^2 + b^2\sigma_2^2}{a^2d^2\sigma_1^2\sigma_2^2 - 2abcd\sigma_1^2\sigma_2^2 + b^2c^2\sigma_1^2\sigma_2^2} \end{pmatrix}$$

进而可得

$$E\{[\boldsymbol{Y} - E(\boldsymbol{Y})][Cov(\boldsymbol{Y})]^{-1}[\boldsymbol{Y} - E(\boldsymbol{Y})]^{\mathrm{T}}\}$$

$$= E\left[\frac{(x_1 - \mu_1)^2\sigma_2^2}{\sigma_1^2\sigma_2^2} + \frac{(x_2 - \mu_2)^2\sigma_1^2}{\sigma_1^2\sigma_2^2}\right]$$

$$= \frac{E[(x_1 - \mu_1)^2\sigma_2^2 + (x_2 - \mu_2)^2\sigma_1^2]}{\sigma_1^2\sigma_2^2}$$

$$= 2E\{[E(\boldsymbol{Y}|X_1) - E(\boldsymbol{Y})][Cov(\boldsymbol{Y})]^{-1} \cdot [E(\boldsymbol{Y}|X_1) - E(Y)]^{\mathrm{T}}\} = E\left[\frac{(x_1 - \mu_1)^2\sigma_2^2}{\sigma_1^2\sigma_2^2}\right]$$

$$= \frac{E[(x_1 - \mu_1)^2]}{\sigma_1^2} = 1$$

$$E\{[E(\boldsymbol{Y}|X_2) - E(\boldsymbol{Y})][Cov(\boldsymbol{Y})]^{-1}[E(\boldsymbol{Y}|X_2) - E(\boldsymbol{Y})]^{\mathrm{T}}\} = E\left[\frac{(x_2 - \mu_2)^2\sigma_1^2}{\sigma_1^2\sigma_2^2}\right]$$

$$= \frac{E[(x_2 - \mu_2)^2]}{\sigma_2^2} = 1$$

所以无论 a, b, c, d 取何值，均有 $S_1^m \equiv S_2^m = 0.5$。此结论推导至 n 维可得 $S_1^m \equiv S_2^m \equiv \cdots \equiv S_n^m = 1/n$。由此可见，对于输入与输出变量维数相同且输入－输出为线性关系的情况，基于马氏距离的重要性测度指标无法正确识别输入变量的重要性。

2 基于谱分解加权 MP 马氏距离的多输出重要性测度

对于基于马氏距离重要测度的第一个缺陷，MP 马氏距离[6]可以解决，MP 马氏距离通过构造协方差阵的广义逆矩阵$[Cov(\boldsymbol{Y})]^{+}$，避免了协方差阵的行列式值为零时，其逆矩阵$[Cov(\boldsymbol{Y})]^{-1}$不存在的问题，并且在 $\det[Cov(\boldsymbol{Y})] \neq 0$ 时 $[Cov(\boldsymbol{Y})]^{+} = [Cov(\boldsymbol{Y})]^{-1}$。

2.1 谱分解加权矩阵的构造

针对缺陷的第二点和第三点，将协方差的谱分解引入 Hermite 正定矩阵，建立一种多输出情况下基于谱分解加权 MP 马氏距离（SPectral Weighted Moor-Penrose Mahalanobis Distance，SPWMPD）的新重要性测度指标。通过对协方差进行谱分解来得到特征值，根据特征值的大小确定不同输出变量对总体的不同贡献，然后以此构造权矩阵 $\boldsymbol{M}$ 和 $\boldsymbol{N}$。新指标充分考虑多输出变量间的相互关系，使它对每个输出变量都区分对待，此处仅给出构造方法，更多证明参考文献[7]。

由于协方差阵为半正定矩阵，根据对称矩阵的谱分解理论，协方差阵 $Cov(\boldsymbol{Y})$ 的谱分解形式为：

$$Cov(\boldsymbol{Y}) = \lambda_1\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_1^{\mathrm{T}} + \lambda_2\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{e}_2^{\mathrm{T}} + \cdots + \lambda_m\boldsymbol{e}_m\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{T}} \tag{7}$$

其中，λ_i 为 $Cov(\boldsymbol{Y})$ 的第 i 个特征值，$\boldsymbol{e}_i$ 为对应的标准化正交特征向量。

从式(7)可以看出，特征值越大，其对应的特征向量对 $Cov(\boldsymbol{Y})$ 的贡献越大。根据加权范数的定义，$\boldsymbol{M}$ 和 $\boldsymbol{N}$ 权矩阵的扰动性，使 $\boldsymbol{M}$ 与 $Cov(\boldsymbol{Y})$ 有相同的关系，$\boldsymbol{N}$ 与 $Cov(\boldsymbol{Y})$ 成反关系。这样的加权可以矫正一些贡献度较小而被高估的情况，或对贡献度较大而被低估的情况。其构造为：

$$\boldsymbol{M} = \alpha_1\boldsymbol{e}_1\boldsymbol{e}_1^{\mathrm{T}} + \alpha_2\boldsymbol{e}_2\boldsymbol{e}_2^{\mathrm{T}} + \cdots + \alpha_m\boldsymbol{e}_m\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{T}} \tag{8}$$

其中，$\alpha_i > 0 (i = 1,2,\cdots,m)$，对 $\lambda_i + \min\{\lambda_i\} + 1$

标准化后的值为 $\alpha_i = \dfrac{\lambda_i + \min\{\lambda_i\} + 1}{\sum_{i=1}^{n}\lambda_i + \min\{\lambda_i\} + 1}$。

$$\boldsymbol{N} = \beta_1 \boldsymbol{v}_1 \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} + \beta_2 \boldsymbol{v}_2 \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{T}} + \cdots + \beta_m \boldsymbol{v}_m \boldsymbol{v}_m^{\mathrm{T}} \tag{9}$$

其中:$\beta_i > 0 (i = 1,2,\cdots,m)$ 且 β_i 为 α_i 倒数后经标准化的值,即 $\beta_i = \dfrac{1/\alpha_i}{\sum_{i=1}^{n}(1/\alpha_i)}$;$\boldsymbol{v}_i$ 为向量 $\boldsymbol{e}_i$ 中各元素倒数后再归一化得到的向量,即 $\boldsymbol{v}_{ji} = \dfrac{1/\boldsymbol{e}_{ji}}{\sum_{j}^{n}(1/\boldsymbol{e}_{ji})} (j = 1,2,\cdots,m)$。$\alpha_i > 0$, $\beta_i > 0$ 保证了所构造的矩阵为正定矩阵。

通过构造的 $\boldsymbol{M}$ 和 $\boldsymbol{N}$ 矩阵,李寒宇利用加权 Moore-penrose[7] 得到协方差阵 $Cov(\boldsymbol{Y})$ 的加权 $\boldsymbol{MN}$ 逆。

$$\boldsymbol{W}_{MN}^{+} = \boldsymbol{N}^{-\frac{1}{2}}[\boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} Cov(\boldsymbol{Y}) \boldsymbol{N}^{-\frac{1}{2}}]^{+} \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \tag{10}$$

2.2 基于谱分解加权 MP 马氏距离的多输出重要性测度的定义

通过上述构造可以得到谱分解加权 MP 马氏距离 $d^2_{\mathrm{SP-WMP}}[\boldsymbol{Y}, E(\boldsymbol{Y})]$ 为:

$$d^2_{\mathrm{SP-WMP}}[\boldsymbol{Y}, E(\boldsymbol{Y})] = [\boldsymbol{Y} - E(\boldsymbol{Y})] mol(\boldsymbol{W}_{MN}^{+}) [\boldsymbol{Y} - E(\boldsymbol{Y})]^{\mathrm{T}} \tag{11}$$

其中,$\boldsymbol{W}_{MN}^{+}$ 可由式(10)求得,$mol(\boldsymbol{W}_{MN}^{+})$ 表示对矩阵 $\boldsymbol{W}_{MN}^{+}$ 的元素取模运算。

把式(11)代入式(2)的主指标 S_i^m 得到式(12)。

类似于上述指标的情况,可以定义结构系统多输出情况下基于谱分解加权 MP 马氏距离的重要性测度总指标,如式(13)所示。

$$S_i^m = \frac{E\{[E(\boldsymbol{Y}|X_i) - E(\boldsymbol{Y})] mol(\boldsymbol{W}_{MN}^{+}) \times [E(\boldsymbol{Y}|X_i) - E(\boldsymbol{Y})]^{\mathrm{T}}\}}{E\{[\boldsymbol{Y} - E(\boldsymbol{Y})] mol(\boldsymbol{W}_{MN}^{+}) [\boldsymbol{Y} - E(\boldsymbol{Y})]^{\mathrm{T}}\}} \tag{12}$$

$$ST_i^m = 1 - \frac{E\{[E(\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}_{-i}) - E(\boldsymbol{Y})] mol(\boldsymbol{W}_{MN}^{+}) [E(\boldsymbol{Y}|\boldsymbol{X}_{-i}) - E(\boldsymbol{Y})]^{\mathrm{T}}\}}{E\{[\boldsymbol{Y} - E(\boldsymbol{Y})] mol(\boldsymbol{W}_{MN}^{+}) [\boldsymbol{Y} - E(\boldsymbol{Y})]^{\mathrm{T}}\}} \tag{13}$$

与马氏距离一样,ST_i^m 表征 X_i 对系统多输出综合随机取值特征的总体影响程度,包含 X_i 与其他输入随机变量的交互作用。当多输出系统模型的各个输出是可加模型时,有 $S_i^m = ST_i^m$,且有 $\sum S_i^m = 1$ 成立。基于谱分解加权 MP 马氏距离的重要性测度实质是通过对协方差阵进行谱分解,用其得到的特征值来构造权矩阵,并将加权后的协方差阵代替基于 MP 马氏距离重要性测度中的协方差阵。其充分考虑了各个输出之间的相互关系,从而避免了输入变量与输出变量数目相等时,基于马氏距离的重要性测度无法正确识别线性问题中输入变量重要性的局限性,该结论可以通过解析解证明,但由于公式复杂此处不详细介绍。对协方差的谱分解与权矩阵 $\boldsymbol{M}$ 和 $\boldsymbol{N}$ 的构造,可以更显著地体现输出变量之间的重要性。当马氏距离过大估计作用微小变量的贡献时,$\boldsymbol{M}$ 和 $\boldsymbol{N}$ 会弱化此错误影响,反之,当其过小估计作用较大变量的贡献时,$\boldsymbol{M}$ 和 $\boldsymbol{N}$ 会强化输入变量的贡献作用。

在 $m = 1$ 时,基于谱分解 MP 加权马氏距离的多输出重要性测度指标将退化为单输出情况下的基于方差的重要性测度指标。在各个输出相互独立的情况下,多输出下基于谱分解 MP 加权马氏距离的重要性测度指标退化为基于欧氏距离的多输出重要性测度指标。

3 基于多维距离的多输出重要性测度指标的求解

近些年,基于 Smolyak 准则的稀疏网格积分被广泛地应用到数值积分[10-11]、插值[12-13]、微分方程的求解[14],以及随机不确定性的传递[8]中。并且已经证明它可以在一定程度上解决传统数值积分计算量随输入随机变量维数呈指数级增长的问题,因此对高维积分问题具有很好的适用性。稀疏网格积分的具体实现过程简单灵活,采用不同类型一维积分点应对输入随机变量的不同分布类型,通过调整精度水平可以方便地提高积分精度,有效地解决高维系统中的"维度诅咒"问题。因此,把稀疏网格算法应用到基于多维距离的多输出重要性测度指标的求解中。

3.1 稀疏网格积分的基本原理

稀疏网格积分算法的关键是依据 Smolyak 准则确定多维积分点的位置及相应的权重。由 Gauss-Hermite 积分或 Clenshaw-Curits 准则等方法确定第 j 个输入随机变量在一维空间中的积分点 $\boldsymbol{U}_l^{i_j}$ 和权重 $w_l^{i_j}$。则 d 维空间中 k 水平精度下稀疏网格多维积分点的集合 $\boldsymbol{U}_d^k$ 可以由 Smolyak 准则[12,15]选取。

$$\boldsymbol{U}_d^k = \bigcup_{k+1 \leqslant |i| \leqslant q} \boldsymbol{U}_1^{i_1} \otimes \boldsymbol{U}_1^{i_2} \otimes \cdots \otimes \boldsymbol{U}_1^{i_d} \tag{14}$$

其中,符号⊗表示张量计算,$q = k + d$, $|i| = i_1 + i_2 + , \cdots, + i_d$ 为多维指标之和。依据 Smolyak 准

则,集合 $\boldsymbol{U}_d^k$ 中第 l 个积分点 $\boldsymbol{\xi}_l=[\xi_{j_{i_1}}^{i_1},\cdots,\xi_{j_{i_d}}^{i_d}]\in\boldsymbol{U}_d^k$ 的权重 ω_l 可以由式(15)确定。

$$\omega_l=(-1)^{q-|i|}\binom{d-1}{q-|i|}(\omega_{j_{i_1}}^{i_1}\cdots\omega_{j_{i_d}}^{i_d}) \quad (15)$$

则对含有 d 维输入变量 $\boldsymbol{x}=(x_1,x_2,\cdots,x_d)$ 的功能函数 $g(\boldsymbol{x})$ 的积分可以由式(16)求得,并且能够达到 $2k+1$ 阶多项式精度。

$$\int g(\boldsymbol{x})f_X(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x}\approx\sum_{l=1}^{N_d^k}\omega_l g[T^{-1}(\boldsymbol{\xi}_l)]=\sum_{l=1}^{N_d^k}\omega_l g(\boldsymbol{x}_l) \quad (16)$$

其中:$f_X(\boldsymbol{x})$ 为输入变量 $\boldsymbol{X}$ 的联合概率密度函数;N_d^k 表示 k 阶精度 d 维积分点的个数;$T^{-1}(\boldsymbol{\xi}_l)$ 为任意分布的基本变量 $\boldsymbol{X}$ 向积分点 $\boldsymbol{\xi}_l$ 空间变换函数的反函数,在第 l 个配置点 $\boldsymbol{\xi}_l$ 处的 $\boldsymbol{X}$ 值为 $\boldsymbol{x}_l$。

3.2 多维空间距离指标的求解流程

1)求解 $E\{d^2[\boldsymbol{Y},E(\boldsymbol{Y})]\}$,利用稀疏网格算法先求解 $E(\boldsymbol{Y})$ 和 $Cov(\boldsymbol{Y})$,再把 $d^2[\boldsymbol{Y},E(\boldsymbol{Y})]$ 看作新的函数求解其期望。

2)求解 $E_{X_i}\{d^2[E_{X_{\sim i}}(\boldsymbol{Y}|X_i),E(\boldsymbol{Y})]\}$,先固定输入随机变量 X_i 求解 $d^2[E_{X_{\sim i}}(\boldsymbol{Y}|X_i),E(\boldsymbol{Y})]$,然后把它看作关于 X_i 的单变量函数求解。

3)通过 2.1 节的方法构造 $\boldsymbol{W}_{MN}^+$。

4)将以上三个步骤的结果代入式(4)、式(6)、式(12)和式(13),即可求得所提的指标。

求解 $d^2[E_{X_i}(\boldsymbol{Y}|X_i),E(\boldsymbol{Y})]$ 的关键是求解多输出变量的期望 $E(\boldsymbol{Y})$,条件期望 $E(\boldsymbol{Y}|X_i)$ 和协方差 $Cov(Y_j,Y_k)(j,k=1,\cdots,m)$。根据稀疏网格积分算法得出求解公式。

$$E(Y_j)=\int g_j(\boldsymbol{x})f_X(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x}\approx\sum_{l=1}^{N_d^k}\omega_l g_j(\boldsymbol{x}_l) \quad (17)$$

$$E(Y_j|X_i)=\int_{R^{d-1}}g_j(x_i,\boldsymbol{x}_{\sim i})f_{X_{\sim i}}(\boldsymbol{x}_{\sim i})\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\sim i}\approx\sum_{l=1}^{N_{d-1}^k}\omega_l g_j(x_i,\boldsymbol{x}_{\sim i,l}) \quad (18)$$

$$Cov(Y_j,Y_k)=\int[g_j(\boldsymbol{x})-E(Y_j)][g_k(\boldsymbol{x})-E(Y_k)]f_X(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x}\approx\sum_{l=1}^{N_d^k}\omega_l[g_j(\boldsymbol{x}_l)-E(Y_j)][g_k(\boldsymbol{x}_l)-E(Y_k)]$$

其中,$\boldsymbol{x}_{\sim i}=(x_1,\cdots,x_{i-1},x_{i+1},\cdots,x_d)$。

4 算例分析

4.1 数值算例

算例 1:考虑如下多输出情况下的线性输入-输出性能,基于多维距离的多输出重要性测度指标的结果见表 1。

$$\begin{cases}y_1=x_1+9x_2+x_3+x_4\\100y_2=x_1+x_2+5x_3+x_4\end{cases}$$

$$x_1\sim N(0,1),x_2\sim N(0,1),x_3\sim N(0,1),x_4\sim N(0,1)$$

表 1 算例 1 的重要性测度结果

Tab. 1 Results of important measure of example 1

输入	x_1		x_2		x_3		x_4	
测度指标	SGI	MC	SGI	MC	SGI	MC	SGI	MC
ED	0.035 7	0.035 5	0.035 7	0.035 7	0.892 6	0.901 8	0.035 7	0.035 1
MD	0.019 1	0.018 6	0.492 4	0.492 1	0.469 5	0.469 3	0.019 1	0.018 4
SP-WMPD	0.027 6	0.027 5	0.506 1	0.498 6	0.438 7	0.429 8	0.027 6	0.028 1
	SGI		MC					
运算次数	55		$10^5\times10^5\times6+10^5$					
运算时间/s	0.169		67.017					

表 1 中 ED 表示基于欧式距离的多输出重要性测度指标,MD 表示基于马氏距离的多输出重要性测度指标,SP-WMPD 表示基于谱分解加权 MP 马氏距离的重要性测度指标,SGI 表示稀疏网格算法(选取精度 $k=3$ 的多维积分点),MC 表示蒙特卡洛数字模拟法。

本算例中没有输入变量的交叉项,因而属于可加模型,有 $S_i^m=ST_i^m$,且满足 $\sum_{i=1}^{4}S_i^m=1$,所以表 1 只给出了 S_i^m 的结果。由于各输入变量均为互相独立的标准正态变量,因而由输出性能的函数结构可以定性判断 $S_2^m>S_3^m>S_1^m=S_4^m$。

定量计算结果表明,除了基于欧式距离的重要性测度为 $S_3^m>S_2^m=S_1^m=S_4^m$,其余两种指标都得出了与定性分析相同的结论。基于欧氏距离与其余两种指标不同的原因是其没有考虑 y_2 的量纲影响,使输出量间的不同量纲干扰了对多个输出性能综合影响的分析。而马氏距离与谱分解加权 MP

马氏距离考虑了不同量纲的影响和各个输出变量间的相关性,其指标包含的信息更多。工程实际中,需要消除各输出变量间量纲的影响,因而使用基于马氏距离和谱分解加权 MP 马氏距离的多输出重要性测度指标是更加合理的选择。输入变量的重要性测度指标越大表示其对多输出结构系统不确定性影响越大,当需要控制多输出的不确定性时,这些重要输入变量的变异性是需要优先考虑的。

算例 2:考虑如下多输出情况下的非线性输入 – 输出性能,基于空间距离的多输出重要性测度指标的结果见表 2。

$$\begin{cases} y_1 = x_1 + x_2^2 + x_3 \\ y_2 = x_1 + x_2^2 + x_3 \\ y_3 = x_1 + 2x_2^2 + x_3 \end{cases}$$

$$x_1 \sim N(0,1), x_2 \sim N(0,1), x_3 \sim N(0,1)$$

表 2　算例 2 的重要性测度结果

Tab. 2　Results of important measure of example 2

输入	x_1		x_2		x_3	
测度指标	SGI	MC	SGI	MC	SGI	MC
ED	0.166 7	0.160 1	0.666 7	0.676 0	0.166 7	0.165 9
MD						
SP-WMPD	0.171 1	0.170 8	0.657 9	0.651 8	0.171 1	0.173 6
	SGI		MC			
运算次数	51		$10^5 \times 10^5 \times 6 + 10^5$			
运算时间/s	0.148		63.777			

本算例中没有输入变量的交叉项,因而属于可加模型,有 $S_i^m = ST_i^m$,所以表 2 只给出了 S_i^m 的结果。由于各输入变量均为互相独立的标准正态变量,因而由输出性能的函数结构可以定性判断 $S_2^m > S_1^m = S_3^m$。

定量计算结果也表明,除了基于马氏距离的指标不存在以外,其余两种指标都得出了与定性分析相同的结论。基于马氏距离重要性测度不存在是因为输出中 y_1 与 y_2 线性相关,从而导致 $\det[Cov(\boldsymbol{Y})] = 0$ 和 $Cov(\boldsymbol{Y})$ 不可逆。

结果表明基于马氏距离的指标不适用于存在线性相关输出的情况,尽管基于欧式距离的指标和基于谱分解加权 MP 马氏距离的指标都可以用于该例子,但基于欧式距离的指标未能考虑输出的量纲影响和相关性,因而不如基于谱分解加权 MP 马氏距离的指标合理。

4.2　工程算例

算例 3:如图 1 所示单跨两层框架结构,各随机变量的统计分布参数见表 3(其中,M_i 为梁端塑性抵抗矩,F 是图 1 中 F_1)。

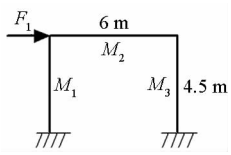


图 1　单层单隔弹塑性框架

Fig. 1　One-story one-bay elastoplastic frames

表 3　单层单隔弹塑性框架的统计特性

Tab. 3　Statistical properties of one-story one-bay elastoplastic frames

	M_1/(kN·m)	M_2/(kN·m)	M_3/(kN·m)	F/kN
均值	200	200	200	100
变异系数	0.1	0.1	0.1	0.25
分布类型	正态	正态	正态	正态

考虑如下四个失效模式的功能函数,其重要性分析结果见表 4。

$$g_1 = 2M_1 + 2M_3 - 4.5S$$

$$g_2 = 2M_1 + M_2 + M_3 - 4.5S$$

$$g_3 = M_1 + M_2 + 2M_3 - 4.5S$$

$$g_4 = M_1 + 2M_2 + M_3 - 4.5S$$

表 4　单层单隔弹塑性框架的重要性测度结果

Tab. 4　Results of important measure of one-story one-bay elastoplastic frames

输入	M_1		M_2		M_3		S	
测度指标	SGI	MC	SGI	MC	SGI	MC	SGI	MC
ED	0.065 5	0.065 2	0.039 3	0.038 0	0.065 5	0.064 9	0.829 6	0.841 0
MD	0.238 2	0.237 1	0.238 2	0.234 9	0.238 2	0.237 0	0.285 3	0.283 6
SP-WMPD	0.064 0	0.064 6	0.026 8	0.026 4	0.057 3	0.058 4	0.852 0	0.839 8
	SGI		MC					
运算次数	55		$10^5 \times 10^5 \times 8 + 10^5$					
运算时间/s	0.201		131.453					

表 4 只给出了主指标 S_i^m 的数据,其结果表明,通过蒙特卡洛数字模拟法与稀疏网格法计算出的结果近似相等。由于本算例的输入变量与输出变量的维数相同并且输入 - 输出之间全为线性关系,所以马氏距离无法给出正确的排序。表 4 中基于欧式距离和谱分解加权 MP 马氏距离的重要性指标得出的输入随机变量不确定性对多输出结构系统不确定性影响的重要性排序是一致的,为 $S_F^m > S_{M_1}^m > S_{M_3}^m > S_{M_2}^m$,但输入随机变量间的相对重要性程度存在一定的差异。总的来说,基于这两种距离所得的重要性测度指标在本工程结构算例未表现出明显差异,对于单跨两层结构失效方面的系统不确定性影响较大的输入随机变量主要是力 F,其次是梁端塑性抵抗矩 M_1 和 M_3,而 M_2 表现出的重要性程度很小。这表明当需要机构系统的多维输出更加稳定时,最有效的措施是减小施加的力 F,并降低梁端塑性抵抗矩 M_1 和 M_3 的变异性。

从算法的效率方面看,上述三个算例中基于欧式距离、马氏距离和谱分解加权 MP 马氏距离的指标都使用了相同数量的样本点。其中蒙特卡洛数字模拟法抽取了 10^5 个样本点,由于需要双层循环计算才可以得到精确的收敛解,所以模型运算次数达到 $10^5 \times 10^5 \times 2n + 10^5$,$n$ 表示输入随机变量个数。稀疏网格积分法所需的模型运算次数分别为 55、51、55。通过两者的计算结果表明,稀疏网格积分法可在保证计算精度的同时大幅度提高效率。也验证了基于 SP-WMPD 的指标可以在不增加额外计算量的同时,增强其分析性能。

5 结论

本文提出了基于谱分解 MP 马氏距离的重要性测度,修正了马氏距离的部分缺陷。其创新点如下:

1)利用广义逆矩阵的优势,使得基于 SP-WMPD 的指标对输出中出现了两个或两个以上线性相关的输出时依然适用,可用来衡量更多工程实际问题中的输入随机变量的变异性对多输出结构系统不确定性的总体影响的重要性程度。

2)将对协方差阵谱分解得到的权重引入马氏距离,修正了因对输出变量间的相互关系考虑不够充分而错误识别重要输入变量的问题。

3)将多维空间重要性测度进行展开分析,给出了所提指标的性质,说明其与基于方差分解的多输出重要性测度指标的关系。

4)在计算效率方面,相比于传统的蒙特卡洛数字模拟法,所使用的基于稀疏网格积分的方法可以在保证精度的同时大幅度提高计算效率,极大地节约了模型运算成本。

参考文献(References)

[1] Bosetti V, Marangoni G, Borgonovo E, et al. Sensitivity to energy technology costs: a multi-model comparison analysis[J]. Energy Policy, 2015, 80: 244 - 263.

[2] Campolongo F, Cariboni J, Saltelli A. An effective screening design for sensitivity analysis of large models [J]. Environmental Modelling & Software, 2007, 22 (10): 1509 - 1518.

[3] Gamboa F, Janon A, Klein T, et al. Sensitivity indices for multivariate outputs [J]. Comptes Rendus Mathematique, 2013, 351(7/8): 307 - 310.

[4] Campbell K, McKay M D, Williams B J. Sensitivity analysis when model outputs are functions [J]. Reliability Engineering & System Safety, 2006, 91(10/11): 1468 - 1472.

[5] 吴密霞, 刘春玲. 多元统计分析[M]. 北京: 科学出版社, 2014.
WU Mixia, LIU Chunling. Multivariate statistical analysis[M]. Beijing: Science Press, 2014. (in Chinese)

[6] 陈欢, 黄德才. 基于广义马氏距离的缺损数据补值算法[J]. 计算机科学, 2011, 38(5): 149 - 153.
CHEN Huan, HUANG Decai. Missing data imputation based on generalized Mahalanobis distance[J]. Computer Science, 2011, 38(5): 149 - 153. (in Chinese)

[7] 李寒宇. 矩阵加权广义逆与加权极分解研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2009.
LI Hanyu. Research on weighted generalized inverses and weighted polar decomposition of matrices [D]. Chongqing: Chongqing University, 2009. (in Chinese)

[8] Xiong F F, Greene S, Chen W, et al. A new sparse grid based method for uncertainty propagation[J]. Structural and Multidisciplinary Optimization, 2010, 41(3): 335 - 349.

[9] Kloer B. Feature extraction using pixel-level and object-level analysis: US 20070116365 A1[P]. 2007.

[10] Chen S, Wang X. Approximate risk analysis using numerical integration on sparse grids[J]. Journal of Mathematical and Computational Science, 2013, 3(4): 929 - 944.

[11] Rodríguez J I, Thompson D C, Ayers P W, et al. Numerical integration of exchange-correlation energies and potentials using transformed sparse grids. [J]. Journal of Chemical Physics, 2008, 128(22): 151 - 155.

[12] Dũng D. Sampling and cubature on sparse grids based on a B-spline quasi-interpolation[J]. Foundations of Computational Mathematics, 2016, 16(5): 1193 - 1240.

[13] Sickel W, Ullrich T. Spline interpolation on sparse grids[J]. Applicable Analysis, 2011, 90(3/4): 337 - 383.

[14] Xiu D B, Hesthaven J S. High-order collocation methods for differential equations with random inputs[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2005, 27(3): 1118 - 1139.

[15] Gerstner T, Griebel M. Numerical integration using sparse grids[J]. Numerical Algorithms, 1998, 18(3/4): 209 - 232.