清華
汇智译丛
QINGHUA
HUIZHI YICONG

全局敏感性分析

GLOBAL SENSITIVITY ANALYSIS

【意】萨特利（A. Saltelli）等⊙著
吴琼莉　丁义明　易　鸣　范清风⊙译



WILEY
清華大學出版社

需要全本请访问 www.ertongbook.com

清華汇智译丛
QINGHUA HUIZHI YICONG

全局敏感性分析

GLOBAL SENSITIVITY ANALYSIS

[意]萨特利(A. Saltelli) [意]拉托(M. Ratto)
[加]安德烈斯(T. Andres) [意]坎波隆戈(F. Campolongo) ⊙著
[意]卡里博里(J. Cariboni) [意]盖特利(D. Gatelli)
[希]赛娜娜(M. Saisana) [意]塔兰托拉(S. Tarantola)

吴琼莉 丁义明 易 鸣 范清风⊙译

清華大學出版社
北 京

Andrea Saltelli, Marco Ratto, Terry Andres, Francesca Campolongo, Jessica Cariboni, Debora Gatelli, Michaela Saisana, Stefano Tarantola

Global Sensitivity Analysis

ISBN:978-0-470-05997-5

Copyright © 2008 by John Wiley & Sons, Inc.

All Rights Reserved. Authorized translation from the English language edition published by John Wiley & Sons Limited/Blackwell Publishing Limited. Responsibility for the accuracy of the translation rests solely with Tsinghua University Press Limited and is not the responsibility of John Wiley & Sons Limited/Blackwell Publishing Limited. No part of this book may be reproduced in any form without the written permission of the original copyright holder, John Wiley & Sons Limited/Blackwell Publishing Limited.

北京市版权局著作权合同登记号　图字:01-2014-3590
本书封面贴有 Wiley 公司防伪标签,无标签者不得销售。
版权所有,侵权必究。侵权举报电话:010-62782989　13701121933

图书在版编目(CIP)数据

全局敏感性分析/(意)萨特利(A. Saltelli)等著;吴琼莉等译.—北京:清华大学出版社,2018
(清华汇智译丛)
书名原文:Global Sensitivity Analysis
ISBN 978-7-302-48555-1

Ⅰ.①全…　Ⅱ.①萨…　②吴…　Ⅲ.①统计数据—统计分析　Ⅳ.①O212.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 239795 号

责任编辑:张　伟
封面设计:汉风唐韵
责任校对:王荣静
责任印制:沈　露
出版发行:清华大学出版社
网　　址:http://www.tup.com.cn, http://www.wqbook.com
地　　址:北京清华大学学研大厦 A 座　　邮　　编:100084
社 总 机:010-62770175　　邮　　购:010-62786544
投稿与读者服务:010-62776969; c-service@tup.tsinghua.edu.cn
质量反馈:010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn
印 装 者:三河市铭诚印务有限公司
经　　销:全国新华书店
开　　本:170mm×230mm　**印　张**:16.5　　**字　　数**:292 千字
版　　次:2018 年 3 月第 1 版　　**印　　次**:2018 年 3 月第1次印刷
定　　价:79.00 元

产品编号:059452-01

前言

Foreword

在建模领域很容易找到海量的学术文章，以及针对一个特别领域的指导丛书，或者数字模拟的手册，但是却很难找到适合所有建模者的广泛意义上的建模手册。不同学科的建模学术圈对于建模理论的发展在很大程度上是相对独立的。这是不是表明，正如认知论学家所说的那样，建模不是一门科学，而是一种工具？换句话说，是不是因为几乎不太可能定义一套标准去把自然或者人造系统解码成一套称之为“模型”的数学规则？

如果建模工作真的具有这样不可同化性而缺乏系统性，也许对于模型的敏感性分析给出一套好的通用的实践方法显得有点太过野心勃勃。进一步讲，如果翻翻现有的文献，在很多场合，“敏感性”一词只被理解为一个特定的输出变量对于一个特定的输入变量的微商（经济学里面所讲的“弹性”）。这一点也不奇怪，作为当代的科研工作者（如本书的作者），也许在微积分方面接受了相当的训练，但是在用蒙特卡罗方法上面却很欠缺，也许研究了很多雅可比矩阵、海森矩阵，却没有好好研究一下俄罗斯轮盘。少数敏感性分析的实践者（大部分来自统计、风险分析、可信度分析）都在积极地用本书所描述的“重要性测量”方法。这些方法都基于这样一种原则：输入因素对于输出的影响是以参考整个输入空间的变化为标准而不是输入空间的某一点。这些方法也渐渐在很多领域的建模原则当中广泛应用（例如，美国的环境保护组织 EPA，2001）。本书的目的在于给学生提供一本简单易懂的手册来实践敏感性分析，阐明敏感性分析如何有助于建立一个更具鲁棒性、更简洁的模型，以及怎样让模型在面对科学的或者技术的拷问时更加经得起推敲。

目录

Contents

第1章 敏感性分析导论 …… 1

1.1 模型与敏感性分析 …… 1

1.1.1 定义 …… 1

1.1.2 模型 …… 2

1.1.3 模型和不确定性 …… 3

1.1.4 如何建立不确定性和敏感性分析 …… 4

1.1.5 对模型质量的影响 …… 8

1.2 敏感性分析的方法和设置简介 …… 9

1.2.1 局部与全局敏感性分析 …… 10

1.2.2 测试模型 …… 11

1.2.3 散点图与导数 …… 11

1.2.4 标准差归一化导数 …… 14

1.2.5 蒙特卡罗和线性回归 …… 15

1.2.6 条件方差:第一种释义 …… 18

1.2.7 条件方差:第二种释义 …… 19

1.2.8 对于式(1.3)中模型的应用 …… 20

1.2.9 第一种设定:参数优先排序 …… 22

1.2.10 非加性模型 …… 23

1.2.11 高阶敏感性系数 …… 26

1.2.12 总阶效应 …… 28

1.2.13 第二种设定:参数固定 …… 29

需要全本请访问 www.ertongbook.com

1.2.14 敏感性分析基本原理 …… 30
1.2.15 组参数的处理 …… 32
1.2.16 其他方法 …… 32
1.2.17 元效应分析 …… 33
1.2.18 蒙特卡罗滤波 …… 34
1.3 非独立输入参数 …… 36
1.4 敏感性分析的可能缺陷 …… 36
1.5 结束语 …… 37
1.6 习题 …… 39
1.7 习题解答 …… 39
1.8 补充习题 …… 43
1.9 补充习题答案 …… 44

第2章 实验设计 …… 46
2.1 导言 …… 46
2.2 对单个参数的依属关系 …… 48
2.3 对单个参数的敏感性分析 …… 51
2.3.1 随机取值 …… 51
2.3.2 分层抽样 …… 52
2.3.3 分层抽样的均值与方差估计 …… 53
2.4 多参数敏感性分析 …… 56
2.4.1 线性模型 …… 57
2.4.2 单次逐个(OAT)取样 …… 58
2.4.3 影响参数个数的限制 …… 61
2.4.4 部分析因抽样 …… 63
2.4.5 拉丁超立方体抽样(LHS) …… 67
2.4.6 多变量分层抽样 …… 71
2.4.7 弱差异序列的准随机抽样 …… 73

2.5 组抽样 …… 78
2.6 习题 …… 85
2.7 习题解答 …… 88

第3章 元效应方法 …… 97
3.1 导言 …… 97
3.2 元效应方法 …… 98
3.3 抽样策略与策略优化 …… 100
3.4 敏感性系数的计算 …… 104
3.5 组参数的计算 …… 108
3.6 元效应(EE)方法步骤 …… 110
3.7 结论 …… 114
3.8 习题 …… 115
3.9 习题解答 …… 117

第4章 基于方差方法 …… 136
4.1 不同设定的不同测试实例 …… 136
4.2 为什么选择方差 …… 137
4.3 方差方法发展史 …… 139
4.4 相互作用效应 …… 141
4.5 总效应 …… 142
4.6 如何计算敏感性系数 …… 144
4.7 FAST 和随机平衡设计 …… 147
4.8 方法应用实例:疾病传染动态模型 …… 149
4.9 额外解释 …… 153
4.10 习题与解答 …… 153

第5章 参数映射和元建模 …… 162
5.1 导言 …… 162
5.2 蒙特卡罗滤波(MCF) …… 163
5.2.1 蒙特卡罗滤波方法植入 …… 164
5.2.2 优缺点分析 …… 166
5.2.3 习题 …… 167
5.2.4 习题解答 …… 168
5.2.5 例子 …… 176
5.3 元建模和高维度模型表述(HDMR) …… 186
5.3.1 HDMR 计算和元模型 …… 187
5.3.2 简单例子 1 …… 196
5.3.3 简单例子 2 …… 199
5.3.4 习题 …… 202
5.3.5 习题解答 …… 202
5.4 结论 …… 206

第6章 敏感性分析:从理论到实践 …… 209
6.1 例子 1:综合指数 …… 209
6.1.1 问题陈述 …… 209
6.1.2 估量各国家环境可持续发展综合指数 …… 210
6.1.3 选择敏感性分析方法 …… 212
6.1.4 敏感性分析的过程及结果 …… 213
6.1.5 结论 …… 221
6.2 例子 2:跳跃在期权定价中的重要性 …… 223
6.2.1 问题提出 …… 223
6.2.2 带跳跃的 Heston 随机波动率模型 …… 225
6.2.3 选择合适的敏感性分析方法 …… 227

6.2.4 敏感性分析的过程及结果 …… 227
6.2.5 结论 …… 230
6.3 例子3:化学反应 …… 231
6.3.1 问题提出 …… 231
6.3.2 间歇式反应器中的热失控分析 …… 231
6.3.3 选择合适的敏感性分析方法 …… 234
6.3.4 敏感性分析的过程及结果 …… 234
6.3.5 结论 …… 237
6.4 例子4:混合的不确定性—敏感性作图 …… 238
6.5 什么时候使用什么方法 …… 239

后 记 …… 243

译后记 …… 245

参考文献 …… 247

第1章
敏感性分析导论

1.1 模型与敏感性分析

什么是模型？敏感性分析考虑什么样的模型输入？在建模过程中，不确定性分析和敏感性分析起到什么作用？它们的作用在于，帮助我们了解不确定性在模型内部传播的主要途径，以及评估其对模型质量的影响。

1.1.1 定义

敏感性分析可定义为研究模型输出的不确定性（数值的或者其他类型的），如何能够追根溯源到模型输入的不确定性（Saltelli et al.，2004）。与敏感性分析相关的是“不确定性分析”，不确定性分析量化评估模型的输出。理想情况下，不确定性分析和敏感性分析应该先后成对进行。

在这种定义下，首先要明确的概念是：什么是“模型”，什么是“输入”，什么是“输出”。这些概念将贯穿本书的始终。

1.1.2 模型

图 1.1 所示的建模框图能帮助我们了解敏感性分析在整个科学过程中的作用。该图引用自生物学家 Robert Rosen (1991)(也可见文献 Saltelli et al.,2000, pp. 3-4)。在 Rosen 的框图左边,是整个“现实世界”,是研究的主体系统。我们有理由相信,这个系统不管是自然的还是人工的,或是被某种规则所驱使运转的,而这种规则,我们可以揭示并为我们所用。因此,我们制定或者假想出模型的一套结

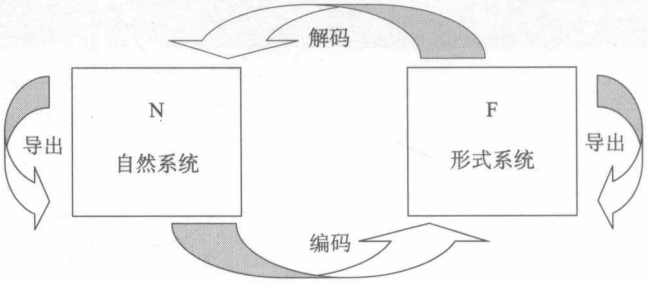

图 1.1 Rosen 模型(1991)

构(图中右边所示)。例如,一种假设的世界上某一物种的生长机制可以在模型中翻译为差分方程。当这一物种以其自己系统规则(也是我们致力于弄明白的规则)持续生长,最后安静地在世界上消失,这一过程可以在差分方程里面用数学算法来解得。Rosen 的直觉假设是,当自然界的物种遵循某种“规则”时,差分方程也是有“规则”的,不管是形式上的,还是数学上的。没有哪种“规则”可以决定自然界的这种假设的规则以什么方式影射到模型中的这种“规则”。在 Rosen 的言论中,当现实世界和模型各自内部相关,模型对现实世界的描述作用是有限的。这种悖论形成的原因是:模型能捕捉到的现实世界是被主观加工过的封闭的内部相互关联的个体,而不是开放的[①]。这也是当考察的现实世界是自然系统的一部分时 Rosen 的观点。然而,经验告诉我们,即使现实世界是一个严格定义的封闭系统,如人工系统,一个人工元器件或者一个机械装置,不同的建模者会有不同的系统描述,这些模型的输出会与相同的观测结果相吻合,但是其结构却不尽相同。

① 当一个模型的作用在于学习一个系统的不可观测部分时,这种现象尤甚。

需要全本请访问 www.ertongbook.com

一个初步接触建模的学生如果对那些显而易见的自然规律的美习以为常，那么他也不得不接受一个不太令人舒服的现实，那就是往往对于同一组数据或者证据有多个模型与之匹配。有学者为这种现象专门造了一个词：equifinality(Beven，1993，2001，也见 Saltelli et al. 2004，pp. 173-178)，这个词的意思是说不同的模型也会有相同的结果。也有另外的说法把这一现象叫作模型的不确定性。

从伽利略时代，科学家们就不得不面对人类大脑在创造从“现实世界”到“模型”的映射这一过程中的局限性。在这种背景下，“规则”这个词可以理解为是一种艰难的简化、分离和辨识的过程，这一过程导致了模型特有的简单和美。

1.1.3 模型和不确定性

使得建模和科学研究比较困难的一个原因就是不确定性。不确定性不是科学方法的偶然事件，而是其实质。①

在模型的不确定性问题上，建模工作者和科学哲学家争论由来已久(Oreskes et al.，1994)。如今，大多数建模工作者会承认一个模型如果从“被证明是真实的”这个角度来讲，是没有办法校验的。更令人信服和正确的说法应该是，一个模型经过了各种扩展性的确证，即通过了各种测试：是否合乎规范，是否内部一致，或者模型在一定程度上具备解释和预测真实世界的能力。

如果模型失效，继而在不同科学团队之间引发争议，这种后果是严重的。② 因为模型的应用是广泛的，而不确定性有可能被很功利性地加以利用。一位荷兰环境科学家(In't Veld，2000)就这样说过，“所有的团体以一种选择性方式处理环境信息，或者进行巧妙的处理”。巧妙设计处理模型的不确定性在一些诸如健康、环境等重要问题上的争议是比较普遍的。

总之，模型是科学方法的一部分，因此也成为认识论争论的主题。后常规科学(PNS，见图 1.2；Funtowicz，Ravetz，1990，1993；Funtowicz 等，1996)提出了一种构造当代科学辩论的方法。

在后常规科学中，要区分三种科学生产模式，取决于系统的不确定性，而且与

① “这是科学的含义。问题及其答案都在不确定性当中混在一起，这个事实也令人苦恼。但是没有办法，你没法隐藏什么，相反，所有的一切将在不确定性当中展开。”(Høeg，1995)。

② 建模信用危机，荷兰 RIVM 实验室(Van der Sluijs，2002)，又见 MacLane(1988)。

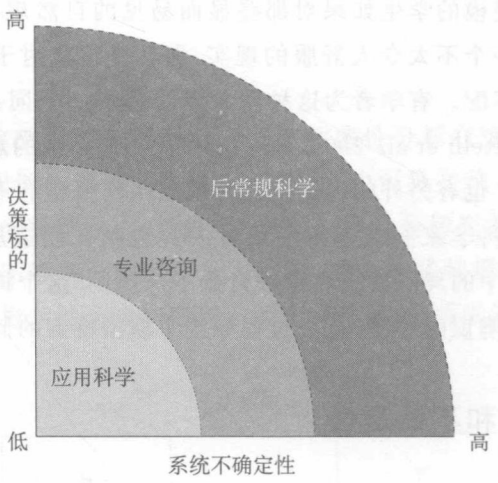

图 1.2　Funtowicz, Ravetz 不确定性/风险图(1990)

风险也有关。

应用该理论到建模中的各种需求和实践有如下几个方面。

● 应用科学:模型为一个封闭的专家团体创建并且仅仅为其所用。例如,这是用来解决一个局限的化学动力学问题的模型。

● 当模型作为"咨询"用途时,更容易被审查。例如,为一个社区内新的道路或桥梁的建设所产生的影响做成本效益分析。

● 在全球变化背景下计算气候敏感性。在这种情形下,属于我们所讲的后常规科学的范畴。科学及其模型为具有冲突的利害关系和信念提供了证据。

像理论科学一样,模型可以给出其谱系以帮助我们判断其品质。这种模型谱系考虑了该模型过去的使用情况,其支持者的状态,同行接受程度等(Van der Sluijs,2002;Craye 等,2005)。在这个谱系中,模型质量与"有目的性的拟合"更密切相关,也就是说,当模型建立时这个特定的目的比模型的内在构成更为重要。

科学与决策相关的产出模式,Funtowicz (2004)中给出了相应的后常规观点。Ravetz (2006) 中对模型作为一种比喻做了讨论。

1.1.4　如何建立不确定性和敏感性分析

如本章开头所提到的,敏感性分析的定义涉及模型本身、模型的输入和输出。

我们现在尝试以模型本质和作用定义模型的输入，以及设置不确定性和敏感性分析。模型可以有如下类型。

(1) 诊断型或预测型的模型。换句话说，要区分这是一个用来理解特定规律的模型，还是一个用来预测在特定规律下的系统行为的模型。模型可以从天马行空的假设游戏(例如，外星智慧是否存在的模型)到被认为是准确和可信的预测系统模型(例如，一家化工厂控制系统)。

(2) 法则驱动或者数据驱动的模型。法则驱动的模型是将对系统有贡献的规律法则综合在一起，以预测其行为。例如，使用 Darcy 和 Fick 定律来理解一种溶质在流动的水中通过多孔介质的运动。数据驱动的模型是将溶质作为信号以获得它的统计性能。像数据驱动模型的倡导者指出的那样，这些模型可以以一种精简的方式建立起来，即用最小的可调参数描述现实(Young 等，1996)。对比之下，法则驱动的模型，通常过参数化，因为它们可能包括更多的相关规律，而这些规律缺乏可用的数据量支持。出于同样的原因，法则驱动的模型可能有更强的能力描述未观察到的情况下的系统，而数据驱动的模型仅限于支持在做估计时所使用的与数据相关联的系统行为。统计模型(如分层或多层模型)是数据驱动的模型另一个例子。

除此之外，也有其他类别的模型[①]。模型输入的定义取决于作为研究对象的特定模型。为了做不确定性及敏感性分析，可以将输入看作可以驱动模型输出的所有变量。

考虑图 1.3 所示的方案。这里有观测值(为简单起见，假定无误差)和一个模型，其参数从观测数据估计。参数估计可以采取不同的方法，通常是通过最小化度量所述模型预测和数据之间的距离，如最小二乘法。在估计步骤结束时，“最佳”的参数值以及它们的误差是已知的。在这一点上，可以认为模型是“真实”的，而参数的不确定性经由模型传播至模型的输出端来做不确定性分析。在这种情况下，所估计的参数成为我们研究的因素。

这种研究的一种方式是通过蒙特卡罗分析来实现的。在此我们考察输入参数的分布函数，这些分布函数往往由估计来获得。例如，可有以下方案。

- 从参数 $\alpha \sim N(\bar{\alpha}, \sigma_\alpha)$ 开始，经过参数估计之后，α 呈正态分布，均值为 $\bar{\alpha}$，标

① 贝尔等，(1988)区分正式(公理)，描述性与规范性模型(代理人应遵循有助于达到目标的规则)，在本书中的例子都是描述性模型。

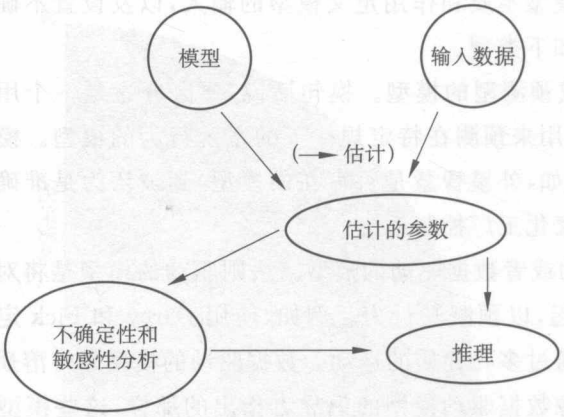

图 1.3　参数自助版本的不确定性和敏感性分析

准差为 σ_α。

● 同样的分布也适用于参数 β 和 γ。虽然逻辑上来讲有点不现实，为了简化考虑，假定参数是相互独立的。这个问题在以后的章节会详细讨论。

● 对于每个参数，从其分布中取样。例如，产生一簇向量 $(\alpha^{(j)},\beta^{(j)},\cdots)$，其中 $j=1,2,\cdots,N$，而 $(\alpha^{(1)},\alpha^{(2)},\cdots,\alpha^{(N)})$ 是依分布 $\alpha\sim N(\bar{\alpha},\sigma_\alpha)$ 的抽样，同样的抽样也适用于其他参数。

$$\begin{bmatrix} \alpha^{(1)} & \beta^{(1)} & \gamma^{(1)} & \cdots \\ \alpha^{(2)} & \beta^{(2)} & \gamma^{(2)} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \alpha^{(N-1)} & \beta^{(N-1)} & \gamma^{(N-1)} & \cdots \\ \alpha^{(N)} & \beta^{(N)} & \gamma^{(N)} & \cdots \end{bmatrix} \tag{1.1}$$

● 对矢量 $(\alpha^{(j)},\beta^{(j)},\cdots)$ 计算(习惯上也称为“运行”)模型输出，因此得到模型输出 Y_j 的 N 个值。[①]

$$\begin{bmatrix} y^{(1)} \\ y^{(2)} \\ \cdots \\ y^{(N-1)} \\ y^{(N)} \end{bmatrix} \tag{1.2}$$

① 注意：此处的模型输出 Y_j 可能与参数估计时的模型输出不一样。

这些步骤构成了不确定性分析的过程。从这些步骤可以计算出模型的平均输出，标准方差，其分布的分位数，置信区间，点描出其分布，等等。显然，这种分析有时被称为“参数自助”[①]，在这里，模型输入是模型的参数。这种不确定性分析之后再进行敏感性分析，以确定哪些输入参数是更重要的，能更加影响模型输出的不确定性。在这里简略这一步是为了继续关于模型输入的探讨。

注意：为了刚刚讲的不确定性分析，我们认为相关的输入只有估计的参数。其他的模型输入信息均被忽略不计，例如，观测数据，物理或数学常数，内部模型的变量（如网格点的数量，如果模型需要一个网格的话），也就是说，我们不考虑它们的变化对模型输出造成的变化。

在图 1.4 中，我们做了一个不一样的不确定性分析，对观测值采样，而不是参数。此时只有有限的观测值，而我们都知道，观测值不同的子集可能都会使我们尝试一个不同的模型去拟合数据。为了对数据进行公平的处理，我们所能做的是选择观测值的一个子集，基于这些数据和预先建立的模型选择准则选择一个模型，使用相同的采样数据估计相应的参数，运行模型来计算 Y_j。我们采取替换采样，然后重复这个过程，识别潜在的不同的（或者是相同的）模型，参数估计（如果模型是不同的，参数个数与之前的可能有不同），如此反复总共 N 次，直到我们得到不确定性分析的采样。这种方法可以被称为“自助建模过程”（Chatfield，1993）。

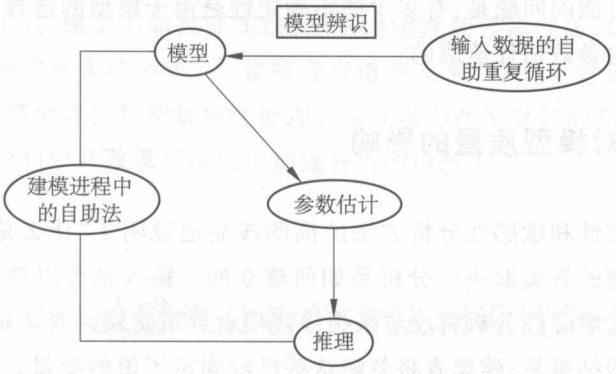

图 1.4 “自助建模过程”（Chatfield，1993）

① 自助是重复多次替换采样的过程。例如，如果我们想估计三个 Bingo 游戏片的和，可以通过从 Bingo 袋子中随机抽取三个，计算它们的平均值，然后把游戏片放回袋子再抽。当抽取次数足够大时平均和可以计算出来，这种策略被称为 Bingo 游戏片自助法。

这种不确定性分析的输入已变成自助重复数据，因为我们假定所有其他步骤（从模型选择到参数估计）是自动完成的，因此没有增加模型输出的变化。

图 1.5 中比较了一套合理的模型与数据。利用贝叶斯分析，我们可以得到模型后验概率以及相关参数的分布（Saltelli 等，2004）。一旦模型的更新和参数估计完成，就可以得到一个平均模型用于不确定性分析。

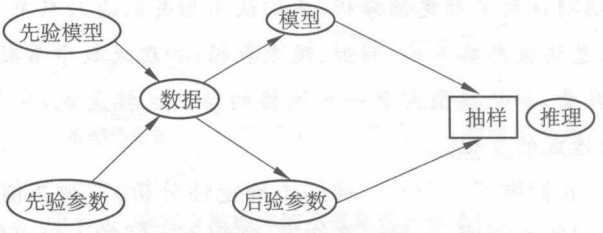

图 1.5　贝叶斯模型平均

这个过程是这样实现的：先根据模型和参数的分布来抽样，在系统中传播不确定性，从而产生一个模型输出 Y_j。这个过程称为贝叶斯模型平均[①]，在这种情况下，敏感性分析的输入是模型和参数，更精确地讲，是不同的模型表示和不同的参数概率分布。在 Monte Carlo 框架下，触发变量将被采样，以根据后验概率选择模型，同时参数也将被采样，模型输出也将被确定。敏感性分析可以在这一点上执行。然而一个可能的问题是：有多少的不确定性是由于模型的选择造成的，有多少不确定性又是由参数估计造成的？

1.1.5　对模型质量的影响

以上不确定性和敏感性分析方法的插图浅显地说明了“什么是敏感性分析的输入”，这一问题的答案取决于分析是如何建立的。输入是可以变化的，以研究其对输出的影响。敏感性分析将反过来指导建模者弄清楚输入对于输出的相对重要性。一个明显的结果是，建模者将忽略这些已经固定了值的变量。当然，这对建模者来说是一种危险的做法，作为一个被视为无影响的变量而固定其值会在稍后的阶段影响分析结果。例如，建模者不幸后验发现网格尺寸太大，网格点的数目对模

① 这种方法详见 Kass，Raftery（1995），Hoeting 等（1999）。相关敏感性问题见 Saltelli 等（2004，pp. 151-192）。

需要全本请访问 www.ertongbook.com