针对具有非独立变量的函数的活跃子空间方法和基于导数的 Shapley 效应

M. Lamboni [1a,b], S. Kucherenko[c]

[a]圭亚那大学，*DFR-ST* 系，法属圭亚那卡宴 *97346*，法国[b] *228-Espace-Dev* 联合研究单位，圭亚那大学、留尼汪大学、法国国家可持续发展研究院、蒙彼利埃大学，法国。[c] 伦敦帝国学院，英国

arXiv:2601.04132v1 [math.NA] 7 Jan 2026

摘要

影响不确定性估计的低维子空间通常用输入变量的线性组合来描述，从而得到活跃变量。本文扩展了基于导数的活跃子空间方法和基于导数的 Shapley 效应，使其能够处理具有非独立变量的函数，并引入了基于敏感度的活跃子空间。基于导数的子空间方法关注函数呈现显著变化的方向，而基于敏感度的子空间方法则旨在寻找一个精简的活跃变量集，以降低函数的方差。我们利用近期关于非独立变量函数梯度的研究成果，提出了理论结果；同时，通过采用梯度的最优计算，构建了实用方案。这些计算具有与维数无关的偏差上界，并达到参数收敛速率。模拟结果表明，基于导数和基于敏感度的活跃子空间方法的相对表现会因函数不同而有所差异。

关键词： 活跃子空间、相关变量、无导数方法、基于导数的全局敏感性度量、Shapley效应**数学主题分类**：49Q12,26D10, 65C05, 65C20.

1. 引言

全局敏感性分析（SA）（例如，适用于独立变量的 [1, 2, 3, 4, 5, 6] 以及适用于相关变量的 [7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14] ）有助于确定哪些模型输入会显著影响输出。当输入变量相互独立时，这种分析用于在经典坐标系中选择活跃子空间。传统的基于导数的活跃子空间方法（[15, 16, 17, 18]）旨在确定一组较少的方向或一个新基底，使函数在其中表现出显著变化。这些方向通常对应于对称

[1]通讯作者：matieyendou.lamboni[at]gmail.com 或 [at]univ-guyane.fr；20年1月7日 26

正定矩阵的特征向量，这些矩阵根据模型输入和输出定义。这类方法通常用于低维函数近似，因为它们依赖于精简的活跃变量集。人们已探索了这些方法的扩展形式，包括涉及高斯随机向量的情形 [19] 以及涉及旋转和相关变量的模型 [20]。

基于导数（Db）的活跃子空间和 Db-Shapley效应（[14]）依赖于函数的梯度。对于在非独立变量的随机向量上进行评估的确定性函数， [21, 22], 中给出了梯度的定义和计算，说明了一阶偏导数与一般意义下梯度之间的差异。事实上，在微分几何中，梯度的定义需要一个张量度量，通常是对称度量（[23, 24, 25]），从而产生许多可能性。对于相关变量，由于第一基本形式， [21] 中推导出了一个张量度量。事实证明，独立变量的张量度量是单位矩阵，从而得到函数的通常梯度，即 ∇f。因此，通常的 Db-活跃子空间和 Db-Shapley效应非常适用于具有独立变量的函数，因为这类方法依赖于∇f。

为澄清这一点并突出我们工作的一个关键动机，考虑函数 $f_1(x_1, x_2) := x_1$, 其中（x_1, x_2）是随机向量（X_1, X_2）的一个样本点，该随机向量服从高斯分布，方差为 $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = 1$ ，相关系数为 ρ。可以看出，通常的梯度 $\nabla f_1 = [1, 0]^T$ 未能考虑两个输入之间的依赖结构。使用 $\nabla f_1 = [1, 0]^T$将得到第一个活跃方向 $\mathbf{w}_1 := [1, 0]^T$，该方向与第一个典范欧几里得方向重合。类似地，基于导数的 Shapley 值为 $\phi_1 =1$, $\phi_2 = 0$ （见[14]），这意味着 X_2 并不重要。当 $|\rho| > 0$时，不应期待得到这样的结果，尤其是在极端情况下 $\rho = \pm 1$ （详情请参见第 6.1 节）。作为一个说明性示例，考虑函数

$$f_1(x_1, \ldots, x_d) := \prod_{k=1}^{d} x_k,$$

针对 d 个相互独立的标准高斯变量进行评估。在这种情况下，所有输入变量都是活跃变量。因此，无法通过 SA 实现降维，基于导数的活跃子空间方法同样无法识别出精简的活跃变量集。这凸显了开发一种新的活跃子空间方法的必要性，它能够

- 能够识别出一个精简的活跃变量集，即使对于非光滑函数也是如此；

- 当活跃方向与 $\mathbb{R}^d$的典范欧几里得基重合时，能够将基于方差的最具影响力变量识别为活跃变量；
- 补充了现有的 Db 活跃子空间方法及本文提出的扩展方法。

本文主要有两项贡献。首先，我们通过纳入能够刻画依赖结构的梯度信息，将 Db 活跃方法和 Db-Shapley效应扩展到适用于相关变量的函数。其次，我们提出了新颖的基于敏感度的子空间方法，用于识别能够有效降低输出方差的精简活跃变量集合。对于典范欧几里得活跃方向，这些方法能够找出基于方差的最具影响力变量。

本文的组织结构如下：第 2 节介绍敏感性分析中已知的基于导数的方法，以及在非独立变量处求值的函数的梯度。第 3 节利用近期关于非独立变量函数梯度及其最优计算的研究进展（[21, 22]），将 Db 活跃子空间方法扩展到非独立变量的情形。我们进一步确立了用于识别活跃变量的矩阵估计量的关键性质，包括无维数依赖偏差和参数收敛速率（即$\mathcal{O}(d^2N^{-1})$），其中 N 为样本量。第 4 节介绍基于敏感度的活跃子空间方法及其性质，并利用总敏感度泛函；第 5 节讨论非独立变量情形下的 Db-Shapley效应。第 6 节使用不同的测试函数，将这些新方法与现有方法进行比较。比较 Db-活跃子空间与基于敏感度的活跃子空间的模拟研究表明，两种方法的相对表现因函数而异；具体取决于所考察的函数，每种方法都可能表现更优、相当或较差。第 7 节总结全文。

2. 预备知识

为了涵盖一大类函数 $f\colon\ \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$，且满足 $d \in \mathbb{N} \setminus 0$，我们的分析需要弱可微性的概念 [26, 27]。

定义 1. *([26, 27])* 考虑测试函数集合 $\mathcal{C}_c^\infty$。对于任意 $j \in\{1,\dots,d\}$，令 $h_j(\cdot, \mathbf{x}_{\sim j})\colon \Omega_j \subseteq \mathbb{R} \to \mathbb{R}$。

如果存在一个局部可积函数 h_j，使得对于所有 $\phi \in \mathcal{C}_c^\infty$，则称函数 f 关于 x_j 弱偏可微，

$$\int_{\Omega_j} f(\mathbf{x})\phi'(x_j)\,dx_j = -\int_{\Omega_j} h_j(x_j, \mathbf{x}_{\sim j})\phi(x_j)\,dx_j\,,$$

其中 ϕ' 是 ϕ 的导数。

为确保函数梯度的存在，假设

假设 1 (A1)。 f关于 x_j, $j = 1, \ldots, d$弱可微。

2.1. 全局敏感性分析与基于导数的全局敏感性度量

当输入变量 $\mathbf{X} := (X_1, \ldots, X_d)$ 相互独立时，考虑如下的一阶和总敏感度泛函（[28, 29]）

$$f_j^{fo}(X_j) := \mathbb{E}\left[f(\mathbf{X})|X_j\right] - \mathbb{E}\left[f(\mathbf{X})\right]; \qquad f_j^{tot}(\mathbf{X}) := f(\mathbf{X}) - \mathbb{E}\left[f(\mathbf{X})|\mathbf{X}_{\sim j}\right],$$

分别给出。Sobol'主效应指数和总效应指数是此类敏感性泛函的方差除以模型方差所得的值，即

$$S_j := \frac{\mathbb{V}\left[f_j^{fo}(X_j)\right]}{\mathbb{V}\left[f(\mathbf{X})\right]}; \qquad S_{T_j} := \frac{\mathbb{V}\left[f_j^{tot}(\mathbf{X})\right]}{\mathbb{V}\left[f(\mathbf{X})\right]}.$$

请注意，Sobol'指数依赖于 L_2-范数。采用 L_1-范数可得到基于绝对值的敏感性指数（见 [12]）

$$S_j^a := \frac{\mathbb{E}\left[\left|f_j^{fo}(X_j)\right|\right]}{\mathbb{E}\left[|f(\mathbf{X}) - \mathbb{E}\left[f(\mathbf{X})\right]|\right]}; \qquad S_{T_j}^a := \frac{\mathbb{E}\left[|f_j^{tot}(\mathbf{X})|\right]}{\mathbb{E}\left[|f(\mathbf{X}) - \mathbb{E}\left[f(\mathbf{X})\right]|\right]},$$

它们是基于核的敏感性指数的特例（见 [12]）。

对于连续变量，记 $\mathbf{X}'$ 为 $\mathbf{X}$ 的一个独立同分布副本，并记 ρ_j 为 X_j 的密度函数。当偏导数存在时，敏感性泛函的基于导数的表达式为（[6]）

$$f_j^{fo}(X_j) = \mathbb{E}_{\mathbf{X}'}\left[\frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{X}')\frac{F_j(X_j') - \mathbb{1}_{X_j' \geq X_j}}{\rho_j(X_j')}\right],$$

$$f_j^{tot}(\mathbf{X}) = \mathbb{E}_{\mathbf{X}'}\left[\frac{\partial f}{\partial x_j}(X_j', \mathbf{X}_{\sim j})\frac{F_j(X_j') - \mathbb{1}_{X_j' \geq X_j}}{\rho_j(X_j')}\right],$$

由此可利用导数定义 Sobol'指数和基于绝对值的指数。事实上， [6] 中证明了

$$S_j = \frac{1}{\mathbb{V}\left[f(\mathbf{X})\right]}\mathbb{E}\left[\frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{X})\frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{X}')\frac{F_j\left(\min(X_j, X_j')\right) - F_j(X_j)F_j(X_j')}{\rho_j(X_j)\rho_j(X_j')}\right],$$

$$S_{T_j} = \frac{1}{\mathbb{V}\left[f(\mathbf{X})\right]}\mathbb{E}\left[\frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{X})\frac{\partial f}{\partial x_j}(X_j', \mathbf{X}_{\sim j})\frac{F_j\left(\min(X_j, X_j')\right) - F_j(X_j)F_j(X_j')}{\rho_j(X_j)\rho_j(X_j')}\right].$$

基于导数的全局敏感性度量（DGSM）（[3, 4, 5, 6, 30, 31, 32]）在计算上比上述 Sobol'指数更具优势，而且这类测度为 Sobol'指数和基于绝对值的指数提供了上界。输入 L_2的 - 基于导数的全局敏感性度量定义如下（ X_j ）： ([3, 32]) ：

$$\nu_j := \mathbb{E}\left[\left(\frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{X})\right)^2\right],$$

而 L_1型 DGSM X_j 可表示为（[31]）

$$\mu_j^* := \mathbb{E}\left[\left|\frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{X})\right|\right].$$

基于此类测度， S_{T_j} 的最优上界已在[3, 4, 5] 中针对某些分布函数给出。对于输入 X_j的任意分布函数 F_j ， 上界为

$$S_j \leq S_{T_j} \leq \min\left\{4\left[\sup_{x\in\Omega_j}\frac{F_j(x)\left(1-F_j(x)\right)}{\rho_j(x)}\right]^2, \frac{1}{2}\sup_{x\in\Omega_j}\frac{F_j(x)\left(1-F_j(x)\right)}{\left[\rho_j(x)\right]^2}\right\}\frac{\nu_j}{\mathbb{V}\left[f(\mathbf{X})\right]}.$$

值得注意的是， [5] 中推导出的第一个上界改进了4 [中给出的常数{sup}$_{x\in\Omega}\min(F_j(x)\ 1-F_j(x))\frac{1}{\rho_j(x)}]^2$。第三个上界在 [6],中推导，其中还证明了对于 S_{T_j} ， 最优上界对所有分布普遍成立:

$$S_{T_j} \leq UB_j := \frac{1}{2\mathbb{V}\left[f(\mathbf{X})\right]}\mathbb{E}\left[\left(\frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{X})\right)^2\frac{F_j(X_j)\left(1-F_j(X_j)\right)}{\left[\rho_j(X_j)\right]^2}\right].$$

注意，对于函数 $f_0(\mathbf{x}) := \prod_{j=1}^d (F_j(x_j) - 0.5)$，等式成立。

对于基于绝对值的指数，我们可以证明

$$S_j^a \leq S_{T_j}^a \leq UB_j^a := \frac{2}{\mathbb{E}\left[|f(\mathbf{X}) - \mathbb{E}\left[f(\mathbf{X})\right]|\right]}\mathbb{E}\left[\left|\frac{\partial f}{\partial x_j}(\mathbf{X})\right|\frac{F_j(X_j)\left(1-F_j(X_j)\right)}{\rho_j(X_j)}\right],$$

and

$$UB_j^a \leq \frac{2\mu_j^*}{\mathbb{E}\left[|f(\mathbf{X}) - \mathbb{E}\left[f(\mathbf{X})\right]|\right]}\sup_{x\in\Omega_j}\frac{F_j(x)\left(1-F_j(x)\right)}{\rho_j(x)},$$

据我们所知，这些是新的研究成果。

对于非独立变量，已有相关的依赖敏感性指标（dSIs）和依赖导数全局敏感性度量（dDGDMS）[11, 12, 13]（另见第4节）。此类指标依赖于依赖模型，而依赖模型能够准确描述非独立变量的依赖结构。尽管一阶依赖敏感性指标始终有对应总指标的上界，而总指标又有Db上界，但主效应指标与交互作用指标之和可能超过一。

2.2. 非独立变量函数的梯度

[34, 35, 11, 13, 36, 37, 12] 中证明了，任意非独立变量 $\mathbf{X}$ 都可以建模如下：

$$\begin{aligned}\mathbf{X}_{\sim j} &\overset{d}{=} r_j\left(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j}\right) \\ &= \left[r_{1,j}\left(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j}\right), \ldots, r_{j-1,j}\left(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j}\right), r_{j+1,j}\left(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j}\right) \ldots, r_{d,j}\left(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j}\right)\right]^T ,\end{aligned} \tag{1}$$

其中 $r_j: \ \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{d-1}$; X_j 且 $\mathbf{Z}_{\sim j} := (Z_1, \ldots, Z_{j-1}, Z_{j+1}, \ldots Z_d)$ 相互独立。此外，值得注意的是，对于连续变量，r_j 关于 $\mathbf{Z}_{\sim j}$ 可逆，并且有

$$\mathbf{Z}_{\sim j} = r_j^{-1}\left(\mathbf{X}_{\sim j} \,|\, X_j\right) .$$

对于 $\mathbf{X}$ 的一个样本值 $\mathbf{x}$，考虑映射 $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}$。$\mathbf{x}$ 关于 x_j 的依赖偏导数为 ([11, 21])

$$J^{(j)}\left(\mathbf{x}\right) := \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial x_j} = \left[\frac{\partial r_{1,j}}{\partial x_j} \ \ldots \underbrace{1}_{j^{\text{th}} \text{ position}} \ldots \ \frac{\partial r_{d,j}}{\partial x_j}\right]^T \left(x_j, \, r_j^{-1}\left(\mathbf{x}_{\sim j} | x_j\right)\right) ,$$

依赖雅可比矩阵为 ([21])

$$J^d\left(\mathbf{x}\right) := \left[J^{(1)}\left(\mathbf{x}\right), \ldots, J^{(d)}\left(\mathbf{x}\right)\right] .$$

此外，张量度量为

$$G(\mathbf{x}) := J^d\left(\mathbf{x}\right)^T J^d\left(\mathbf{x}\right) , \tag{2}$$

以及具有非独立变量的 f 的梯度等于（[21, 22]）

$$grad(f)(\mathbf{x}) := G^{-1}(\mathbf{x}) \nabla f(\mathbf{x}) , \tag{3}$$

其中 $G^{-1}(\mathbf{x})$ 是 $G(\mathbf{x})$ 的广义逆。注意，对于独立变量，$G(\mathbf{x})$ 化为单位矩阵，从而得到 $grad(f)(\mathbf{x}) = \nabla f(\mathbf{x})$。对于

高斯分布函数，以下命题给出了梯度的一般表达式。

命题 1. 考虑一个函数 f，其在$\mathbf{X} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ 处取值，其中 $\boldsymbol{\mu}$ 为期望，Σ 为协方差矩阵。若（*A1*）成立，则，

$$G = \left(diag\left(\Sigma_{1,1}, \ldots, \Sigma_{d,d}\right)\right)^{-1} \Sigma^T \Sigma \left(diag\left(\Sigma_{1,1}, \ldots, \Sigma_{d,d}\right)\right)^{-1},$$

$$grad(f)(\mathbf{x}) = diag\left(\Sigma_{1,1}, \ldots, \Sigma_{d,d}\right) \Sigma^{-1} \Sigma^{-1^T} diag\left(\Sigma_{1,1}, \ldots, \Sigma_{d,d}\right) \nabla f(\mathbf{x}).$$

证明。对于高斯分布，依赖雅可比矩阵在 *[22]* 中推导为 $J^d = \left[J^{(1)}, \ldots, J^{(d)}\right] = \left[\frac{\Sigma_{\bullet,1}}{\Sigma_{1\,1}}, , \ldots, \frac{\Sigma_{\bullet,d}}{\Sigma_d}, \right]$，这等于 $J^d = \Sigma(diag(\Sigma_{1,1}, \ldots, \Sigma_{d,d}))^{-1}$。因此，$G = (diag(\Sigma_{1,1}, \ldots, \Sigma_{d,d}))^{-1} \Sigma^T \Sigma (diag(\Sigma_{1,1}, \ldots, \Sigma_{d,d}))^{-1}$，结论成立。□

注释 1. 当 Σ 不满秩时，仍可通过考虑由相关变量组成的 $K > 1$ 独立随机向量来定义 G 和 $grad(f)$（更多详情见*[21]*）。

注释 2. 显然，选择其他输入依赖结构或张量度量，只要这些依赖关系有意义，就会得到不同的梯度。此外，除了使用依赖梯度 $grad(f)$，还可以使用 f 关于 X_j 的偏导数，以反映输入的依赖结构（*[11]*），即

$$d\nabla f(\mathbf{X}) := \left(J^d(\mathbf{X})\right)^T \nabla f(\mathbf{X}).$$

本文将重点关注 $grad(f)$，它给出了函数显著变化的方向，而不是 $d\nabla f(\mathbf{X})$。

3. 非独立变量下基于导数的活跃子空间

传统的活跃子空间方法 [15, 16, 17] 旨在识别一个正交基（即 $\mathbf{w}_1$、…、$\mathbf{w}_d$），使函数 $f\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 呈现显著变化。这些方法通过构造矩阵来利用梯度信息

$$C := \mathbb{E}\left[\nabla f(\mathbf{X}) \ (\nabla f(\mathbf{X}))^T\right],$$

以及矩阵 C 的特征向量 $\mathbf{w}_k$、$k = 1$、…、d，它们表示为 $C\mathbf{w}_k = \lambda_k \mathbf{w}_k$，其中 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq$、…、$\lambda_d$ 是矩阵 C 的特征值。随后，利用主特征向量定义一个低维活跃子空间，以近似高维函数。

对于相关变量，f 的依赖梯度（记为 $grad(f)$）不同于传统梯度 ∇f。

假设 2 (A2)。 该梯度具有有限的二阶矩。

在假设 (A2) 下，考虑对称矩阵：

$$C' := \mathbb{E}\left[grad(f)(\mathbf{X})\,(grad(f)(\mathbf{X}))^T\right] = \mathbb{E}\left[G^{-1}(\mathbf{X})\nabla f(\mathbf{X})\,(\nabla f(\mathbf{X}))^T\,G^{-1}(\mathbf{X})\right]. \tag{4}$$

考虑到对称矩阵的对角化过程，定义特征向量 $\mathbf{w}'_k, k = 1, \ldots, d$ 为 $C'\mathbf{w}'_k = \lambda'_k\mathbf{w}'_k$，其中 $\lambda'_1 \geq \lambda'_2 \geq \ldots \lambda'_d$ 为 C'的特征值。利用线性代数运算，我们可以得到

$$\lambda'_k := (\mathbf{w}'_k)^T C'\mathbf{w}'_k = \mathbb{E}\left[\left\{(grad(f)(\mathbf{X}))^T\,\mathbf{w}'_k\right\}^2\right].$$

给定 $\ell \in \{1, \ldots, d\}$，考虑矩阵 $\mathcal{W}_\ell \in \mathbb{R}^{d\times\ell}$，其列为与 $\lambda'_1 \geq \lambda'_2 \geq \ldots \geq \lambda'_\ell$相关的前 ℓ 个特征向量；再考虑 $\mathcal{W}_{\sim\ell} \in \mathbb{R}^{d\times(d-\ell)}$，其列为 $\mathbf{w}'_k, k = \ell+1, \ldots, d$。利用 $\mathcal{W} := [\mathcal{W}_\ell\ \mathcal{W}_{\sim\ell}]$，$\mathbf{r} := \mathcal{W}_{\sim\ell}^T\mathbf{x}$，并且已知 $\mathcal{W}\mathcal{W}^T = \mathcal{I}$，其中 $\mathcal{I}$ 为单位矩阵，我们可以证明

$$f(\mathbf{x}) = f\left(\mathcal{W}_\ell\mathcal{W}_\ell^T\mathbf{x} + \mathcal{W}_{\sim\ell}\mathbf{r}\right).$$

因此，我们能够通过以下条件期望来近似 f ：

$$f(\mathbf{x}) \approx \widetilde{f}_a(\mathbf{x}) := \mathbb{E}\left[f\left(\mathcal{W}_\ell\mathcal{W}_\ell^T\mathbf{x} + \mathcal{W}_{\sim\ell}\mathbf{R}\right)\,|\mathcal{W}_\ell^T\mathbf{X} = \mathcal{W}_\ell^T\mathbf{x}\right], \tag{5}$$

其中 $\mathbf{R} := \mathcal{W}_{\sim\ell}^T\mathbf{X}$。

3.1. 基于导数的全局敏感性度量与活跃得分

本节介绍针对非独立变量函数的两种新型基于导数的全局敏感性度量，分别使用 L_1 范数或 L_2 范数。为此，定义

$$\mathbf{e}_k := \left[\underbrace{0, \ldots, 0,\ 1\ ,0, \ldots, 0}_{k^{\text{th}}\,\text{position}}\right]^T, \quad k = 1, \ldots, d,$$

并考虑特征向量 $\mathbf{w}'_k := \left[w'_{1,k}, \ldots, w'_{d,k}\right]^T$。

定义 2。考虑非独立变量的随机向量 $\mathbf{X}$，并假设 *(A1)-(A2)* 成立。输入 X_j 的基于导数的全局敏感性度量为

$$d\nu_j^* := \mathbb{E}\left[\left\{(grad(f)(\mathbf{X}))^T\,\mathbf{e}_j\right\}^2\right], \qquad d\mu_j^* := \mathbb{E}\left[\left|(grad(f)(\mathbf{X}))^T\,\mathbf{e}_j\right|\right].$$

此外， X_j 的活跃得分为

$$d\alpha_j(m) := \sum_{k=1}^{m} \lambda'_k \left(w'_{j,k}\right)^2, \quad m \in \{1, \ldots, d\},$$

引理 1. 在 *(A1)-(A2)* 条件下，我们有

$$d\alpha_j(d) = d\nu_j^*; \qquad d\nu_j^* \le d\alpha_j(m) + \lambda'_{m+1}.$$

证明. 第一个结果可直接由主成分分析中使用的标准线性代数论证得出。详细证明与以下文献中的证明类似：*[16]*。□

注 3. 对于独立变量，上述活跃得分和基于导数的全局敏感性度量可归结为通常的重要性度量，即 *([3, 32, 31])*

$$d\nu_j^* := \nu_j; \qquad d\mu_j^* = \mu_j^*.$$

对于 *[16]*，中引入的活跃得分（即 $\alpha_k(m)$），我们有

$$d\alpha_k(m) = \alpha_k(m),$$

并且以下关系成立：

$$S_{T_j} \le C_1 \frac{\nu_j}{\mathbb{V}[f(\mathbf{X})]} \le C_1 \frac{\alpha_j(m) + \lambda_{m+1}}{\mathbb{V}[f(\mathbf{X})]},$$

其中 $C_1 := \min\left\{4\left[\sup_{x\in\Omega_j} \frac{F_j(x)(1-F_j(x))\,\rho_j(x)}{}\right]^2, \frac{1}{}\,2\sup_{x\in\Omega_j} \frac{F_j(x)(1-F_j(x))}{}\right\}[\rho_j(x)]$。因此，界 $C_1 \frac{\alpha_j(m+\lambda_{m+1})(\mathbf{X})}{\mathbb{V}[f]}$ 的精度较低。

3.2. 活跃子空间和基于导数的全局敏感性度量的计算

活跃子空间及其得分的推导依赖于 C' 及其特征值和特征向量。本节首先介绍 C'的估计方法，随后计算特征值、特征向量和活跃得分。我们将采用 [22] 中提出的最优且高效的梯度估计量，推导 C'的估计量。

形式上，考虑相互独立的随机变量 V_k，其满足 $k = 1$、……、d，且关于零具有对称分布（例如 $V_k \sim \mathcal{U}(-\xi, \xi)$ 或 $V_k \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$），方差为 σ^2。定义 $\mathrm{V} := (V_1, \ldots, V_d)$，并将 $\{\mathrm{V}_i := (V_{i,1}, \ldots, V_{i,d})\}_{i=1}^N$ 记为 V 的一个样本，该样本与由 $\{\mathrm{X}_i := (X_{i,1}, \ldots, X_{i,d})\}_{i=1}^N$ 给出的 X 的样本相互独立。

使用 [22], 中给出的梯度估计量，即

$$\widehat{grad(f)}(\mathbf{x}) := \frac{1}{2Nh\sigma^2} G^{-1}(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^{N} \left[f\left(\mathbf{x} + h\mathbf{V}_i\right) - f\left(\mathbf{x} - h\mathbf{V}_i\right) \right] \mathbf{V}_i \,,$$

C' 的插件估计量推导如下:

$$\widehat{C'}_p := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \widehat{grad(f)}(\mathbf{X}_i) \left(\widehat{grad(f)}(\mathbf{X}_i) \right)^T .$$

这种估计量至少需要 $m := dN$ 次模型运行。通常使用 $m \propto d^2 N$ 次模型运行即可获得稳定的估计结果（参见 [22]中提供的均方误差）。在高维情况下，我们需要一个 C' 的替代估计量，以减少对梯度估计量取平方所引入的偏差。此外，我们将考虑 $\mathbb{R}^d$上的一类球面分布，即 $\mathbf{V} \sim \mathcal{S}_d(\mathbb{R}^d)$。注意，这类分布关于零对称（即 $\mathbb{E}[V_k] = 0$， $\mathbb{E}[V_k^2] = \sigma^2$），其性质可见[38, 39, 40]。除此之外，$\mathbf{V}$ 的一个随机表示为 $\mathbf{V} = R\mathbf{U}$，其中 $R > 0$ 是一个正随机变量，并且与单位球上的均匀分布随机向量 $\mathbf{U}$ 相互独立。为给出 C'的直接估计量，考虑一个整数 $L \geq 1$， $\beta_\ell \in \mathbb{R}$ 满足 $\ell = 1$、.....、 L，以及由下式给出的约束集合

$$\sum_{\ell=1}^{L} \zeta_\ell \beta_\ell^r = \delta_{r,1}, \quad r = 0, 1, \ldots, L-1 \,. \tag{6}$$

此外，记 $\mathbf{V}'$ 为 $\mathbf{V} \sim \mathcal{S}_d(\mathbb{R}^d)$ 的一个独立同分布副本； $\vec{1} := [1, \ldots, 1]^T \in \mathbb{R}^d$ 和 $\mathcal{H}_\alpha$ 表示 α- 光滑函数的赫尔德空间。

定理1. 设 $h > 0$ 为互不相同的 β_ℓs，且 $(\zeta_1, \ldots, \zeta_L)$ 是方程 *(6)* 的一个解。若 *(A1)-(A2)* 成立，且 $f \in \mathcal{H}_\alpha$ 满足 $\alpha \geq 2L$，则存在 $\alpha_1 \in \{1, \ldots, L\}$ 使得

$$C' = \sum_{1 \leq \ell_1 \leq \ell_2 \leq L} \frac{\zeta_{\ell_1} \zeta_{\ell_2}}{h^2 \sigma^4} \mathbb{E}\left[g\left(\mathbf{X} + h\beta_{\ell_1}\mathbf{V}\right) g\left(\mathbf{X} + \beta_{\ell_2} h\mathbf{V}'\right) G^{-1}(\mathbf{X}) \mathbf{V}\mathbf{V}'^T G^{-1}(\mathbf{X}) \right] + \mathcal{O}(h^{2\alpha}) \,,$$

其中 $g\left(\mathbf{x} + h\beta_{\ell_1}\mathbf{V}\right) := f\left(\mathbf{x} + h\beta_{\ell_1}\mathbf{V}\right) - K_0$ 对任意常数 K_0 均成立。

证明。 参见附录*A*。 □

给定独立样本，即 $\{\mathbf{X}_i\}_{i=1}^N$； $\{\mathbf{V}_i\}_{i=1}^N$ 和 $\{\mathbf{V}'_i\}_{i=1}^N$，并采用矩估计法， C' 的估计量为

$$\widehat{C'} := \sum_{1 \leq \ell_1 \leq \ell_2 \leq L} \sum_{i=1}^{N} \frac{\zeta_{\ell_1} \zeta_{\ell_2}}{h^2 \sigma^4 N} g\left(\mathbf{X}_i + h\beta_{\ell_1}\mathbf{V}_i\right) g\left(\mathbf{X}_i + \beta_{\ell_2} h\mathbf{V}'_i\right) G^{-1}(\mathbf{X}_i) \mathbf{V}_i \mathbf{V}_i'^T G^{-1}(\mathbf{X}_i) \,.$$

注4。 请注意，中心高斯分布属于球对称分布。例如，取$\mathbf{V} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma^2\mathcal{I}_d)$会得到具有 σ^2的独立变量 V_ks。值得注意的是，对于具有关于零对称分布的独立变量 V_k，仍可使用估计量 $\widehat{C'}$ 。

我们将使用均方误差（MSEs）来选择参数 h 和 σ^2，并评估 $\widehat{C'}$ 的统计性质。用 $\widehat{\lambda'}_1 \geq \widehat{\lambda'}_2 \geq \ldots \geq \widehat{\lambda'}_d$ 表示 $\widehat{C'}$ 的特征值，我们可以写出 $\mathbf{Tr}\left(\widehat{C'}\right) = \sum_{k=1}^{d} \widehat{\lambda'}_k$。为了控制特征值之和的估计量的质量，我们将评估 $\mathbf{Tr}\left(\widehat{C'}\right)$ 的性质。推导这些结果依赖于以下引理，该引理旨在控制在球对称分布的随机向量处取值的 L_0-Lipschitz 函数的矩。

引理2. 设 $\mathbf{V}$ 服从球对称分布，且 f 是关于$\mathbf{V}$的 L_0-*Lipschitz* 函数。若 f 的 p 阶矩有限，则存在 $c_0 > 0$ 使得

$$\mathbb{E}\left[|f\left(\mathbf{V}\right) - \mathbb{E}\left[f\left(\mathbf{V}\right)\right]|^p\right] \leq \begin{cases} \frac{\sqrt{2\pi}\,(2q+1)!}{2q}\left(\frac{L_0^2}{2c_0 d}\right)^{q+1/2}\mathbb{E}\left[R^{2q+1}\right] & \text{if } p = 2q+1 \\ 2q!\left(\frac{L_0^2}{c_0 d}\right)^{q}\mathbb{E}\left[R^{2q}\right] & \text{if } p = 2q \end{cases}.$$

证明。见附录*B*。 □

为给出偏差矩阵和均方误差的上界，我们用 $T \in \mathbb{R}^{d\times d}$ 表示单位矩阵（即 $T_{i,j} = 1$），符号 $A \preceq B$ 表示 $B - A$ 是正定矩阵。下文中，M_1（分别为 M_2）表示一阶（分别为二阶）赫尔德常数。

定理 2。假设 *(A1)-(A2)* 成立且 $f \in \mathcal{H}_2$。若 $\mathbf{V} \sim \mathcal{S}_d(\mathbb{R}^d)$ 服从$\widehat{\ }$球面分布，则 C' 偏差的上界矩阵为

$$\mathbb{E}\left[\widehat{C'}\right] - C' \preceq dM_2^2h^2\,\mathbb{E}[R^2]\,\mathbb{E}\left[G^{-1}(\mathbf{X})TG^{-1}(\mathbf{X})\right]\sum_{\ell_1\leq\ell_2}|\zeta_{\ell_1}\zeta_{\ell_2}|\,\beta_{\ell_1}^2\beta_{\ell_2}^2 + \mathcal{O}(h^2)\,.$$

此外，若 $R \sim \mathcal{U}\left(0, \sqrt{3d\sigma^2}\right)$，$\mathbf{Z} := \underline{\mathrm{v}}_{\sigma}$ 且 $\mathbf{Z}' := \underline{\mathrm{v}}_{\sigma}{}'$，则均方误差为

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left[Tr^2\left(\widehat{C'} - C'\right)\right] \;\leq\; & d^4M_2^4h^4\sigma^4\,\mathbb{E}^2\left[Tr\left\{G^{-1}(\mathbf{X})TG^{-1}(\mathbf{X})\right\}\right]\left(\sum_{\ell_1\leq\ell_2}|\zeta_{\ell_1}\zeta_{\ell_2}|\,\beta_{\ell_1}^2\beta_{\ell_2}^2\right)^2 \\ & + \frac{\sqrt{432}M_1^4}{c_0^2N}\left(\sum_{\ell_1}|\zeta_{\ell_1}\beta_{\ell_1}|\right)^4\left\{\mathbb{E}\left[Tr^4\left(G^{-1}(\mathbf{X})\mathbf{Z}\mathbf{Z}'^{T}G^{-1}(\mathbf{X})\right)\right]\right\}^{1/2},\end{aligned}$$

证明。见附录*C*。 □

对于相互独立的输入变量，回顾一下 $G = \mathcal{I}$ and $C' = C$，由此得到偏差和均方误差的简单表达式。

推论 1. 在定理 2的条件下，若 $R \sim \mathcal{U}\left(0, \sqrt{3d\sigma^2}\right)$ 且 $G = \mathcal{I}$，则有

$$\mathbb{E}\left[\widehat{C}\right] - C \preceq dM_2^2 h^2 \, \mathbb{E}[R^2] \, T \sum_{\ell_1 \leq \ell_2} |\zeta_{\ell_1}\zeta_{\ell_2}| \, \beta_{\ell_1}^2 \beta_{\ell_2}^2 + \mathcal{O}(h^2)\,;$$

$$\mathbb{E}\left[Tr^2\left(\widehat{C} - C\right)\right] \;\leq\; d^6 M_2^4 h^4 \sigma^4 \left(\sum_{\ell_1 \leq \ell_2} |\zeta_{\ell_1}\zeta_{\ell_2}| \, \beta_{\ell_1}^2 \beta_{\ell_2}^2\right)^2 + \frac{9\sqrt{432}d^2 M_1^4}{5c_0^2 N}\left(\sum_{\ell_1} |\zeta_{\ell_1}\beta_{\ell_1}|\right)^4 .$$

证明。 由于 $G = \mathcal{I}$，我们可以验证

$$\mathbb{E}\left[Tr^4\left(G^{-1}(\mathbf{X})\mathbf{Z}\mathbf{Z}'^T G^{-1}(\mathbf{X})\right)\right] = \mathbb{E}\left[\langle \mathbf{Z}, \mathbf{Z}'\rangle^4\right] \leq \mathbb{E}\left[||\mathbf{Z}||_2^4 \, ||\mathbf{Z}'||_2^4\right] = \left(\frac{\mathbb{E}\left[R^4\right]}{\sigma^4}\right)^2 ,$$

并且结果成立，因为 $R \sim \mathcal{U}\left(0, \sqrt{3d\sigma^2}\right)$。 □

现在，我们已具备推导均方误差所需的所有条件。

推论 2。 在定理 2 的条件下，假设 $R \sim \mathcal{U}\left(0, \sqrt{3d\sigma^2}\right)$;$h \propto N^{-\tau}$，其中 $\tau \in]\frac{1}{4}, 1[$。若 $\sigma^2 \leq \frac{\mathbb{E}^{-1}\left[Tr\left\{G^{-1}(\mathbf{X}) \quad TG^{-1} \quad \right\}\right](\mathbf{X})}{d^2 M_2^2 \sum_{\ell_1 \leq \ell_2} |\zeta_{\ell_1}\zeta_{\ell_2}| \, \beta_{\ell_1}^2 \beta_{\ell_2}^2}$，则有

$$\mathbb{E}\left[Tr^2\left(\widehat{C'} - C'\right)\right] \leq \frac{\sqrt{432}M_1^4}{c_0^2 N}\left(\sum_{\ell_1} |\zeta_{\ell_1}\beta_{\ell_1}|\right)^4 \left\{\mathbb{E}\left[Tr^4\left(G^{-1}(\mathbf{X})\mathbf{Z}\mathbf{Z}'^T G^{-1}(\mathbf{X})\right)\right]\right\}^{1/2} + \mathcal{O}(N^{-1}) .$$

此外，当 $G = \mathcal{I}$ 且 $\sigma^2 \leq \left(d^3 M_2^2 \sum_{\ell_1 \leq \ell_2} |\zeta_{\ell_1}\zeta_{\ell_2}| \, \beta_{\ell_1}^2 \beta_{\ell_2}^2\right)^{-1}$ 时，有

$$\mathbb{E}\left[Tr^2\left(\widehat{C} - C\right)\right] \leq \mathcal{O}\left(N^{-1}d^2\right) .$$

证明。 根据定理2 和推论 1，结果显而易见。 □

推论2 给出了计算 C' 和 C所需超参数的实用取值，并表明，通常要获得稳定的估计，模型运行次数 $N \propto d^2$ 必须达到某个常数级别。值得注意的是，本节推导的所有结果对于任意张量度量仍然成立，包括式（2）给出的张量度量。

4. 基于灵敏度泛函的活跃子空间

通常的活跃子空间依赖于函数的梯度，而我们关注的是能够帮助找出更少活跃变量、并有助于降低给定模型方差的新型活跃子空间。主要目标是找到

少数几个方向（及其对应的活跃变量），以便更好地捕捉敏感性泛函协方差中所包含的信息。定义

$$S(\mathbf{X}) := \left[f_1^{tot}(\mathbf{X}) \ \ldots \ f_d^{tot}(\mathbf{X})\right]^T; \qquad \Sigma^{tot} := \mathbb{E}\left[S(\mathbf{X})S(\mathbf{X})^T\right],$$

其中 $f_j^{tot}(\mathbf{X}) = f(\mathbf{X}) - \mathbb{E}\left[f(\mathbf{X}) \mid X_{\sim j}\right] = \mathbb{E}_{\mathbf{X}'}\left[\frac{\partial f}{\partial x_j}(X_j', \mathbf{X}_{\sim j}) \underline{F_j(X_j') - \mathbb{1}_{X_j' \geq X_j}}\right]$, $j = 1, \ldots, d$ 当输入变量相互独立时。若某些输入变量存在相关性或依赖性，

则上述总SF将由 [11, 36] 中引入的量取代。事实上，给定一个形式为 $\mathbf{X}_{\sim j} = r_j(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j})$ 的 $\mathbf{X}$ 的依赖模型，X_j 的（依赖）总SF如下：

$$df_j^{tot}(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j}) := f(X_j, r_j(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j})) - \mathbb{E}_{X_j}\left[f(X_j, r_j(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j}))\right],$$

这恰好是使用函数 $h^{(j)}(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j})$ 计算 X_j 的总SF：$= f(X_j, r_j(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j}))$，也就是说，$df_j^{tot}(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j}) = h_j^{tot}(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j}) = f(X_j, r_j(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j})) - \mathbb{E}_{X_j}\left[f(X_j, r_j(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j}))\right]$。因此，类比可得

$$\begin{aligned} df_j^{tot}(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j}) &= \mathbb{E}_{\mathbf{X}'}\left[\frac{\partial h^{(j)}}{\partial x_j}(X_j', \mathbf{Z}_{\sim j})\frac{F_j(X_j') - \mathbb{1}_{X_j' \geq X_j}}{\rho_j(X_j')}\right] \\ &= \mathbb{E}_{\mathbf{X}'}\left[\left\{J^j(X_j', \mathbf{Z}_{\sim j})\right\}^T \nabla f(X_j', r_j(X_j', \mathbf{Z}_{\sim j}))\frac{F_j(X_j') - \mathbb{1}_{X_j' \geq X_j}}{\rho_j(X_j')}\right] \end{aligned} \tag{7}$$

根据 X_j 的（相关）总 SF，X_j 的总敏感性指数定义为 ([11, 36])

$$dS_{T_j} := \frac{\mathbb{V}\left[df_j^{tot}(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j})\right]}{\mathbb{V}\left[f(\mathbf{X})\right]}.$$

现在，考虑 $dS(X_1, \mathbf{Z}_{\sim 1}, \ldots, X_d, \mathbf{Z}_{\sim d}) := \left[df_1^{tot}(X_1, \mathbf{Z}_{\sim 1}) \ \ldots \ df_d^{tot}(X_d, \mathbf{Z}_{\sim d})\right]^T$，并定义

$$d\Sigma^{tot} := \mathbb{E}\left[dS(X_1, \mathbf{Z}_{\sim 1}, \ldots, X_d, \mathbf{Z}_{\sim d})\left\{dS(X_1, \mathbf{Z}_{\sim 1}, \ldots, X_d, \mathbf{Z}_{\sim d})\right\}^T\right] \in \mathbb{R}^{d \times d},$$

$$\mathsf{K} := \begin{cases} \Sigma^{tot} & \text{for independent inputs} \\ d\Sigma^{tot} & \text{otherwise} \end{cases}.$$

用 $\boldsymbol{\varpi}_k, k = 1, \ldots, d$ 表示 K 的特征向量，即 $\mathsf{K}\boldsymbol{\varpi}_k = \gamma_k \boldsymbol{\varpi}_k$，用 $\gamma_1 \geq \gamma_2 \geq \ldots \geq \gamma_d$ 表示 K 的特征值。因此，我们可以看到

$$\gamma_k = \boldsymbol{\varpi}_k^T \mathsf{K} \boldsymbol{\varpi}_k = \mathbb{E}\left[\left\{S(\mathbf{X})^T \boldsymbol{\varpi}_k\right\}^2\right],$$

当 d 输入彼此独立时。

同样，考虑列元素为与 $\gamma_1 \geq \gamma_2 \geq \ldots \geq \gamma_\ell$相关的前$\ell$ 个特征向量的矩阵 $\bar{\mathcal{W}}_\ell \in \mathbb{R}^{d\times\ell}$，以及列为 $\boldsymbol{\varpi}_k$、 $k=\ell+1$、...、 d的矩阵 $\bar{\mathcal{W}}_{\sim\ell} \in \mathbb{R}^{d\times(d-\ell)}$，我们可以写成

$$f(\mathbf{x}) = f\left(\bar{\mathcal{W}}_\ell \bar{\mathcal{W}}_\ell^T \mathbf{x} + \bar{\mathcal{W}}_{\sim\ell}\mathbf{r}\right),$$

其中 $\mathbf{r} = \bar{\mathcal{W}}_{\sim\ell}^T\mathbf{x}$。利用 $\mathbf{R} := \bar{\mathcal{W}}_{\sim\ell}^T\mathbf{X}$， f 可由以下条件期望近似:

$$f(\mathbf{x}) \approx \widetilde{f}_s(\mathbf{x}) := \mathbb{E}\left[f\left(\bar{\mathcal{W}}_\ell \bar{\mathcal{W}}_\ell^T \mathbf{x} + \bar{\mathcal{W}}_{\sim\ell}\mathbf{R}\right) | \bar{\mathcal{W}}_\ell^T\mathbf{X} = \bar{\mathcal{W}}_\ell^T\mathbf{x}\right]. \tag{8}$$

此外，将与 K 相关联的 X_j 活跃得分定义为

$$\vartheta_j(m) := \sum_{k=1}^{m} \gamma_k \left(\varpi_{j,k}\right)^2, \quad m \in \{1,\ldots,d\},$$

引理3. 假设 *(A1)-(A2)* 成立。

(i) 若$\mathbf{X}$ 是由独立变量构成的随机向量，则有

$$S_{T_j} = \frac{\vartheta_j(d)}{\mathbb{V}\left[f(\mathbf{X})\right]} \leq C_1 \frac{\alpha_j(d)}{\mathbb{V}\left[f(\mathbf{X})\right]}.$$

(ii) 若$\mathbf{X}$ 是由相关变量构成的随机向量，则

$$dS_{T_j} = \frac{\vartheta_j(d)}{\mathbb{V}\left[f(\mathbf{X})\right]}.$$

证明。 该结果可通过调整 *[16]*中给出的证明直接得到。 □

事实证明，在独立输入的情况下，与 K 相关的 X_j 活跃得分是 X_j 未归一化的 Sobol' 总指标；而对于非独立变量，它是相关总指标（[11]）。此外，值得注意的是，基于SF的活跃子空间可以处理所有具有有限二阶矩的函数。我们只需使用敏感性泛函的无导数表达式，即可据此推导出 K 的无偏估计量。基于上述总 SF，以下各节将分别给出独立变量的 Σ^{tot} 估计量和相关变量的 $d\Sigma^{tot}$ 估计量。

4.1. 独立输入的基于敏感度的活跃子空间计算

我们将推导基于模型输出直接计算 Σ^{tot} 的敏感性泛函估计量。对于独立输入，回想一下 $\Sigma^{tot} = \mathbb{E}\left[S(\mathbf{X})S(\mathbf{X})^T\right]$，并令

$\mathbf{X}'$ 是$\mathbf{X}$的一个独立同分布副本。牢记总SF的定义，我们可以验证

$$\Sigma^{tot}_{\ell,k} = \begin{cases} \frac{1}{2}\mathbb{E}\left[(f(\mathbf{X}) - f(X'_\ell, \mathbf{X}_{\sim\ell}))^2\right] & \text{if } \ell = k \\ \mathbb{E}\left[(f(\mathbf{X}) - f(X'_\ell, \mathbf{X}_{\sim\ell}))\,(f(\mathbf{X}) - f(X'_k, \mathbf{X}_{\sim k}))\right] & \text{otherwise} \end{cases}. \tag{9}$$

上述表达式有助于推导 Σ^{tot}的无偏估计量。为此，我们考虑 $\boldsymbol{X}$的两个独立同分布样本，即 $\{\mathbf{X}_i\}_{i=1}^N$, $\{\mathbf{X}'_i\}_{i=1}^N$，以及$d$维随机向量 $\tilde{S}^{(i)}$ ，其第 k个分量为

$$\tilde{S}^{(i)}_k := f(\mathbf{X}_i) - f(X'_{i,k}, \mathbf{X}_{i,\sim k}), \quad k = 1, \ldots, d\,.$$

此外，用 $\mathcal{D}^* \in \mathbb{R}^{d\times d}$表示其元素为$\mathcal{D}^*_{i,k} = \left(\frac{1}{2}\right)^{\delta_{i,k}}$的矩阵，其中$\delta_{i,k}$为克罗内克符号。给定两个矩阵 $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{d\times d}$ 和 $\mathcal{B} \in \mathbb{R}^{d\times d}$， $\mathcal{A} * \mathcal{B}$ 表示逐元素乘积，即$(\mathcal{A} * \mathcal{B})_{i,k} := \mathcal{A}_{i,k}\mathcal{B}_{i,k}$。

命题2。 在假设*(A1)-(A2)*下， Σ^{tot} 的无偏且一致估计量为

$$\widehat{\Sigma^{tot}} := \left\{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \tilde{S}^{(i)}\left[\tilde{S}^{(i)}\right]^T\right\} * \mathcal{D}^*\,.$$

证明。 利用方程（*9*）可直接得出。 □

直接基于模型输出推导 $d\Sigma^{\text{tot}}$ 的估计量，可通过在命题2 中考虑相关输入的敏感度指标来调整，即， $h^{tot}_j(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j}) = \mathbb{E}_{X'_j}\left[f(X_j, r_j(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j})) - f(X'_j, r_j(X'_j, \mathbf{Z}_{\sim j}))\right]$ (另见第4.2节）。

4.2. 相关输入的基于敏感度的活跃子空间计算

在本节中，我们利用敏感性泛函的基于导数的表达式，推导相关变量情形下 $d\Sigma^{tot}$ 的估计量，随后推导独立变量情形下的估计量。回顾一下，X_j 的总敏感性泛函的基于导数的表达式为

$$df^{tot}_j(X_j, \mathbf{Z}_{\sim j}) = \mathbb{E}_{\mathbf{X}'}\left[\frac{\partial h^{(j)}}{\partial x_j}(X'_j, \mathbf{Z}_{\sim j})\frac{F_j(X'_j) - \mathbb{1}_{X'_j \geq X_j}}{\rho_j(X'_j)}\right],$$

其中 $j = 1, \ldots, d$。因此，我们可以验证

$$d\Sigma^{tot}_{\ell,k} = \begin{cases} \mathbb{E}\left[\frac{\partial h^{(\ell)}}{\partial x_\ell}(X_\ell, \mathbf{Z}_{\sim\ell})\frac{\partial h^{(\ell)}}{\partial x_\ell}(X'_\ell, \mathbf{Z}_{\sim\ell})\frac{F_j\left(\min(X_\ell, X'_\ell)\right) - F_\ell(X_\ell)F_\ell(X'_\ell)}{\rho_\ell(X_\ell)\rho_\ell(X'_\ell)}\right] & \text{if } \ell = k \\ \mathbb{E}\left[\frac{\partial h^{(\ell)}}{\partial x_\ell}(X'_\ell, \mathbf{Z}_{\sim\ell})\frac{\partial h^{(k)}}{\partial x_k}(X'_k, \mathbf{Z}_{\sim k})\frac{\left[F_\ell(X'_\ell) - \mathbb{1}_{X'_\ell \geq X_\ell}\right]\left[F_k(X'_k) - \mathbb{1}_{X'_k \geq X_k}\right]}{\rho_\ell(X'_\ell)\rho_k(X'_k)}\right] & \text{otherwise} \end{cases}. \tag{10}$$

对于独立变量，方程（10）变为

$$\widetilde{\Sigma^{tot}}_{\ell,k} := \begin{cases} \mathbb{E}\left[\frac{\partial f}{\partial x_\ell}(\mathbf{X})\frac{\partial f}{\partial x_\ell}(X'_\ell, \mathbf{X}_{\sim\ell})\frac{F_j\left(\min(X_\ell, X'_\ell)\right) - F_\ell(X_\ell)F_\ell(X'_\ell)}{\rho_\ell(X_\ell)\rho_\ell(X'_\ell)}\right] & \text{if } \ell = k \\ \mathbb{E}\left[\frac{\partial f}{\partial x_\ell}(X'_\ell, \mathbf{X}_{\sim\ell})\frac{\partial f}{\partial x_k}(X'_k, \mathbf{X}_{\sim k})\frac{\left[F_\ell(X'_\ell) - \mathbb{1}_{X'_\ell \geq X_\ell}\right]\left[F_k(X'_k) - \mathbb{1}_{X'_k \geq X_k}\right]}{\rho_\ell(X'_\ell)\rho_k(X'_k)}\right] & \text{otherwise} \end{cases}. \tag{11}$$

~利用方程（10）–（11），$d\Sigma^{\text{tot}}$ 和 Σ^{tot} 可直接通过矩估计法得到。

4.3. 基于敏感度的活跃子空间与 *Db-active* 子空间的比较

给定 (i) 相互独立且服从关于原点对称分布的输入 $\boldsymbol{X}$，以及 (ii) 具有如下形式的函数

$$f_3(\boldsymbol{x}) := \prod_{k=1}^{d} g_k(x_k),$$

其中 $g_k: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 是偶函数或奇函数，可以验证，Db-active 方向与 $\mathbb{R}^d$ 的典范欧几里得基重合，因为矩阵 C 是对角矩阵。因此，应用 Db-active 子空间方法相当于根据量 ν_j 对原始输入变量 $\boldsymbol{X}$ 排序并进行降维，而这通常不会降低模型输出方差。因此，当 C 为对角矩阵时，最好依靠 Sobol'指数或基于敏感度的活跃子空间方法来识别影响最大的输入，或筛选出精简的活跃变量集，因为这些变量有助于降低输出方差。

相比之下，对于独立输入以及具有如下形式的加性函数

$$f_4(\boldsymbol{x}) := \sum_{j=1}^{d} q_j(x_j),$$

其中 $q_j: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 是给定函数，可以验证，利用敏感度因子（SFs）识别出的活跃方向与 $\mathbb{R}^d$ 的典范欧几里得基重合，因为矩阵 K 是对角矩阵。在这种情况下，基于敏感度的活跃子空间方法可简化为使用 Sobol'指数进行降维。当无法使用 SA 进行降维且 K 为对角矩阵时，则可以采用 Db-活跃子空间来识别精简的活跃变量集。

总之，活跃子空间方法有助于：(i) 识别由新的活跃变量张成的低维子空间；(ii) 当矩阵 C、C' 和 K 为对角矩阵时，降低原始输入维度 $\boldsymbol{X}$

。基于敏感度的活跃子空间具有以下优势：依靠 Sobol'指数和依赖敏感度指数对原始变量进行降维，同时实现方差缩减。由于在这种情况下，它们通常无法实现方差缩减，因此当 C 和 C' 为对角矩阵时，Db-活跃子空间并不适用。

5. 非独立变量的基于导数的 Shapley 效应

Shapley 值 [41] 用于在不同团队之间公平分配给定的奖励。对于 d 个团队，这些值，即 Φ_j、 $j = 1$、.....、 d，依赖于正的重要性度量。考虑集合 D: $= \{1, \ldots, d\}$ 以及由$\mathcal{A}$给出的相关 σ-代数$= \{v_0 : v_0 \subseteq \{1, \ldots, d\}\}$。此外，考虑映射 $\eta : \mathcal{A} \to \mathbb{R}_+, v \mapsto \eta(v)$，其满足$\eta(\emptyset) = 0$，并且 $\eta(D)$ 是奖励总额。

定理3。*(Shapley[41])*。
考虑 d 个团队以及团队 j、 j_1、 $j_2 \in D$。给定测度 η，存在唯一的 *Shapley* 值 Φ_j、 $j = 1$、.....、 d，使得
(i) $\sum_{j=1}^{d} \Phi_j = \eta(D)$; *(ii)* 如果 $\eta(v \cup \{j\}) = \eta(v)$ $\forall v \in \mathcal{A}$，则 $\Phi_j = 0$; *(iii)* 如果 $\eta(v \cup \{j_1\}) = \eta($ $v \cup \{j_2\})$ $\forall v \in \mathcal{A}$，则 $\Phi_{j_1} = \Phi_{j_2}$。
这些值如下所示：

$$\Phi_j = \frac{1}{d} \sum_{v \subseteq (D \setminus \{j\})} \binom{d-1}{|v|}^{-1} \left[\eta(v \cup \{j\}) - \eta(v)\right] .$$

考虑可加测度会得到可加Shapley值。在敏感性分析中，将 $\mathbf{X}_u$ a 作为重要性度量的一阶效应，即，

$$\eta(u) := \mathbb{V}\left[\mathbb{E}\left[f(\mathbf{X})|\mathbf{X}_u\right]\right], \quad \forall u \in \mathcal{A},$$

会得到 [8, 9]中提出的输入变量的Shapley效应。回想一下，这类效应对于非独立变量很有意义。

对于非独立变量， u 的基于导数重要性度量如下：

$$d\eta(u) := \sum_{k \in u} \mathbb{E}\left[\left(e_k^T grad(f)(\mathbf{X})\right)^2\right] + \sum_{\{k_1, k_2\} \subseteq u} \mathbb{E}\left[\left|e_{k_1}^T grad(f)(\mathbf{X})\, e_{k_2}^T grad(f)(\mathbf{X})\right|\right] .$$

我们可以看到

$$d\eta(D) = \sum_{\substack{k_1=1,k_2=1 \\ k_2 \geq k_1}}^{d,d} \mathbb{E}\left[\left|e_{k_1}^T grad(f)(\mathbf{X})\, e_{k_2}^T grad(f)(\mathbf{X})\right|\right] ,$$

且如果 $j \notin u$,

$$d\eta(u \cup \{j\}) - d\eta(u) = \mathbb{E}\left[\left(e_j^T grad(f)(\mathbf{X})\right)^2\right] + \sum_{k \in u} \mathbb{E}\left[\left|e_j^T grad(f)(\mathbf{X})\, e_k^T grad(f)(\mathbf{X})\right|\right] .$$

定理4。 假设 *(A1)-(A2)* 成立。给定重要性度量 $d\eta(u)$，输入 X_j*s* 的唯一 *Shapley* 值如下：

$$d\Phi_j := \mathbb{E}\left[\left(e_j^T grad(f)(\mathbf{X})\right)^2\right] + \frac{1}{2}\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{d} \mathbb{E}\left[\left|e_j^T grad(f)(\mathbf{X})\, e_k^T grad(f)(\mathbf{X})\right|\right] .$$

证明。 参见附录*D*。 □

由于 $d\Phi_j := d\nu_j^* + \frac{1}{2}\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{d} \mathbb{E}\left[\left|e_j^T grad(f)(\mathbf{X})\ e_k^T grad(f)(\mathbf{X})\right|\right]$，$d\Phi_j$ 表示梯度各分量的张量积，可将其视为梯度各分量之间的二阶交互。

注 5。 根据定理*4*的证明，我们能够扩展 $d\Phi_j$，以涵盖梯度各分量之间任意阶的交互。对于三阶交互，我们可以考虑

$$\begin{aligned} d\Phi_{j,3} \;:=\; & \mathbb{E}\left[\left(e_j^T grad(f)(\mathbf{X})\right)^2\right] + \frac{1}{2}\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{d} \mathbb{E}\left[\left|e_j^T grad(f)(\mathbf{X})\, e_k^T grad(f)(\mathbf{X})\right|\right] \\ & + \frac{1}{3} \sum_{\{k_1,k_2\} \subseteq (D \setminus \{j\})} \mathbb{E}\left[\left|e_j^T grad(f)(\mathbf{X})\, e_{k_1}^T grad(f)(\mathbf{X}) e_{k_2}^T grad(f)(\mathbf{X})\right|\right] . \end{aligned}$$

注 6。 与相关工作的联系 *[14]*
对于独立变量的情形，注意到 $grad\,(f)\,(\mathbf{X}) = \nabla f\,(\mathbf{X})$，而我们的 X_j 的相关变量 *Db-Shpaley* 效应变为

$$d\Phi_j = \Phi_j = \mathbb{E}\left[\left(e_j^T \nabla f(\mathbf{X})\right)^2\right] + \frac{1}{2}\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{d} \mathbb{E}\left[\left|e_j^T \nabla f(\mathbf{X})\, e_k^T \nabla f(\mathbf{X})\right|\right] ,$$

其引入于*[14]*。显然，X_j中给出的 *Db-Shpaley* 效应 *[14]* 非常适用于独立输入（另见第*6.1*节）。

6. 示例

6.1. 具有相关输入的二维线性模型

考虑函数 $f(X_1, X_2) := X_1$，其中 $(X_1,\ X_2) \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$，且

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 1 & \rho \\ \rho & 1 \end{pmatrix},$$

其中 ρ 表示相关系数。可以验证，该函数的梯度为（另见[21]）

$$grad(f) := \frac{1}{(1-\rho^2)^2}\left[1+\rho^2,\ -2\rho\right]^T,$$

and

$$C' = \frac{1}{(1-\rho^2)^4}\begin{bmatrix} (1+\rho^2)^2 & -2\rho\,(1+\rho^2) \\ -2\rho\,(1+\rho^2) & 4\rho^2 \end{bmatrix}.$$

因此，相关的活跃方向取决于 ρ 的值。取 $\rho \to 1$ 可得到两个活跃方向，分别为 $\mathsf{w}_1' = \frac{\sqrt{2}}{2}[1,\ 1]^T$ 和 $\mathsf{w}_2' = \frac{\sqrt{2}}{2}[1,\ -1]^T$。

对于基于敏感度的活跃子空间，使用 $G_1(X_1, Z_2) := X_1$；依赖函数 $X_1 = \rho X_2 + \sqrt{1-\rho^2}Z_1$，其中 X_2 独立于 $Z_1 \sim \mathcal{N}(0, 1)$；以及 $G_2(X_2, Z_1) := \rho X_2 + \sqrt{1-\rho^2}Z_1$，可以看出两个总SF为

$$df_1^{tot}(X_1) = \mathbb{E}_{X_1'}\left[\frac{F_1(X_1') - \mathbb{I}_{X_1' \geq X_1}}{\rho_1(X_1')}\right]; \qquad df_2^{tot}(X_2) = \rho\,\mathbb{E}_{X_2'}\left[\frac{F_2(X_2') - \mathbb{I}_{X_2' \geq X_2}}{\rho_2(X_2')}\right].$$

利用以下恒等式，也称为基于导数的方差分析（参见[6]）

$$h(X_j) = \mathbb{E}\left[h(X_j)\right] + \mathbb{E}_{X_j'}\left[h'(X_j')\frac{F_1(X_j') - \mathbb{I}_{X_j' \geq X_j}}{\rho_j(X_j')}\right],$$

我们有 $df_1^{tot}(X_1) = X_1$；$df_2^{tot}(X_2) = \rho X_2$并且

$$\mathsf{K} = \mathbb{E}\begin{bmatrix} X_1^2 & \rho X_1 X_2 \\ \rho X_1 X_2 & \rho^2 X_2^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \rho^2 \\ \rho^2 & \rho^2 \end{bmatrix},$$

当 $\rho = 1$ 时，得到方向 $\mathsf{w}_1' = \frac{\sqrt{2}}{2}[1,\ 1]^T$ 和 $\mathsf{w}_2' = \frac{\sqrt{2}}{2}[1,\ -1]^T$。显然，当 $\rho = 1$ 时，由 C' 和 K 得到的活跃方向相同。但它们与使用 C 得到的活跃方向不同。此外，我们还可以验证，当 $\rho = 0.5$ 时，由 C' 和 K 得到的活跃方向不同。

[14] 的 X_1、 X_2 的Db-Shapley效应分别为 $\Phi_1 = 1$ 和 $\Phi_2 = 0$，而使用定理4得到的结果为 $d\Phi_1 = \frac{1+\rho^2}{(1-\rho^2)^4}(1 + \rho^2 + |\rho|)$ 和 $d\Phi_2 = \frac{|\rho|}{(1-\rho^2)^4}(4|\rho| + 1 + \rho^2)$。两个输入的归一化效应通过将 $d\Phi_j$ 除以 $d\eta(\{1, 2\}) = d\Phi_1 + d\Phi_2$（其中 $j = 1$）得到。图1 描绘了 ρ 取不同值时的此类归一化效应。我们还添加了两个输入基于方差的Shapley效应（见 [9, 42]）。

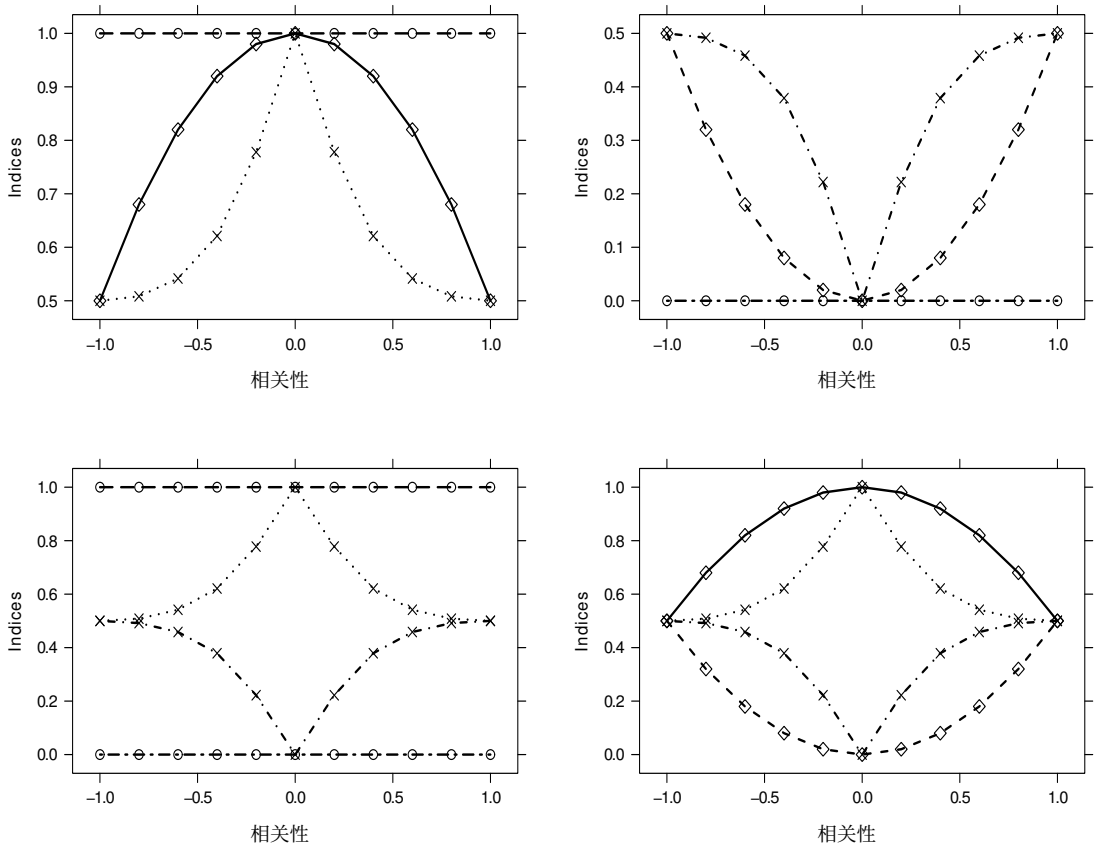

图1：来自 [14] （○ 及虚线）的Db-Shapley效应；本文提出的Db-Shapley效应（×及点）和来自 [9] （◇ 及实线）的基于方差的Shapley效应。左上图展示了 X_1的三个指标，右上图展示了 X_2 的指标。左下图展示了 X_1 和 X_2 分别来自 [14] 和本文的指标，而右下图展示了 [9] 及本文的两个指标。

可以看出，[14] 中的Db-Shapley效应不受相关性取值的影响，而其他指标则会受到影响。此外，根据 [14]，， X_1 始终是影响最大的输入；而基于方差的Shapley效应表明，当 $\rho = \pm 1$时， X_1 和 X_2的效应相同。根据本文提出的Db-Shapley效应，当 $|\rho| \geq 0.8$时， X_1 和 X_2 的效应相同。

6.2. 基于导数与基于敏感度的活跃子空间之间的比较

首先，考虑如下二次函数： $f_q(\mathbf{X}) := \frac{1}{2}\mathbf{X}^T\mathcal{A}\mathbf{X}$，其中 $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{d\times d}$ 是一个对称正定矩阵，且$\mathbf{X} \sim \mathcal{U}(-1, 1)^{d=10}$。为了评估我们对特征值的估计量的质量，矩阵 $\mathcal{A}$ 构造如下： $\mathcal{A} = \mathbf{P}\Lambda\mathbf{P}^T$，其中$\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{d\times d}$ 是一个给定的正交矩阵。我们可以看到

$$\nabla f_q(\mathbf{X}) = \mathcal{A}\mathbf{X}, \qquad C = \mathcal{A}\mathbb{E}\left[\mathbf{X}\mathbf{X}^T\right]\mathcal{A} = \frac{1}{3}\mathcal{A}\mathcal{A} = \frac{1}{3}\mathbf{P}\Lambda^2\mathbf{P}^T.$$

在下文中，特征值（150, 5, 0.5, 0.4, 0.1, 0.8, 0.01, 0.0009, 0.005, 0.008）对应于类型 1 的二次函数，而（150, 140, 130, 120, 110, 100, 90, 145, 145, 125）与类型 2 的二次函数相关联。

其次，我们考虑如下定义的 U-乘积函数

$$f_u(\mathbf{x}) := \prod_{j=1}^{d=10} u_j\Phi(x_j),$$

其中，$\mathbf{u} := (25,25,25,25,25,37,37,37,37,37)$， Φ 是标准高斯分布的累积分布函数，而 $X_j \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 = 4)$，其中 $j = 1$，.....， $d = 10$ 为独立变量。

最后，我们考虑 A型、B型和 C型 G-Sobol'函数，即（[3]）

$$f_G(\mathbf{x}) := \prod_{j=1}^{d=10} \frac{|4x_j - 2| + a_j}{1 + a_j},$$

A型取 $\mathbf{a} = [0, 0, 6.52, 6.52, 6.52, 6.52, 6.52, 6.52, 6.52, 6.52]^T$； B型取 $\mathbf{a} = [50, 50, 50, 50, 50, 50, 50, 50, 50, 50]^T$； C型取 $\mathbf{a} = [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0]^T$。$d = 10$ 输入相互独立，且 $\mathbf{X} \sim \mathcal{U}(0, 1)^{d=10}$。

基于这些函数，图2 展示了基于导数和基于敏感度的主动方法对应的真实特征值与估计特征值。可以得出，估计特征值与理论值吻合良好。

~图 3 展示了通过以下方式近似各个函数 f： $f_a(\mathbf{x})$ 或

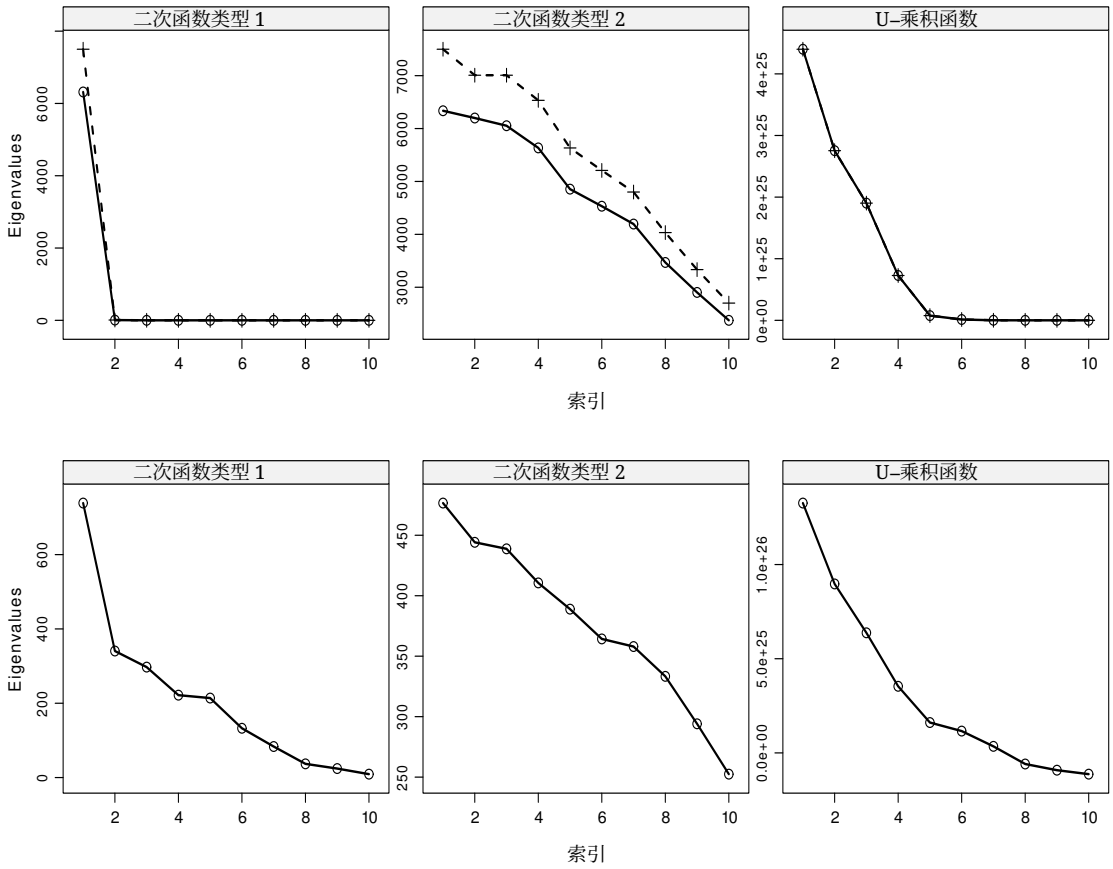

图 2：估计的特征值（实线）和真实特征值（虚线）。上方各图显示 Db 主动方法得到的特征值，下方各图则显示基于灵敏度的主动方法估计的特征值。

$_{\sim}f_s(\mathbf{x})$（参见方程（5）和（8）。这类误差的计算方法如下：

$$Err_a := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(f(\mathbf{x}_i) - \widetilde{f}_a(\mathbf{x}_i)\right)^2; \qquad Err_s := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(f(\mathbf{x}_i) - \widetilde{f}_s(\mathbf{x}_i)\right)^2,$$

其中 $N = 200$。

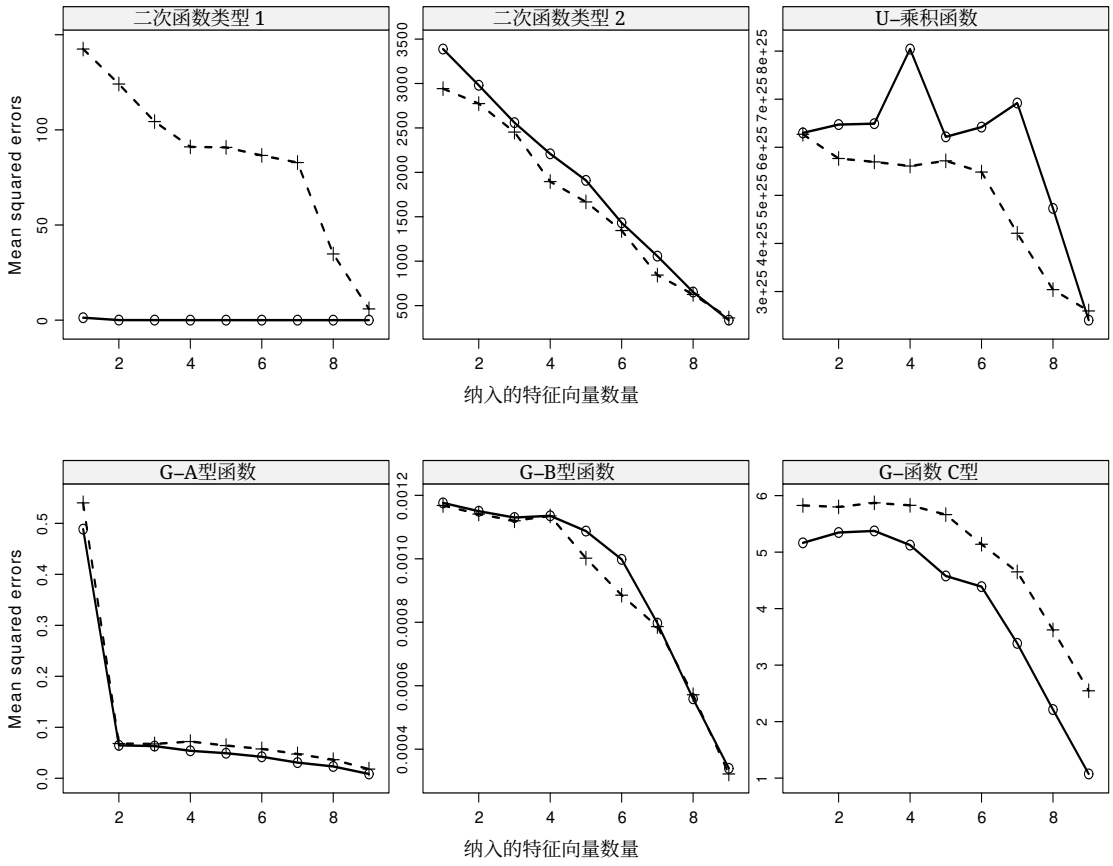

图3：基于导数（实线）和基于敏感度（虚线）活跃子空间的误差，与用于推导近似函数的特征向量数量之间的关系。

结果表明，两种方法的相对表现因函数而异；根据所考虑的具体函数，每种方法都可能表现更优、相当或更差。

7. 结论

本文首先将基于导数（Db）的活跃子空间方法和 Db Shapley效应扩展到相关且相依的输入变量情形。所提出的 Db-活跃子空间和 Db-Shapley效应能够通过依赖梯度而非传统梯度，捕捉非独立变量之间的依赖结构

。关于 Db-Shapley效应，概念论证以及针对相关输入的测试案例均支持我们的方法优于 [14], 中提出的方法，因为我们的 Db-Shapley效应显式依赖于相关结构，这与基于方差的Shapley效应相一致[9]。此外，我们还提供了高效的估计量，用于计算依赖梯度以及推导活跃变量所需的矩阵，并为估计量偏差给出了与维数无关的上界。

其次，我们介绍了基于总敏感度函数的基于敏感度的活跃子空间，并证明相关的活跃得分与 Sobol 总指标或 [11, 13] 提出的依赖敏感度指数完全一致。解析结果和数值结果均表明，Db-active子空间方法与基于敏感度的活跃子空间的相对表现因函数类别而异；根据所研究的函数不同，各种方法可能更优、相当或较差。最后，我们为用于推导基于敏感度的活跃变量的矩阵提供了高效估计量。

作为未来的研究方向，鉴于 [43] 的最新结果，在 Db-active子空间方法框架内实现此类矩阵的无维数依赖计算，前景尤为可观。

利益冲突

The 作者声明，就本文内容而言，不存在需要披露的利益冲突。 r.

数据可用性

本文未使用真实数据集。模拟数据集已包含在论文中。

附录A定理证明1

已知梯度为（见 [22]）

$$grad(f)(\mathbf{x}) = \frac{1}{h\sigma^2} G^{-1}(\mathbf{x}) \sum_{\ell_1=1}^{L} \zeta_{\ell_1} \mathbb{E}\left[f\left(\mathbf{x} + h\beta_{\ell_1}\mathbf{V}\right)\mathbf{V}\right] + \mathcal{O}(h^{2\alpha}),$$

and 利用 $g(\mathbf{x} + h\beta_{\ell_1}\mathbf{V}) := f(\mathbf{x} + h\beta_{\ell_1}\mathbf{V}) - K_0$ 对于任意常数 K_0，我们可以写成 e

$$grad(f)(\mathbf{x}) = \frac{1}{h\sigma^2} G^{-1}(\mathbf{x}) \sum_{\ell_1}^{L} \zeta_{\ell_1} \mathbb{E}\left[g\left(\mathbf{x} + h\beta_{\ell_1}\mathbf{V}\right)\mathbf{V}\right] + \mathcal{O}(h^{2\alpha}) \ ,$$

因为 $\mathbb{E}[\mathbf{V}] = \mathbf{0}$。使用公式（4）即可直接得到该结果。

附录 B 引理2的证明

利用表示式 $\mathbf{V} = R\mathbf{U}$，我们可以写成 $|f(R\mathbf{U}) - f(R\mathbf{U}')| \leq L_0 R||\mathbf{U} - \mathbf{U}'||_2$，这意味着 f 相对于 $\mathbf{U}$ 也是一个 L_0R-Lipschitz 函数。利用[39], 中关于单位球面上 L_0R-Lipschitz 函数集中性的经典不等式，也就是说，对于给定常数 $c_0 > 0$，概率 $\mathbb{P}[|f(\mathbf{V}) - \mathbb{E}[f(\mathbf{V})]| \geq t\,|R] \leq 2\exp\left(-\frac{c_0 dt^2}{L_0^2 R^2}\right)$，我们可以写出 $p = 2q$

$$
\begin{aligned}
A_0 &:= \mathbb{E}_U\left[|f(\mathbf{V}) - \mathbb{E}[f(\mathbf{V})]|^p\right] = \int_0^{+\infty} \mathbb{P}\left[|f(\mathbf{V}) - \mathbb{E}[f(\mathbf{V})]|^{2q} \geq t\,|R\right] dt \\
&= \int_0^{+\infty} \mathbb{P}\left[|f(\mathbf{V}) - \mathbb{E}[f(\mathbf{V})]| \geq t^{1/(2q)}\,|R\right] dt \\
&\leq 2\int_0^{+\infty} \exp\left(-\frac{c_0 dt^{1/q}}{L_0^2 R^2}\right) dt = 2q\int_0^{+\infty} y^{q-1}\exp\left(-\frac{c_0 dy}{L_0^2 R^2}\right) dy \\
&= 2q\frac{L_0^2 R^2}{c_0 d}\int_0^{+\infty} y^{(q-1)}\frac{c_0 d}{L_0^2 R^2}\exp\left(-\frac{c_0 dy}{L_0^2 R^2}\right) dy = 2q\left(\frac{L_0^2 R^2}{c_0 d}\right)^q (q-1)!\,.
\end{aligned}
$$

对于 $p = 2q+1$，我们有

$$
\begin{aligned}
A_0 &\leq 2\int_0^{+\infty} \exp\left(-\frac{c_0 dt^{2/(2q+1)}}{L_0^2 R^2}\right) dt = 2(2q+1)\int_0^{+\infty} y^{2q}\exp\left(-\frac{c_0 dy^2}{L_0^2 R^2}\right) dy \\
&= (2q+1)\sqrt{\pi\frac{L_0^2 R^2}{c_0 d}}\int_{-\infty}^{+\infty} y^{2q}\frac{1}{\sqrt{\pi\frac{L_0^2 R^2}{c_0 d}}}\exp\left(-\frac{c_0 dy^2}{L_0^2 R^2}\right) dy \\
&= (2q+1)\sqrt{\pi\frac{L_0^2 R^2}{c_0 d}}\left(\frac{L_0^2 R^2}{2c_0 d}\right)^q (2q-1)! = \frac{\sqrt{2\pi}(2q+1)!}{2q}\left(\frac{L_0^2 R^2}{2c_0 d}\right)^{q+1/2}.
\end{aligned}
$$

通过取期望可得该结果 $\mathbb{E}_R[A_0]$，因为 R 与 $\mathbf{U}$ 相互独立。

附录 C 定理2的证明

Consider the vectors $\vec{\mathbf{q}} = (q_1, \ldots, q_d) \in \mathbb{N}^d$; $\vec{\boldsymbol{i}} := (i_1, \ldots, i_d) \in \mathbb{N}^d$ and $\vec{k} = \left(0, \ldots, 0, \underbrace{1}_{\text{k-th position}}, 0 \ldots, 0\right) \in \mathbb{N}^d$ for any $k \in \{1, \ldots, d\}$. Define $\mathbf{V}^{\vec{\boldsymbol{i}}} = \prod_{j=1}^d V_j^{i_j}$

并且 $\tau_k := \left\{ \vec{\mathfrak{q}} + \vec{k} : \ ||\vec{\mathfrak{q}}||_1 = 1 \right\}$。在假设 $f \in \mathcal{H}_2$ 下，我们可以写成

$$f(\mathbf{x}+\beta_\ell h\mathbf{V}) = \sum_{||\vec{\boldsymbol{\imath}}||_1=0}^{1} \mathcal{D}^{(\vec{\boldsymbol{\imath}})} f(\mathbf{x}) (h\beta_\ell)^{||\vec{\boldsymbol{\imath}}||_1} \frac{\mathbf{V}^{\vec{\boldsymbol{\imath}}}}{\vec{\boldsymbol{\imath}}!} + \sum_{\substack{||\vec{\boldsymbol{\imath}}||_1=2 \\ \vec{\boldsymbol{\imath}} \notin \tau_k}} \mathcal{D}^{(\vec{\boldsymbol{\imath}})} f(\mathbf{x}) \frac{h^2\beta_\ell^2 \mathbf{V}^{\vec{\boldsymbol{\imath}}}}{\vec{\boldsymbol{\imath}}!} + H_k\left(h, \beta_\ell, \mathbf{V}\right) ,$$

带有余项

$$\begin{aligned} H_k\left(h, \beta_\ell, \mathbf{V}\right) &= \sum_{\substack{||\vec{\boldsymbol{\imath}}||_1=2 \\ \vec{\boldsymbol{\imath}} \in \tau_k}} \mathcal{D}^{(\vec{\boldsymbol{\imath}})} f(\mathbf{x}+\beta_\ell h\mathbf{V}) \frac{h^2\beta_\ell^2 \mathbf{V}^{\vec{\boldsymbol{\imath}}}}{\vec{\boldsymbol{\imath}}!} = \sum_{\substack{||\vec{\boldsymbol{q}}||_1=1 \\ \vec{\boldsymbol{\imath}} \in \tau_k}} \mathcal{D}^{(\vec{k}+\vec{\boldsymbol{q}})} f(\mathbf{x}+\beta_\ell h\mathbf{V}) \frac{(h\beta_\ell)^2 \mathbf{V}^{\vec{\boldsymbol{q}}+\vec{k}}}{(\vec{k}+\vec{\boldsymbol{q}})!} \\ &= (h\beta_\ell)^2 V_k \sum_{||\vec{\boldsymbol{q}}||_1=1} \mathcal{D}^{(\vec{k}+\vec{\boldsymbol{q}})} f(\mathbf{x}+\beta_\ell h\mathbf{V}) \frac{\mathbf{V}^{\vec{\boldsymbol{q}}}}{(\vec{k}+\vec{\boldsymbol{q}})!} =: (h\beta_\ell)^2 V_k H_k^0(h, \beta_{\ell_1}, \mathbf{V}) , \end{aligned}$$

其中有 $|H_k^0(h, \beta_{\ell_1}, \mathbf{V})| \leq M_2 ||\mathbf{V}||_1$。然后，利用 V_j 的对称性，我们可以写成

$$\mathbb{E}\left[f(\mathbf{x}+\beta_\ell h\mathbf{V}) V_k\right] = h\beta_\ell\sigma^2 \frac{\partial f}{\partial x_k}(\mathbf{x}) + (h\beta_\ell)^2 \mathbb{E}\left[V_k^2 H_k^0(h, \beta_{\ell_1}, \mathbf{V})\right] + \mathcal{O}(h^2) .$$

关于偏差，即 $B := \mathbb{E}\left[\widehat{C'} - C'\right]$，我们有

$$\begin{aligned} B &= \mathbb{E}_{\mathbf{X}} \left[G^{-1}(\mathbf{X}) \mathbb{E}_V \left[\sum_{\ell_1=1}^{L} \frac{\zeta_{\ell_1}}{h\sigma^2} f\left(\mathbf{X} + h\beta_{\ell_1}\mathbf{V}\right) \mathbf{V} - \nabla f(\mathbf{X}) \right] \right. \\ &\quad \left. \mathbb{E}_{V'} \left[\sum_{\ell_2=1}^{L} \frac{\zeta_{\ell_2}}{h\sigma^2} f\left(\mathbf{X} + h\beta_{\ell_2}\mathbf{V}'\right) \mathbf{V}'^T - \nabla^T f(\mathbf{X}) \right] G^{-1}(\mathbf{X}) \right] \\ &\preceq \sum_{\ell_1 \leq \ell_2} \frac{M_2^2 \left|\zeta_{\ell_1}\zeta_{\ell_2}\right| \beta_{\ell_1}^2 \beta_{\ell_2}^2 h^2}{\sigma^4} \mathbb{E}_{\mathbf{X}} \left[G^{-1}(\mathbf{X}) \mathbb{E}\left[\mathbf{V}^2 \left(\mathbf{V}'^2\right)^T ||\mathbf{V}||_1 ||\mathbf{V}'||_1 \right] G^{-1}(\mathbf{X}) \right] \\ &= \sum_{\ell_1 \leq \ell_2} \frac{M_2^2 \left|\zeta_{\ell_1}\zeta_{\ell_2}\right| \beta_{\ell_1}^2 \beta_{\ell_2}^2 d h^2}{\sigma^4} \mathbb{E}[R^2] \mathbb{E}_{\mathbf{X}} \left[G^{-1}(\mathbf{X}) \mathbb{E}\left[\mathbf{V}^2 \left(\mathbf{V}'^2\right)^T \right] G^{-1}(\mathbf{X}) \right] \\ &= dM_2^2 h^2 \mathbb{E}[R^2] \mathbb{E}\left[G^{-1}(\mathbf{X}) T G^{-1}(\mathbf{X}) \right] \sum_{\ell_1 \leq \ell_2} \left|\zeta_{\ell_1}\zeta_{\ell_2}\right| \beta_{\ell_1}^2 \beta_{\ell_2}^2 , \end{aligned}$$

因为 $||\mathbf{V}||_1 = R||\mathbf{U}||_1 \leq R\sqrt{d}\mathbf{U}||_2 = R\sqrt{d}$。由此可得偏差上界为 $\mathbb{E}\left[\mathbf{V}^2 \left(\mathbf{V}'^2\right)^T\right] = \sigma^4 T$。

对于 $\widehat{C'}$ 的迹的方差，即 $\Gamma := \mathbb{V}\left[\mathrm{Tr}(\widehat{C'})\right]$，我们可以写成

$$\begin{aligned}
\Gamma &= \mathbb{V}\left[\sum_{\ell_1\le\ell_2}\sum_{i=1}^{N}\frac{\zeta_{\ell_1}\zeta_{\ell_2}}{h^2\sigma^4 N} g\left(\mathbf{X}_i+h\beta_{\ell_1}\mathbf{V}_i\right) g\left(\mathbf{X}_i+\beta_{\ell_2}h\mathbf{V}_i'\right)\mathrm{Tr}\left(G^{-1}(\mathbf{X}_i)\mathbf{V}_i\mathbf{V}_i'^{T}G^{-1}(\mathbf{X}_i)\right)\right] \\
&= \frac{1}{h^4\sigma^8 N}\mathbb{V}\left[\sum_{\ell_1\le\ell_2}\zeta_{\ell_1}\zeta_{\ell_2} g\left(\mathbf{X}+h\beta_{\ell_1}\mathbf{V}\right) g\left(\mathbf{X}+\beta_{\ell_2}h\mathbf{V}'\right)\mathrm{Tr}\left(G^{-1}(\mathbf{X})\mathbf{V}\mathbf{V}'^{T}G^{-1}(\mathbf{X})\right)\right] \\
&\le \mathbb{E}\left[\left\{\sum_{\ell_1}\zeta_{\ell_1} g\left(\mathbf{X}+h\beta_{\ell_1}\mathbf{V}\right)\right\}^2\left\{\sum_{\ell_2}\zeta_{\ell_2} g\left(\mathbf{X}+\beta_{\ell_2}h\mathbf{V}'\right)\right\}^2\frac{\mathrm{Tr}^2\left(G^{-1}(\mathbf{X})\mathbf{V}\mathbf{V}'^{T}G^{-1}(\mathbf{X})\right)}{h^4\sigma^8 N}\right] \\
&\le \frac{1}{h^4\sigma^8 N}\left(\mathbb{E}\left[\left\{\sum_{\ell_1}\zeta_{\ell_1} g\left(\mathbf{X}+h\beta_{\ell_1}\mathbf{V}\right)\right\}^8\right]\right)^{1/2}\left(\mathbb{E}\left[\mathrm{Tr}^4\left(G^{-1}(\mathbf{X})\mathbf{V}\mathbf{V}'^{T}G^{-1}(\mathbf{X})\right)\right]\right)^{1/2},
\end{aligned}$$

通过应用与 (4, 4, 2) 相关的 Hölder不等式，可得 $1/4+1/4+1/2=1$。由于 $f\in\mathcal{H}_\alpha$，且 $\alpha\in\{0,2\}$，我们有 $|f(\mathbf{X}+h\beta_{\ell_1}\mathbf{V})-f(\mathbf{X})|\le M_1 h|\beta_{\ell_1}|||\mathbf{V}||_2$，这意味着 $f(\mathbf{X}+h\beta_{\ell_1}\mathbf{V})$ 关于 V 是 Lipschitz 函数，常数为 $M_1 h|\beta_{\ell_1}|$。这一结果表明，$\sum_{\ell_1}\zeta_{\ell_1}f(\mathbf{X}+h\beta_{\ell_1}\mathbf{V})$ 关于 V 也是 Lipschitz 函数，常数为 $M_1 h\sum_{\ell_1}|\zeta_{\ell_1}\beta_{\ell_1}|$，因为

$$\left|\sum_{\ell_1}\zeta_{\ell_1}f\left(\mathbf{X}+h\beta_{\ell_1}\mathbf{V}\right)-\sum_{\ell_1}\zeta_{\ell_1}f\left(\mathbf{X}\right)\right|\le M_1 h||\mathbf{V}||_2\sum_{\ell_1}|\zeta_{\ell_1}\beta_{\ell_1}|.$$

通过取 $K_0=\mathbb{E}\left[f(\mathbf{X}+h\beta_{\ell_1}\mathbf{V})\right]$, 由引理 2 可知

$$\begin{aligned}
A_1 &:= \mathbb{E}\left[\left\{\sum_{\ell_1}\zeta_{\ell_1} g\left(\mathbf{X}+h\beta_{\ell_1}\mathbf{V}\right)\right\}^8\right]\le\frac{48M_1^8h^8\left(\sum_{\ell_1}|\zeta_{\ell_1}\beta_{\ell_1}|\right)^8}{c_0^4d^4}\mathbb{E}\left[R^8\right] \\
&= \frac{432M_1^8h^8\sigma^8}{c_0^4}\left(\sum_{\ell_1}|\zeta_{\ell_1}\beta_{\ell_1}|\right)^8,
\end{aligned}$$

因为 $\mathbb{E}[R^2]=d\sigma^2$ 且 $R\sim\mathcal{U}\left(0,\sqrt{3d\sigma^2}\right)$。因此，我们有

$$\Gamma\le\frac{\sqrt{432}M_1^4}{c_0^2\sigma^4 N}\left(\sum_{\ell_1}|\zeta_{\ell_1}\beta_{\ell_1}|\right)^4\left(\mathbb{E}\left[\mathrm{Tr}^4\left(G^{-1}(\mathbf{X})\mathbf{V}\mathbf{V}'^{T}G^{-1}(\mathbf{X})\right)\right]\right)^{1/2},$$

并且，当使用 $\mathbf{Z}=\mathbf{V}/\sigma$ 和 $\mathbf{Z}'=\mathbf{V}'/\sigma$时，结果仍然成立。

附录 D 定理证明4

根据上述要素，定理 3 的 (i)-(ii) 点显而易见。由于 $d\nu_j^* = \mathbb{E}\left[\left(e_j^T grad(f)(\mathbf{X})\right)^2\right]$，$d\Phi_j$的表达式如下：

$$\begin{aligned}
d\Phi_j &= \frac{1}{d}\sum_{u\subseteq(D\setminus\{j\})}\binom{d-1}{|u|}^{-1}\left[\eta(u\cup\{j\})-\eta(u)\right] \\
&= \frac{1}{d}\sum_{u\subseteq(D\setminus\{j\})}\binom{d-1}{|u|}^{-1}\left\{d\nu_j^* + \sum_{k\in u}\mathbb{E}\left[\left|e_j^T grad(f)(\mathbf{X})\, e_k^T grad(f)(\mathbf{X})\right|\right]\right\} \\
&= \frac{d\nu_j^*}{d}\sum_{|u|=0}^{d-1}\binom{d-1}{|u|}\binom{d-1}{|u|}^{-1} \\
&\quad + \frac{1}{d}\sum_{u\subseteq(D\setminus\{j\})}\sum_{k\in u}\binom{d-1}{|u|}^{-1}\mathbb{E}\left[\left|e_j^T grad(f)(\mathbf{X})\, e_k^T grad(f)(\mathbf{X})\right|\right] \\
&= d\nu_j^* + \frac{1}{d}\sum_{k_0\in(D\setminus\{j\})}\sum_{p=1}^{d-1}\binom{d-2}{p-1}\binom{d-1}{p}^{-1}\mathbb{E}\left[\left|e_j^T grad(f)(\mathbf{X})\, e_{k_0}^T grad(f)(\mathbf{X})\right|\right],
\end{aligned}$$

因为对于给定的 $k_0 \in (D\setminus\{j\})$，我们有 $\binom{d-2}{p-1}$ 个子集 $u \subseteq (D\setminus\{j\})$，其基数为 $|u| = p$，且 $k_0 \in u$。结果成立，因为

$$\frac{1}{d}\sum_{p=1}^{d-1}\binom{d-2}{p-1}\binom{d-1}{p}^{-1} = \frac{1}{d(d-1)}\sum_{p=1}^{d-1} p = \frac{1}{2}.$$

参考文献

[1] I. M. Sobol，非线性数学模型的敏感性分析，《数学建模与计算实验》1（1993）407–414。

[2] A. Saltelli、K. Chan、E. Scott，《基于方差的方法》，概率与统计，John Wiley and Sons，2000年。

[3] S. Kucherenko、M. Rodriguez-Fernandez、C. Pantelides、N. Shah，基于导数的全局敏感性度量的蒙特卡罗评估，《可靠性工程与系统安全》94（2009年）1135–1148。

[4] M. Lamboni, B. Iooss, A.-L. Popelin, F. Gamboa，基于导数的全局敏感性测度：与 Sobol'指数的一般联系及数值测试，《数学与计算机仿真》87 (0) (2013) 45 – 54。

[5] O. Roustant、F. Barthe、B. Iooss，区间上的Poincaré不等式——在敏感性分析中的应用，《电子统计学杂志》11 (2) (2017) 3081–3119。

[6] M . Lamboni, Weak derivative-based expans ion of functions: 方差分析 and 一些不等式，Mathematics and Computers in Simulation 194 (2022年) 691–718。[7] T. A. Mara, S. Tarantola, P. Annoni，针对相关输入模型输出的全局敏感性分析的非参数方法，Environmental Modelling & Software 72 (2015) 173 – 183。[8] A. Owen，Sobol'指数与 Shapley 值，《不确定性量化期刊》2 (2014) 245–251。[9] A. B. Owen, C. Prieur，利用 Shapley 值衡量相关输入的重要性，《SIAM/ASA 不确定性量化期刊》5 (1) (2017) 986– 1002。[10] S. Tarantola, T. A. Mara，具有相关输入的计算机模型的基于方差的敏感性指数：傅里叶幅度敏感性检验，《国际不确定性量化期刊》7 (6) (2017) 511–523。[11] M. Lamboni, S. Kucherenko，相关变量的多变量敏感性分析与基于导数的全局敏感性度量，《可靠性工程与系统安全》212 (2021) 107519。[12] M. Lamboni，利用方差分析衡量输入与输出之间关联的基于核的度量，Sankhya A (2024) 1–37。[13] M. Lamboni，给定输入子集的输出分布与相关广义敏感性指数，《数学》13 (5) (2025年)。[14] H. Duan, G. Okten，用于全局敏感性分析和机器学习可解释性的基于导数的 Shapley 值，《国际不确定性量化期刊》15 (1) (2025年) 1–16。[15] T. M. Russi，利用实验数据和复杂系统模型进行不确定性量化，2010。[16] P. Constantine, E. Dow, S. Wang，活跃子空间方法的理论与实践：在克里金曲面中的应用，SIAM科学计算杂志 36 (2014) 1500–1524。[17] P. G. Constantine, P. Diaz，基于活跃子空间的全局敏感性度量，《可靠性工程与系统安全》162 (2017) 1 – 13。[18]R. Yue, G. kten，全局活跃子空间方法（2024）。arXiv:2304.14142。

[19] O. Zahm, P. G. Constantine, C. Prieur, Y. M. Marzouk，多元向量值函数的基于梯度的降维，SIAM科学计算杂志 42 (1) (2020年) A534–A558。[20] S. Kucherenko, N. Shah, O. Zaccheus，活跃子空间在模型降阶与设计空间识别中的应用，载于：大规模科学计算国际会议（pp. (1) (2023年) 412–418。[21]M. Lamboni，非独立变量函数的导数公式与梯度，Axioms 12 (9) (2023年)。doi:10.3390/axioms12090845。[22] M. Lamboni，非独立变量函数梯度的最优高效近似，Axioms 13 (7) (2024)。[23] J. J. Jost，黎曼几何与几何分析，第6卷，Springer，2011。[24]P. Petersen，黎曼几何，Springer International Publishing AG，2016。[25] S. Sommer, T. Fletcher, X. Pennec，微分几何与黎曼几何导论，载于：医学图像分析中的黎曼几何统计，Elsevier，2020年，第3–37页。[26] A. Zemanian，《分布理论与变换分析：广义函数导论及其应用》，Dover Books on Advanced Mathematics，Dover Publications，1987。[27] R. Strichartz，《分布理论与傅里叶变换指南》，Studies in advanced mathematics，CRC Press，Boca，1994。[28]M. Lamboni，全局敏感性分析：一种近似总敏感性指数的高效数值方法，《国际不确定性量化期刊》6 (1) (2016) 1–17。[29] M. Lamboni，不确定性量化：非归一化 Sobol'指数的最小方差无偏（联合）估计量，Statistical Papers (2018) – doi:https://doi.org/10.1007/s00362-018-1010-4。[30] M. Morris，用于初步计算实验的析因抽样方案，Technometrics 33 (1991) 161–174。[31] F. Campolongo, J. Cariboni, A. Saltelli，用于大型模型敏感性分析的有效筛选设计，Environmental Modelling & Software 22 (10) (2007) 1509–1518。

[32] I. M. Sobol, S. Kucherenko, 《基于导数的全局敏感性度量及其与全局敏感性指数的联系》, Mathematics and Computers in Simulation 79 (2009) 3009–3017。[33] S. G. Bobkov, M. Ledoux, 《适用于柯西及其他凸测度的加权 Poincaré 型不等式》, Ann. Probab. 37 (2) (2009) 403–427。[34] A. V. Skorohod, 《随机变量的一种表示》, Theory Probab. Appl 21 (3) (1976) 645–648。[35]M. Lamboni, 《高效依赖模型：模拟相关随机变量》, Mathematics and Computers in Simulation (2022)。doi:https://doi.org/10.1016/j.matcom.2022.04.018。[36]M. Lamboni, 《多元加权分布的精确分布及其分类》, Methodol Comput Appl Probab 25 (2023) 1–41。doi:https://doi.org/10.1007/s11009-023-09993-2。[37] M. Lamboni, 《利用核在安全目标下衡量时变风险模型的输入—输出关联》, 《国际不确定性量化期刊》15 (1) (2025)。[38] K. Fang, S. Kotz, K. Ng, 《对称多元分布及相关分布》, Wiley概率与统计丛书，纽约：Chapman and Hall/CRC, 1990年。[39] M. Ledoux, 《测度集中现象》, 数学调查与专著丛书，美国数学学会，2001年。[40] C. Louart, R. Couillet, 《高维稳健统计中的测度集中与随机矩阵方法》, 应用概率年刊（2020）。[41] L. S. Shapley, 《17. n人博弈的一个值》, 普林斯顿大学出版社，普林斯顿，1953年，第307–318页。[42] B. Iooss, C. Prieur, 《用于相关输入敏感性分析的 Shapley效应：与 Sobol'指数的比较、数值估计及应用》, 《国际不确定性量化期刊》9 (5) (2019) 493–514。[43] M. Lamboni, 《具有（或不具有）相关变量的函数梯度的无维数依赖估计量》, Axioms 15 (1) (2026)。