

基于偏导数的 Sobol' 总测度指标的上下限分析

宋述芳¹ 周 桐² 吕震宙¹

1.西北工业大学,西安,710072 2.香港理工大学,香港,999077

摘要:以 Sobol' 主测度指标 S_i 作为总测度指标 S_i^{tot} 的下限,建立并推导了基于偏导数的测度指标作为 S_i^{tot} 的新上限。基于泛函和 Euler-Lagrange 等式,进行了不同变量分布形式下(均匀、正态、指数、Beta、三角分布等),Sobol' 总测度指标 S_i^{tot} 的基于偏导数的上限分析,并给出了新上限详细的推导过程和具体的计算公式。通过简单数值和工程算例,验证了新上限的精度及效率,为更准确地界定总测度指标 S_i^{tot} 的取值区间提供了参考。

关键词:总测度指标;主测度指标;基于偏导数的测度指标;Euler-Lagrange 等式

中图分类号:TP302.7

DOI:10.3969/j.issn.1004-132X.2016.13.014

Analyses for Lower and Upper Bounds of Sobol' Total Sensitivity Index Based on Derivative

Song Shufang¹ Zhou Tong² Lü Zhenzhou¹

1.Northwestern Polytechnical University, Xi'an, 710072

2.Hongkong Polytechnical University, Hongkong, 999077

Abstract: A main sensitivity index S_i was set as the lower bound of S_i^{tot} and the new upper bound of S_i^{tot} was built based on the derivative. On the basis of functional analysis and Euler-Lagrange equation, the new upper bound of S_i^{tot} based derivative was analyzed for different variable distribution types, such as uniform, normal, exponential, triangular, Beta distribution etc. The derived process and formulas were presented in detail. Several numerical and engineering examples were used to verify the precision and efficiency of the presented bounds, which may provide the accurate bounds of S_i^{tot} .

Key words: total global sensitivity index; main global sensitivity index; derivative based global sensitivity index; Euler-Lagrange equation

0 引言

全局灵敏度(又称重要测度)指标可以全面反映模型输入变量的不确定性对模型输出响应不确定性的贡献程度,它在工程设计及概率安全评估中具有很重要的作用^[1-6]。依据全局灵敏度指标的大小,为基本变量进行重要性排序,进而在设计和优化中优先或者重点考虑重要性程度高的基本变量或者忽略重要性程度低的基本变量,对系统工程设计和优化具有重要的指导作用。

基于方差的重要性测度体系在 20 世纪 90 年代中期被提出,目前依然是最主流的重要性测度体系,它以输出响应在给定输入变量条件下均值的方差(也即输出响应条件均值的方差)来度量,从平均的角度直接反映单个输入变量及多个输入变量的交互作用对输出响应方差的贡献^[2,6]。基于方差的重要性测度具有“输入-输出函数关系分解”与“输出响应方差贡献分解”的一一对应关系,这种优越的对应关系使得基于方差的重要性测度

能够在全面反映单个输入变量对输出响应方差影响和多个输入变量对输出响应方差交互影响的同时,还能够反映输入输出函数的结构关系。Sobol'^[2]提出基于方差的全局灵敏度指标包括主测度指标 S_i 和总测度指标 S_i^{tot} 。前者反映的是随机输入变量 x_i 对输出响应的主影响;后者反映的是随机输入变量 x_i 对输出响应的总影响,它包括主测度指标 S_i 以及多个随机变量对输出响应的交叉影响。目前求解 Sobol' 测度指标的方法有很多,如基于 Monte Carlo(MC)或 Quasi Monte Carlo(QMC)模拟的方法^[2,7-8],随机抽样的高维模型替代法(HDMR)^[9-11]等,这些方法需要计算函数方差及条件方差,多涉及双重抽样分析,计算量较大。Sobol'等^[12]提出了基于偏导数的测度指标(derivative-based global sensitivity measure, DGSM),并获得 DGSM 和 S_i^{tot} 的不等式关系, DGSM 不需要进行条件方差的计算,且 DGSM 与 S_i^{tot} 确定的变量重要性排序基本一致。Iooss等^[13]在此基础上,推导得出了服从 Boltzmann 分布的多种 DGSM 指标。

本文在上述研究基础上,以主测度指标 S_i 作为 S_i^{tot} 的下限,并基于泛函和 Euler-Lagrange 等

收稿日期:2015-08-03

基金项目:国家自然科学基金资助项目(NSFC51308459);中央高校基本科研业务费专项资金资助项目(310201401JQC01014, 3102015BJ(II)CG009)

式,建立了基于偏导数的 S_i^{tot} 的新上限,得出了不同变量分布形式下(均匀、正态、指数、Beta、三角分布等)总测度指标 S_i^{tot} 的基于偏导数的新上限计算公式。通过算例分析,得知在大多数情况下,新上限优于 DGSM,能够给出更优的 S_i^{tot} 的界限。

1 Sobol'的测度指标

文献[1-2,6]利用方差分析(analysis of variance, ANOVA)给出了基于方差的重要性测度指标。因而,一般的 ANOVA 分解被认为是基于方差的重要性分析的基础。ANOVA 分解的前提是假设各子项期望为零且各子项正交,在这种假设下 ANOVA 的分解唯一,即功能函数 $Y = f(\mathbf{x})$ 的唯一分解式为

$$f(\mathbf{x}) = f_0 + \sum_{i=1}^n f_i(x_i) + \sum_{i=1}^n \sum_{j>i}^n f_{ij}(x_i, x_j) + \dots + f_{1\dots n}(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (1)$$

其中, $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ 为定义在 \mathbf{R}^n 空间上的 n 维随机向量,假设随机变量间互相独立, $\rho_{X_i}(x_i) (i=1, 2, \dots, n)$ 代表随机变量 x_i 的概率密度函数,则随机向量的联合概率密度函数为 $\rho_X(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^n \rho_{X_i}(x_i)$, 常量 f_0 为函数 $f(\mathbf{x})$ 的均值, $f_0 = \int \dots \int_{\mathbf{R}^n} f(\mathbf{x}) \prod_{i=1}^n (\rho_{X_i}(x_i) dx_i)$; 子项 $f_i(x_i)$ 仅依赖于变量 x_i , 表征该变量的主影响,它可以通过下式求得:

$$f_i(x_i) = \int \dots \int_{\mathbf{R}^{n-1}} f(\mathbf{x}) \prod_{j \neq i} (\rho_{X_j}(x_j) dx_j) - f_0 \quad (2)$$

$f_{ij}(x_i, x_j)$ 表征两变量 (x_i, x_j) 的相互作用,它可以通过下式求得:

$$f_{ij}(x_i, x_j) = \int \dots \int_{\mathbf{R}^{n-2}} f(\mathbf{x}) \prod_{k \neq i, j} (\rho_{X_k}(x_k) dx_k) - f_i(x_i) - f_j(x_j) - f_0 \quad (3)$$

类似地,可得到 $s (s=3, 4, \dots, n)$ 个变量的分解项 $f_{i_1 i_2 \dots i_s}(x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_s})$, 也可称之为 s 阶交叉项,可通过对除这 s 个变量外的所有变量求数学期望后减去这 s 阶变量的任意子集影响及常数项 f_0 得到。

考虑式(1)各分解项的正交特点,功能函数 $Y = f(\mathbf{x})$ 的方差:

$$D = \int \dots \int_{\mathbf{R}^n} f^2(\mathbf{x}) \prod_{i=1}^n (\rho_{X_i}(x_i) dx_i) - f_0^2$$

可以由各分解项方差之和表示,即

$$D = \sum_{i=1}^n D_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j>i}^n D_{ij} + \dots + D_{1\dots n} \quad (4)$$

$$\left. \begin{aligned} D_i &= \int_{\mathbf{R}} f_i^2(x_i) \rho_{X_i}(x_i) dx_i \\ D_{ij} &= \iint_{\mathbf{R}^2} f_{ij}^2(x_i, x_j) \rho_{X_i}(x_i) \rho_{X_j}(x_j) dx_i dx_j \\ &\vdots \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

定义与变量 x_i 有关的子项之和为 $u_i(\mathbf{x})$ ^[14], 即

$$u_i(\mathbf{x}) = f_i(x_i) + \sum_{j=1, j \neq i}^n f_{ij}(x_i, x_j) + \dots + f_{1\dots n}(x_1, \dots, x_n) = f(\mathbf{x}) - \int_{\mathbf{R}} f(\mathbf{x}) \rho_{X_i}(x_i) dx_i \quad (6)$$

则变量 x_i 对输出响应变异性的总贡献 D_i^{tot} 为

$$D_i^{\text{tot}} = \int \dots \int_{\mathbf{R}^n} u_i^2(\mathbf{x}) \prod_{k=1}^n (\rho_{X_k}(x_k) dx_k) \quad (7)$$

定义输入变量 x_i 的主测度指标 S_i 以及总测度指标 S_i^{tot} 分别为

$$\left. \begin{aligned} S_i &= D_i / D \\ S_i^{\text{tot}} &= D_i^{\text{tot}} / D \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

$$D_i = \text{var}[E(Y | x_i)] \quad (9)$$

$$D_i^{\text{tot}} = E[\text{var}(Y | \mathbf{x}_{-i})] \quad (10)$$

其中, $E(\cdot)$ 为期望算子, $\text{var}(\cdot)$ 为方差算子, 下标“ $-i$ ”表示除 x_i 以外的变量, 即 $\mathbf{x}_{-i} = (x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n)$, 从而可得到输入变量 x_i 的重要性测度两个指标的计算表达式分别为

$$S_i = \frac{\text{var}[E(Y | x_i)]}{\text{var}(Y)} = \frac{E[E^2(Y | x_i)] - E^2[E(Y | x_i)]}{D} \quad (11)$$

$$S_i^{\text{tot}} = \frac{E[\text{var}(Y | \mathbf{x}_{-i})]}{\text{var}(Y)} = 1 - \frac{\text{var}[E(Y | \mathbf{x}_{-i})]}{D} \quad (12)$$

依据总测度指标 S_i^{tot} 的大小, 可以对基本变量进行重要性排序, 进而在设计和优化中重点考虑重要性程度高的基本变量以加快优化迭代的收敛速度; 或者忽略重要性程度低的基本变量, 以有效降低结构设计的变量维数。

求解 Sobol' 测度指标的方法有很多, 如基于 MC 或 QMC 模拟的方法(如式(11)、式(12)), 随机抽样的高维模型替代法(HDMR)等(如式(5)), 这些方法多涉及双重抽样分析, 计算量较大。我们更期望找到较简单的计算方式以获得总测度指标的区间, 进而确定变量的重要性排序。

2 文献中的 Sobol' 总测度指标的上下限

2.1 下限(lower bound, LB)

从总测度指标 S_i^{tot} 的定义可以看出: $S_i^{\text{tot}} \geq S_i$, 故而 S_i^{tot} 的下限是 S_i 。

2.2 上限(upper bound, UB)

Sobol' 等^[12] 提出的基于偏导数的测度指标(DGSM)定义为对模型输出偏导数平方的积分。假设模型函数 $Y = f(\mathbf{x})$, 其输入变量 $\mathbf{x} =$

(x_1, x_2, \dots, x_n) 是相互独立的随机向量, 其联合概率密度函数和累积分布函数分别为 $\rho_X(x)$ 和 $F_X(x)$, 如果 $\partial f/\partial x_i$ 存在并且平方可积, 变量 x_i 的 DGSM 指标 v_i 为

$$v_i = \int \dots \int_{\mathbb{R}^n} \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_i} \right)^2 \rho_X(x) dx \quad (13)$$

由文献[13]可以得到不同变量分布的总测度指标 S_i^{tot} 的上限如表 1 所示。将 DGSM 和 S_i^{tot} 两种测度联系在一起的定理如下^[15]。

表 1 满足 log-concave 概率分布情况下的 $v(x)$ 函数、中位数 m 、Cheeger 常数 C_1

分布类型	$v(x)$	m	C_1
正态分布 $N(\mu, \sigma^2)$	$\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2} + \ln\sigma$	μ	$\frac{\sigma}{2}$
指数分布 $E(\lambda), \lambda > 0$	$\lambda x - \ln\lambda$	$\frac{\ln 2}{\lambda}$	$\frac{1}{\lambda}$
Beta 分布 $B(\alpha, \beta), \alpha, \beta \geq 1$	$\ln(x^{1-\alpha}(1-x)^{1-\beta})$		
Gamma 分布 $\Gamma(\alpha, \beta), \alpha \geq 1, \beta > 0$	$\ln(x^{1-\alpha}\Gamma(\alpha)) + \frac{x}{\beta} + \alpha \ln(\beta)$		
均匀分布 $U(a, b)$	$\frac{1}{b-a}, a < x < b$	$\frac{a+b}{2}$	$\frac{b-a}{2\pi}$

定理 1 在以下假设条件下: ① 随机输入变量相互独立; ② 函数 $f(x)$ 为实函数; ③ $f(x)$ 的一阶导数为实函数; ④ 随机变量 x_i 的分布是 Boltzman 概率测度, 有

$$D_i^{\text{tot}} \leq C(\mu_i)v_i \quad (14)$$

$$C(\mu_i) = 4C_1^2$$

$$C_1 = \sup_{x \in \mathbb{R}} \frac{\min(F_{X_i}(x_i), 1 - F_{X_i}(x_i))}{\rho_{X_i}(x_i)}$$

其中, $F_{X_i}(x_i)$ 为随机变量 x_i 的累积分布函数。

定理 2 在以下假设条件下: ① 随机输入变量相互独立; ② 函数 $f(x)$ 为实函数; ③ $f(x)$ 的一阶导数为实函数; ④ 随机变量 x_i 的分布是 log-concave 概率测度, 有

$$D_i^{\text{tot}} \leq (\exp(v(m)))^2 v_i \quad (15)$$

其中, Cheeger 常数 $C_1 = \frac{\exp(v(m))}{2}$, m 为测度函数 $v(x)$ 的中位数。

3 Sobol' 总测度指标 S_i^{tot} 的新上限公式及推导

3.1 均匀分布

根据文献[16]中理论 225, 如果函数 u 是可积的(0, 1 点可以除外), $x(1-x)\dot{u}^2$ 在(0, 1) 之间也是可积的, 那么有

$$0 \leq \int_0^1 u^2 dx - \left(\int_0^1 u dx \right)^2 \leq \frac{1}{2} \int_0^1 x(1-x)\dot{u}^2 dx \quad (16)$$

并且当且仅当 u 是常数的时候等号成立。

假设输入变量 x_i 服从区间(0, 1) 的均匀分布, 即 $x_i \sim U(0, 1)$, 则 $D_i^{\text{tot}} = \int \dots \int_{\mathbb{H}^n} u_i^2 \prod_{k=1}^n dx_k$ 的上限为

$$D_i^{\text{tot}} \leq \frac{1}{2} \int \dots \int_{\mathbb{H}^n} x_i(1-x_i)\dot{u}_i^2 \prod_{k=1}^n dx_k \quad (17)$$

其中, \mathbb{H}^n 为 n 维的超立方体空间, u_i 为与变量 x_i 有关的项。

由于 ANOVA 中分解式 $\int_0^1 u dx = 0$, 再对其进行积分, 即可得到(0, 1) 区间上的均匀分布变量的总测度指标的新上限。

根据变量代换可得出 (a, b) 区间上的均匀分布变量的总测度指标的新上限为

$$D_i^{\text{tot}} \leq \frac{1}{2(b-a)} \int \dots \int_{\mathbb{R}^n} (x_i-a)(b-x_i)\dot{u}_i^2 \prod_{k=1}^n dx_k \quad (18)$$

3.2 其他变量分布类型

假设对于其他分布, 构造如下形式的上限:

$$D_i^{\text{tot}} \leq \int \dots \int_{\mathbb{R}^n} A(x_i)\dot{u}_i^2(x_i) dF_X(x) \quad (19)$$

其中, $A(x_i)$ 是关于 x_i 的表达式, 多数情况下选取为多项式形式, 显然 $A(x_i)$ 的选取与随机变量 x_i 所服从的分布相关, 使得 $\int_{\mathbb{R}} u^2(t)\rho(t) dt \leq \int_{\mathbb{R}} A(t)\dot{u}^2(t)\rho(t) dt$ 成立。

假设 $\Phi = \Phi[u]$ 是一个关于 $u(t)$ 的泛函, 即

$$\Phi = \int_{\mathbb{R}} (A(t)\dot{u}^2(t) - u^2(t))\rho(t) dt \quad (20)$$

将积分不等式转化为变分法求泛函极值的问题, 当 $u(t)$ 满足 $\int_{\mathbb{R}} u(t)\rho(t) dt = 0$ 时使得泛函 $\Phi[u]$ 最小。假设泛函有极值函数 $u^* = t - \mu$, 其中 μ 是随机变量 t 的平均值, 此极值函数需满足 Euler-Lagrange 方程:

$$A(t)\ddot{u} + (\dot{A}(t) + \frac{\rho(t)}{\dot{\rho}(t)}A(t))\dot{u} + u = 0 \quad (21)$$

即 $\dot{A}(t) + \frac{\rho(t)}{\dot{\rho}(t)}A(t) + t - \mu = 0$ 。要使不等式

$\int_{\mathbb{R}} u^2(t)\rho(t) dt \leq \int_{\mathbb{R}} A(t)\dot{u}^2(t)\rho(t) dt$ 成立, 应满足泛函 $\Phi = \int_{\mathbb{R}} (A(t)\dot{u}^2(t) - u^2(t))\rho(t) dt \geq 0$ 。

也就是说, 泛函的最小值 $\min \Phi[u] = \Phi[t - \mu] = 0$ 。推导得出的 $A(x_i)$ 的表达式列于表 2。

表 2 满足 log-concave 概率分布情况下的新上限 $A(x_i)$ 函数

分布类型	概率密度函数	$A(x_i)$
正态分布 $N(\mu, \sigma^2)$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}, -\infty < x < +\infty$	$(x_i - \mu)^2$
对数正态分布 $\ln(\mu, \sigma^2)$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma x} e^{-\frac{(\ln x - \mu)^2}{2\sigma^2}}, x > 0$	$(x_i - e^{\mu + \sigma^2/2})^2$
指数分布 $E(\lambda), \lambda > 0$	$\lambda e^{-\lambda x}, x > 0$	$\frac{1}{\lambda} x_i$
Beta 分布 $B(\alpha, \beta), \alpha, \beta \geq 1$	$\frac{x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)}, 0 < x < 1$	$\frac{1}{\rho(x_i)} (\frac{\alpha}{\alpha+\beta} F(x_i) - \frac{B(\alpha+1, \alpha)}{B(\alpha, \beta)} G(x_i) + K_1)$
Gamma 分布 $\Gamma(\alpha, \beta), \alpha \geq 1, \beta > 0$	$\frac{1}{\Gamma(\alpha)\beta^\alpha} x^{\alpha-1} e^{-\frac{x}{\beta}}, x > 0$	$\frac{1}{\rho(x_i)} (\alpha\beta F(x_i) - \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha)} \beta G(x_i) + K_2)$
三角形分布 $T(a, c, b)$	$\begin{cases} \frac{2(x-a)}{(b-a)(c-a)} & a < x < c \\ \frac{2(b-x)}{(b-a)(b-c)} & c < x < b \end{cases}$	$\begin{cases} \frac{1}{x_i-a} [-\frac{1}{3}x_i^3 + \frac{1}{2}(\mu_1+a)x_i^2 - \mu_1ax_i + K_3] & a < x_i < c \\ \frac{1}{b-x_i} [\frac{1}{3}x_i^3 - \frac{1}{2}(\mu_2+b)x_i^2 + \mu_2bx_i + K_4] & c < x_i < b \end{cases}$
均匀分布 $U(a, b)$	$\frac{x-a}{b-a}, a < x < b$	$\frac{(x_i-a)(b-x_i)}{2(b-a)}$

表 2 中的常数 K_1, K_2, K_3 和 K_4 分别为

$$K_1 = -\frac{\alpha^2\beta + \alpha\beta^2}{(\alpha + \beta)^2(\alpha + \beta + 1)} + \frac{B(\alpha + 1, \alpha)}{B(\alpha, \beta)} \frac{\beta}{\alpha + \beta + 1}$$

$$K_2 \geq 0$$

$$K_3 = \frac{1}{c-a} [\frac{(b-a)(c-a)}{2} \sigma_1^2 + \frac{1}{12}(c^4 - a^4) - \frac{1}{6}(\mu_1 + a)(c^3 - a^3) + \frac{1}{2}\mu_1a(c^2 - a^2)]$$

$$K_4 = \frac{1}{b-c} [\frac{(b-a)(b-c)}{2} \sigma_2^2 - \frac{1}{12}(b^4 - c^4) + \frac{1}{6}(\mu_2 + b)(b^3 - c^3) - \frac{1}{2}\mu_2b(b^2 - c^2)]$$

4 算例及分析

将文献[12-13]提出的基于偏导数的测度指标 DGSM 称为 γ_{UB1} , 本文所提出的新上限称为 γ_{UB2} , 通过对不同分布、不同类型的功能函数进行测试, 验证其正确性与有效性。

4.1 数值算例

4.1.1 均匀分布算例

算例 1~3 的函数及测度指标结果显示列于表 3, 其中所有输入变量均服从 $(0, 1)$ 区间上的均匀分布, 变量之间相互独立。

从算例 1~3 的结果可以看出, 对于均匀分布变量来说, 大多数情况下, 随机变量的 γ_{UB2} 能够比 γ_{UB1} 获得更好的总测度指标的上限。以算例 3 为例, 随着幂指数 α 的增大, γ_{UB2} 比 γ_{UB1} 增长速率明显低很多, 如图 1 所示。从算例结果可以看出, 对于可加模型函数, $\gamma_{UB2} = S_i^{tot}$, 且 γ_{UB2} 和 γ_{UB1} 确定的变量重要性排序和总测度指标一致。

表 3 算例 1~3 的函数及测度指标结果对比

算例	指标	随机变量				
		x_1	x_2	x_3	x_4	
1	$f(x) = \sum_{i=1}^4 x_i^2$	S_i	0.2500	0.2500	0.2500	0.2500
	S_i^{tot}	0.2500	0.2500	0.2500	0.2500	
	γ_{UB1}	0.3856	0.3856	0.3856	0.3856	
	γ_{UB2}	0.2860	0.2860	0.2860	0.2860	
2	$f(x) = \sum_{i=1}^4 i \sin(\pi x_i)$	S_i	0.0333	0.1333	0.3000	0.5333
	S_i^{tot}	0.0333	0.1333	0.3000	0.5333	
	γ_{UB1}	0.1760	0.7038	1.5837	2.8154	
	γ_{UB2}	0.1008	0.4030	0.9068	1.6121	
3	$f(x) = \prod_{i=1}^4 x_i^\alpha$	$\alpha = 0.5$	$\alpha = 1$	$\alpha = 2$	$\alpha = 4$	
	S_i	0.2078	0.1543	0.0844	0.0327	
	S_i^{tot}	0.2958	0.3657	0.4911	0.6488	
	γ_{UB1}	1.5737	0.4447	0.7578	2.1935	
γ_{UB2}	0.3201	0.3657	0.5619	1.0578		

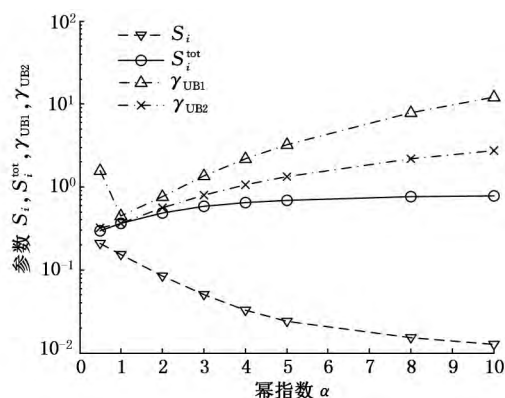


图 1 算例 3 的 $S_i, S_i^{tot}, \gamma_{UB1}, \gamma_{UB2}$ 随 α 的变化趋势图

4.1.2 指数分布算例

算例 4~6 的函数及测度指标结果参见表 4,

其中输入变量 x_1, x_2, x_3, x_4 分别服从均值为 1, 2, 3, 4 的指数分布, 变量之间相互独立。

表 4 算例 4~6 的函数及测度指标结果对比

算例	指标	随机变量				
		x_1	x_2	x_3	x_4	
4	$f(x) = \sum_{i=1}^4 \sqrt{x_i + 1}$	S_i	0.0693	0.1820	0.3080	0.4407
		S_i^{tot}	0.0693	0.1820	0.3080	0.4407
		γ_{UB1}	0.4181	1.2947	2.4349	3.7638
		γ_{UB2}	0.0708	0.1891	0.3237	0.4671
5	$f(x) = \sum_{i=1}^4 ix_i^\alpha$		$\alpha = 1$	$\alpha = 2$	$\alpha = 3$	$\alpha = 4$
		S_i	0.7232	0.8377	0.9063	0.9466
		S_i^{tot}	0.7232	0.8377	0.9063	0.9466
		γ_{UB1}	2.8937	1.3471	1.1716	1.1864
		γ_{UB2}	0.7232	1.0092	1.4546	2.0185
6	$f(x) = (x_1 x_2)^\alpha$		$\alpha = 0.5$	$\alpha = 1$	$\alpha = 2$	$\alpha = 4$
		S_i	0.4398	0.3308	0.0775	0.0001
		S_i^{tot}	0.5601	0.6648	0.6836	0.5026
		γ_{UB1}	12.9193	2.6650	0.8127	0.5995
		γ_{UB2}	0.6373	0.6617	0.7309	1.5479

从算例 4~6 的结果可以看出, 对于指数分布变量来说, 对于非线性程度不大的情况, 随机变量 γ_{UB2} 可比 γ_{UB1} 更精确地对总测度指标 S_i^{tot} 作出估计和评估, γ_{UB2} 获得的总测度指标上限的有效性随着模型函数非线性程度的增大而大大降低(图 2)。但是对于高次幂相加模型函数, γ_{UB1} 有更精确的估计值, 但此时 γ_{UB1} 和 γ_{UB2} 都大于 1。 γ_{UB2} 和 γ_{UB1} 确定的变量重要性排序和总测度指标一致。

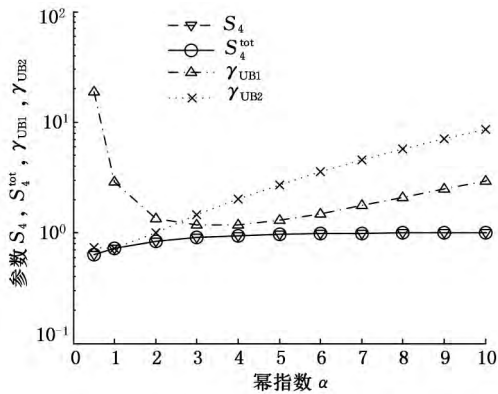


图 2 算例 5 的 $S_4, S_4^{tot}, \gamma_{UB1}, \gamma_{UB2}$ 随 α 的变化趋势图

4.2 工程算例

工程算例 1 悬臂梁结构在自由端受到载荷 P 作用, 以自由端位移不超过 0.004 m 建立极限状态方程为

$$f(x) = \frac{4PL^3}{Ebh^3} - 0.004(m)$$

其中, 弹性模量 $E=200$ GPa。将梁的长 L 、宽 b 和高 h 看作随机变量, 其均值分别为 0.5 m, 0.02 m, 0.05 m, 标准差为 0.05 m, 0.002 m, 0.005 m, 其中, L 和 h 为对数正态分布变量, b 为正态分布变量, 载荷 P 为 (200, 400)N 的均匀分布变量。该算例的测度指标对比表参见表 5。

表 5 工程算例 1 的测度指标结果对比

	S_i	S_i^{tot}	γ_{UB1}	γ_{UB2}
L	0.7451	0.7812	0.8334	1.3617
h	0.0372	0.0463	0.0467	0.0468
b	0.0390	0.0493	0.0504	0.0610
P	0.1367	0.1676	0.2040	0.1682

从表 5 可以看出, 两种上限给出的变量重要性排序是一致的, 且都能够很好地找出对输出响应影响小的两个参数 b 和 h , 均匀分布时指标 γ_{UB2} 比 γ_{UB1} 好, 正态分布时指标 $\gamma_{UB1} \leq \gamma_{UB2}$, 当且仅当为正态线性函数时, 等号成立。

工程算例 2 基于材料的蠕变和疲劳试验数据, 并考虑一级载荷水平, 文献[17] 采用如下非线性极限状态方程来定义失效与安全的边界线:

$$g(N_c, N_f, n_c, n_f, \theta_1, \theta_2) = 2 - e^{\theta_1 D_c} + \frac{e^{\theta_1} - 2}{e^{-\theta_2} - 1} (e^{-\theta_2 D_c} - 1) - D_f$$

$$D_c = n_c / N_c \quad D_f = n_f / N_f$$

其中, θ_1 和 θ_2 为从试验数据中得到的两个参数; N_c 与 N_f 分别为蠕变寿命和疲劳寿命; n_c 和 n_f 分别为蠕变载荷和疲劳载荷作用的实际周次。

文献[17] 依据试验分析, 假定上述极限状态方程中的基本随机变量 N_c, N_f, n_c, n_f 均服从对数正态分布, θ_1 和 θ_2 服从正态分布(表 6), 则该算例的测度指标对比参见表 7。

表 6 基本变量分布形式

	N_c	N_f	n_c	n_f	θ_1	θ_2
均值 μ_X	5490	17 100	549	4000	0.42	6.0
变异系数 V_X	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20
分布形式	对数正态	对数正态	对数正态	对数正态	正态	正态

表 7 工程算例 2 的测度指标结果对比

	S_i	S_i^{tot}	γ_{UB1}	γ_{UB2}
N_c	0.1757	0.1785	0.2141	0.2272
N_f	0.2573	0.2675	0.3490	0.4355
n_c	0.1757	0.1785	0.1886	0.1786
n_f	0.2573	0.2675	0.2675	0.2675
θ_1	0.0103	0.0112	0.0112	0.0112
θ_2	0.1097	0.1110	0.1120	0.1197

从表 7 可以看出, 通过比较 S_i 和 S_i^{tot} 可以看出, 变量间的交叉影响较小; 上限 γ_{UB1} 和 γ_{UB2} 都能较好地估计 S_i^{tot} 的上限, 并找出影响较小的变量 θ_1 和 θ_2 ; 对于变量 N_c 与 N_f, γ_{UB1} 可以得到更好的 S_i^{tot} 界限。

工程算例 3 单层单跨结构(图 3) 的极限状态方程为

$$f(x) = 0.01 m - u_3(A_1, A_2, P) = 0.01 m - \frac{48k + 32}{18k + 3} \frac{P}{EI_1} \quad k = I_2 / I_1$$

其中, u_3 为节点 3 的水平位移, A_1, A_2 为柱和梁

的截面面积,它们服从对数正态分布, P 为外加载荷,服从 Gamma 分布,均值和变异系数向量分别为 $\mu_x = (0.36 \text{ m}^2, 0.18 \text{ m}^2, 20 \text{ kN})$, $V_x = (0.1, 0.1, 0.25)$,弹性模量 $E = 200 \text{ GPa}$,柱和梁的截面惯性矩分别为 $I_1 = \frac{A_1^2}{12}$, $I_2 = \frac{A_2^2}{6}$,该算例的测度指标对比参见表 8。

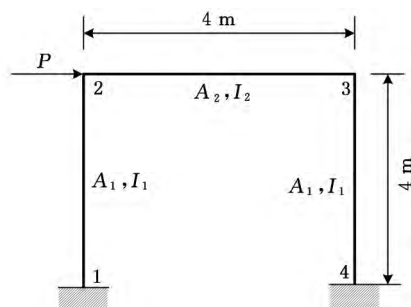


图 3 单层单跨结构

表 8 工程算例 3 的测度指标结果对比

	S_i	S_i^{tot}	γ_{UB1}	γ_{UB2}
A_1	0.996 37	0.997 62	1.023 52	1.198 83
A_2	0.002 29	0.002 33	0.002 34	0.002 39
P	0.000 36	0.000 38	0.002 41	0.000 38

从表 8 可以看出,通过 S_i^{tot} 可以看出变量的重要性排序是 A_1, A_2, P ; 上限 γ_{UB1} 和 γ_{UB2} 都能辨别出重要变量为 A_1 , 非重要变量为 A_2 和 P ; 但是由 γ_{UB1} 得到的 A_2 和 P 的重要顺序是反的。

5 结语

本文围绕 Sobol' 总测度指标和基于偏导数的测度指标进行了如下工作:建立了 $(0, 1)$ 区间上均匀分布变量的偏导数测度指标,并将其作为 Sobol' 总测度指标的新上限,在此基础上基于泛函和 Euler-Lagrange 等式,推导出了正态分布、指数分布、Beta 分布、三角分布等分布形式的偏导数测度指标公式。采用 QMC 方法,在输入变量服从不同分布,不同的功能函数情况下,计算出不同测度指标,并比较它们之间的关系,从理论和数值上证实了所提指标的可靠性。通过算例比较分析得出,对于均匀分布来说,大多数情况下, γ_{UB2} 优于 γ_{UB1} , 对于指数分布来说,当函数非线性程度不高时, γ_{UB2} 的优越性还是很明显的,但随着函数非线性程度的提高, γ_{UB1} 的优势逐渐显现出来。此外, γ_{UB2} 和 γ_{UB1} 确定的变量重要性排序和总测度指标基本一致。

参考文献:

[1] 吕震宙,李璐祎,宋述芳,等. 不确定性结构系统的重要性分析理论与求解方法[M]. 北京:科学出版社, 2015.

- [2] Sobol' I M. Global Sensitivity Indices for Nonlinear Mathematical Models and Their Monte Carlo Estimates[J]. Mathematics and Computer in Simulation, 2001, 55(1):221-280.
- [3] Borgonovo E. Measuring Uncertainty Importance: Investigation and Comparison of Alternative Approaches[J]. Risk Analysis, 2006, 26(5): 1349-1361.
- [4] Borgonovo E. A New Uncertainty Importance Measure [J]. Reliability Engineering & System Safety, 2007, 92(6):771-784.
- [5] Saltelli A. Sensitivity Analysis for Importance Assessment[J]. Risk Analysis, 2002, 22(3): 579-590.
- [6] Saltelli A, Andres M, Campolongo F, et al. Global Sensitivity Analysis: the Primer[M]. New York: John Wiley & Sons Ltd., 2008.
- [7] Feil B, Kucherenko S, Shah N. Comparison of Monte Carlo and Quasi Monte Carlo Sampling Methods in High Dimensional Model Representation [C]//The First International Conference on Advances in System Simulation. Porto, SIMUL, 2009:12-17.
- [8] Sobol' I M, Kucherenko S. On Global Sensitivity Analysis of Quasi-Monte Carlo Algorithms [J]. Monte Carlo Methods and Simulation, 2005, 11(1): 1-9.
- [9] Li G Y, Hu J S, Wang S W, et al. Random Sampling-high Dimensional Model Representation (RS-HDMR) and Orthogonality of Its Different Order Component Functions [J]. Journal of Physical Chemistry A, 2006, 110(7): 2474-2485.
- [10] Feil B, Kucherenko S, Shah N. Volatility Calibration Using Spline and High Dimensional Model Representation Models[J]. Wilmott, 2009, 1(2): 179-195.
- [11] Kucherenko S, Song S. Comparison of Different Numerical Estimators for Main Effect Global Sensitivity Indices [C]//1st ECCOMAS Thematic Conference on Uncertainty Quantification in Computational Sciences and Engineering. Crete Island, 2015:22-53.
- [12] Sobol' I M, Kucherenko S. Derivative based Global Sensitivity Measures and Their Link with Global Sensitivity Indices[J]. Mathematics and Computers in Simulation, 2009, 79(10): 3009-3017.
- [13] Iooss B, Popelin A L, Blatman G, et al. Some New Insights in Derivative-based Global Sensitivity Measures[C]//Proceedings of PSAM 11 & ESREL 2012 Conference. Helsinki, 2012: 1094-1104.

基于焊点形态分析的小节距 BGA 焊盘尺寸设计

陈轶龙¹ 贾建援¹ 付红志² 朱朝飞¹

1.西安电子科技大学,西安,710071 2.中兴通讯股份有限公司,深圳,518000

摘要:为了寻找 BGA 焊点体积、焊盘尺寸及焊点节距之间的最佳匹配关系以提高焊接成品率,研究了焊点形态对焊接高度的影响。通过 Runge-Kutta 方法求解带体积约束的 Young-Laplace 方程,仿真分析了特定节距下焊点体积与焊盘尺寸对焊接效果的影响。结果表明,焊点体积的变化会使得整个焊点高度与承载力的关系曲线向左或者向右平移,而焊盘直径则对焊点的最大高度影响更加明显。需要同时改变焊点体积及焊盘直径以得到能够适应相应封装形式的翘曲变形。最后,按照中兴通讯股份有限公司某封装的 0.4 mm 节距 BGA 的标准,分析了 0.35 mm 节距及 0.3 mm 节距 BGA 封装下焊点体积与焊盘直径的最佳匹配关系。

关键词:球栅阵列封装;承载力;焊盘;节距

中图分类号: TG454

DOI: 10.3969/j.issn.1004-132X.2016.13.015

Design of Fine Pitch BGA Solder Joint Pad Based on Solder Joint Shape Analyses

Chen Yilong¹ Jia Jianyuan¹ Fu Hongzhi² Zhu Zhaofei¹

1.Xidian University, Xi'an, 710071 2.ZTE Corporation, Shenzhen, 518000

Abstract: The influences of solder joint shape on the solder joint height were studied to find the optimal matching relations of the volume, the pitch and the pad of BGA solder joint to increase solder yield. The Young-Laplace equation with the constraint of the volume was solved based on the Runge-Kutta method. The influences of the solder joint volume and diameter of pad on the solder joint height range were simulated. The results show that the whole solder joint height range shifts left or right with the changing solder joint volume. The influences of the pad diameter on the maximum height of the solder joint are of more obvious. The warping adapting to the package might be obtained by changing solder joint volume and pad diameter at the same time. Based on the standard of a 0.4 mm pitch of BGA package of ZTE, the optimal matching relations of the solder joint volume and the diameter of the pad were analyzed with the 0.35 mm pitch and 0.3 mm pitch respectively.

Key words: ball grid array(BGA) package; carrying capacity; pad; pitch

0 引言

电子产品的更新换代,产品功能逐渐完善,性能不断提高,电子产品朝高速化、小型化及多功能化发展。球栅阵列(ball grid array, BGA)封装作为一种主要的封装形式,必须使焊点体积及焊点节距越来越小,才能在相同大小的芯片内封装更多的互联焊点以实现更多的功能。0.4 mm 节距

的封装器件为当前主要使用的最小节距的封装形式。0.35 mm 节距及 0.3 mm 节距的封装形式是当前的主要攻克难题。当焊点节距小到一定程度时,工艺上会出现很多困难。

影响小节距焊接工艺的因素有很多。然而,焊接工艺最主要的目标就是焊接成品率。研究表明,焊点形态对焊接可靠性有直接影响^[1-2]。考虑焊点体积的不可避免的制造误差及器件不同材料不同的热膨胀系数导致的芯片热翘曲变形,焊点形态需要在芯片任意位置适应不同的芯片翘曲变

收稿日期:2016-01-20

基金项目:国家自然科学基金资助项目(61201021)

[14] Kucherenko S, Song S. Derivative-based Global Sensitivity Measures and Their Link with Sobol' Sensitivity Indices[C]//Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods. KU Leuven: Springer International Publishing Switzerland, 2014: 23-38.

[15] Bobkov S G. Isoperimetric and Analytic Inequalities for Log-concave Probability Measures[J]. The Annals of Probability, 1999, 27(4): 1903-1921.

[16] Hardy G H, Littlewood J E, Polya G. Inequalities [M]. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University

Press, 1973.

[17] Mao H Y, Mahadevan S. Reliability Analysis of Creep-fatigue Failure[J]. International Journal of Fatigue, 2000, 22(9): 789-797. (编辑 王艳丽)

作者简介:宋述芳,女,1982年生。西北工业大学航空学院副教授。主要研究方向为飞行器设计、飞行器可靠性工程。发表论文30余篇。周桐,男,1993年生。香港理工大学机械工程学院博士研究生。吕震宙,女,1966年生。西北工业大学航空学院教授、博士研究生导师。