arXiv:2301.13635v1 [cs.LG] 31 Jan 2023

亮点

基于主动学习的域自适应局部多项式混沌展开

Lukáš Novák、Michael D. Shields、Václav Sadílek、Miroslav Vo˘rechovský

- 基于多项式混沌展开的通用代理模型的有效构建方法。
- 输入随机空间序贯分解及局部近似的构建新方法。

- 基于主动学习方法的序贯域分解和样本量扩展。
- 主动学习由基于方差的 Θ 准则表示，该准则是为多项式混沌展开开发的。

基于主动学习的域自适应局部多项式混沌展开

Lukáš Novák*

布尔诺理工大学，布尔诺，捷克共和国

Michael D. Shields

约翰·霍普金斯大学，巴尔的摩，美国

Václav Sadílek，Miroslav Voˇrechovský

布尔诺理工大学，布尔诺，捷克共和国

摘要

本文提出了一种新颖的方法，通过基于主动学习的输入随机空间序列分解以及局部化多项式混沌展开的构建，来建立复杂函数的代理模型，该方法称为域自适应局部多项式混沌展开（DAL-PCE）。该方法将输入随机空间序列分解为较小的子域，并使用低阶多项式展开对其进行近似。这使得对具有强非线性、不连续性以及/奇异性的函数进行近似成为可能。输入随机空间分解和局部近似缓解了此类问题中的吉布斯现象，并将误差限制在非线性附近极小的范围内。因此，代理模型的整体表现显著优于现有方法，数值算例对此进行了验证。整个过程由主动学习程序驱动，该程序利用最近提出的 Θ 准则来评估局部方差贡献 [1]。所提出的方法兼顾了对代理模型的利用和对输入随机空间的探索，从而能够高效且准确地近似原始数学模型。数值结果表明，与以下方法相比，DAL-PCE 具有优越性：(i) 单一的全局多项式混沌展开；以及 (ii) 最近提出的随机谱嵌入（SSE）方法[2] 。后者被开发为一种高精度代理模型，并基于类似的域分解过程。该方法构成了一个通用框架，可据此开展进一步的扩展和改进，并且能够与任何用于构建非侵入式多项式混沌展开的技术相结合。

关键词： 多项式混沌展开、自适应采样、序贯采样、局部近似、主动学习、随机谱嵌入

1. 引言

多项式混沌展开（PCE）最初由 Norbert Wiener [3] 提出，后来许多研究人员在工程学问题背景下对其进行了进一步研究，例如 [4, 5], 。由于其高效性和强大的后处理能力，多项式混沌展开已成为工业应用中进行不确定性量化（UQ）和代理建模的首选方法 [6, 7] 。一旦针对某个问题构建了PCE ，就可以利用所构建的显式函数

*通讯作者 电子邮箱： novak.l@fce.vutbr.cz (Lukáš Novák)，michael.shields@jhu.edu(Michael D. Shields),sadilek.v@fce.vutbr.cz(Václav Sadílek)，vorechovsky.m@vut.cz (Miroslav Voˇrechovský)

直接估计原问题的重要属性，包括其统计矩、响应概率分布或敏感性指标（无需额外采样 [8]），从而显著提高代理建模、敏感性分析、不确定性量化和可靠性分析的效率 [9]。

非侵入式形式的PCE为任何黑箱模型执行概率分析提供了一种便捷方法，例如，用于表示工程学中复杂物理系统的有限元模型。通常，有两类非侵入式方法可用于计算确定性PCE 系数：谱投影和线性回归。谱投影方法利用多元多项式的正交性，并通过内积计算系数。谱投影会导致计算复杂度急剧增加，这种现象被称为维数灾难。因此，基于线性回归的非侵入式方法通常更受青睐。尽管其成本通常低于谱投影（样本数量至少应为 $\mathcal{O}(P\ln(P))$，其中P 是PCE [10, 11]中的项数），但它同样受到维数灾难 的影响，因为PCE 项的数量会随维数和最大多项式阶数的增加而迅速增长。因此，有必要采用先进的自适应技术来构建稀疏PCE，从而为现实世界中的物理系统提供高效的解决方案。

基于回归的多项式混沌展开 可能会受到所选抽样方案的显著影响，近期一篇广泛的综述论文 [12] 比较了多种通用统计抽样技术，已对此进行了说明。然而，将多项式混沌展开构建为线性回归模型是一项非常具体的问题任务，因此，采用能够利用给定数学模型中的信息并序贯更新代理模型的方法可能会非常有益——这类方法被称为主动学习。主动学习是基于代理模型进行可靠性分析的一种常见方法，其中，初始试验设计会根据当前对极限状态面的估计进行迭代更新 [13, 14, 15]。例如，文献 [16, 17, 18]采用了基于多项式混沌展开 的可靠性分析主动学习方法。对于一般的不确定性量化研究，近期一些研究聚焦于基于空间填充准则或字母序最优性 [19, 20]的多项式混沌展开 通用序贯采样。然而，同时采用利用 （利用模型行为）准则和探索 （空间填充）准则来定义一种平衡最优的准则是有益的 [21]。近期，文献 [22]提出了一种用于稀疏贝叶斯学习多项式混沌展开 的此类序贯采样方法，该方法结合了两个方面——统计推断的认知不确定性（探索）与二次损失函数（局部开发）。然而，该方法的应用仅限于通过稀疏贝叶斯学习构建的多项式混沌展开。

本文作者最近提出了一种基于序贯自适应基于方差的抽样 [1], 的通用主动学习方法，该方法是实现精确代理建模的高效工具，并且具有足够的通用性，便于进一步扩展 [23]。尽管与不采用主动学习的标准方法相比，这种方法能够取得更优结果，但其受到多项式混沌展开固有平滑性的限制。更具体地说，多项式基函数无法近似具有不连续性或奇异点的函数。此外，即使输入随机空间的其余部分可以通过低阶多项式混沌展开轻松近似，对于具有局部非线性的函数，仍有必要使用高阶多项式进行近似。这可能导致近似结果出现伪振荡和过拟合。为克服这一限制，我们提出了一种基于分而治之概念构建局部化多项式混沌展开的方法，即将输入随机空间分解为多个子域，并分别使用许多低阶多项式混沌展开进行近似，而不是使用单个高阶全局多项式混沌展开。尽管这一概念在随机有限元 [24] 和随机配置法 [25, 26], 中并非全新，但对于非侵入式多项式混沌展开而言，尚不存在此类方法。不过，存在两种基于相似概念的主要技术，具体将在下一节中介绍。

1.1. 相关进展

随机谱嵌入（SSE） [2] 是一种通用的近似技术，基于输入随机空间分解以及嵌入式局部近似的构建。尽管通常可以使用任何谱近似技术，但将其与多项式混沌展开结合使用会更有益。SSE 基于一种新颖的嵌入理念——不再构建原始数学模型的局部近似，而是构建局部代理模型，以近似分解空间前一层级中模型与近似结果之间的残差。尽管与单一全局近似相比，这种方法可以带来显著改进 [2], , 但它并不是一种基于主动学习的序贯方法，因此不会迭代地反映从算法前序步骤中获得的新信息。主动学习对于分析具有不连续性或奇异性的函数至关重要，因为它能够实现前述的探索与利用，以发现并解析这些特征。为完整起见，针对 SSE 的主动学习已被

提出用于可靠性分析 [27], ，但它无法在整个输入随机空间上实现准确的近似。其准确度仅限于极限状态面附近的区域，而这些区域对于估计失效概率非常重要。

第二种相关技术是多元广义多项式混沌展开（ME-gPC）[28]。ME-gPC 是广义多项式混沌展开 的扩展，基于 Wiener-Askey格式 [29]，可用于分析输入随机向量具有任意分布的模型。ME-gPC 方法由三个主要部分组成：输入随机空间的分解、局部正交多项式的数值构造，以及基于由局部PCE 得到的估计方差中局部误差衰减率的自适应过程。ME-PCE 采用一种h型网格细化过程，类似于有限元方法中的网格细化。通过这种方式，ME-PCE 在每个新单元中引入均匀点的结构化网格，并求解多项式混沌展开 系数。这一过程可能较为繁琐，也无法灵活地自适应选择稀疏且近似最优的训练点。此外，我们注意到，ME-gPC 主要是为具有任意输入分布的模型中的不确定性传播而创建的；因此，与 SSE 相比，其目标未必是利用自适应算法构建尽可能好的替代模型，而是尽量减小响应统计量中的误差。这是一个细微但重要的区别，体现了它作为预测工具与作为统计估计工具的不同用途。

1.2. 本文的贡献

本文介绍了一种新方法，称为域自适应局部化多项式混沌展开 （DAL-PCE），该方法对输入随机空间进行自适应序贯分解，并在各子域内进行自适应序贯采样。这两项特性均基于一种近期提出的、专门针对 [30] 中多项式混沌展开 开发的、基于方差的序贯统计采样准则。在此前介绍的 SSE 和 ME-gPC 方法的背景下，所提出的新方法可以被认为介于两者之间。与 SSE 类似，该方法专门用于构建精确的代理模型，尤其适用于具有高度非线性或不连续性的函数。但其对输入随机空间的分解则与 ME-gPC 更为相似。我们所提出方法的独特之处在于，将主动学习、序贯采样、输入空间序贯分解以及基于回归的多项式混沌展开 相结合，并使用最小角回归（LARS）等稀疏求解器，从而使所提出的算法在每次迭代中都具备自适应和学习能力。

2. 多项式混沌展开

设概率空间为（Ω， $\mathcal{F}$， $\mathcal{P}$），其中 Ω 是事件空间， $\mathcal{F}$是定义在 Ω 上的 σ-代数，而 $\mathcal{P}$ 是 $\mathcal{F}$上的概率测度。如果数学模型的输入变量$Y = f(X)$是随机变量$X(\omega)$， $\omega \in \Omega$，则模型响应$Y(\omega)$也是随机变量。假设Y 具有有限方差，PCE 将输出变量Y 表示为另一个称为基元随机变量的随机变量 ξ 的函数，且该随机变量具有已知分布

$$Y = f(X) = f^{\mathrm{PCE}}(\xi), \tag{1}$$

并通过无穷多项式展开表示函数$f(X)$。一组关于基元随机变量的分布正交的多项式，被用作希尔伯特空间$L^2(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$的基；该空间包含所有具有有限方差的实值随机变量，其中 $\mathcal{P}$ 表示概率分布。对于任意两个函数 ψ_j和 ψ_k，相对于权函数p_ξ （ ξ的概率密度函数），对$L^2(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$定义的内积给出的正交条件为：对于所有$j \neq k$:

$$\langle \psi_j, \psi_k \rangle = \int \psi_j(\xi)\psi_k(\xi)p_\xi(\xi)\,\mathrm{d}\xi = 0. \tag{2}$$

这意味着，通过基元随机变量的加权函数，可以为其相应的分布指定特定的正交多项式。例如，与高斯测度正交的 Hermite多项式对应于正态分布的基元随机变量。对应于其他分布的正交多项式可以根据 Wiener-Askey格式 [29] 进行选择，或通过数值方法构造 [31]。在后续处理中，使用归一化多项式（正交归一多项式）会更有利；此时，第i个与第j个多项式的内积等于克罗内克δ δ_{jk}，即当且仅当$j = k$时为 $\delta_{jk} = 1$，否则为 $\delta_{jk} = 0$。

在*XXX* 和 $\boldsymbol{\xi}$ 为包含 M 个独立随机变量的向量的情况下，多项式 $\Psi(\boldsymbol{\xi})$ 是多变量的，并且由一元正交多项式的张量积构成，即

$$\Psi_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}) = \prod_{i=1}^{M} \psi_{\alpha_i}(\xi_i), \tag{3}$$

其中， $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{N}^M$ 是一组称为多重指标的整数，反映与每个 ξ_i相关联的多项式次数。关注量（QoI），即数学模型 $Y = f(XXX)$的响应，可以表示为 [5]

$$Y = f(\boldsymbol{X}) = \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{N}^M} \beta_{\boldsymbol{\alpha}} \Psi_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}), \tag{4}$$

其中， $\beta_{\boldsymbol{\alpha}}$ 是确定性系数， $\Psi_{\boldsymbol{\alpha}}$ 是多变量正交多项式。

2.1. 多项式混沌展开*PCE*系数的非侵入式计算

在实际计算中，式（4）中的多项式混沌展开 PCE 必须截断为有限项数P。通常可以选择任意截断规则（例如，保留达到所选次数p的多项式张量积），但最常见的截断方式是仅保留总次数 $|\boldsymbol{\alpha}|$ 小于或等于给定p的项，此时，截断后的多项式混沌展开 PCE 项集合定义为

$$\mathcal{A}^{M,p} = \left\{ \boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{N}^M : |\boldsymbol{\alpha}| = \sum_{i=1}^{M} \alpha_i \leq p \right\}. \tag{5}$$

截断指标集 $\mathcal{A}^{M,\ p}$ 的基数为

$$\operatorname{card} \mathcal{A}^{M,p} = \frac{(M+p)!}{M!\,p!} \equiv P\,. \tag{6}$$

当 多项式混沌展开 被截断为有限项时，近似中会产生误差 ε ，使得 t

$$Y = f(\boldsymbol{X}) = \sum_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathcal{A}} \beta_{\boldsymbol{\alpha}} \Psi_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}) + \varepsilon\,.$$

从统计角度来看，多项式混沌展开 是一个带截距的简单线性回归模型。因此，可以使用普通最小二乘法 (OLS)回归来最小化误差 ε。

向量 $\boldsymbol{\beta}$ 的已知信息可通过多项式混沌展开完全表征该近似。要求解 $\boldsymbol{\beta}$，首先需要生成输入随机向量*XXX* 的 N_{sim} 个实现，以及原始数学模型 $\mathcal{Y}$对应的结果，这些合称为试验设计（ED）。随后，可通过普通最小二乘法确定由P 个确定性系数组成的向量 $\boldsymbol{\beta}$ ，如下所示：

$$\boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{\Psi}^T \boldsymbol{\Psi})^{-1}\, \boldsymbol{\Psi}^T \mathcal{Y}, \tag{7}$$

其中 $\boldsymbol{\Psi}$ 是数据矩阵

$$\boldsymbol{\Psi} = \left\{ \Psi_{ij} = \Psi_j(\boldsymbol{\xi}^{(i)}),\ i = 1, \ldots, N_{\text{sim}},\ j = 0, \ldots, P-1 \right\}. \tag{8}$$

一个众所周知的问题，即维数灾难，指出P 高度依赖于输入随机变量的数量M 以及多项式的最大总次数p，这从公式（6）中可以清楚地看出。考虑到通过回归估计 $\boldsymbol{\beta}$ 至少需要 $\mathcal{O}(P \ln(P))$ 个样本才能获得稳定解 [10, 11],，因此，当随机模型规模较大或具有强非线性时，该问题可能会带来很高的计算负担。尽管可以使用最小角回归（LAR） [32, 4],、正交匹配追踪 [33] 或贝叶斯压缩感知 [34] 等先进的模型选择算法来寻找最优的多项式混沌展开项，从而减少计算未知系数所需的样本数量，但只有当真实系数向量是稀疏的或可压缩的时，这些技术才能带来显著收益。为清晰起见，任何自适应算法得到的稀疏基函数集合进一步记为 $\mathcal{A}$ 。

2.2. 近似误差估计

一旦构建了多项式混沌展开，估计其准确度至关重要。此外，多项式混沌展开的准确度可用于直接比较多个多项式混沌展开，从而选择最佳代理模型。理想情况下，应将实验设计划分为验证集和训练集，但在采用复杂数值模型的工程应用中，这可能会带来极高的计算负担。因此，在工程模型不确定性量化（UQ）领域，人们更倾向于直接从训练集中估计近似误差，而不对原始模型进行额外采样。一个常见的选择是决定系数R^2,，它在机器学习或统计学领域广为人知。然而，R^2 可能导致过拟合，因此应采用先进的方法。最广泛使用的方法之一是留一交叉验证（LOO-CV）误差Q^2。留一交叉验证基于原始代理模型与在实验设计中排除一个实现后构建的代理模型之间的残差。该方法会针对实验设计中的所有实现重复进行，并估计平均误差。尽管计算Q^2 通常非常耗时，但仍可以从单个多项式混沌展开中按如下方式解析地获得结果 [35]:

$$Q^2 = \frac{\frac{1}{N_{\text{sim}}}\sum_{i=1}^{N_{\text{sim}}}\left[\frac{g\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right)-g^{\text{PCE}}\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right)}{1-h_i}\right]^2}{\sigma^2_{Y,\text{ED}}}, \tag{9}$$

其中 $\sigma^2{}_{Y,\text{ED}}$ 是使用原始数学模型计算得到的实验设计的方差，而h_i 表示矩阵$\mathbf{H} = \boldsymbol{\Psi}\left(\boldsymbol{\Psi}^T\boldsymbol{\Psi}\right)^{-1}\boldsymbol{\Psi}^T$的第$i$个对角项。

2.3. 基于多项式混沌展开推导的统计矩

将多项式混沌展开表示为正交归一多项式的线性求和形式，便于进行强大且高效的后处理。具体而言，一旦创建了多项式混沌展开近似，就可以直接根据展开估计输出的统计矩。

第一个统计矩（均值）就是展开的第一个确定性系数$\mu_Y = \langle Y^1\rangle = \beta_{\mathbf{0}}$。第二个原始统计矩 $\langle Y^2\rangle$可通过以下公式估计：

$$\begin{aligned}\langle Y^2\rangle &= \int\left[\sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\mathcal{A}}\beta_{\boldsymbol{\alpha}}\Psi_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi})\right]^2 p_{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\xi})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\xi} = \sum_{\boldsymbol{\alpha}_1\in\mathcal{A}}\sum_{\boldsymbol{\alpha}_2\in\mathcal{A}}\beta_{\boldsymbol{\alpha}_1}\beta_{\boldsymbol{\alpha}_2}\int\Psi_{\boldsymbol{\alpha}_1}(\boldsymbol{\xi})\Psi_{\boldsymbol{\alpha}_2}(\boldsymbol{\xi})p_{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\xi})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\xi} \\ &= \sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\mathcal{A}}\beta_{\boldsymbol{\alpha}}^2\int\Psi_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi})^2 p_{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\xi})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\xi} = \sum_{\boldsymbol{\alpha}\in\mathcal{A}}\beta_{\boldsymbol{\alpha}}^2\langle\Psi_{\boldsymbol{\alpha}},\Psi_{\boldsymbol{\alpha}}\rangle\,.\end{aligned} \tag{10}$$

根据多项式的正交归一性，可以将方差 $\sigma^2{}_Y = \langle Y^2\rangle - \mu^2{}_Y$ 表示为除截距（即均值）之外的所有确定性系数的平方和，即：

$$\sigma_Y^2 = \sum_{\substack{\boldsymbol{\alpha}\in\mathcal{A}\\ \boldsymbol{\alpha}\neq\mathbf{0}}}\beta_{\boldsymbol{\alpha}}^2. \tag{11}$$

请注意，高阶统计中心矩，特别是偏度 γ_Y （3rd 矩）和峰度 κ_Y （4th 矩）的计算更加复杂，因为它们需要三重乘积和四重乘积。这些量只能针对某些特定的多项式族进行解析求解，例如，Hermite多项式和Legendre多项式（及其组合）的公式可见于 [30]。

3. 基于主动学习的领域自适应局部多项式混沌展开（DAL-PCE）

本节中，我们提出一种构建局部化多项式混沌展开的新方法，专为高度非线性函数设计，称为域自适应局部化多项式混沌展开 (DAL-PCE)。我们不再提高最大多项式阶数p (p自适应)，因为维数灾难会导致很高的计算开销，而是

提出将输入随机空间分解为若干子域，并用低阶多项式混沌展开来近似这些子域（h自适应）。尽管这一思路并非全新，我们将其与新颖的主动学习方法结合起来，以确定需要细化的域，并进行序贯样本选择和基于回归的多项式混沌展开。这样，我们可以使用任何稀疏自适应求解器（例如 LAR），因此很容易将其集成到现有软件包中 [36, 37]。在以下各节中，我们将定义所提方法所需的组成部分，并给出其实现算法（算法1）。

3.1. 基于方差的自适应序贯采样

输入随机空间的分解是一个与自适应采样相结合的序贯过程，用于确保对感兴趣子域的最佳覆盖。因此，整个过程包括两个步骤：(i) 识别重要子域，即相较于其他子域面积较大，或与较高局部方差相关联的域；以及 (ii) 在选定子域中确定额外样本的最佳位置，以扩展当前实验设计（ED）。这两个步骤都必须基于一个能够平衡对输入随机空间的探索与对代理模型的利用的准则；在本研究中，该代理模型采用多项式混沌展开（PCE）形式。用于自适应序贯采样的Θ准则由输出方差及其通过PCE [1], 利用局部方差得到的近似所驱动，并同时应用于这两个步骤。本节将首先讨论在指定子域内进行自适应序贯采样的过程。随后各节将介绍域细化的过程。

考虑一个候选样本池，其中包含通过任意抽样技术生成的随机向量 $\boldsymbol{\xi}$ 的实现，例如拉丁超立方抽样（LHS）[38, 39] 或相干采样 [40, 41, 10]。我们从该候选池中选出最佳样本，所采用的方法受 [21] 中提出的序贯采样方法启发，并基于 Koksma-Hlawka不等式 [42]。用于多项式混沌展开的 Θ 准则同时考虑了函数变异和样本差异，其形式如下所示 [1]:

$$\Theta(\boldsymbol{\xi}^{(\mathrm{c})}) \equiv \Theta^{c} = \underbrace{\sqrt{\sigma^2_{\mathcal{A}}(\boldsymbol{\xi}^{(\mathrm{c})}) \cdot \sigma^2_{\mathcal{A}}(\boldsymbol{\xi}^{(\mathrm{s})})}}_{\text{ave variance density}} \underbrace{l^{M}_{\mathrm{c,s}}}_{\text{vol.}} \equiv \sqrt{\sigma^2_{\mathrm{c}} \cdot \sigma^2_{\mathrm{s}}}\, l^{M}_{\mathrm{c,s}}. \tag{12}$$

该准则是两个项的乘积——利用项（记为“平均方差密度”）和探索部分（距离项 $l_{\mathrm{c},\,\mathrm{s}}$ 其提升至域维数次方）——二者相乘，以维持探索与利用之间的最佳平衡 [1]。

通过考虑距离$l_{\mathrm{c},\,\mathrm{s}}$即候选样本 $\boldsymbol{\xi}^{(\mathrm{c})}$ 与现有实验设计中的最近邻实现之间的距离，来保持探索方面 $\boldsymbol{\xi}^{(\mathrm{s})}$，其表达式为:

$$l_{\mathrm{c,s}} = \sqrt{\sum_{i=1}^{M} |\xi_i^{(\mathrm{c})} - \xi_i^{(\mathrm{s})}|^2}. \tag{13}$$

如果准则仅简化为这一项，算法将依次填充最大的空白区域，从而按照空间填充“miniMax准则”的思路，逐步实现均匀的空间覆盖 [43, 44, 45]。

利用部分旨在优先在对关注量 σ^2 $_Y$总方差贡献最大的区域中选取样本点，也就是在方差密度最高的位置选点。算法在任一阶段建立多项式混沌展开后，就可以低成本地计算任意位置 $\boldsymbol{\xi}$ 的方差密度，其计算方式为

$$\sigma^2_{\mathcal{A}}(\boldsymbol{\xi}) = \Big[\sum_{\substack{\boldsymbol{\alpha}\in\mathcal{A} \\ \boldsymbol{\alpha}\neq\mathbf{0}}} \beta_{\boldsymbol{\alpha}} \Psi_{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi})\Big]^2 p_{\xi}(\boldsymbol{\xi}). \tag{14}$$

因此，可直接利用多项式混沌展开的基函数和系数 β 估计局部方差。对于候选点“c”，可通过对候选点与其最近邻“s”之间的局部方差密度取平均，估计该区域的方差贡献。因此，准则值最大的候选点，代表了经选择后可进一步细化的总方差最大部分 Θ^{c} 。

该方法的一项显著优势在于能够将候选点逐一添加到现有的实验设计中。因此，它可以在多项式混沌展开构建过程的任何时刻使用。此外，该学习函数还可以

与任何采样算法结合，用于构建初始实验设计及其扩展候选点。现在，将利用 Θ 准则背后的思想来提出域分解和实验设计扩展算法。

3.2. 输入随机空间分解

所提出方法的核心是对输入随机空间 $\mathscr{D}$ 进行序贯分解，以构建局部近似。该方法假设，原始数学模型可以用分段低阶多项式混沌展开近似，且这些近似仅在 $\mathscr{D}$ 的各个子域内有效。因此，在所提出的方法中，输入随机空间被序贯分解为$n_{\mathscr{D}}$ 个更小且互不重叠的子域 $\mathscr{D}_i \subset \mathscr{D}$，这些子域共同覆盖整个输入随机空间 $\mathscr{D}$，即:

$$\bigcup_{i=1}^{n_{\mathscr{D}}} \mathscr{D}_i = \mathscr{D} \quad \text{such that} \quad \mathscr{D}_i \cap \mathscr{D}_j = \emptyset \quad \forall i, j \tag{15}$$

在算法的每次迭代中，选取一个子域 $\mathscr{D}_i$（称为父域）进行细化，并沿垂直于某个选定输入随机变量方向的平面将其分割。具体而言， $\mathscr{D}_i$ 被分割为一个细化子域 $\mathscr{D}_i$（将进一步处理）和一个继承子域 $\mathscr{D}^\star{}_i$，后者沿用父域的多项式混沌展开，如图1所示，其中展示了一个一维函数。在这种情况下，空间被分成两个子域。左侧的细化子域中构建了新的多项式混沌展开；右侧的继承子域则保留原有的多项式混沌展开。该过程确保分解为互不相交的子集且覆盖完整，即$\mathscr{D}_i = \mathscr{D}_i \oplus \mathscr{D}^\star{}_i$。图2展示了这一序贯域分解过程，其中描绘了原始输入随机空间以及分解过程的前四次迭代。

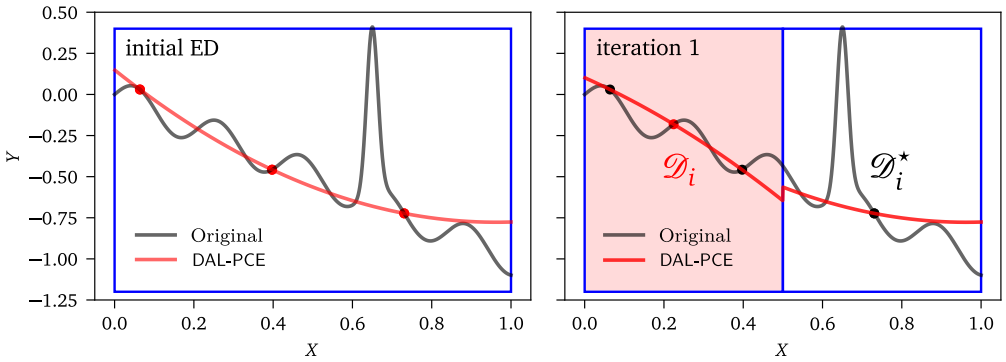

图 1：算法的第一次迭代：原始子域被分割，并在 $\mathscr{D}_i$（红色背景）中构建新的局部 多项式混沌展开，而 $\mathscr{D}^\star$ 中的第二部分$_i$ 则继承原始域的 多项式混沌展开 近似。

与 SSE [2], 相比，在每次迭代中选择单个子域进行细化是基于主动学习方法，其具体细节将在后续章节中介绍。重要的是，主动整合来自原始数学模型的信息，可以实现对空间更有效的分解，从而确保即使对于小规模实验设计，也能获得准确的近似。另一方面，所确定的分解及其关联的实验设计与给定的数学模型直接相关，因此对于一般统计分析而言可能效率较低。

完整的代理模型由与所有子域相关联的 $n_{\mathscr{D}}$ 个局部 多项式混沌展开组装而成，如下所示:

$$Y \approx \sum_{i=0}^{n_{\mathscr{D}}} \sum_{\boldsymbol{\alpha}_i \in \mathcal{A}_i} \beta_{\boldsymbol{\alpha}_i} \Psi_{\boldsymbol{\alpha}_i}(\boldsymbol{\xi}) \mathbb{1}_{\mathscr{D}_i}(\boldsymbol{\xi}), \tag{16}$$

其中， $\mathbb{1}_{\mathscr{D}_i}(\boldsymbol{\xi})$表示指示函数，即仅当 $\boldsymbol{\xi} \in \mathscr{D}_i$时为 $\mathbb{1}_{\mathscr{D}_i}(\boldsymbol{\xi}) = 1$，否则为 $\mathbb{1}_{\mathscr{D}_i}(\boldsymbol{\xi}) = 0$。换言之，为了在任意点近似原始模型，只需确定一个相关的子域，并使用相应的局部PCE即可。每个局部PCE 都有自己的一组基函数 $\mathcal{A}_i$ 及相应的系数$\beta_{\boldsymbol{\alpha}_i}$，这些函数和系数可以通过任意模型选择算法获得。本文采用普通最小二乘法和 LAR 算法，但通常也可以使用任何非侵入式技术。

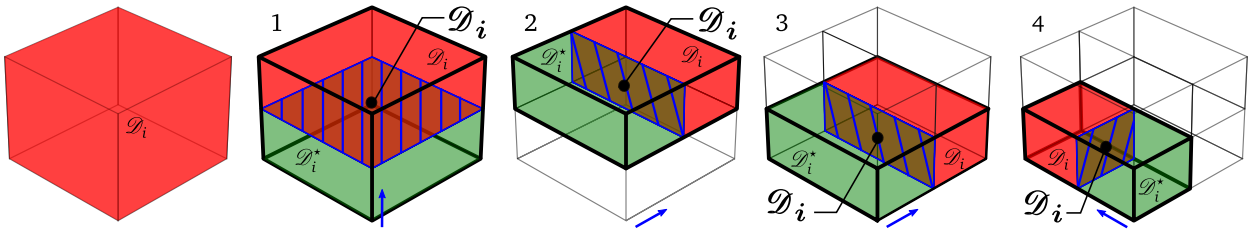

图2：输入随机变量三维空间分解的前四个步骤。粗黑线勾勒出选定进行划分的父域。父域内部的红色和绿色方框分别表示新创建的细化子域 $\mathscr{D}_i$（红色）和继承子域 $\mathscr{D}^\star{}_i$（绿色），它们是通过切割父域 $\mathscr{D}_i$（粗边界）创建的，并通过切割平面（蓝色）依据公式（17）选出。切割平面垂直于选定进行划分的变量（蓝色箭头）。

3.3. 基于改进方差准则的域选择

所选 用于确定可能进行划分的“最佳”子域的过程，是通过扩展以下内容来实现的 Θ准则的依据为 公式（12）如下：

$$\Theta_i = \underbrace{\mathcal{W}_i \cdot \exp\left(Q_i^2\right)}_{\text{weight of subdomain}} \cdot \underbrace{\sqrt{\sigma^2_{\mathcal{A}_i}(\boldsymbol{\xi}^{(c)}) \cdot \sigma^2_{\mathcal{A}_i}(\boldsymbol{\xi}^{(s)})}\, l^M_{c,s}}_{\Theta^c \text{ in } i\text{th subdomain}}. \tag{17}$$

这一扩展准则旨在识别输入随机空间中与 Θ^c最大值相关的子域，同时兼顾各子域的大小以及现有局部多项式混沌展开的准确度。前者通过针对丰富候选池中的筛选全局候选点计算公式（12）得出；后者则分别通过纳入各子域的体积 $\mathcal{W}_i$ 和留一交叉验证误差$Q^2{}_i$ 来衡量。留一交叉验证项 $\exp\left(Q^2{}_i\right)$可视为一种惩罚项，它通过人为扩大域体积来惩罚近似的不准确。当近似完美时 $\left(Q^2{}_i = 0\right)$，使用子域的真实体积。相反，近似较差时$Q^2{}_i = 1$，体积约增至原来的2.72倍。

公式（17）中的三个项分别针对影响最终代理模型准确度的不同因素： $\mathcal{W}_i$倾向于选择较大的子域；包含较差PCE近似的子域则通过 $\exp\left(Q^2{}_i\right)$得到优先考虑；最后， Θ^c 倾向于选择方差高度集中的子域。请注意， Θ^c 是针对丰富候选池中的筛选候选样本计算的，而 $\mathcal{W}_i$ 和 $\exp\left(Q^2{}_i\right)$ 则分别直接根据现有子域的几何形状和局部PCE模型计算。因此，扩展判据中三个项的乘积能够维持所需的平衡，并确保选出子域 $\mathscr{D}_i$；目前看来，该子域对于提高PCE代理模型的准确度最为重要。

子域 $\mathscr{D}$ 具有最大的 Θ_i 将被选中，并执行第3.6 i节中详细描述的操作之一 ，具体取决于 $\mathscr{D}_i$ 是否包含临界数量的ED点。可能出现两种情况：

- $\mathscr{D}_i$ 包含足够数量的 ED 点（$n_i \geq n_{\text{sim}}$），以确保在该域上构建多项式混沌展开的准确度。因此，它成为一个父域 $\mathscr{D}_i$（图2中的粗边界），并根据选定规则被分为两部分。包含具有最大 Θ_c 的决定性候选点的子域成为细化子域$\mathscr{D}_i$（见图2步骤 $1-4$ 中的红色子域）。剩余体积成为继承子域，记为 $\mathscr{D}^\star{}_i$（见图2中的绿色子域），该子域保留父域的多项式混沌展开。划分通过切割平面完成，该平面垂直于选定方向（图2中的蓝色箭头）；自然地，切割平面的坐标被限制在所选父域的包围盒内 $\mathscr{D}_i$，见第3.6节。如有需要，将根据 Θ_c，依次向细化子域 $\mathscr{D}_i$ 中填充额外ED点，以达到构建新的多项式混沌展开近似所需的 $n_i = n_{\text{sim}}$。

- $\mathscr{D}_i$ 不包含 足够数量的 ED点（$n_i < n_{\text{sim}}$）。由于划分建议基于不足的信息，因此该域不会被划分。相反，将继续向 $\mathscr{D}_i$ 中依次添加新的 ED点，同样使用 Θ_c 准则。请注意，当所选域在前一次迭代中是一个继承子域时，实际上通常会出现这种情况。在此情况下，所选域继承了一个多项式混沌展开 模型，该模型是在更大的域上构建的。当该域被划分后，剩余点的数量不足以构建新的多项式混沌展开。

3.4. PCE基函数

在不失一般性的情况下，所提出的方法作用于 M 维单位超立方体，其中输入随机变量服从均匀分布，即 $XXX \sim \mathcal{U}[0,1]^M$。对于 XXX 的一般联合概率分布，总可以通过 Rosenblatt变换[46], Nataf变换 [47] 或各种基于 Copula 的方法 [48]将输入随机向量变换到单位超立方体。这样，关于均匀分布标准正交的归一化勒让德多项式便可用作多项式混沌展开的基函数。然而，由于输入随机空间被分解为更小的子域，每个子域的下界为a_i，上界为~界b_i，因此有必要使用n阶一元缩放正交归一勒让德多项式 $\psi_n(\xi)$，其定义如下：

$$\tilde{\psi}_n(\xi) = \psi_n\left(\frac{2\xi - a_i - b_i}{b_i - a_i}\right), \tag{18}$$

其中， ψ_n 表示标准正交勒让德多项式。自然地，将原始输入随机向量变换到单位超立方体可能会引入额外的非线性，因此，人们可能更倾向于直接构造相对于给定原始概率测度局部标准正交的多项式，如 Me-gPC [28] 中所提出的方法。尽管这当然可行，但会带来额外的计算开销，因此本文未采用这种方法。

3.5. 基于 DAL-PCE 的局部和全局统计估计

多项式混沌展开 的显著优势在于，对其展开式进行解析后处理，可以高效地估计统计矩 [30], 、敏感性指标 [8] 和留一交叉验证 [4]。在所提出的 DAL-PCE 中，由于原始域 $\mathscr{D}$ 被划分为一组子域（见式（15））， 因此可以在局部应用标准解析后处理，并通过简单的加权求和获得全局特征；随着$n_{\mathscr{D}}$ 增加，这些结果将收敛至真实值。具体而言，关注量的全局均值和方差可由局部多项式混沌展开（以下标 $\mathscr{D}_i$表示）计算如下：

$$\mu_Y = \sum_{i=1}^{n_{\mathscr{D}}} \mathcal{W}_i \beta_{0_i} = \sum_{i=1}^{n_{\mathscr{D}}} \mathcal{W}_i \mu_{\mathscr{D}_i}, \tag{19}$$

$$\sigma_Y^2 = \sum_{i=1}^{n_{\mathscr{D}}} \mathcal{W}_i \sum_{\substack{\boldsymbol{\alpha}_i \in \mathcal{A}_i \\ \boldsymbol{\alpha}_i \neq \mathbf{0}}} \beta_{\boldsymbol{\alpha}_i}^2 = \sum_{i=1}^{n_{\mathscr{D}}} \mathcal{W}_i \sigma_{\mathscr{D}_i}^2. \tag{20}$$

其中局部均值$\mu_{\mathscr{D}_i}$ 和方差 $\sigma_{\mathscr{D}_i}^2$ 按照第2.3节所述方法获得。

任意阶的局部 Sobol’指标 $S^{\mathscr{D}_i}$均可直接由局部化的多项式混沌展开得到，其一阶（主效应）估计为

$$S_{\mathscr{D}_i}^{X_j} = \frac{1}{\sigma_{\mathscr{D}_i}^2} \sum_{\boldsymbol{\alpha}_i \in \mathcal{A}_i^{X_j}} \beta_{\boldsymbol{\alpha}_i}^2 \quad \mathcal{A}_i^{X_j} = \left\{ \boldsymbol{\alpha}_i \in \mathcal{A}_i : \alpha_i^j > 0, \alpha_i^{k \neq j} = 0 \right\}. \tag{21}$$

这些局部 Sobol’指标用于DAL-PCE 确定切分方向（见第3.6节）。同样，全局 Sobol’指标也可以通过对部分方差的局部贡献进行加权求和，并用 $\sigma^2{}_Y$ 归一化来轻松获得，如下所示：

$$S_{X_j} = \frac{\sum_{i=1}^{n_{\mathscr{D}}} \mathcal{W}_i \sum_{\boldsymbol{\alpha}_i \in \mathcal{A}_i^{X_j}} \beta_{\boldsymbol{\alpha}_i}^2}{\sigma_Y^2}. \tag{22}$$

类似地，关注量的全局留一交叉验证Q^2, 可以通过对局部贡献进行加权求和来近似表示为

$$Q^2 = \sum_{i=1}^{n_{\mathscr{D}}} \mathcal{W}_i Q_{\mathscr{D}_i}^2, \tag{23}$$

其中$Q_{\mathscr{D}_i}^2$ 分别由每个局部多项式混沌展开根据式（9）获得。

这些估计值贯穿于所提出的DAL-PCE中，具体说明如下。

3.6. 数值算法

基于上述理论背景，现介绍域自适应局部化多项式混沌展开的数值算法。如上所述，整个过程可分为两个迭代任务：（i）输入随机空间的分解，以及（ii）局部化多项式混沌展开的构建。以下段落将分别介绍这两个任务，并具体对应算法1中的各个步骤。

算法1 DAL-PCE：主动域分解与局部化多项式混沌展开的构建

输入： 最大局部多项式阶数p，筛选全局候选点的数量$n_{c,g}$，局部候选点$n_{c,l}$，迭代次数n_{iter}

设置局部多项式混沌展开构建所需的最小实现数量$n_{\text{sim}} \in \langle P, 2P \rangle$
生成一个$n_{c,g}$个筛选候选样本
生成初始实验设计（大小为 n_{sim}）并构建初始全局多项式混沌展开
对于 1 到 n_{iter} **执行**
    根据筛选候选样本，确定具有最高 Θ_i 的子域 $\mathcal{D}_i$
    $n_i \leftarrow$ 中现有的实验设计样本数量 $\mathcal{D}_i$
    如果 $n_i \geq n_{\text{sim}}$ **then**
        已确定的子域 $\mathcal{D}_i$ 成为一个父域 $\mathcal{D}_i$
        确定父域 $\mathcal{D}_i$中一阶 Sobol' 指数$S^{\mathcal{D}_i}$ 最高的方向
        限制 $\mathcal{D}$的坐标 $\rightarrow \mathcal{D}_i$ 并创建 $\mathcal{D}^{\star}_i$
        $n_i \leftarrow$ 个现有实验设计样本位于 $\mathcal{D}_i$
    结束条件判断
    生成$n_{c,l}$个局部候选点位于 $\mathcal{D}_i$中
    当$n_i < n_{\text{sim}}$ **do**
        使用局部 Θ^c 准则扩展局部实验设计的规模n_i
    结束 while 循环
    重构 $\mathcal{D}_i$中的局部多项式混沌展开
结束 for 循环

输出： 子域及其对应的多项式混沌展开列表

第一项任务是确定应当进行划分的重要子域 $\mathcal{D}_i$，并在其上构建低阶局部多项式混沌展开 。具体而言，使用公式（17）中的 Θ_i 准则来确定子域 $\mathcal{D}_i$，该准则再次综合考虑了实现准确代理建模所需的三个重要特征——子域 $\mathcal{W}_i$的大小、由$Q^2_{\mathcal{D}_i}$衡量的现有局部多项式混沌展开 的准确度，以及用于衡量 $\mathcal{D}_i$中方差贡献的原始 Θ^c 准则。$\mathcal{W}_i$ 和$Q^2_{\mathcal{D}_i}$ 是在整个子域上计算的，而 Θ^c 则是在输入随机向量的特定实现处计算的。因此，有必要使用足够多的筛选候选样本覆盖这些子域，使得全局筛选候选样本总数为$n_{c,g}$。根据数值实验，我们建议$n_{c,g} \geq 1000M$，以确保每个子域都包含足够数量的筛选候选样本。请注意，筛选候选样本仅用于确定 $\mathcal{D}_i$ [步骤 *5*]。它们不用于实验设计，因此即使$n_{c,g}$较大，也不会带来额外的计算需求。

确定 $\mathcal{D}_i$ 后，有必要检查是否有足够的样本在子域内构建多项式混沌展开。我们首先确定有多少个点属于所选域 $\mathcal{D}_i$ [步 *6*]。如果已确定子域中的样本数 n_i大于（或等于）n_{sim} [步 *7*]，，则 $\mathcal{D}_i$已经存在局部PCE。随后，将该子域指定为父域 $\mathcal{D}_i$，用于划分 [步 *8*]，并通过公式（22）估计一阶 Sobol 指数 [步 *9*]。将确定的父域 $\mathcal{D}_i$ 沿一阶 Sobol 指数 $S^{X_j}_{\mathcal{D}_i}$最大的方向进行划分。确定细化子域 $\mathcal{D}_i$的新受限坐标，并创建继承子域 $\mathcal{D}^{\star}_i$ [步 *10*]。此外，还需确定细化子域 $\mathcal{D}_i$ 中的 ED 样本数 n_i [步 *11*]。另一方面，如果已确定的子域 $\mathcal{D}_i$ 不包含足够的样本（即 $n_i < n_{\text{sim}}$），则从前一次迭代继承的多项式混沌展开不够局部（它是在一个后来已被划分的域上训练的），因此有必要向 $\mathcal{D}_i$ 添加新样本，然后再构建新的局部PCE。

所提出算法的第二项任务是在子域 $\mathcal{D}_i$中进行序贯采样和自适应多项式混沌展开 构建。回想一下，该域可能是

(i) 刚刚划分但不包含足够数量点的细化子域（$n_i < n_{\text{sim}}$），或

（ii）现在不再包含至少n_{sim} 个 ED 样本的继承子域。

接下来，在区域 $\mathcal{D}_i$ [步骤 *13*]中生成一组局部候选点。为确保充分评估域的覆盖情况，经验上建议局部候选点的数量为 $n_{c,\,l} \in \langle 3P,\ 5P \rangle$ [1]。从这些候选点中，使用公式（12）中的标准 Θ^c 准则，迭代选择最优候选点，直到 $\mathcal{D}_i$ [n_{sim} 个样本位于步骤 *14-16*]中。以这种方式在 $\mathcal{D}_i$ 中顺序扩充样本具有自适应性，因为每增加一个新点后，公式（12）中候选点与现有 ED 点之间的成对距离都会更新。然而，由于$n_i < n_{\text{sim}}$ 局部方差密度是根据先前已有的多项式混沌展开估计的，因此在 $\mathcal{D}_i$中获得足够数量的样本之前无法更新。

每次迭代的最后一步是使用缩放勒让德多项式作为基函数构建局部 多项式混沌展开 （见公式（18）） [步骤 *17*]。可以使用任何非侵入式技术来估计系数$\boldsymbol{\beta}$；本文采用最小角回归和普通最小二乘法自适应地构建局部多项式混沌展开。迭代结束时，所有子域都会重新编号，并且可以导出包含各子域及其对应多项式混沌展开的列表，也可以开始下一次迭代。

3.7. 多项式混沌展开构建与域分解中的自适应性

自适应性是所提出的DAL-PCE的核心。在所提出的算法中，采用了两种类型的自适应性：

(i) 多项式混沌展开 构建中的自适应性（选择最优基函数集），以及

(ii) 域分解中的自适应性

由于可以在每个子域中使用任何回归技术构建多项式混沌展开，因此可通过稀疏求解器和最佳模型选择算法（例如最小角回归 [32], 正交匹配追踪 [33] 或贝叶斯压缩感知 [34]）来实现多项式混沌展开 的自适应性。尽管稀疏求解器常用于高多项式混沌展开 阶（p）的情况，但这种自适应性对于减少基函数数量（从而减少所需的最少 ED 样本数）也很重要，尤其是在高维示例中；在本文的情形下，它对于减少每个近似区域中的 ED 样本数量也很重要，因为这些区域由低p阶局部多项式混沌展开近似。

第二种自适应性是所提出的域分解自适应性。在迭代过程中的任意时刻，都可以利用现有的 ED 样本构建局部PCE或单一全局多项式混沌展开。不能保证 DAL-PCE 比全局多项式混沌展开提供更好的近似效果。具体而言，可以通过计算式（23）中的 Q^2 local，以及根据式（9）由单一全局多项式混沌展开得到的 Q^2 global，来计算 Q^2,specifically，从而对此进行衡量。如果在某次迭代中 Q^2 local $>Q^2$ global，则认为域分解效果较差，并重新启动整个分解过程。也就是说，舍弃完整的几何分解，并将所有现有的 ED点作为全新算法运行的初始实验设计。这一过程如图3所示：图中展示了重启前的分解（上）及其相应误差（下）a) 在 $N_{\text{sim}} = 181$时，b) 重启后立即得到的新分解及误差，以及 c) 最终分解/误差；后者相较于全局多项式混沌展开有显著改进。这些历史记录显示了式（24）中定义的标准 R^2 误差。无需在每次迭代时都检查这一判据，但建议定期检查，即每 n_r 步检查一次，以确保充分的局部细化。

3.8. 停止准则

所提出的DAL-PCE 算法可通过添加适当的停止准则实现完全自动化。一种简单但实用的停止准则基于计算预算，即当模型评估N_{sim} 的总次数或迭代次数n_{iter} 达到临界水平/预算后停止。也可以使用基于分解模式的停止准则，例如任一子域的最小体积或最大体积，以确保所需的分辨率。还可以直接根据Q^2, 获得有价值的停止准则，该指标对应于所达到准确度的目标/阈值水平。无论选择哪种停止准则，都可以很容易地在所提出算法的第 5步之前（每次迭代开始时）应用。

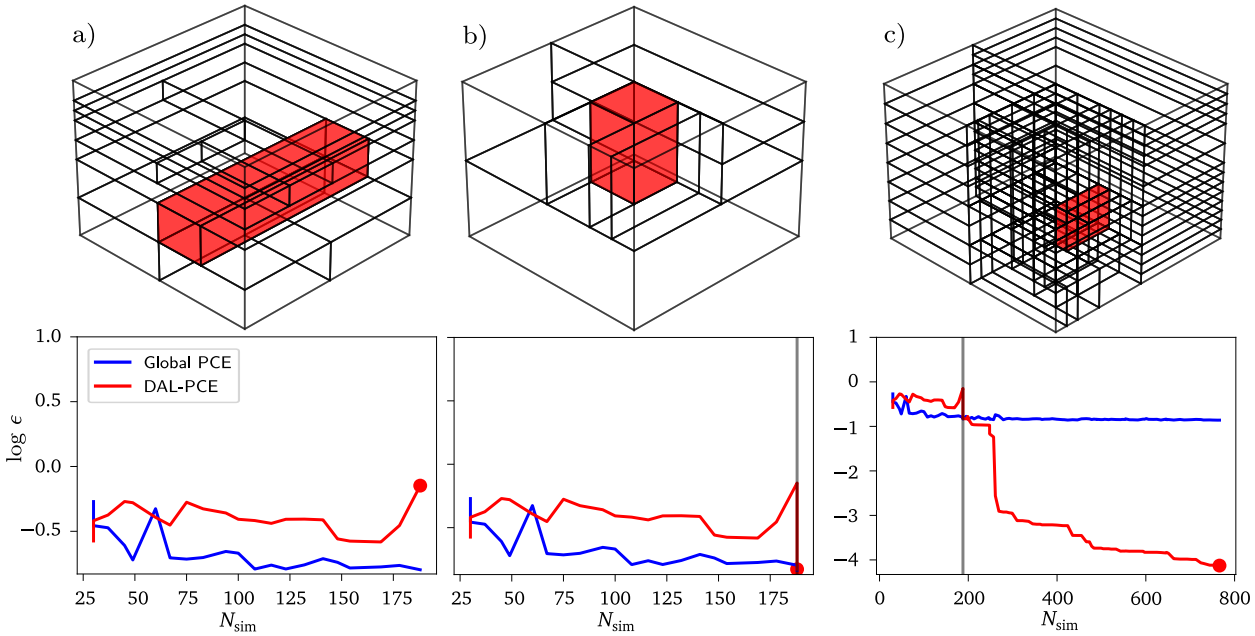

图 3：域分解重启示意图。a）重启前的分解和误差演变；b）重启后立即重建的分解和误差下降；c）最终的分解和误差，表明重启使近似误差显著降低成为可能。

4. 数值实验

所提出的 DAL-PCE 在四个复杂度逐步增加的数值算例上进行了展示，这些算例说明了该方法的不同方面。所得结果分别与以下方法进行比较：（a）具有自适应最高阶数 PCE方法 $p \in [5, 25]$，以及（b）SSE [2], ——当前最先进的基于域分解的非侵入式代理建模技术。该PCE 使用UQPy 软件包 [36] 构建，SSE的原始实现则取自UQLab 软件包 [37]。为比较这些方法，˜在包含大量 10^6 积分点的验证集上，针对全部三种近似f 计算相对均方误差 ϵ；这些积分点按照以下方式通过朴素蒙特卡洛生成：

$$\epsilon(\boldsymbol{X}) := \frac{\mathbb{E}\left[\left(f(\boldsymbol{X}) - \tilde{f}(\boldsymbol{X})\right)^2\right]}{\mathbb{D}\left[f(\boldsymbol{X})\right]}, \tag{24}$$

其中， $\mathbb{E}[]$ 和 $\mathbb{D}[]$ 分别为均值和方差算子。

为展示所提出的DAL-PCE 算法的代表性结果，计算重复进行 100 次，并为所有示例选择了相同的算法设置，具体如下：最大局部多项式次数$p = 2$、全局候选点数量$n_{c,\ g} = 1000\ M$、局部候选点数量$n_{c,\ l} = 5P$、构建局部PCE 所需的最小样本数量$n_{\text{sim}} = 1.5P$、检查重启前的最小迭代次数$n_r = 20$，以及 $\boldsymbol{\beta}$ 均通过最小角回归和普通最小二乘法算法获得。为证明针对 SSE 的展开式合理，子域中的最小样本数量设置为与DAL-PCE 相同，多项式阶数则在$p \in [2, 6]$范围内自适应选择。由于 SSE 并非序贯方法，因此为比较该方法的收敛性，所展示的结果基于 10 个规模递增的离散样本集获得。需要注意的是，所有对比方法中的样本和候选点均通过 LHS 生成，尽管已有研究表明 [1]，对于基于方差的序贯采样，采用相干性 D-最优采样等先进技术会显著更优 [41]。

4.1 一维玩具示例

第一个示例涉及一个简单的一维函数 [2]，由于其中第三项高度非线性的“exp”项，使用PCE 对其进行近似极其困难：

$$f(X) = -X + 0.1\sin(30X) + \exp(-(50(X-0.65))^2), \quad X \sim \mathcal{U}[0,1]. \tag{25}$$

图 4c 中的蓝线展示了基于 200 个样本训练得到的单个全局 PCE 的较差表现。显然，即使样本数量较多且最大多项式阶数 $p \in [5,25]$ 较高，单个全局 PCE 仍无法准确逼近该函数。该函数最初旨在展示基于域分解的 SSE 的效率，因此自然适合用于比较所提出的DAL-PCE 与 SSE。

图 4a-b 展示了 DAL-PCE 的一次典型运行：算法逐步分解域，并向实验设计中添加样本。图中具体展示了第 4 次和第 11 次迭代。子域的边界以蓝色竖线表示，红点表示实验设计中样本的位置。当算法发现高度非线性区域（由 exp 引起的陡峭峰值）后，便逐步细化该区域，并因其方差密度较高而在此添加更多样本。当然，这些图只展示了算法的一次运行结果，分解方式取决于初始实验设计。因此，有必要使用随机生成的初始实验设计多次运行该算法，以评估其收敛情况。图 4d 展示了收敛情况

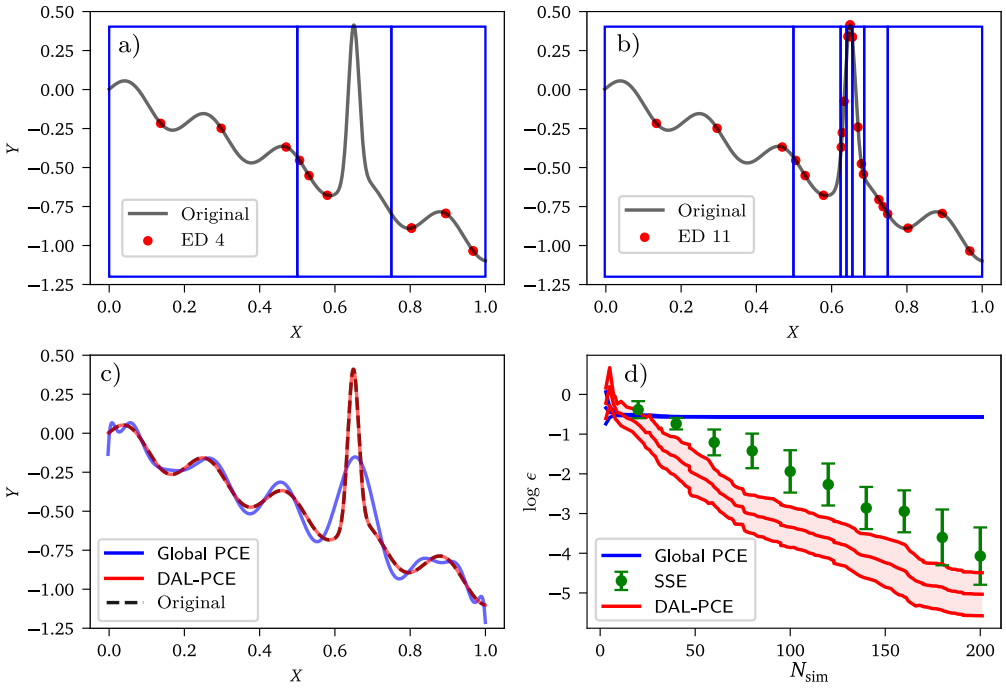

图 4：（a）、（b）探索并发现数学模型的指数部分前后（第 4 次迭代和第 11 次迭代）的自适应域和实验设计。（c）全局多项式混沌展开 和DAL-PCE得到的最终代理模型。（d）比较全局多项式混沌展开 SSE 与DAL-PCE均方误差的收敛图。全局多项式混沌展开 和 DAL-PCE 的收敛图显示了 100 次重复试验所得的连续均值 $\pm\sigma$ 区间，而 SSE 的收敛图则针对若干离散的实验设计规模绘制。

误差 ϵ 来自 100 次重复试验。单一的全局 PCE 即使使用较高的p，也无法准确逼近原始函数，因此 ϵ不会收敛，这符合预期。基于域分解的两种方法（DAL-PCE 和 SSE）在仅使用 200 个样本时就已经达到了很高的准确度。然而，对于给定的样本数，DAL-PCE的准确度始终比 SSE 高 1–2 个数量级。此外，总体而言，ϵ 的方差在 DAL-PCE 中的增长速度比在 SSE 中更慢。在原论文 [2]中也可以看到 SSE 方差的快速增长。最后，我们再次观察到，DAL-PCE的收敛是连续的，而通过新的分析，SSE 只能在离散的样本量下评估收敛性。所有这些

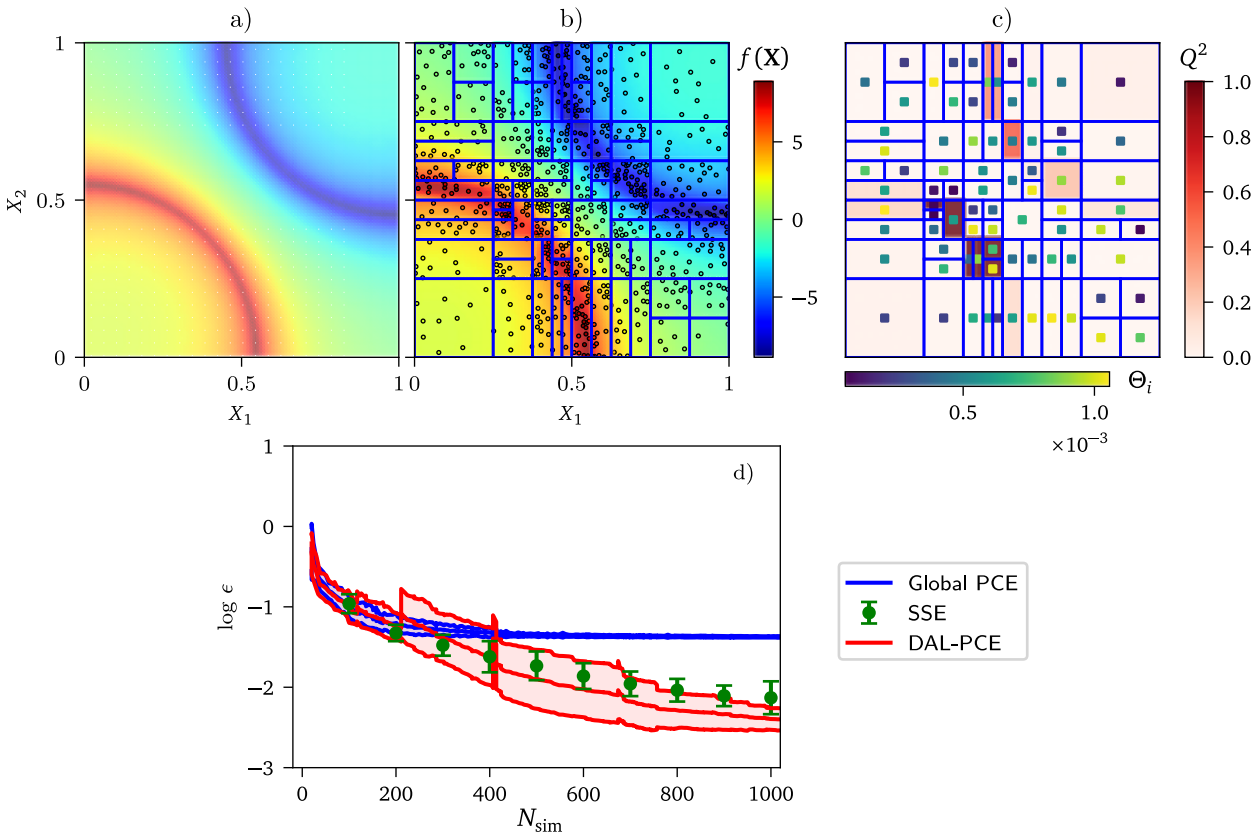

图 5：二维奇异函数的结果：a）原始数学模型；b）通过 DAL-PCE （背景色）得到的近似、当前域划分及相应的实验设计（ED）；c）每个子域的局部留一交叉验证（LOO-CV）$Q^2_{\mathcal{D}_i}$ 和 Θ_i 值；d）DAL-PCE、全局 PCE和 SSE 的收敛图，显示均值和 $\pm\sigma$ 区间。SSE 的收敛图显示离散样本量下的均值 $\pm\sigma$ 。

优势DAL-PCE 都可归因于主动学习：主动学习既探索空间，又利用函数的行为来分解域并添加样本。尽管主动学习可能会导致初始阶段的准确度较低（ ϵ较高）（对于较小的$n_{\text{sim}} = 10$–20），因为此时它主要进行探索，但一旦识别出重要特征并开始倾向于利用，其性能就会迅速提升。

4.2. 二维奇异性

第二个 e xample 涉及一个具有镜像四分之一圆弧线奇异性的二维函数 [1]。该函数的形式为 给出如下:

$$f(\boldsymbol{X}) = \frac{1}{|0.3 - X_1^2 - X_2^2| + \delta} - \frac{1}{|0.3 - (1-X_1)^2 - (1-X_2)^2| + \delta}, \quad \boldsymbol{X} \sim \mathcal{U}[0,1]^2, \tag{26}$$

其中奇异点的强度由参数 δ 控制，我们将其设为 $\delta = 0$。1. 在此示例中，即使采用高阶方法，全局 多项式混沌展开 仍面临极具挑战性的任务，这是由于众所周知的吉布斯现象 [49]。因此，识别奇异性的所在位置、对域进行局部分解，并构建低阶局部多项式混沌展开，将会十分有益。

图 5 展示了计算某一阶段的分解和 DAL-PCE 近似。面板 a) 通过背景颜色显示函数的真实值。面板 b) 使用相同的配色方案，通过小圆圈表示当前实验设计（ED）中可用的逐点信息，并通过背景颜色表示DAL-PCE 函数近似。面板 b) 和 c) 还展示了最终的域分解。其对称性

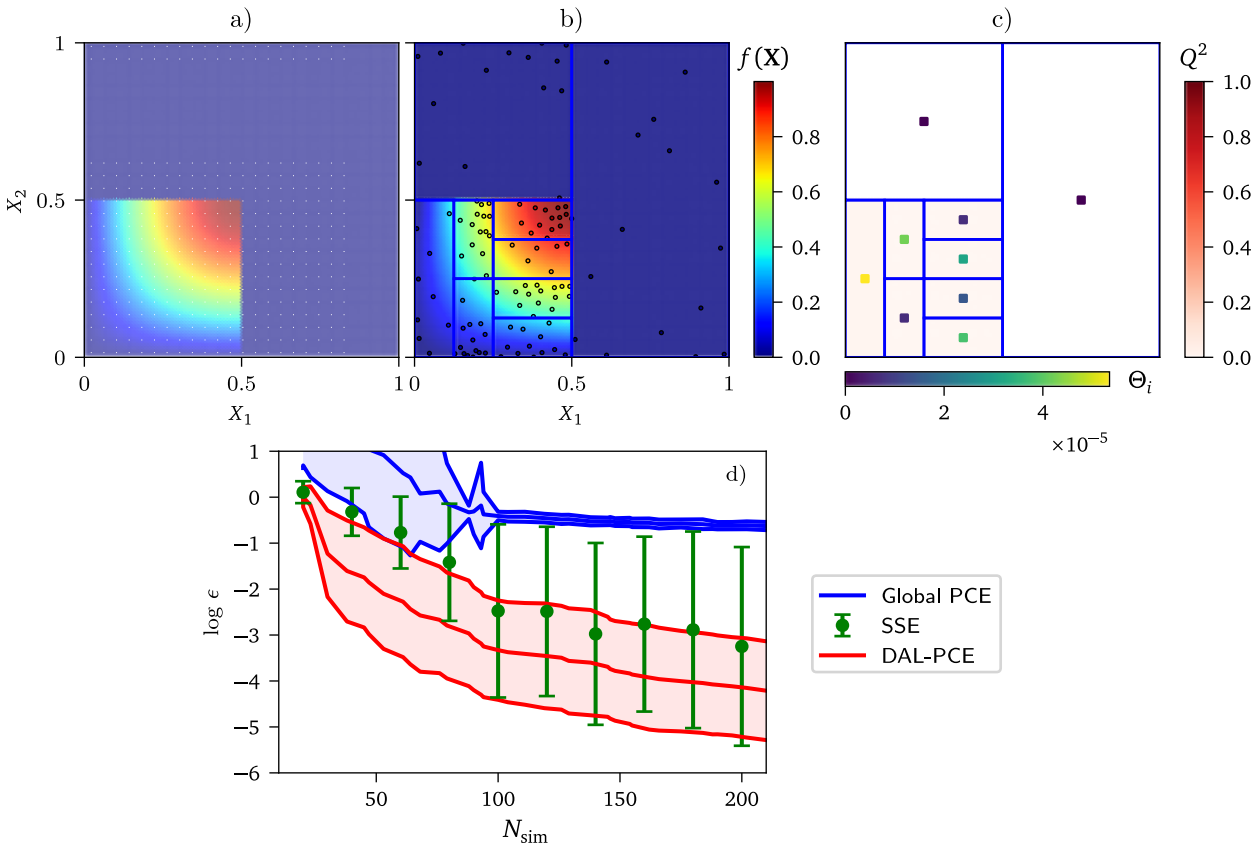

图 6：二维不连续函数的结果：a) 原始数学模型；b) 通过 DAL-PCE 和实验设计进行近似；c) 每个子域的局部留一交叉验证$Q^2_{\mathcal{D}_i}$ 和 Θ_i 值；d) DAL-PCE、全局PCE和 SEE 的收敛图，显示均值和$\pm\sigma$ 区间。SSE 的收敛图显示了离散样本量下的均值 $\pm\sigma$ 。

体现了DAL-PCE 的良好收敛，这得益于上一节所述的自适应分解。图 c) 显示了每个子域中的局部$Q^2_{\mathcal{D}_i}$ 误差（颜色越深，局部误差越大）。这些局部误差清楚地表明，预测误差集中在奇异点附近很小的区域内，而这些区域正在不断细化。每个子域中心的小实心方块的颜色表示该子域的 Θ_i 值。

最后，图 5d) 中的收敛图表明，正如预期，DAL-PCE 和 SSE 的表现均优于全局PCE。对于较小的N_{sim}，SSE 的表现与DAL-PCE 相当或略好；但随着N_{sim} 增大，得益于针对奇异点附近样本的主动学习方法，DAL-PCE开始优于 SSE。需要注意的是，当样本量接近 1000 时，SSE 和DAL-PCE 的误差均趋于收敛，此后似乎不会显著降低。这是因为即使在局部范围内，使用低阶多项式近似这种奇异性也存在根本局限。

4.3. M 维不连续性

第三个示例考察了维数对所提出的 DAL-PCE 性能的影响。对于任意数量的输入随机变量 M [26]，定义如下不连续函数：

$$f(\boldsymbol{X}) = \begin{cases} \sin(X_1\pi)\sin(X_2\pi) & \text{if } x_1 \le 0.5 \text{ and } x_2 \le 0.5 \\ \sum_{i=3}^{M} X_i & \text{otherwise} \end{cases}, \quad \boldsymbol{X} \sim \mathcal{U}[0,1]^M. \tag{27}$$

该函数在前两个输入随机变量上存在不连续性，如图 6a 所示。由于存在不连续性，单个全局 PCE 无法准确逼近该函数，尽管函数f (*XXX*)

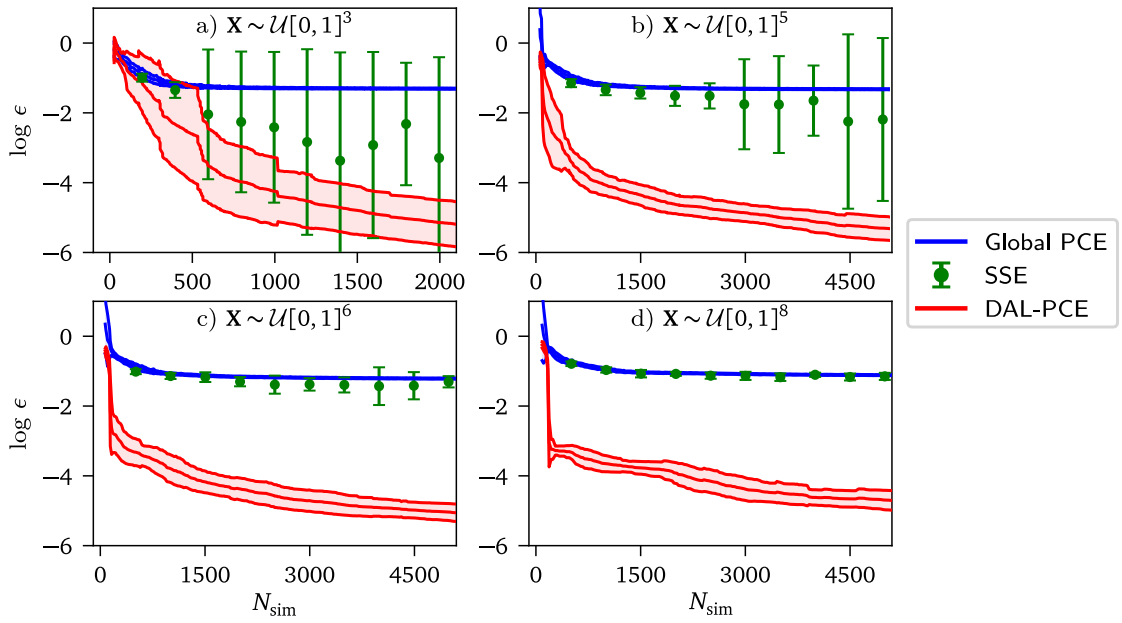

图 7：M维函数的收敛图：a) 三维版本，b) 五维版本，c) 六维版本，以及 d) 八维版本。DAL-PCE 和全局PCE 的收敛图显示了均值 $\pm\sigma$ 区间。SSE 的收敛图也显示均值 $\pm\sigma$，但样本量是离散的。

可以在定义不同的两个区域内分别使用两个PCE进行逼近。但这需要事先 知道不连续位置。由于假设不连续位置未知，因此该函数是使用DAL-PCE进行域适应的一个很好的示例。

该问题二维版本的详细结果如图 6 所示，其形式与前一个示例相同。请注意，局部$Q^2{}_i$ 误差图 6c 显示，在输入随机空间中$f\ (XXX) = 0$ 的部分具有完美准确度，因此不会优先对相关子域进行进一步分解。图 6d 中的收敛图证实，单个全局PCE 无法构建准确的近似，而向实验设计中添加更多点也不会使近似得到显著改进。与第一个示例类似，所提出的DAL-PCE 方法的误差均值ϵ 显著低于 SSE（低 1–2 个数量级），尽管两种方法的收敛趋势相似。然而，SSE 使用随机划分程序。这可能导致结果方差非常高，因为准确度高度依赖于分解后输入随机空间的模式。这清楚地表明了主动学习方法的优势。

图 7 研究了维数M 对DAL-PCE、SSE 和全局PCE 收敛性的影响，分别对应 a) 3、b) 5、c) 6 和 d) 8 个输入随机变量。随着域维数增加，函数$f\ (XXX)$ 的线性部分在域中所占比例逐渐增大，而不连续性仍保持低维。所提出的DAL-PCE 能够识别理想的分解并布置局部样本以解析不连续性，因此大幅提升了收敛性。对于低维情况（$M = 2,\ 3$），SSE 误差 ϵ 呈下降趋势，优于全局PCE，但方差极高。这是由于样本布置缺乏控制所致。SSE 中的域分解由样本位置决定；如果没有主动学习来指导样本布置，SSE 有时会得到非常好的分解，有时则会得到非常差的分解。与此同时，所提出的DAL-PCE 在低维情况下的误差方差相对较低，且其准确度始终与最佳 SSE 实现相当或更高。

随着维数M的增加，DAL-PCE 仍能保持非常高的准确度，而 SSE 的准确度则完全下降，达到与全局PCE相当的水平。DAL-PCE 之所以能够保持较低的误差，是因为不连续性仍然具有低维特征，且主动学习过程能够针对该区域进行域细化和采样。这意味着DAL-PCE 基本上不受问题维数的影响，而主要取决于模型不连续

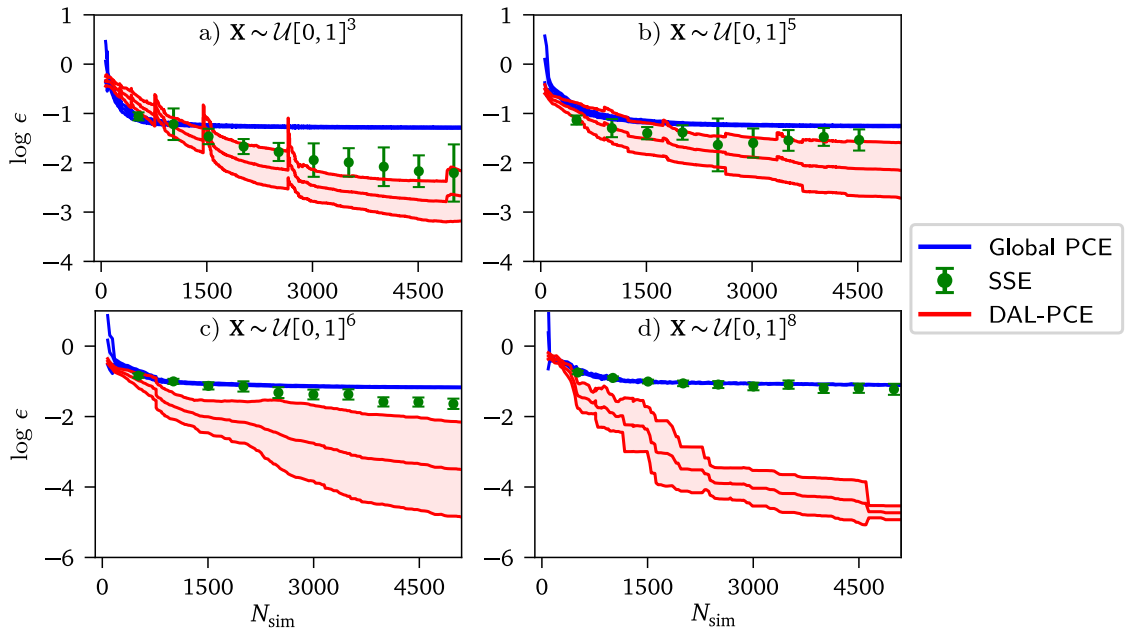

图 8：修正后的M维函数的收敛图：a）3 维版本，b）5 维版本，c）6 维版本，d）8 维版本。DAL-PCE 和全局PCE 的收敛图显示均值 $\pm\sigma$ 区间。SSE 的收敛图也显示均值 $\pm\sigma$，但仅在离散样本量处显示。

的/非线性特征的内在维数。另一方面，SSE 的性能会随维数增加而下降，因为其域分解仅依赖于一组先验 指定的点，而这些点的选择并未考虑模型的重要特征。因此，随着维数增加，该算法越来越不可能围绕嵌入的低维特征适当地细化域。我们指出，DAL-PCE 这种理想的可扩展收敛趋势不太可能是一种普遍性质，因为当不连续性/非线性的内在维数较高，或不连续性仅占域中非常小的比例时，这种趋势可能会失效——在这种情况下，为了探索空间并找到重要特征，可能需要大量样本。

在本例中，式（27）给出的函数的不连续性位于$x_1 = 0.5$ 和$x_2 = 0.5$ 处，这恰好对应于 SSE 以及 DAL-PCE早期迭代过程中域被划分的位置。有人可能会认为，这使所提出的算法获得了不合理的优势。因此，我们对该函数进行了修改，使不连续性位于$x_1 = 0.61$ 和$x_2 = 0.61$ 处。图8 展示了DAL-PCE 和 SSE 在不同维数M下对该修正函数的收敛情况。绝对误差ϵ 下降得较慢，尤其是在维数$M = 3$ 和$M = 5$时。然而，所提出的主动学习方法仍然取得了更优的结果（尤其是在高维情况下，与前一个例子相同）。请注意，在 3 维示例的 DAL-PCE 收敛图中出现了明显的尖峰。尽管结果经过了统计处理，这些尖峰仍是由重复试验中重启自适应总是在同一个N_{sim} 处触发所导致的。在这种情况下，最优分解模式非常复杂，因此算法会频繁启动重启自适应（每隔n_r 步的整数倍），直到找到合适的模式以继续收敛。与前一个例子相比，SSE 在 3 维和 5 维情况下的平均误差较大，方差则显著较小。这是因为修正后的不连续位置不再位于域分解的边界上。在前一个例子中，由于域恰好沿着不连续位置划分，部分 SSE 实现取得了近乎完美的准确度。

图 9 对这一现象进行了更深入的研究，该图比较了两个版本三维示例中的离群值数量。除先前所示的均值 $\pm\sigma$ 外，该图还展示了 SSE 的标准箱线图（中位数以及下四分位数和上四分位数），以及产生极高准确度的“极端”实现的相应数量（顶部坐标轴）：a) 不连续性的原始位置；以及 b) 不连续性位于 $x_1 = 0.61$

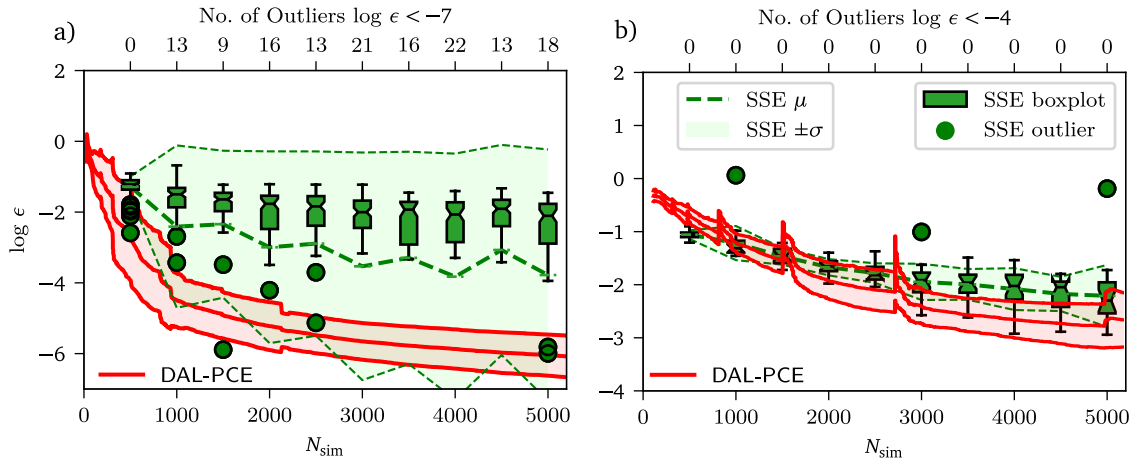

图9：DAL-PCE 和SSE的收敛图，以及SSE的附加箱线图，显示以下情况的中位数、下四分位数和上四分位数及离群值：a）在$x_1 = 0.5$和$x_2 = 0.5$处存在不连续性的三维示例；b）在$x_1 = 0.61$和$x_2 = 0.61$处存在不连续性的三维示例。

以及$x_2 = 0.61$。如图所示，在面板 a) 中，有许多离群值产生了 $\epsilon < -7$，这实际上使μ 相对于中位数降低，同时也显著增加了方差。相比之下，DAL-PCE 没有离群值，因此结果非常一致。在面板 b) 中，SSE 或 DAL-PCE 均没有离群值，因此两种方法的结果都具有较低方差，表现一致。

4.4. 非对称浅拱 *von Mises* 桁架

本节通过一个具有不连续响应的代表性工程学示例，展示所提出方法的相关性。考虑一个在顶部节点处承受竖向载荷的浅双杆平面桁架，如 [50] 所示，并见图10a。

该桁架由两根硬木制成的棱柱杆组成（密度为800 kg/m^3, ，弹性模量为E = 12 GPa）。所研究的von Mises 桁架包含两个变量：(i) 竖向载荷F，以及(ii)左杆的半正弦波初始缺陷，其幅值为 δ，见图10a中的示意图。载荷在零时刻以阶跃函数形式动态施加，并持续无限长时间。结构建模如图10b所示。具体而言，杆的质量集中在21个质量点上，其中包括支座和加载点。这些质量点通过 10 + 10 平移弹簧相连，用于表示实际杆的法向刚度。每对轴向构件通过转动弹簧相连；相邻杆件之间夹角为零时，转动弹簧的力矩为零。唯一的例外是加载点和支承点处，这些位置未连接转动弹簧（铰链）。阻尼通过质量点施加，采用线性黏性阻尼系数11 N· s/(kg · m)，对应约3%的相对阻尼。采用显式动力学求解器FyDiK [51, 52] 求解质量点处的平衡方程。数值解持续时间最长为两秒，这是使解几乎完全稳定所需的时间（动能降至可忽略的阈值以下）。

由于结构非常浅，竖向力的突然施加可能导致跳跃屈曲，此时加载点会在支座之间下落，而杆件在最终稳定状态下会从压缩状态转变为承受拉应力的状态。我们重点研究y_F 动力响应稳定至最终变形形状后加载点的水平坐标。力F $\in$ (31.6,772.6) kN 和初始缺陷 $\delta \in (-0.4, 0.4)$ m 被视为均匀随机变量，并映射到单位正方形，使模型输入$\mathbf{X} \sim \mathcal{U}[0,1]^2$。由于可能发生跳跃屈曲，如图10c 所示，解是不连续的。在不连续性的两侧，解y_F 均光滑且缓慢变化，其值分别接近 +1 m 和 -1 m。需要注意的是，输出并不对称于 $\delta = 0$，因为对于凹形和凸形初始位移，动力响应的演化过程不同。

屈曲区域与未屈曲区域之间的尖锐边界（如图 11a 所示）会导致全局 多项式混沌展开 产生较差的近似，并且容易出现吉布斯现象，这与小节中的示例类似

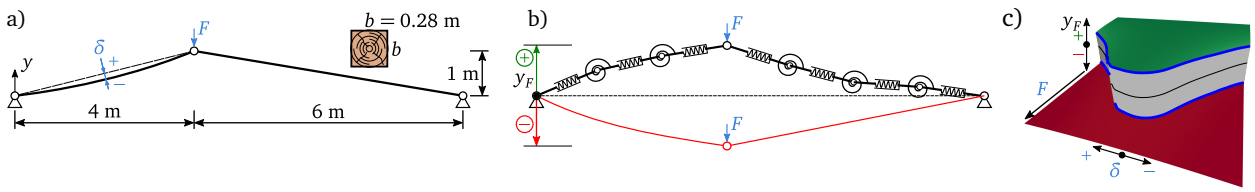

图10：非对称浅拱 von Mises 桁架。a) 包含两个随机变量F 和 δ的初始几何形状；b) 离散动力学模型及输出变量y_F含义的示意图；c) 两个输入变量的不连续响应函数示意图。

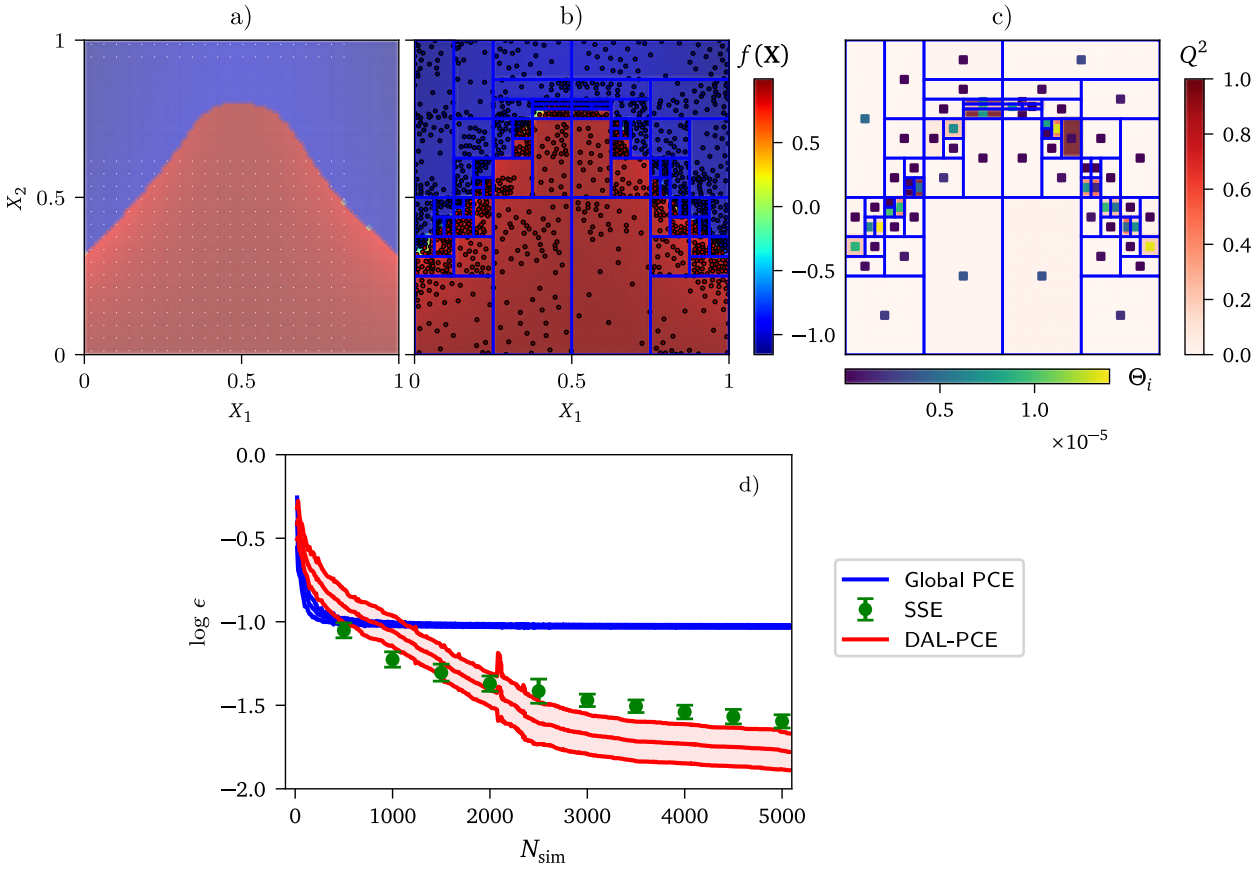

图11：von Mises 桁架示例的结果：a) 原始数学模型（数值解）；b) 通过DAL-PCE 和实验设计获得的近似；c) 每个子域的局部留一交叉验证$Q^2_{\mathcal{D}_i}$ 和 Θ_i 值；d) DAL-PCE、全局PCE和SSE的收敛图，显示均值和 $\pm\sigma$ 区间；SSE的收敛图显示离散样本量下的均值 $\pm\sigma$ 。

4.2。图 11d 中的收敛图对比了全局多项式混沌展开、DAL-PCE 和 SSE。显然，该示例的复杂性以及不连续性的复杂形状限制了所有代理模型的准确度。所提出的 DAL-PCE 在样本量较小时准确度较低，这是因为相应的少量子域和低阶 多项式混沌展开无法充分近似边界。因此，全局 多项式混沌展开和 SSE（具有较少的嵌入层级）在初始阶段表现更好。随着样本量增加，所提出的 DAL-PCE 方法能够取得更优结果，因为主动学习能够解析不连续性，如图 11b 所示，该图展示了使用 2000 个样本后的域分解和近似结果。图11c 展示了每个子域对应的留一交叉验证误差，表明误差局限于边界附近的小范围局部区域。

5. 讨论与未来工作

所提出的 DAL-PCE 方法是一种通用方法论，用于输入随机空间的分解，以及利用主动学习构建局部化的多项式混沌展开。所提出的主动学习基于一种新颖的 Θ准则，能够在模型的全局探索 与局部利用之间实现最优平衡。尽管本文介绍了一种具体的学习算法，但该方法论具有通用性，并且可以根据特定用户的需求进行修改。整个过程可以分为两个任务：A）输入随机空间分解；B）局部化多项式混沌展开的构建；如后文所述，这两个任务均可轻松修改：

A）最重要的子域 $\mathcal{D}_i$ 通过扩展 Θ 根据针对大量全局候选点评估的公式（17）进行识别。本文使用标准 LHS 生成候选点，但采用能够使整个输入随机空间覆盖更加均匀的不同抽样方法可能更为有利（例如参见 [53, 54, 45]）。尽管通常可以生成大量候选点，但要均匀覆盖整个输入随机空间可能颇具挑战，尤其是在高维情况下。因此，可以针对具体示例采用任何合适的抽样技术，例如 [55]。

通过公式（17）确定 $\mathcal{D}_i$ 后，如果其中包含足够的实验设计点（ED点），则将其划分；否则就在其中扩充样本，以获得更好的多项式混沌展开（PCE）近似。最简单的划分方式是在一阶 Sobol' 指数最高的方向上，将体积划分为两个超体积相同的部分。然而，该算法也可以适应各种不同的方法。例如，可以将 $\mathcal{D}_i$ 划分为更多的子域，而不仅仅是两个。此外，与其将域划分为超体积相等的部分，也可以采用其他判据。例如，可以设置切割平面，使域方差被等分。

B）用户可以选择采用任何现有方法来构建非侵入式多项式混沌展开（PCE），包括各种稀疏求解器或自适应算法；对于某些应用而言，这些方法可能更为合适 [12]。例如，我们将最小角回归与普通最小二乘法结合使用。然而，通常而言，采用基于 Θ 准则的主动学习来构建多项式混沌展开（PCE）会更加高效，如 [1], 所示，该方法采用基于方差的序贯抽样。这一改进可以集成到DAL-PCE 中，从而使每个子域中的局部多项式混沌展开（PCE）更加高效，进而改善整体收敛性。通过在子域内使用诸如相干性 D-最优采样等高级采样技术，还可以进一步提升这一效果 [40, 41]。

如前文所述，整个算法可以根据给定数学模型的特征（如维数、稀疏性、非线性等）进行调整，以满足特定需求，只需将所提出算法中的组件替换为合适的现有（或新）技术即可。需要注意的是，即使经过修改，基于 Θ 准则的整个方法仍然有效，并且可以像本文所述那样用于不确定性量化和代理建模。此外，与 SSE 相比，DAL-PCE 会根据从前一次迭代中获得的信息，按顺序逐点添加样本点，并逐一划分子域。

DAL-PCE 的另一个显著优势是，它能够估计与每个子域相关的局部误差 $Q_{\mathcal{D}_i}$。由于局部化的PCE是独立构建的，局部误差可以直接估计代理模型的局部精度，并可汇总以提供全局误差度量。显然，局部精度是非常重要的信息，可用于进一步的概率分析和主动学习。尽管本文没有提出任何针对这些信息的具体后处理方法，但它可以作为各种主动学习算法的主要组成部分。例如，它可以直接用于预测工业应用中的不确定性，并可能扩展感兴趣子域中的实验设计。

最后，进一步研究的一个重要主题是考察所提出准则在高维中的表现。特别是，几何项 $l^M{}_{c,s}$ 以及 $\mathcal{W}_i$ 很可能会导致高维中的收敛性较差。尽管在提出原始 Θ 准则的论文 [1] 中，已经对高维情况下的 $l^M{}_{c,s}$ 进行了初步研究，但仍有必要对其表现开展广泛研究，并考察 $\mathcal{W}_i$的影响；对于高维情况，可能需要对其进行重新表述。

6. 结论

该论文提出了一种新颖的方法——域自适应局部化PCE，用于基于主动学习和输入随机空间分解，对局部化PCE进行自适应序贯构建。该方法基于最近提出的 Θ 准则进行自适应序贯采样，以保持输入随机空间探索与利用PCE 当前特征之间的平衡；同时，通过对输入随机空间进行自适应序贯分解，构建由局部代理模型近似的子域。该方法提供了一种通用技术，可以针对特定函数进行轻松调整或修改，从而拓展其适用性。通过多个复杂度逐步增加的数值算例，对所提出方法的性能进行了验证，研究了算法的不同方面，并且与单一全局PCE 及最近提出的 SSE 相比，取得了更优的结果。

致谢

第一作者感谢捷克科学基金会根据项目编号 22-00774S 提供的资金支持。此外，本研究的大部分工作是在第一作者于约翰斯·霍普金斯大学开展研究期间完成的，该研究访问由捷克布尔诺理工大学“研究人员国际流动”项目提供支持，项目编号为 EF18_053/0016962。

参考资料

[1] L. Novák, M. Vo˘rechovský, V. Sadílek, M. D. Shields，基于方差的自适应序贯采样用于多项式混沌展开，《计算力学与工程方法》386 (2021) 114105。 doi:10.1016/j.cma.2021.114105。[2] S. Marelli, P.-R. Wagner, C. Lataniotis, B. Sudret，随机谱嵌入，《不确定性量化国际期刊》11 (2) (2021) 25–47。 doi:10.1615/int.j.uncertaintyquantification.2020034395。[3] N. Wiener，齐次混沌，《美国数学杂志》60 (4) (1938) 897–936。 doi:10.2307/2371268。[4] G. Blatman, B. Sudret，基于最小角回归的自适应稀疏多项式混沌展开，《计算物理学杂志》230 (6) (2011) 2345–2367。 doi:10.1016/j.jcp.2010.12.021。[5] R. G. Ghanem, P. D. Spanos，《随机有限元：谱方法》，Springer New York,

1991 doi:10.1007/ 。.

978-1-4612-3094-6

[6] N.-Z. Chen, C. Guedes Soares，层合复合板的谱随机有限元分析，《计算力学与工程方法》197 (51) (2008) 4830–4839。 doi:10.1016/j.cma.2008.07.003。[7] L. Novak, D. Novak，剪切失效混凝土梁随机分析中的代理建模，载于：《Fib研讨会2019论文集：混凝土——材料、设计与结构创新》，2019，第1741–1747页。[8] B. Sudret，使用多项式混沌展开进行全局敏感性分析，《可靠性工程与系统安全》93 (7) (2008) 964–979。 doi:10.1016/j.ress.2007.04.002。[9] T. Crestaux, O. L. Maître, J.-M. Martinez，用于敏感性分析的多项式混沌展开，《可靠性工程与系统安全》94 (7) (2009) 1161–1172。 doi:10.1016/j.ress.2008.10.008。[10] A. Cohen, G. Migliorati，最优加权最小二乘方法，《SMAI计算数学杂志》3 (2017) 181–203。doi:10.5802/smai-jcm.24。[11] A. C. Narayan, J. Jakeman, T. Zhou，配置点逼近的Christoffel函数加权最小二乘算法，《数学计算》86 (2017) 1913–1947。 doi:10.1090/mcom/3192。[12] N. Lüthen, S. Marelli, B. Sudret，稀疏多项式混沌展开：文献综述与基准测试，《SIAM ASA不确定性量化杂志》9 (2) (2021) 593–649。/。 doi:10.1137/20M1315774B. Echard, N. Gayton, M. Lemaire，AK-MCS：结合克里金法与蒙特卡罗模拟的主动学习可靠性方法，《结构安全》33 (2) (2011) 145–154。[13]。 doi:10.1016/j.strusafe.2011.01.002L. Shi, B. Sun, D. S. Ibrahim，基于径向基函数和多核函数的主动学习可靠性方法，《结构与多学科优化》60 (1) (2019) 211–229。[14]。 doi:10.1007/s00158-019-02210-0X. Yang, X. Cheng，结合克里金模型与基于多峰优化的重要抽样的小失效概率估计主动学习方法，《工程数值方法国际期刊》121 (21) (2020) 4843–4864。doi:10.1002/nme.6495。[16] S. Marelli, B. Sudret，结合稀疏多项式混沌展开与自助法的结构可靠性分析主动学习算法，《结构安全》75 (2018) 67–74。 doi:10.1016/j.strusafe.2018.06.003。[17] Y. Zhou, Z. Lu, W. Yun，系统可靠性分析的主动稀疏多项式混沌展开，《可靠性工程与系统安全》202 (2020) 107025。 doi:10.1016/j.ress.2020.107025。[18] K. Cheng, Z. Lu，基于最大化期望指示函数预测误差的可靠性分析主动学习多项式混沌展开，《工程数值方法国际期刊》121 (14) (2020) 3159–3177。 doi:10.1002/nme.6351。[19] N. Fajraoui, S. Marelli, B. Sudret，稀疏多项式混沌展开的序贯试验设计，《SIAM ASA不确定性量化杂志》5 (1) (2017) 1061–1085。/。

[20] M. Thapa, S. B. Mulani, R. W. Walters，具有基函数自适应与序贯自适应采样的自适应加权最小二乘多项式混沌展开，《计算力学与工程方法》

360 2020 112759 doi:10.1016/j.cma.2019.( )。.
112759
[21] M. D. Shields，强非线性随机系统的自适应蒙特卡罗分析，《可靠性工程与系统安全》175 (2018) 207–224。
doi:10.1016/j.ress.2018.03.018。[22] Y. Zhou, Z. Lu, K. Cheng, C. Ling，稀疏贝叶斯学习框架中用于多项式混沌展开的高效稳健自适应采样方法，《计算力学与工程方法》

352 2019 654 674 doi:10.1016/j.cma.2019.( )–。.
04.046
[23] J. Zhang, W. Gong, X. Yue, M. Shi, L. Chen，使用面向预测的主动稀疏多项式混沌展开进行高效可靠性分析，《可靠性工程与系统安全》228 (2022) 108749。 doi:10.1016/j.ress.2022.108749。[24] M. K. Deb, I. M. Babuška, J. Oden，使用Galerkin有限元技术求解随机偏微分方程，《计算力学与工程方法》190 (48) (2001) 6359–6372。 doi:10.1016/S0045-7825(01)00237-7。[25] J. A. Witteveen, G. Iaccarino，针对非超立方体概率空间、结合随机抽样与外推的单纯形随机配置，《SIAM科学计算杂志》34 (2) (2012) A814–A838。[26] A. Bhaduri, Y. He, M. D. Shields, L. Graham-Brady, R. M. Kirby，采用自适应网格细化进行参数不确定性分析的随机配置方法，《计算物理学杂志》371 (2018) 732–750。 doi:10.1016/j.jcp.2018.06.003。[27] P.-R. Wagner, S. Marelli, I. Papaioannou, D. Straub, B. Sudret，使用随机谱嵌入进行稀有事件估计，《结构安全》96 (2022) 102179。
doi:10.1016/j.strusafe.2021.102179。[28] X. Wan, G. E. Karniadakis，用于随机微分方程的自适应多元广义多项式混沌方法，《计算物理学杂志》209 (2) (2005) 617–642。 doi:10.1016/j.jcp.2005.03.023。[29] D. Xiu, G. E. Karniadakis，用于随机微分方程的Wiener–Askey多项式混沌，《SIAM科学计算杂志》24 (2) (2002) 619–644。 doi:10.1137/s1064827501387826。[30] L. Novák，基于多项式混沌展开的基于分布的全局敏感性分析，《计算机与结构》267 (2022) 106808。doi:10.1016/j.compstruc.2022.106808。[31] W. Gautschi，关于正交多项式的生成，《SIAM科学与统计计算杂志》3 (3) (1982) 289–317。doi:10.1137/0903018。[32] B. Efron, T. Hastie, I. Johnstone, R. Tibshirani，最小角回归，《统计年鉴》

32 2 2004 407 451 doi:10.2307/( )( )–
3448465
。.[33] J. A. Tropp, A. C. Gilbert，通过正交匹配追踪从随机测量中恢复信号，《 IEEE 信息论汇刊》 53 (12) (2007) 4655–4666。
doi:10.1109/tit.2007.909108。[34] S. Ji, Y. Xue, L. Carin，贝叶斯压缩感知，《IEEE信号处理汇刊》

56 6 2008 2346 2356 doi:10.1109/( )( )–
TSP.2007.914345
。.[35] G. Blatman, B. Sudret，用于随机有限元分析的稀疏多项式混沌展开构建自适应算法，《概率工程力学》 25 (2) (2010) 183–197。
doi:10.1016/j.probengmech.2009.10.003。[36] A. Olivier, D. Giovanis, B. Aakash, M. Chauhan, L. Vandanapu, M. D. Shields, UQPy：用于不确定性量化的通用Python软件包与开发环境，《计算科学杂志》47 (2020) 101204。[37] S. Marelli, B. Sudret，UQLab：用于Matlab不确定性量化的框架，载于：《脆弱性、不确定性与风险》，2014，第2554–2563页。 doi:10.1061/9780784413609.257。[38] M. D. McKay, W. J. Conover, R. J. Beckman，在计算机代码输出分析中选择输入变量的三种方法比较，《Technometrics》21 (1979) 239–245。 doi:10.1080/00401706.1979.10489755。[39] W. Conover，关于选择输入变量的更优方法，未发表的洛斯阿拉莫斯国家实验室手稿，作为J.C. Helton和F.J. Davis所著《拉丁超立方抽样与复杂系统分析中的不确定性传播》的附录A转载，桑迪亚国家实验室报告SAND2001-0417，2002年11月印刷（1975）。URL https://prod-ng.sandia.gov/techlib-noauth/access-control.cgi/2001/010417.pdf
[40] J. Hampton, A. Doostan，基于压缩采样的多项式混沌展开：收敛性分析与采样策略，《计算物理学杂志》280 (2015) 363–386。 doi:10.1016/j.jcp.2014.09.019。[41] P. Diaz, A. Doostan, J. Hampton，通过压缩感知和D最优设计实现稀疏多项式混沌展开，《计算力学与工程方法》336 (2018) 640–666。 doi:10.1016/j.cma.2018.03.020。[42] J. F. Koksma，模1均匀分布理论中的一个一般定理，《Mathematica B》11 (1942/1943) 7–11。[43] M. Johnson, L. Moore, D. Ylvisaker，极小极大与极大极小距离设计，《统计规划与推断杂志》2 (26) (1990) 131–148。 doi:10.1016/0378-3758(90)90122-B。[44] L. Pronzato，极小极大与极大极小填充空间设计：构造的若干性质与方法，《法国统计学会杂志》158 (1) (2017) 7–36。[45] J. Eliáš, M. Vořechovský, V. Sadílek，用于蒙特卡罗积分的极小极大距离准则的周期版本，《工程软件进展》149 (2020) 102900。 doi:10.1016/j.advengsoft.2020.102900。[46] M. Rosenblatt，关于多变量变换的评注，《数学统计年鉴》23 (3) (1952) 470–472。 doi:10.1214/aoms/1177729394。[47] A. Nataf，边缘分布给定的概率分布的确定，《法国科学院纪要》225 (1962) 42–43。[48] F. Wang, H. Li，给定边缘分布与相关性的系统可靠性：我们是否正确理解了相关性的影响？《可靠性工程与系统安全》173 (2018) 94–104。 doi:10.1016/j.ress.2017.12.018。[49] J. M. Davis, P. Hagelstein，某些经典正交多项式的吉布斯现象，《数学分析与应用杂志》505 (1) (2022) 125574。[50] M. Vořechovský，通过检测失效面，利用自适应序贯采样分析离散状态性能函数的可靠性，《计算力学与工程方法》401 (2022) 115606。 doi:10.1016/j.cma.2022.115606。

[51] P. Frantík，FyDik——一种基于物理离散化的耗散性非线性动力系统交互式仿真软件，http://fydik.kitnarf.cz/ （2000–2022）。[52] P. Frantík，非对称应力状态下 von Mises 桁架稳定性丧失的仿真，《工程力学》14（3）（2007）155–161。[53] M. Voˇrechovský，J. Eliáš，对 maximin 和 ϕ_p（phi）准则的修改，以实现采样点的统计均匀分布，《Technometrics》62（3）（2020）371–386。 doi:10.1080/00401706.2019.1639550。[54] M. Voˇrechovský，J. Mašek，J. Eliáš，超立方体中的基于距离的最优采样：与 N体系统的类比，《Advances in Engineering Software》137（2019）102709。 doi:10.1016/j.advengsoft.2019.102709。[55] M. Voˇrechovský，J. Mašek，超立方体中的基于距离的最优采样：高维和低饱和度设计的能量势，《Advances in Engineering Software》149（2020）102880。 doi:10.1016/j.advengsoft.2020.102880。