利用高斯过程回归的非线性固体力学不确定性量化

Ludovica Cicci[1,2], Stefania Fresca[1], Mengwu Guo[3], Andrea Manzoni[1], 和 Paolo Zunino[1]

[1]MOX-数学系，米兰理工大学，意大利[*2]生物医学工程与成像科学学院，伦敦国王学院，英国[3]应用数学系，特温特大学，荷兰[†]

arXiv:2302.08216v1 [math.NA] 16 Feb 2023

摘要

在处理涉及求解非线性微分问题的输入输出映射时，不确定性量化（UQ）任务（如敏感性分析和参数估计）会带来巨大的计算复杂度，这是因为需要反复调用昂贵的数值求解器。基于投影的降阶模型（ROM），例如基于 Galerkin 降阶基（RB）的方法，在过去几十年中得到了广泛发展，以克服高保真全阶模型（FOM）的计算复杂度，并在处理与参数化微分问题相关的 UQ 任务时实现显著加速。然而，构建一个能够被高效调用的基于投影的 ROM，通常需要对原始代码进行大量修改；对于非线性问题而言，这项任务并不简单，而在使用专有软件时甚至完全无法实现。近年来，人们开发了非侵入式降阶模型，以解决这一问题；这类模型将 FOM 作为黑箱使用。在本文中，我们研究了利用本征正交分解从一组全阶模型快照构建降阶基，并利用高斯过程回归（GPR）逼近降阶基投影系数的 ROM。我们在一组三维时变固体力学算例上探讨了两种不同的方法，即全局高斯过程回归和基于张量分解的高斯过程回归。最后，我们利用非侵入式降阶模型开展全局敏感性分析（同时采用筛选方法和基于方差的方法）以及参数估计（通过马尔可夫链蒙特卡罗方法），结果表明，与高保真全阶模型相比，该方法在计算速度上实现了显著提升，并具有很高的准确度。

关键词： 不确定性量化；降阶建模；高斯过程回归；非线性固体力学；敏感性分析；参数估计

1 引言

应用科学和工程问题，例如结构力学中的问题，通常可用（随时间变化的非线性）偏微分方程（PDE）来描述。这些方程可能带有参数化设置，即包含多个参数，以考虑不同的材料属性、源项、数据或几何特征等。偏微分方程解的离散高保真近似可通过全阶模型（FOM）计算得到，但这类模型通常计算开销很大——在 CPU 时间和内存需求方面均是如此——因为需要采用精细的计算网格和较小的时间步长来确保解的准确度。尽管如今拥有强大的计算能力，在多查询场景中依赖全阶模型仍然是难以承受的，例如在执行不确定性量化（UQ）任务时。

在处理受输入参数（可能有很多个）不确定性影响的微分模型时，出于多种目的，以下做法可能很有用：(i) 检测并排序那些需要测量、以降低输出方差的输入；(ii) 检测在后续估计过程中更有可能被准确估计的参数；(iii) 识别影响较小的输入，以便将其固定在取值范围内的标称值。为完成这些任务，通常会采用全局敏感性分析（SA）方法，例如筛选方法 [Mor91] 和基于方差的方法 [Sob90], ，应用范围十分广泛

[*]{ludovica.cicci,stefania.fresca,andrea1.manzoni,paolo.zunino}@polimi.it
[†]m.guo@utwente.nl

。然而，在高维参数空间中计算敏感性指数需要大量输入-输出评估（尤其是在通过蒙特卡罗积分进行敏感性分析时），因此，如果依赖高保真全阶模型，整体计算成本可能高得令人难以承受。可以构建高效的代理模型 [LGMS17], ，例如，利用基于合适回归预测器的解析公式直接计算敏感性指数 [Sud08, CLLZ20], ，或降低每次正向仿真的成本，最终构建多保真框架 [QPO+18]。

现实应用中涉及的另一个重要问题，是如何从对感兴趣量（QoIs）的有限且含噪观测值中恢复有关输入参数的信息；这些感兴趣量是利用问题解计算得到的输出。在贝叶斯框架下处理参数估计问题时，该逆向不确定性量化问题的解通过未知输入在给定观测值条件下的后验分布来表示。然而，这一分布无法通过解析方式获得，因此需要依赖马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）等采样技术对其进行刻画，并推导出适当的统计量。尽管如此，这些方法需要反复（通常达数百万次）评估输入—输出映射，因此依赖计算成本高昂的高保真全阶模型将变得不可行。为降低参数估计问题的求解成本，可以采用不同的方法 [FMWvBW10], ，例如减少所需的正向仿真次数、降低输入空间的维度，或依赖高效的代理模型来求解正问题 [LM14, LMQR14, CMW15, YMK21]。

为应对 SA 和逆 UQ 场景，我们采用半侵入式方法，依靠降阶模型（ROM）高效计算问题参数的敏感性估计和后验密度，同时保持良好的准确度。具有更小维度（即更少自由度（DOFs））的 ROM 在过去几十年中得到了广泛发展，以克服高保真全阶模型（FOM）的计算复杂度。许多此类降阶方法基于这样的假设：高保真解流形，即输入参数变化时所有 FOM 解的集合，可以由一个低维线性空间进行良好近似，并采用本征正交分解（POD）构建这样的降阶基（RB），以捕捉原始系统中最主要的特征。因此，高维解可以重构为这些（希望数量较少的）模态的线性组合，同时准确度损失较小。具体而言，在时间域和参数域中的多个点处评估高保真解、构建正交分解基以及组装降阶模型数组，只需执行一次，即可在线下完成。随后，对于未见过的时间—参数实例，可以在线快速计算降阶基系数，从而重构高维解。这些 ROM 成功的关键在于两个阶段的完全解耦，即在线阶段独立于高保真维度。根据 ROM 近似的生成方式和降阶数组的构建方式，ROM 还可分为侵入式和非侵入式。

侵入式投影降阶模型（例如参见 [BGW15] 及其中的参考文献），如降阶基方法 [QMN16, HRS16], ，是通过将高保真模型算子投影到由一组依赖于问题的基函数张成的线性子空间上构建的。这些方法已成功应用于广泛的问题 [DHO12, AZF12, RR16, GTS17, BMQ17], ，因为它们能够保留高保真全阶模型的底层结构，并近似求解全阶模型的全部场变量。不过，这些方法需要大量修改代码；使用专有软件时，这些修改可能并非易事，甚至无法实现。此外，对于非线性问题或具有非仿射参数依赖关系的问题，组装降阶模型算子还需要进一步进行超降阶，例如采用经验插值法（EIM） [BMNP04] 及其变体 [CS10, TDR13, LMQR14, NMA15]。为克服这一困难，近期提出了基于深度学习的策略 [CFM22],，在近似非线性降阶模型算子方面，即使面对复杂的时变非线性应用，也展现出显著的在线阶段加速比[CFMQ22] 。不过，每个时间步仍须求解降阶问题并计算解向量，因此，当只需评估标量或低维感兴趣量，或只需获得指定时间点的解时，降阶模型的效率仍会受到影响。

为克服这些问题，可以采用其他数据驱动方法来近似降阶基系数，而无需借助（Galerkin）投影。在这类方法中，先将 FOM 解投影到降阶基空间，再利用代理模型近似组合系数，例如采用高斯过程回归（GPR） [GH18, GH19, KGH20, ZGH19], 、径向基函数（RBF）近似 [ADVN13]或人工神经网络（ANN） [HU18, GLH+21, SDM21]。因此，高保真求解器仅在离线阶段作为“黑箱”使用，以生成降阶基构建和代理模型训练所需的数据。已有研究提出了使用径向基函数插值降阶模型系数的非侵入式基于POD的方法

系数的方法 [ADVN13, WHM13, XFPN17] ，并将其应用于非线性参数化时变偏微分方程。在 [HU18] 中，研究人员采用人工神经网络构建回归模型，以计算基于POD的降阶模型的系数，重点研究稳态偏微分方程；随后，该方法进一步扩展到时变非线性问题，即非定常流 [WHR19]；另见 [SMPW19, YYG19]，其中采用机器学习策略近似POD系数。另一种方法是在 [GH18]中开发用于稳态非线性结构分析的POD-GPR降阶模型，并在 [GH19] 中将其扩展到时变问题；这些模型已成功用于工程应用，例如电磁散射问题 [ZLL21]和船舶工程问题 [ODR20]。文献 [BHKE20] 对采用径向基函数、高斯过程回归和人工神经网络回归的非侵入式降阶模型进行了比较，并将其应用于时变变形计算域中的复杂流动问题。另见 [GMA+22, CGMH23] ，其中介绍了人工神经网络的另一种用途：在依赖不同保真度模型的多保真度方法中进行回归。后者可能涉及数据驱动的基于投影的降阶模型 [PW16, GMW22] ，或近期开发的基于深度学习的降阶模型 [FDM21, FM22, FMZ23, BGB22]。

在本研究中，我们采用非侵入式降阶模型，高效求解固体力学中出现的非线性时变参数化问题，以加速敏感性分析和贝叶斯逆问题的求解。利用正交分解构造低维线性子空间后——这既提供了一种将物理规律嵌入降阶模型并使其具备可解释性的方法——我们通过高斯过程回归模型近似 RB 展开系数，并考察（比较）两种不同的方法 [GH18]和 [GH19]，，二者均能确保非侵入性和在线效率。与深度神经网络等其他数据驱动方法相比，POD-GPR 降阶模型具有两方面优势：一方面，训练所需的数据量相对较少；另一方面，它们能够重构整个解场，因此无需重新训练模型即可评估任意关注量，而代理模型则会直接近似输入输出映射。此外，采用高斯过程回归还可以考虑仿真器不确定性，这构成了我们问题中的另一个不确定性来源。

与现有文献相比——例如，参见 [GH18、GH19] ——本文研究了定义在三维域上的时变非线性问题的近似，这类问题还具有数量相当多的输入参数。此外，本文展示了完整的不确定性量化流程，其中包括敏感性分析和参数估计；该流程利用结合 POD-GPR 框架所实现的非侵入式降阶模型近似，并将其准确度与基于有限元方法的高保真全阶模型所得结果进行比较。

本文结构如下。第 2 节回顾时变参数化问题降阶基方法的一些基本知识；第 3 节介绍两种基于高斯过程回归的不同方法，用于高效近似降阶基系数。随后，第 4 节给出非线性固体力学中两个测试案例的数值结果，并从效率和准确度方面比较 POD-GPR 降阶模型。第 5 节利用 POD-GPR 降阶模型求解敏感性分析和逆向不确定性量化问题。最后，第 6 节总结全文。

2 RB 参数化 PDE 的方法：基本事实与记号 n

我们的目标是高效求解一类非线性时变 PDE 问题，这类问题取决于一组输入参数 $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}$，其中 $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^p$ 是表示参数空间的紧集， p 是输入的数量。具体而言，我们关注由弹性动力学方程支配的问题

$$\rho \partial_t^2 \boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}, t; \boldsymbol{\mu}) - \nabla_{\boldsymbol{X}} \cdot \boldsymbol{P}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X}, t; \boldsymbol{\mu}); \boldsymbol{\mu}) = \mathbf{0} \text{ in } \Omega_0 \times \mathcal{T}, \tag{1}$$

并辅以适当的初始条件和边界条件。我们用 $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{X},\ t;\ \boldsymbol{\mu})$ 表示未知状态解，即位移场，它取决于参考构形中的空间坐标 $\boldsymbol{X}$、时间变量 t、参数向量 $\boldsymbol{\mu}$，以及第一类 Piola-Kirchhoff 应力张量 $\boldsymbol{P}$。一旦通过例如伽辽金有限元法对该问题进行空间离散化，就可以得到一个维度为 N_h 的动力系统，其形式为

$$\begin{cases} \rho_0 \mathbf{M} \ddot{\mathbf{u}}_h(t; \boldsymbol{\mu}) + \mathbf{N}(\mathbf{u}_h(t; \boldsymbol{\mu}), t; \boldsymbol{\mu}) = \mathbf{F}^{ext}(t; \boldsymbol{\mu}) \qquad \text{in } \mathcal{T}, \\ \mathbf{u}_h(0; \boldsymbol{\mu}) = \mathbf{u}_{h,0}(\boldsymbol{\mu}), \quad \dot{\mathbf{u}}_h(0; \boldsymbol{\mu}) = \dot{\mathbf{u}}_{h,0}(\boldsymbol{\mu}), \end{cases} \tag{2}$$

其中 $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{N_h \times N_h}$ 表示质量矩阵，$\mathbf{N} \in \mathbb{R}^{N_h}$ 表示内力的（非线性）向量，$\mathbf{F}^{ext} \in \mathbb{R}^{N_h}$ 表示外力向量，而 $\mathbf{u}_h(t) \in \mathbb{R}^{N_h}$ 汇集了表示

时间 t处的（半离散）高保真解的自由度。请注意，为了保证数值稳定性，此处采用全隐式格式，因为它不受时间步长的限制；若采用其他格式，则由于本研究所考虑的应变能密度函数包含高度非线性项，时间步长会受到限制。这里， N_h 表示自由度的数量，具体取决于所用的计算网格和空间离散方法。采用有限差分进行时间离散，因此近似

$$\dot{\mathbf{u}}_h(t^n,\boldsymbol{\mu}) \approx \frac{\mathbf{u}_h(t^n,\boldsymbol{\mu}) - \mathbf{u}_h(t^{n-1},\boldsymbol{\mu})}{\Delta t}, \qquad \ddot{\mathbf{u}}_h(t^n,\boldsymbol{\mu}) \approx \frac{\mathbf{u}_h(t^n,\boldsymbol{\mu}) - 2\mathbf{u}_h(t^{n-1},\boldsymbol{\mu}) + \mathbf{u}_h(t^{n-2},\boldsymbol{\mu})}{\Delta t^2},$$

其中， $\{t^0 < t^1 < \cdots < t^{N_t}\}$ 是时间步长为 Δt的 $\mathcal{T}$均匀划分，我们得到一系列完全离散的问题，其代数形式如下：给定 $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}$，对于 t^n, $n = 1$，……， N_t，求离散的高保真位移$\mathbf{u}_h(t^n;\boldsymbol{\mu}) \in \mathbb{R}^{N_h}$ 使得

$$\frac{\rho}{\Delta t^2}\mathbf{M}\mathbf{u}_h(t^n,\boldsymbol{\mu}) + \mathbf{N}(\mathbf{u}_h(t^n,\boldsymbol{\mu}),t^n;\boldsymbol{\mu}) - \frac{2\rho}{\Delta t^2}\mathbf{M}\mathbf{u}_h(t^{n-1},\boldsymbol{\mu}) + \frac{\rho}{\Delta t^2}\mathbf{M}\mathbf{u}_h(t^{n-2},\boldsymbol{\mu}) - \mathbf{F}^{ext}(t^n,\boldsymbol{\mu}) = \mathbf{0}, \quad (3)$$

其中，$\mathbf{u}_h(t^{-1},\ \boldsymbol{\mu})$和$\mathbf{u}_h(t^0,\ \boldsymbol{\mu})$由初始条件给定。非线性系统（3）的解最终可通过迭代算法（如牛顿-拉夫森方法）计算得到。然而，为了在实际应用中达到足够的准确度，全阶模型维数 N_h 或时间步数 N_t以及牛顿迭代总次数都可能变得极大，从而导致巨大的计算成本。

因此，我们采用降阶基方法 [QMN16、HRS16、HPR22] ，以寻求$\mathbf{u}_h(t;\boldsymbol{\mu}) \in \mathbb{R}^{N_h}$ 的低维近似，将其表示为 $N \ll N_h$ 个与参数无关的基函数的线性组合；这些基函数通过对一组采样的全阶模型解执行本征正交分解（POD）构造而成。记$\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N_h \times N}$ 为按列收集降阶基函数自由度的矩阵，则可通过将全阶模型解投影到Col(**V**)上，计算得到降阶解$\mathbf{u}_h^{RB}(t;\boldsymbol{\mu}) \in \mathbb{R}^{N_h}$ ，即

$$\mathbf{u}_h^{RB}(t;\boldsymbol{\mu}) = \mathbf{V}\mathbf{V}^T\mathbf{u}_h(t;\boldsymbol{\mu}),$$

因此，我们只需恢复 $(t,\ \boldsymbol{\mu})$ 与降阶系数之间的底层映射，即

$$\mathbf{q}\colon (t,\boldsymbol{\mu}) \mapsto \mathbf{V}^T\mathbf{u}_h(t;\boldsymbol{\mu}),$$

对于 $(t;\boldsymbol{\mu}) \in \mathcal{T}\times\mathcal{P}$。请注意，在这种情况下，有 $\mathbf{u}_h^{RB}(t;\ \boldsymbol{\mu}) = \arg\min_{\mathbf{x}_h^* \in \mathrm{Col}(\mathbf{V})} \|\mathbf{u}_h(t;\ \boldsymbol{\mu}) - \mathbf{x}_h^*\|$。然而，当采用Galerkin投影计算RB系数时，由于问题的非线性，组装降阶系统仍取决于高保真维度，因此需要进一步进行超降阶，以确保计算效率，例如参见 [BMNP04、CS10、NMA15、TR13]。因此，降阶基方法采用侵入式策略来生成降阶解，而超降阶技术可能会影响降阶模型层面非线性求解器的收敛性质。基于[GH18、GH19], ，我们采用非线性回归构建高效的非侵入式降阶模型，并针对输入向量的每个新取值，获取投影系数的概率分布，以便开展不确定性量化研究。

3 基于高斯过程回归的降阶代理建模

为获得投影系数 $\mathbf{q}(t;\boldsymbol{\mu})$，对于 $(t,\boldsymbol{\mu}) \in \mathcal{T}\times\mathcal{P}$，并由此恢复降阶基解 $\mathbf{u}_h^{RB}(t;\ \boldsymbol{\mu}) \approx \mathbf{u}_h(t;\boldsymbol{\mu})$，我们采用两种不同的基于回归的方法，分别称为全局方法（见第 3.2 节）和基于张量分解的方法，后者由 [GH19] 提出，详见第 3.3 节。需要指出的是，由于降阶基系数彼此不相关，我们采用相互独立的单输出高斯过程。

3.1 高斯过程（GP）回归

给定数据集 $\mathcal{D} = (\mathbf{X},\mathbf{y}) = \left\{(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)}) \in \mathcal{X}\times\mathcal{Y} \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \mid i = 1,\ldots,N_{data}\right\}$，其中

$$\mathbf{X} = \left[\mathbf{x}^{(1)}|\ldots|\mathbf{x}^{(N_{data})}\right] \quad \text{and} \quad \mathbf{y} = [y^{(1)},\ldots,y^{(N_{data})}]^T$$

分别为观测到的输入矩阵和相应的输出向量，人们希望建立一个模型f： $\mathcal{X} \to \mathcal{Y}$ ，以推断 d维自变量$\mathbf{x}$ 与标量因变量 y之间的关系，从而确定给定输入时目标输出的条件分布

。由于可能存在多个同样拟合数据的回归函数 f，因此使用高斯过程（GP） [WR06] 为这些函数分别赋予概率。因此，给定均值 $m(\mathbf{x})$和协方差函数（或核函数） $\kappa(\mathbf{x},\mathbf{x}')$，假设 f 的先验是一个高斯过程，并写作

$$f(\mathbf{x}) \sim \mathrm{GP}(m(\mathbf{x}), \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}')).$$

备注。 通常，均值选为常数，例如取为训练集的均值（或取零），而协方差有许多不同的选择 κ: $\mathcal{X}\times\mathcal{X} \to \mathbb{R}$，例如径向基函数（*RBF*）核函数

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma_f^2 \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}-\mathbf{x}'\|^2}{2\ell^2}\right) = \sigma_f^2 \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{d}\frac{(x_j - x_j')^2}{\ell^2}\right), \tag{4}$$

其超参数为信号方差 σ_f^2 和长度尺度 ℓ。或者，自动相关性确定（*ARD*）*RBF*核函数假设每个维度彼此独立，从而允许使用不同的长度尺度 ℓ_j，分别对应于 $j = 1$、.....、d。还可以通过深度神经网络架构 *[LBN+17、Guo21]*定义非平稳协方差函数。

高斯过程回归的目标是将训练数据 $\mathcal{D}$ 所提供的知识纳入先验，以获得后验（预测）分布。尽管本文依赖合成数据，但高斯过程也可以基于实验输出进行训练，因此应考虑测量误差。因此，为尽可能全面起见，我们假设训练输出标签受到加性独立同分布高斯噪声 $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma_y^2)$的干扰，即 $y^{(i)} = f(\mathbf{x}^{(i)}) + \epsilon$，其中$i = 1$, ..., N_{data}。给定一组新的测试点$\mathbf{x}^* \notin \mathcal{D}$，根据条件高斯定理（例如参见 [Mur12]），预测的高斯过程实现的条件分布为

$$f(\mathbf{x}^*) \mid \mathbf{X}, \mathbf{y}, \mathbf{x}^* \sim \mathrm{GP}(\widehat{m}(\mathbf{x}^*), \widehat{\kappa}(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{*\prime})),$$

其中

$$\begin{aligned}\widehat{m}(\mathbf{x}^*) &= m(\mathbf{x}^*) + \kappa(\mathbf{x}^*, \mathbf{X})(\kappa(\mathbf{X}, \mathbf{X}) + \sigma_y^2\mathbf{I})^{-1}(\mathbf{y} - m(\mathbf{X})),\\ \widehat{\kappa}(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{*\prime}) &= \kappa(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^{*\prime}) - \kappa(\mathbf{x}^*, \mathbf{X})(\kappa(\mathbf{X}, \mathbf{X}) + \sigma_y^2\mathbf{I})^{-1}\kappa(\mathbf{X}, \mathbf{x}^*).\end{aligned}$$

高斯过程回归模型的超参数，例如径向基函数的 $\boldsymbol{\theta} = (\sigma_y, \sigma_f, \ell)$，会显著影响预测性能，因此应进行优化，例如最大化对数似然

$$\log \pi(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}) = -\frac{1}{2}\left(\mathbf{y}^T(\kappa(\mathbf{X}, \mathbf{X}) + \sigma_y^2\mathbf{I})^{-1}\mathbf{y} + \log\det(\kappa(\mathbf{X}, \mathbf{X}) + \sigma_y^2\mathbf{I}) + N_{data}\log 2\pi\right). \tag{5}$$

在训练集 $\mathcal{D}$ 上优化超参数后，高斯过程回归模型可用于在未见过的测试集上执行推断，使用由后验计算得到的回归主题均值函数，记作 $\widehat{\ }$，下文将其记为 f（这里对符号作略微滥用）。

备注。 处理幅值各异的输入的一种常见做法，是对训练集和测试集进行特征缩放。广泛使用的数据变换 $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^m$ 和 $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 包括：

1. 最小-最大归一化 $\boldsymbol{\xi}^{\mathbf{v}}_{min\text{-}max}$和 $\boldsymbol{\xi}^{\mathbf{M}}_{min\text{-}max}$，使得对于 $i = 1$, ..., m,

$$(\boldsymbol{\xi}^{\mathbf{v}}_{min\text{-}max})_i \colon \mathbf{v}_i \mapsto \frac{\mathbf{v}_i - \min\mathbf{v}}{\max\mathbf{v} - \min\mathbf{v}}, \quad (\boldsymbol{\xi}^{\mathbf{M}}_{min\text{-}max})_i \colon \mathbf{M}_{i:} \mapsto \frac{\mathbf{M}_{i:} - \min_k \mathbf{M}_{ik}}{\max_k \mathbf{M}_{ik} - \min_k \mathbf{M}_{ik}}; \tag{6}$$

2. 标准化 $\boldsymbol{\xi}^{\mathbf{M}}_{stand}$或 $\boldsymbol{\xi}^{\mathbf{v}}_{stand}$，使得对于 $i = 1, \ldots, m$,

$$(\boldsymbol{\xi}^{\mathbf{v}}_{stand})_i \colon \mathbf{v}_i \mapsto \frac{\mathbf{v}_i - mean\ \mathbf{v}}{std\ \mathbf{v}}, \quad (\boldsymbol{\xi}^{\mathbf{M}}_{stand})_i \colon \mathbf{M}_{i:} \mapsto \frac{\mathbf{M}_{i:} - mean_k\ \mathbf{M}_{ik}}{std_k\ \mathbf{M}_{ik}}. \tag{7}$$

3.2 全局方法

首先，我们尝试直接学习时间/参数值与投影到 RB 空间上的映射，即

$$(t, \boldsymbol{\mu}) \mapsto \mathbf{q}(t; \boldsymbol{\mu}) = \mathbf{V}^T \mathbf{u}_h(t; \boldsymbol{\mu}),$$

通过回归模型。具体而言，我们希望通过一个基于由输入-输出对组成的 $N_t N_s$ 维数据集训练的高斯过程，推断每个 RB系数 $q_\ell(t; \boldsymbol{\mu})$，其中 $\ell = 1, \ldots, N$，数据集记为（$\mathbf{X}$,$\mathbf{y}_\ell$），其中

$$\mathbf{X} = \left[\begin{array}{ccc|c|ccc} t^1 & \ldots & t^{N_t} & \ldots & t^1 & \ldots & t^{N_t} \\ \boldsymbol{\mu}_1 & \ldots & \boldsymbol{\mu}_1 & \ldots & \boldsymbol{\mu}_{N_s} & \ldots & \boldsymbol{\mu}_{N_s} \end{array}\right] \in \mathbb{R}^{(p+1)\times N_t N_s},$$

$$\mathbf{y}_\ell = [q_\ell(t^1; \boldsymbol{\mu}_1), \ldots, q_\ell(t^{N_t}; \boldsymbol{\mu}_1) \mid \ldots \mid q_\ell(t^1; \boldsymbol{\mu}_{N_s}), \ldots, q_\ell(t^{N_t}; \boldsymbol{\mu}_{N_s})]^T + \boldsymbol{\varepsilon} \in \mathbb{R}^{N_t N_s},$$

因此，对于 $\ell = 1, \ldots, N$，后验分布的均值可用于对每个新的输入 $\mathbf{x}^* = (t^*, \boldsymbol{\mu}^*) \in \mathcal{T} \times \mathcal{P}$进行预测。该方法已在 [GH18] 中用于非线性结构分析，但仅限于准静态问题。由于时间和参数被视为一个统一的输入变量，我们将其称为全局方法。根据第 3.1 节的符号，我们有 $N_{data} = N_t N_s$,$\mathbf{x}^{(i)} = (t^{n_i}, \boldsymbol{\mu}_{m_i})$ 和 $y^{(i)} = q_\ell(t^{n_i}, \boldsymbol{\mu}_{m_i}) + \varepsilon$，其中 $\ell = 1, \ldots, N$，且 $n_i \in \{1, \ldots, N_t\}$ 和 $m_i \in \{1, \ldots, N_s\}$。

在本研究中，我们将备注 3.1 中所述的变换，即 (6) 或 (7)，应用于 ($\mathbf{X}$,$\mathbf{X}^*$) 和 $\widehat{\ }(\mathbf{y}_\ell, f(\mathbf{X}^*))$，其中 $\ell = 1, \ldots, N$，且 $\mathbf{M} = \mathbf{X}$和 $\mathbf{v} = \mathbf{y}_\ell$ 分别对应，以处理不同量级的数值。请注意，最小值、最大值、均值和标准差均根据训练数组计算。

3.3 基于张量分解的回归方法

另一种方法是所谓的基于张量分解的回归方法，由 [GH19], 提出，下面简要介绍。设 $\mathbb{P} \in \mathbb{R}^{N_t \times N_s \times (p+1)}$ 满足

$$\mathbb{P}_{n,m,:} = \left[\begin{array}{c} t^n \\ \boldsymbol{\mu}_m \end{array}\right], \text{ for } n = 1, \ldots, N_t, \ m = 1, \ldots, N_s,$$

并令 $\mathbb{Q}_\ell \in \mathbb{R}^{N_t \times N_s}$ 为第 ℓ 个 RB系数对应的输出矩阵，即

$$\mathbb{Q}_\ell = \left[\begin{array}{ccc} q_\ell(t^1; \boldsymbol{\mu}_1) & \ldots & q_\ell(t^1; \boldsymbol{\mu}_{N_s}) \\ \vdots & & \vdots \\ q_\ell(t^{N_t}; \boldsymbol{\mu}_1) & \ldots & q_\ell(t^{N_t}; \boldsymbol{\mu}_{N_s}) \end{array}\right],$$

对于 $\ell = 1$, ..., N。 $\mathbb{Q}_\ell$的（截断）奇异值分解（SVD）可写为

$$\mathbb{Q}_\ell \approx \boldsymbol{\Psi}^\ell \boldsymbol{\Lambda}^\ell (\boldsymbol{\Phi}^\ell)^T = \sum_{k=1}^{N_{q_\ell}} \lambda_k^\ell \boldsymbol{\Psi}_k^\ell (\boldsymbol{\Phi}_k^\ell)^T,$$

其中，$\boldsymbol{\Psi}_k^\ell$ 和 $\boldsymbol{\Phi}_k^\ell$ 分别是第 k 个离散时间模态和参数模态，截断秩 N_{q_ℓ} 则根据所选的奇异值分解容差 $\varepsilon_{SVD} > 0$，按照希望涵盖的方差百分比确定。将 $\mathbb{P}$ 拆分为两个输入矩阵后，我们定义以下数组

$$\mathbf{X}_t = \left[\begin{array}{c} t^1 \\ \vdots \\ t^{N_t} \end{array}\right] \in \mathbb{R}^{N_t \times 1}, \quad \mathbf{X}_{\boldsymbol{\mu}} = \left[\begin{array}{c} (\boldsymbol{\mu}_1)^T \\ \vdots \\ (\boldsymbol{\mu}_{N_s})^T \end{array}\right] \in \mathbb{R}^{N_s \times p}$$

分别与时间点和模型参数相关的相应目标输出$\mathbf{y}_{\ell,t} := \boldsymbol{\Psi}^\ell \in \mathbb{R}^{N_t \times N_{q_\ell}}$ 和$\mathbf{y}_{\ell,\boldsymbol{\mu}} := \boldsymbol{\Phi}^\ell \in \mathbb{R}^{N_s \times N_{q_\ell}}$，可能受到噪声污染。

对于 $k = 1, \ldots, N_{q_\ell}$，我们的目标是根据 $\{\mathbf{X}_t, (\mathbf{y}_{\ell,t})_{1:N_t,k}\}$学习第 k个连续时间模态 $\widehat{\psi}_k^\ell(t)$，并根据 $\{\mathbf{X}_{\boldsymbol{\mu}}, (\mathbf{y}_{\ell,\boldsymbol{\mu}})_{1:N_s,k}\}$学习第 k个连续参数模态 $\widehat{\phi}_k^\ell(\boldsymbol{\mu})$，从而对于新的取值$\mathbf{x}^* = (t^*; \boldsymbol{\mu}^*) \in \mathcal{T} \times \mathcal{P}$，我们可以计算

$$q_\ell(\mathbf{x}^*) \approx \widehat{q}_\ell(\mathbf{x}^*) = \sum_{k=1}^{N_{q_\ell}} \lambda_k^\ell \widehat{\psi}_k^\ell(t^*) \widehat{\phi}_k^\ell(\boldsymbol{\mu}^*).$$

备注。对于截断奇异值分解的每个分量，即 $k = 1, \ldots, N_{q_\ell}$，分别针对时间变量和参数向量变量训练一个高斯过程，因此考虑 $2\sum_{\ell=1,\ldots,N} N_{q_\ell}$ 个高斯过程。尽管如此，与之前的全局方法相比，训练数据集的维度现在小得多（N_t 或 N_s，而不是 $N_t N_s$），从而减少了计算最优超参数所需的总体计算时间。

与之前一样，我们采用两种缩放策略，即最小-最大归一化和标准化。在这种情况下，变换 (6) 或 (7) 分别应用于时间数据集和参数数据集。具体而言，输入数据集 $(\mathbf{X}_t, \mathbf{X}_t^*)$ 和 $(\mathbf{X}_{\boldsymbol{\mu}}, \mathbf{X}_{\boldsymbol{\mu}}^*)$ 分别根据映射 $\boldsymbol{\xi}_\star^{\mathbf{X}_t}$和$\boldsymbol{\xi}_\star^{\mathbf{X}_\mu}$ 进行缩放，其中 $\star \in \{$最小-最大，标准$\}$。同时，对于 $\ell = 1, \ldots, N$和 $k = 1, \ldots, N_{q_\ell}$，通过应用 $\boldsymbol{\xi}_\star^{(\mathbf{y}_{\ell,t})_{1:N_t\,k}}$，将输出数据集缩放至 $((\mathbf{y}_{\ell,t})_{1:N_t,k}, \widehat{\psi}_k^\ell(\mathbf{X}_t^*))$；并应用 $\boldsymbol{\xi}_\star^{(\mathbf{y}_{\ell,\mu})_{1:N_s\,k}}$，将其缩放至 $((\mathbf{y}_{\ell,\boldsymbol{\mu}})_{1:N_s,k}, \widehat{\phi}_k^\ell(\mathbf{X}_{\boldsymbol{\mu}}^*))$。

4 数值结果

本节介绍两个基准问题的计算结果。这两个问题借鉴了用于验证心脏力学软件 [LGA+15] 的基准问题，分别为固定矩形梁的变形和截断椭球的主动收缩，二者均由弹性动力学方程 (1) 描述。具体而言，我们着重研究软组织力学 [HO03], ，这是计算力学中一个充满挑战的研究领域，其特点是材料各向异性显著、变形较大且应力-应变行为高度非线性。虽然这些测试案例针对这一领域，但对于具有类似特征的其他应用领域也可能具有参考价值。对于这两个测试案例，我们从训练时间、相较于高保真模型的计算加速比以及准确度等方面，评估全局方法和基于张量分解的方法的性能。具体来说，为了检验测试集上高斯过程回归对 RB系数 q_ℓ 的预测保真度，对于 $\ell = 1, \ldots, N$，我们采用均方误差 (MSE)

$$\mathrm{MSE}(q_\ell) = \frac{1}{N_s^{test} N_t^{test}} \sum_{m=1}^{N_s^{test}} \sum_{n=1}^{N_t^{test}} (q_\ell(t^n; \boldsymbol{\mu}_m) - \widehat{q}_\ell(t^n; \boldsymbol{\mu}_m))^2$$

以及相对平方误差（RSE）

$$\mathrm{RSE}(q_\ell) = \frac{\sum_{m=1}^{N_s^{test}} \sum_{n=1}^{N_t^{test}} (q_\ell(t^n; \boldsymbol{\mu}_m) - \widehat{q}_\ell(t^n; \boldsymbol{\mu}_m))^2}{\sum_{m=1}^{N_s^{test}} \sum_{n=1}^{N_t^{test}} (q_\ell(t^n; \boldsymbol{\mu}_m) - \bar{q}_\ell)^2}, \text{ with } \bar{q}_\ell = \frac{1}{N_s^{test} N_t^{test}} \sum_{m=1}^{N_s^{test}} \sum_{n=1}^{N_t^{test}} q_\ell(t^n; \boldsymbol{\mu}_m).$$

使用时间平均绝对误差和时间平均相对 L^2-误差来评估降阶模型相对于全阶模型的整体准确度，其定义如下

$$\mathrm{tAE}(\boldsymbol{\mu}) = \frac{1}{N_t^{test}} \sum_{n=1}^{N_t^{test}} \|\mathbf{u}_h(t^n; \boldsymbol{\mu}) - \mathbf{V}\widehat{\mathbf{q}}(t^n; \boldsymbol{\mu})\|_{L^2},$$

$$\mathrm{tRE}(\boldsymbol{\mu}) = \frac{1}{N_t^{test}} \sum_{n=1}^{N_t^{test}} \frac{\|\mathbf{u}_h(t^n; \boldsymbol{\mu}) - \mathbf{V}\widehat{\mathbf{q}}(t^n; \boldsymbol{\mu})\|_{L^2}}{\|\mathbf{u}_h(t^n; \boldsymbol{\mu})\|_{L^2}},$$

分别为，其在测试集上的均值，即 $\mathrm{mean}_{m=1,\ldots,N_s^{test}} \mathrm{tRE}(\boldsymbol{\mu}_m)$ 和 $\mathrm{mean}_{m=1,\ldots,N_s^{test}} \mathrm{tAE}(\boldsymbol{\mu}_m)$。

高斯过程回归模型使用 Python 库 GPy [GPy12], （一种高斯过程框架）实现。所有计算均在一台配备 2.60GHz 英特尔酷睿 i7-9750H 处理器和 16GB 内存的笔记本电脑上完成。

备注。 数值模拟以串行方式运行，高斯过程按顺序进行训练和测试，即在一个外层循环中从 $\ell = 1$ 到 $\ell = N$。不过，利用与不同降阶基系数相关的高斯过程回归模型之间的独立性并行进行训练和测试，可以获得更短的 *CPU* 时间。

4.1 非线性固体力学基准测试

对于基准测试案例的设置，我们将边界划分为三个区域，分别对应位移、压力和无应力条件。具体而言，我们在边界的特定部分 $\partial\Omega_0^D$ 上施加狄利克雷边界条件，并施加压力载荷

$$\boldsymbol{p}(t;\boldsymbol{\mu}) = \widetilde{p}\frac{t}{T}$$

于 ∂ Ω_0^P 上。此外，在所有其他表面上施加诺伊曼条件，即 $\partial\Omega_0^N = \partial\Omega_0\backslash(\partial\Omega_0^D \cup$ $\partial\Omega_0^P$, 并且规定齐次初始条件，时间为 $t = 0$ 秒

还必须补充适用于该材料的本构关系， h

can b其表示 方程 (1)。为例如将 Green-Lagrange 应变张量映射

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{u}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u})^T\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{I})$$

到第一类 Piola-Kirchhoff 应力张量 $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{u})$ 的非线性算子，其中 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{I} + \nabla_{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{u}$ 为变形梯度。本文考虑一种近不可压缩超弹性材料，其应变能函数如下

$$\mathcal{W}(\boldsymbol{F}) = \frac{C}{2}(e^{Q(\boldsymbol{E})-1}) + \frac{K}{2}(J-1)\ln(J), \tag{8}$$

使得 $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{u}) = \partial\mathcal{W}(\boldsymbol{F})/\partial\boldsymbol{F}$。第一项由 [GCM95], 中提出的本构定律给出，第二项则用于实现不可压缩性。这里， $C > 0$ 为缩放常数， $J = \det(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}))$ 表示运动过程中的体积变化，而 $K > 0$ 为用于惩罚较大体积变化的体积模量。具体而言，我们考虑 Q 的以下形式，

$$Q = b_x E_{xx}^2 + b_y E_{yy}^2 + b_z E_{zz}^2 + b_{xy}(E_{xy}^2 + E_{yx}^2) + b_{xz}(E_{xz}^2 + E_{zx}^2) + b_{yz}(E_{yz}^2 + E_{zy}^2),$$

其中， b_i（对于 $i \in \{x, y, z\}$）与不同方向上的材料刚度相关，而 E_{ij}（对于$i,\ j \in \{x, y, z\}$）是应变张量 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{u})$ 的分量。因此，我们得到如下初始—边界值问题：给定 $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}$，求参数化位移场 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{\mu})$：$\Omega_0 \times (0, T) \to \mathbb{R}^3$，使得

$$\begin{cases} \rho\partial_t^2\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X},t;\boldsymbol{\mu}) - \nabla_{\boldsymbol{X}}\cdot\boldsymbol{P}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X},t;\boldsymbol{\mu});\boldsymbol{\mu}) = \boldsymbol{0} & \text{in} \quad \Omega_0\times(0,T) \\ \boldsymbol{u}(\boldsymbol{X},t;\boldsymbol{\mu}) = \boldsymbol{0} & \text{on} \quad \partial\Omega_0^D\times(0,T) \\ \boldsymbol{P}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X},t;\boldsymbol{\mu});\boldsymbol{\mu})\boldsymbol{\nu} = -\boldsymbol{p}(t;\boldsymbol{\mu})J\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X},t;\boldsymbol{\mu});\boldsymbol{\mu})^{-T}\nu & \text{on} \quad \partial\Omega_0^P\times(0,T) \\ \boldsymbol{P}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X},t;\boldsymbol{\mu});\boldsymbol{\mu})\boldsymbol{\nu} = \boldsymbol{0} & \text{on} \quad \partial\Omega_0^N\times(0,T) \\ \boldsymbol{u}(\boldsymbol{X},t;\boldsymbol{\mu}) = \boldsymbol{0}, \partial_t\boldsymbol{u}(\boldsymbol{X},t;\boldsymbol{\mu}) = \boldsymbol{0} & \text{in} \quad \Omega_0\times\{0\}, \end{cases} \tag{9}$$

其中， $\boldsymbol{\nu}$ 表示外法向单位向量。

4.1.1 测试 1：梁的变形

第一个基准测试研究固定矩形梁在作用于物体底面的压力载荷下的变形。该问题定义在参考域 Ω $_0 = [0, 10^{-2}]$m $\times[0, 10^{-3}]$m$\times[0, 10^{-3}]$m 上，参考域与计算六面体网格一同示于图 1 中。相对于系统（9），我们定义 $\partial\Omega_0^D = \Omega_0 \cap \{x = 0\}$ 以及 $\partial\Omega_0^P = \Omega_0 \cap \{z = 0\}$。

我们将 Guccione 定律的参数作为输入参数，即 b_f， b_s， b_n， b_{fs}， b_{fn}， b_{sn}， K和 G，以及压力载荷的斜率 $\widetilde{p}$，使得 $\boldsymbol{\mu} = [b_f, b_s, b_n, b_{fs}, b_{fn}, b_{sn}, K, G, \widetilde{p}] \in \mathcal{P} = \bigcup_{i=1}^{9}[l_i, r_i] \subset \mathbb{R}^9$，参见表 1。

全阶模型采用包含 1025 个顶点的六面体网格构建，空间上使用 $\mathbb{Q}_1$-有限元，时间上使用 BDF1 格式，时间步长为 $\Delta t = 0.005$ s，终止时间为 $T = 0.25$ s，因此 $N_h = 3075$ 和 $N_t = 50$。在此设置下，对于给定的参数向量，计算全阶模型解平均需要 48 s 的 CPU 时间。

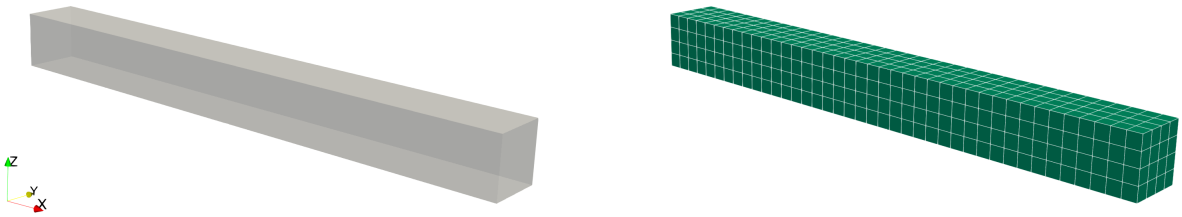

图 1：梁的变形。参考几何（左）和计算网格（右）。

	b_f	b_s	b_n	b_{fs}	b_{fn}	b_{sn}	K [千帕]	C [千帕]	$\widetilde{p}$ [千帕]
l_i	4	1	1	2	2	1	25	1	0.002
r_i	12	3	3	6	6	3	75	3	0.006

表 1：D　梁的变形。参数向量各分量的下限和上限　　r.

为分析和比较两种 POD-GPR 方法，即全局方法和基于张量分解的方法，我们通过拉丁超立方抽样（LHS）从 $\mathcal{P}$ 中抽取 $N_s = 100$ 个参数位置的全阶快照，以构建降阶基函数。随后将同一组解向量按 8:2 的比例划分为训练数据集和测试数据集，并用于构建高斯过程回归模型。需要指出的是，除非另有说明，训练和测试使用相同的时间点，因此 $N_t^{test} = N_t$。

备注。 为了使基于*POD*的降阶模型能够针对任意输入参数准确地近似全阶模型位移场，必须确保用于构建降阶基的快照能够充分捕捉解的动力学，因此，采样参数位置的选择会极大地影响降阶模型的准确度。依赖随机策略可能需要大量高保真快照，导致离线计算时间极其昂贵。为解决这些问题，人们采用了适当的自适应采样策略，例如 *[GH18,APLK19,GLH+21、CHJ+18]*。

4.1.2 测试 2：截断椭球主动收缩

对于第二个问题，我们将 [LGA+15] 中描述并在图 2 中展示的截断椭球 Ω_0 作为参考几何，并考虑一种由 *Guccione* 等人应变能函数 (8) 描述的近不可压缩材料。此外，我们通过添加一个假设仅沿纤维方向作用的参数化时变项，将主动张力纳入被动应力张量，即

$$\mathbf{P}(\mathbf{u}) = \frac{\partial \mathcal{W}(\mathbf{F})}{\partial \mathbf{F}} + T_a(t;\boldsymbol{\mu})(\mathbf{F}\mathbf{f} \otimes \mathbf{f}),$$

其中$\mathbf{f} \in \mathbb{R}^3$ 表示纤维方向上的参考单位向量，并假设

$$T_a(t;\boldsymbol{\mu}) = \widetilde{T}_a \frac{t}{T},$$

对于 $\widetilde{T}_a > 0$。基底平面 $\partial\Omega_0^D = \Omega_0 \cap \{z = \bar{z}\}$ 在所有方向上均固定，并在内边界 $\partial\Omega_0^P$施加外部压力。最后，在外表面 $\partial\Omega_0^N$施加诺伊曼条件。

除材料参数和压力载荷的斜率 $\widetilde{p}$ 外，我们还考虑主动张力的最大值 $\widetilde{\ } T_a$ ，以及心外膜和心内膜处的纤维取向角 $\boldsymbol{\alpha}_{epi}$ 和 $\boldsymbol{\alpha}_{endo}$。因此，$\boldsymbol{\mu} = [b_f, b_s, b_n, b_{fs}, b_{fn}, b_{sn}, K, G, \widetilde{p}, \widetilde{T}_a, \boldsymbol{\alpha}_{epi}, \boldsymbol{\alpha}_{endo}] \in \mathcal{P} \subset \mathbb{R}^{12}$，参数空间 $\mathcal{P}$ 列于表 2 中。

全阶模型基于一个包含 6455 个顶点的六面体网格构建，采用 $\mathbb{Q}_1$-FE，从而得到 $N_h = 19365$；时间离散采用 BDF1 格式，步长为 $\Delta t = 0.005$ s 和 $T = 0.25$ s，使得 $N_t = 50$。对于模型的构建

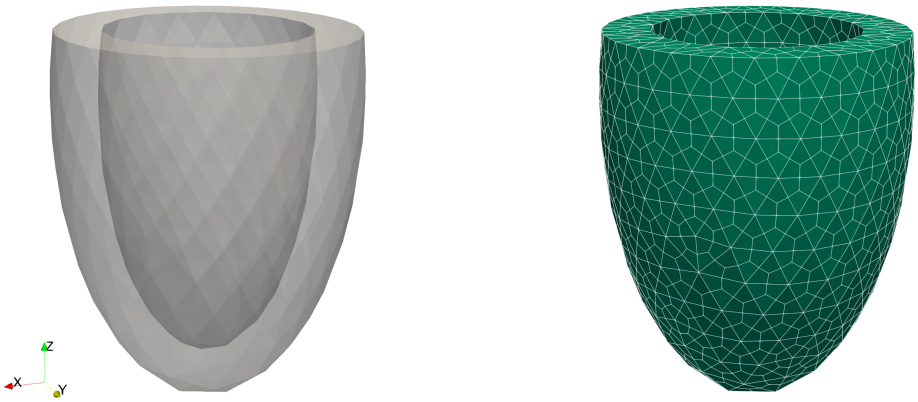

图2：截断椭球主动收缩。截断椭球的参考几何（左）和计算网格（右）。

	b_f	b_s	b_n	b_{fs}	b_{fn}	b_{sn}	K [千帕]	C [千帕]	$\widetilde{p}$ [千帕]	$\widetilde{T}_a$ [千帕]	$\boldsymbol{\alpha}_{epi}$ [°]	$\boldsymbol{\alpha}_{endo}$ [°]
l_i	6.6	1.65	1.65	3.3	3.3	1.65	40	1.5	14	49.5	-105.5	74.5
r_i	9.4	2.35	2.35	4.7	4.7	2.35	60	2.5	16	70.5	-74.5	105.5

表2：截断椭球主动收缩。参数范围。

与评估，我们使用拉丁超立方抽样在 $\mathcal{P}$ 中采样 100 个点，并计算相应的高保真位移，然后按 8:2 的比例将其划分为训练集和测试集。在这种情况下，计算单个 FOM 解平均需要 6 分 11 秒的 CPU 时间。

4.2 全局与张量分解 POD-GPR 方法的比较

4.2.1 测试 1：梁的变形

通过使用不同的截断容差 ε_{POD} 对全阶模型快照矩阵 $\mathbf{S}_d$ 进行正交分解，可以构造不同维度的降阶基 N，如表 3 所示。对于当前问题，由于奇异值迅速衰减，只需 $N = 5$ 个降阶基函数（对应的正交分解容差为 $5 \cdot 10^{-4}$），即可很好地近似高保真全阶模型的解。

ε_{POD}	10^{-3}	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{-4}	$5 \cdot 10^{-5}$	10^{-5}
N	4	5	8	12	22

表 3：梁的变形。不同正交分解容差下的降阶基子空间维度。

由于高斯过程回归模型高度依赖协方差函数的选择，我们使用不同的核函数（即多项式、径向基函数和自动相关性确定径向基函数）以及不同的缩放技术（即标准化和最小-最大归一化）来分析其预测性能。在此比较中，我们仅考虑离线收集的前 $N_s = 50$ 个训练样本，用于构建降阶基矩阵 $\mathbf{V}$。需要指出的是，对于基于张量分解的方法，在以容差 10^{-2} 计算截断奇异值分解后，将时间模态和参数模态作为高斯过程进行训练，从而得到 $3 \leq N_\ell \leq 6$。以下结果分为两部分：（i）首先讨论高斯过程回归对降阶基系数的预测；（ii）随后评估降阶模型相对于全阶模型的整体准确度。

GPR 对 RB系数的预测。图 3 展示了全局和基于张量分解的高斯过程回归模型采用不同协方差函数和缩放技术计算得到的均方误差。在这种

情况下，ARD-RBF 核比其他协方差函数更准确，而标准化与最小-最大归一化的效果几乎相当，前者的准确度略高。因此，从现在起，我们将只关注 ARD-RBF 核，并根据式（7）对数据集进行缩放。

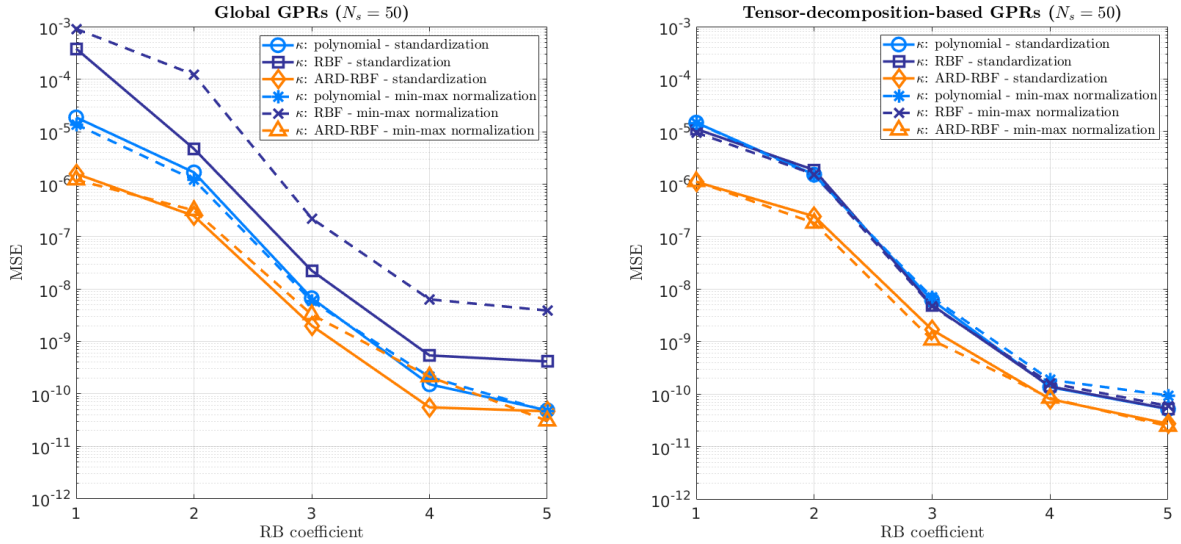

图3：梁的变形。对于 $N = 5$，使用不同核类型和缩放技术计算得到的全局（左）和基于张量分解的（右）POD-GPR 降阶模型的均方误差。

我们通过将训练集的大小从 $N_s = 10$ 增加到 $N_s = 80$，从准确度和效率两方面分析全局 POD-GPR 降阶模型和基于张量分解的 POD-GPR 降阶模型的性能。图4给出了在测试集上计算得到的相对平方误差，结果表明，随着训练集大小从 $N_s = 10$ 增加到 $N_s = 40$，两种方法的近似效果均得到显著改善。我们指出，就训练过程中的计算效率而言，基于张量分解的方法优于全局方法，因为前者对每个高斯过程均在规模小得多的数据集上进行训练（见注3.3）。

表4报告了在 $N_s = 50$时计算得到的训练时间和相对平方误差。对于全局高斯过程回归模型和基于张量分解的高斯过程回归模型，针对两个不同输入参数计算得到的真实投影系数、预测均值及其95%置信水平分别如图5和图6所示。我们观察到，在这两种情况下，POD-GPR 降阶模型近似与真实解之间的误差基本上都被95%置信水平所界定。

	全局高斯过程回归	基于张量分解的高斯过程回归
训练 CPU 时间	881 秒	6 s
相对平方误差(q_1)	0.0029	0.0020
相对平方误差(q_2)	0.0545	0.0535
RSE(q_3)	0.0732	0.0612
RSE(q_4)	0.1061	0.1532
RSE(q_5)	0.1206	0.0705

表4：梁的变形。针对 $N = 5$、$N_s = 50$ 和 $N_t = 50$，采用 ARD-RBF 核的全局回归方法和基于张量分解的回归方法的计算数据。

ROM 相对于 FOM 的精度。对于 $n = 1, \ldots, N_t$，在线重构降阶解 $\mathbf{V}\hat{\mathbf{q}}(t^n; \cdot)$，以验证回归模型相对于全阶模型的总体准确度。首先，我们计算高保真解 $\mathbf{u}_h$ 及其在 RB 空间上的投影$\mathbf{V}\mathbf{V}^T\mathbf{u}_h$之间的误差，并在整个测试集上取平均，得到 tAE $\approx 1.27 \cdot 10^{-5}$ 和 tRE $\approx 2.01 \cdot 10^{-3}$。这些指标代表

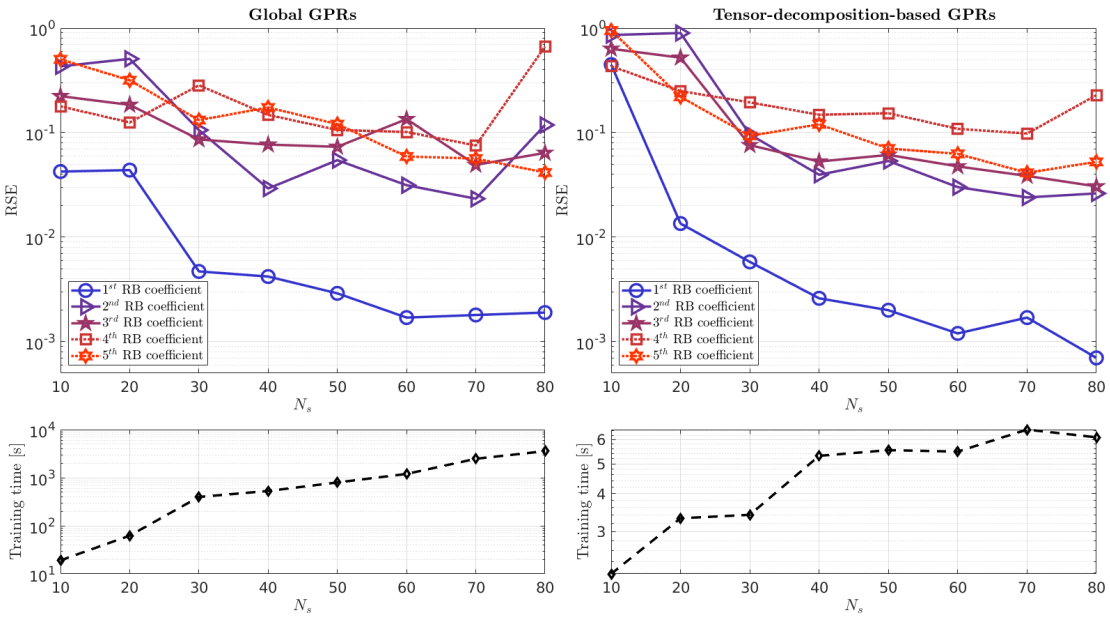

图4：梁的变形。全局（左上）和基于张量分解（右上）的 POD-GPR 降阶模型的相对平方误差随训练集大小的变化。还给出了相应的训练时间（下方）。这些结果是在考虑包含$N_s^{test} = 20$ 个参数的测试集的情况下获得的，这些参数在训练期间未出现过。

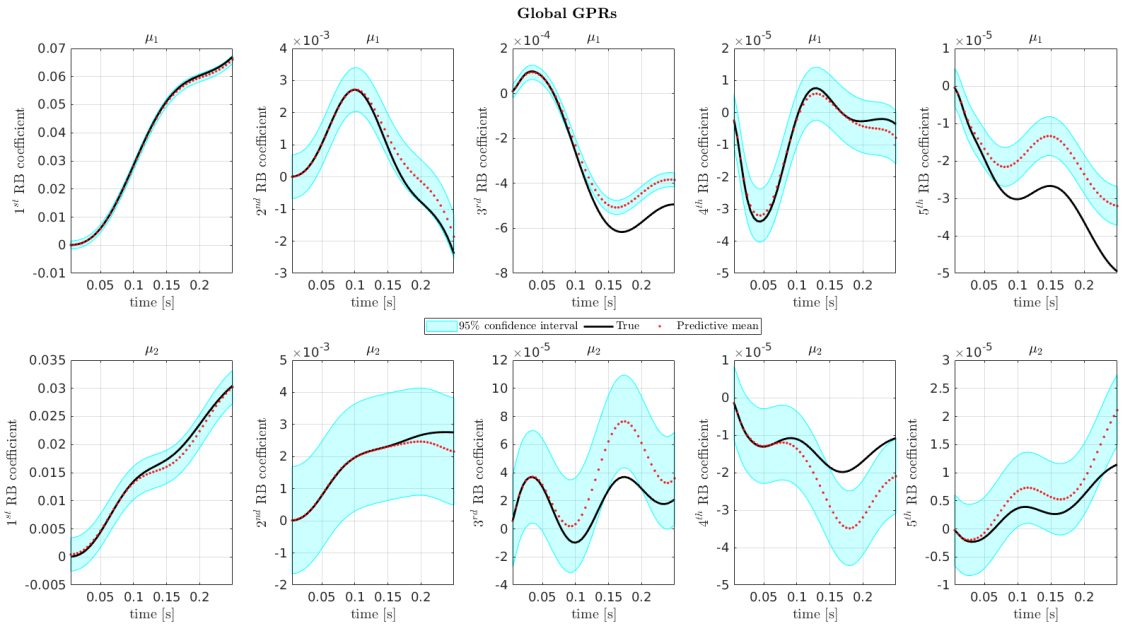

图5：梁的变形。从左到右为精确 RB 系数（黑色）及相应的全局 POD-GPR ROM 均值（红色虚线）随时间的演化情况；从上到下对应不同的测试参数。此外，还给出了 95% 置信水平。

Col(**V**)中的最佳（线性）近似误差，因此也得到了我们降阶模型的比较值。从表5报告的结果中，我们可以看到，高斯过程回归模型相对于高保真度解以及RB投影近似都具有良好的准确度。我们回顾一下，基于张量分解的方法在离线训练所需的CPU时间方面优于全局方法。对于这个测试案例，全阶模型平均需要48 s，才能根据给定的参数向量计算解的动力学，

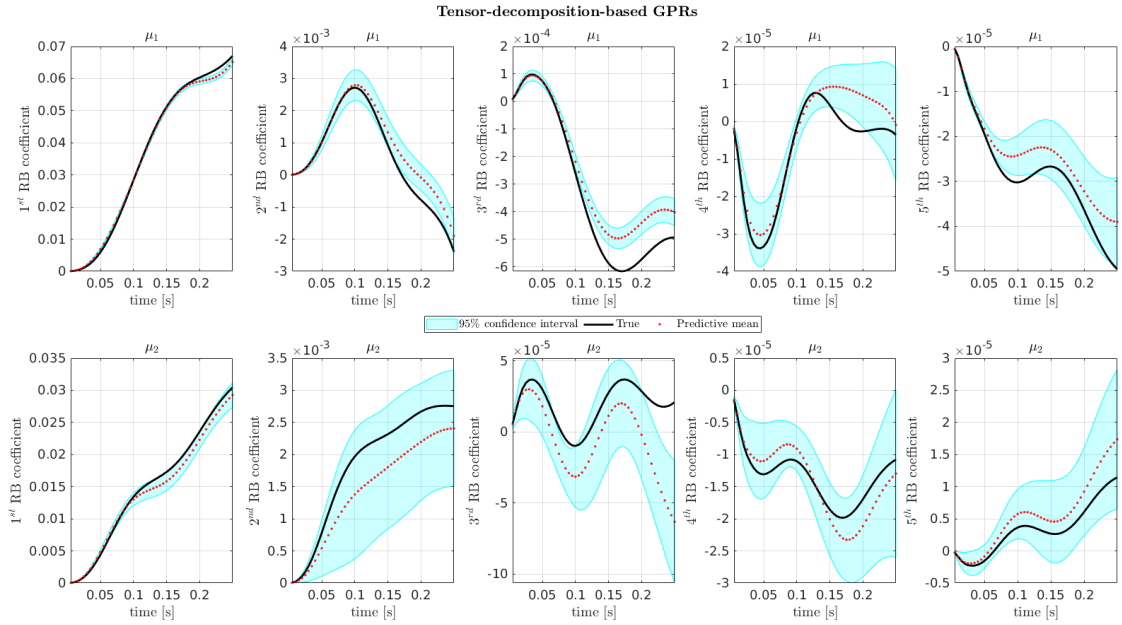

图6：梁的变形。从上到下为不同测试参数下，精确 RB 系数（黑色）随时间的变化，以及从左到右对应的基于张量分解的 POD-GPR 降阶模型均值（红色虚线）。此外，我们还报告了 95% 置信水平。

而全局和基于张量分解的 POD-GPR 降阶模型分别能够将在线 CPU 时间最多缩短至原来的 1/364 和 1/270。此外，我们比较了配备离散经验插值法（DEIM） [CS10]超降阶技术的标准 POD-Galerkin 降阶模型的准确度和效率。具体而言，我们考虑了 $|\mathcal{I}| = 83$ 和 $|\mathcal{I}| = 119$ 个 DEIM 插值点，它们分别对应于残差快照上等于 10^{-4} 和 10^{-5} 的 POD 容差。结果见表5。

	POD-Galerkin-DEIM		全局高斯过程回归	基于张量分解的高斯过程回归
	$\|\mathcal{I}\| = 83$	$\|\mathcal{I}\| = 119$		
在线 CPU 时间	11.4 秒	13.4 秒	0.13 秒	0.18 秒
加速比	4.2	3.6	364	270
$\text{mean}_{\boldsymbol{\mu}}$ tAE($\boldsymbol{\mu}$)	$2.3 \cdot 10^{-4}$	$1.2 \cdot 10^{-4}$	$4.4 \cdot 10^{-4}$	$4.1 \cdot 10^{-4}$
$\text{mean}_{\boldsymbol{\mu}}$ tRE($\boldsymbol{\mu}$)	$1.6 \cdot 10^{-2}$	$1.3 \cdot 10^{-2}$	$1.0 \cdot 10^{-1}$	$2.1 \cdot 10^{-2}$

表5：梁的变形。POD-Galekin-DEIM 降阶模型、全局POD-GPR降阶模型和基于张量分解的 POD-GPR 降阶模型的效率和准确度。

图7和图8分别展示了针对不同训练样本数量 N_s，相对于 FOM 解计算得到的均值（在测试集上）绝对误差和相对误差随时间的演化。此外，相应的计算加速比见图 9。我们观察到，当训练数据集足够大时，两种方法均表现良好，且准确度相当。特别是，全局高斯过程回归能够实现比基于张量分解的方法更高的计算加速比，尽管其严格依赖于 N_s。对于给定的输入向量取值，图10给出了不同时间点的全阶模型位移以及 POD-GPR 降阶模型的近似误差。

到目前为止，在在线阶段，我们始终采用与训练高斯过程回归时相同的时间点，因为我们主要关注参数对物体变形的影响。然而，高斯过程回归也能对时间维度上未见过的取值进行泛化，这一点可由表6中的计算结果看出：在线阶段采用的时间步长为 $\Delta t = 3.5 \cdot 10^{-3}$ s。在这种情况下，时间点总数为

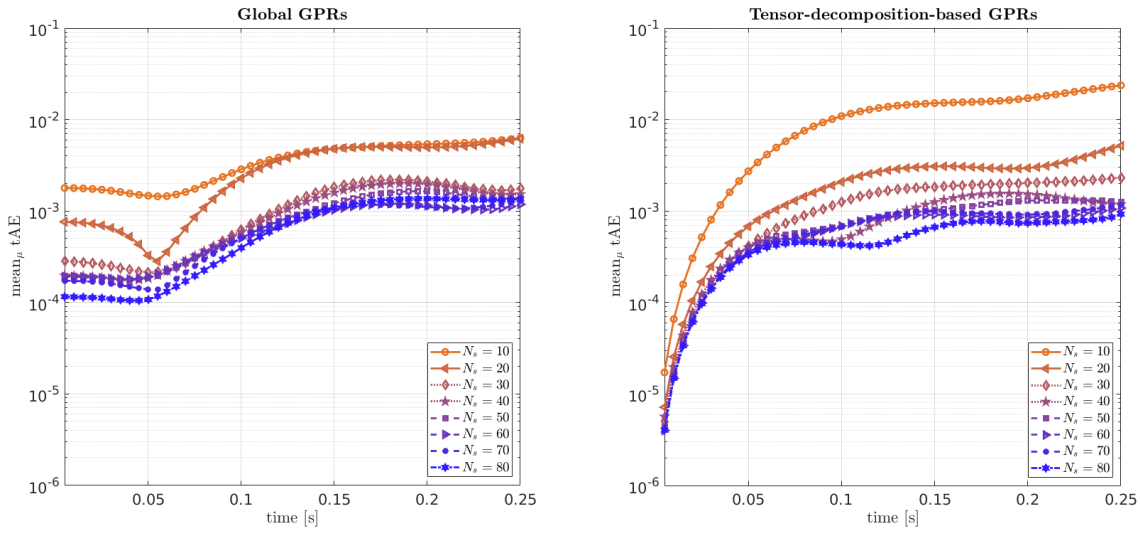

图 7：梁的变形。全局（左）和基于张量分解的（右）POD-GPR降阶模型近似的平均绝对误差随训练集大小的变化。

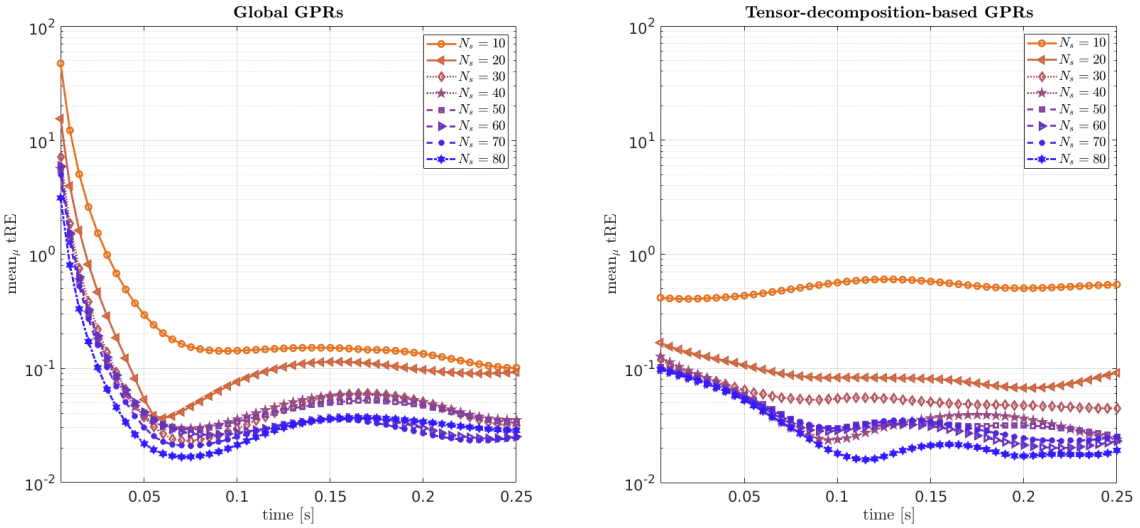

图 8：梁的变形。全局（左）和基于张量分解的（右）POD-GPR降阶模型近似的平均相对误差随时间的变化，其中训练集大小各不相同。

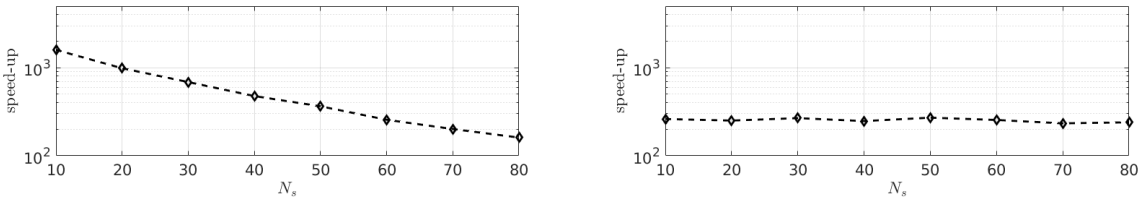

图 9：梁的变形。全局（左）和基于张量分解的（右）POD-GPR降阶模型近似相对于全阶解的平均计算加速比随时间的变化，其中训练集大小各不相同。

$N_t^{test} = 71$，对于给定的参数向量，全阶模型平均需要 75 s。图 11 展示了不同输入参数取值下相应的时间平均 L^2-绝对误差。每幅图中还以浅灰色标出了使用与训练期间相同的时间步长计算得到的误差，

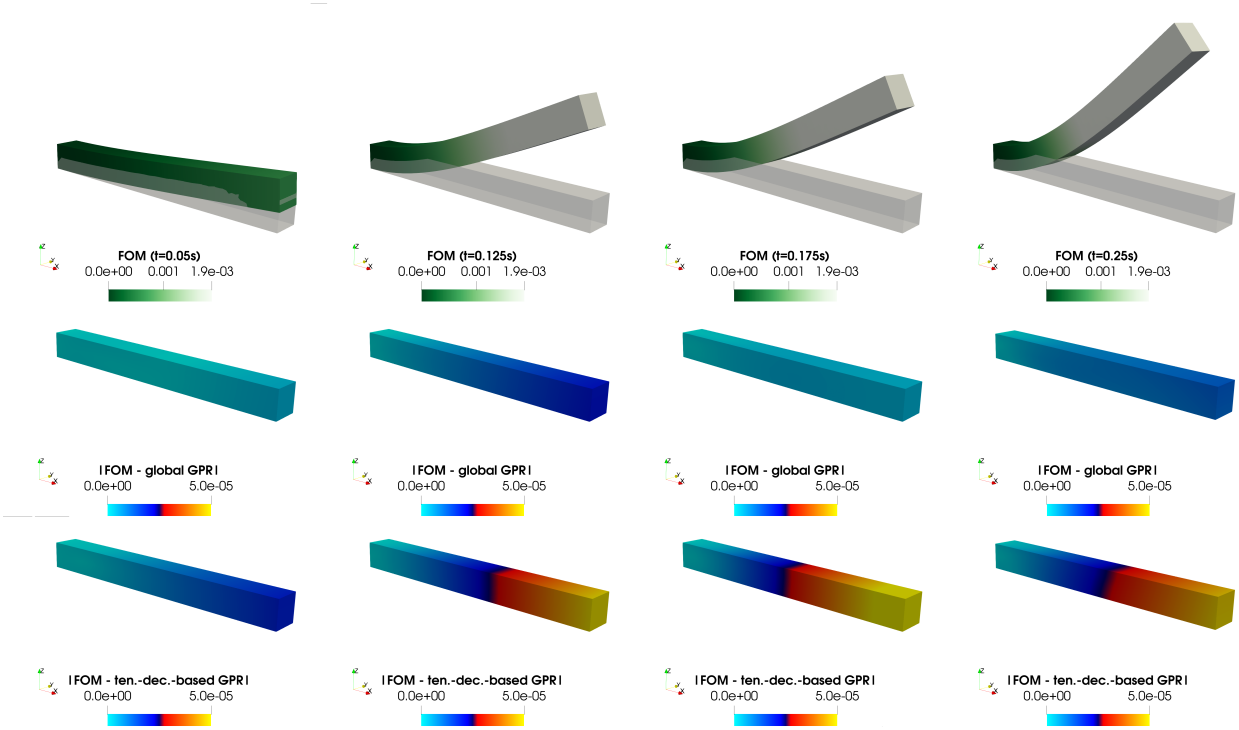

图10：梁的变形。对于 $\boldsymbol{\mu}$ =[4.20, 2.63, 2.51, 4.54, 4.46, 2.81, 27.25 千帕 2.51 千帕 0.0052 千帕]，不同时间点的全阶模型位移（上）以及全局（中）和基于张量分解的 POD-GPR 降阶模型的近似误差（下）。

显示　　表明 POD-GPR 降阶模型在时间和参数方面均具有良好的预测性能　　.

	全局高斯过程回归	基于张量分解的高斯过程回归
在线 CPU 时间	0.18 秒	0.20 秒
加速比	385	366
$\underset{\boldsymbol{\mu}}{\text{mean}}\ tAE$	$1.1 \cdot 10^{-3}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$
$\underset{\boldsymbol{\mu}}{\text{mean}}\ tRE$	$3.9 \cdot 10^{-1}$	$7 \cdot 10^{-2}$

表6：梁的变形。全局和基于张量分解的 POD-高斯过程回归降阶模型的效率和准确度，基于 20 个测试参数计算，使用 $\Delta t = 3.5 \cdot 10^{-3}$ 秒。

4.2.2 测试 2：截断椭球主动收缩

在第二个测试案例中，由于奇异值衰减较慢，为达到与前一个问题相同的 POD 精度，需要更多的降阶基函数（见表 7），从而因必须训练更多高斯过程而增加了代理模型的复杂性。

ε_{POD}	10^{-3}	$5 \cdot 10^{-4}$	10^{-4}	$5 \cdot 10^{-5}$	10^{-5}
N	20	30	71	100	202

表 7：截断椭球主动收缩。不同 POD 容差下的降阶基子空间维度。

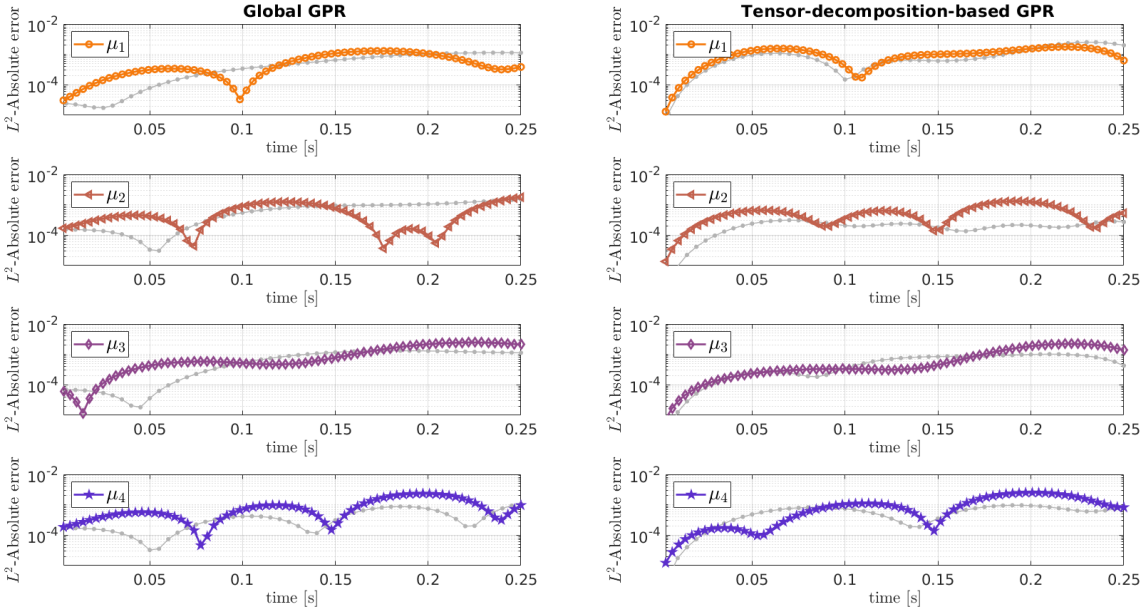

图 11：梁的变形。采用 $\Delta t = 3.5 \cdot 10^{-3}$ s 时，全局（左）和基于张量分解的 POD-GPR 降阶模型（右）的 L^2绝对误差随时间的平均值演变。

GPR 预测的降阶基系数。将 RB 维数固定为 $N = 30$ 后，我们分析使用不同协方差函数构建的全局 POD-GPR 降阶模型和基于张量分解的 POD-GPR 降阶模型所计算近似结果的保真度，这些模型均使用 $N_s = 50$ 个参数样本进行训练。对于基于张量分解的方法，通过计算截断奇异值分解，获得每个 RB 系数的时间模态和参数模态，从而得到 $3 \leq N_\ell \leq 9$。根据第 4.2.1 节中的观测结果，我们仅对训练集和测试集采用标准化缩放。

从图 12 报告的均方误差可以看出，与前一个测试相比，核函数的选择对高斯过程回归预测准确度的影响较小。不过，由于 ARD-RBF 核函数对第一个降阶基系数真实值的拟合优于其他核函数，因此除非另有说明，我们均采用该核函数作为高斯过程的协方差函数。

因此，我们通过将训练集规模从 $N_s = 10$ 增加到 80，分析 POD-GPR 降阶模型的准确度和效率。我们指出，全局方法需要约 4 h 才能针对 $N_s = 50$ 个采样参数训练高斯过程，这可能是由于全阶模型维数 N_h 较高，且降阶基系数数量较多。为减轻这一负担，同时避免采用并行计算，从现在起，我们仅保留与时间点 t^{5i}相关的数据，将训练集规模限制为 $i = 1, \ldots, \lfloor N_t/5 \rfloor$。从图 13 可以看出，由 $N_s = 40$ 或 $N_s = 50$ 个采样参数组成的数据集，在准确度和 CPU 训练时间之间实现了良好的权衡。

对于 RB系数 $q_1, \ldots, q_5$，我们在表 8 中报告了使用 $N_s = 50$ 获得的计算数据，而相应的真实投影系数、预测均值和 95%置信水平则展示在图 14 和图 15 中。两种方法在准确度方面几乎相当，而基于张量分解的方法训练速度更快。

降阶模型相对于全阶模型的准确度。最后，我们比较代理 GPR 模型对整个高保真位移场的近似准确度，即 $\mathbf{V}\hat{\mathbf{q}}(\cdot;\boldsymbol{\mu})$ 与 $\mathbf{u}_h(\cdot;\ \boldsymbol{\mu})$ 的差异，以及其计算效率。回顾一下，对于给定参数，全阶模型平均需要 6 分 11 秒来计算解的动力学。所得结果见图 16 和图 17，并汇总于表 9。如前所见，全局 POD-GPR 降阶模型在线实现的加速比在两种方法中最高。图 18 展示了给定输入向量取值时，不同时间点的全阶模型位移以及 POD-GPR 降阶模型的近似误差。

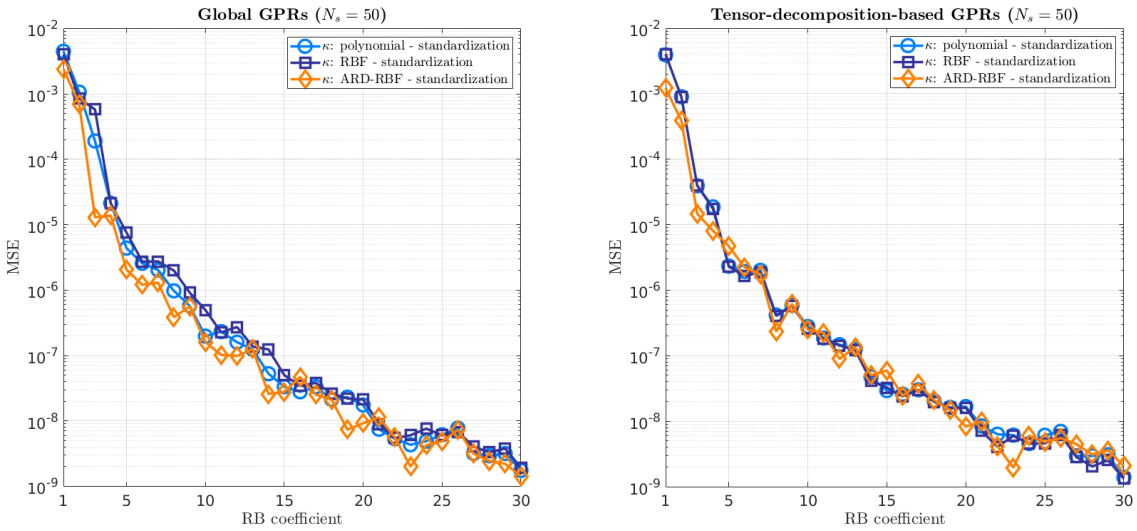

图 12：截断椭球主动收缩。对于 $N = 30$，使用不同核类型计算的全局（左）和基于张量分解的（右）POD-GPR降阶模型的均方误差。

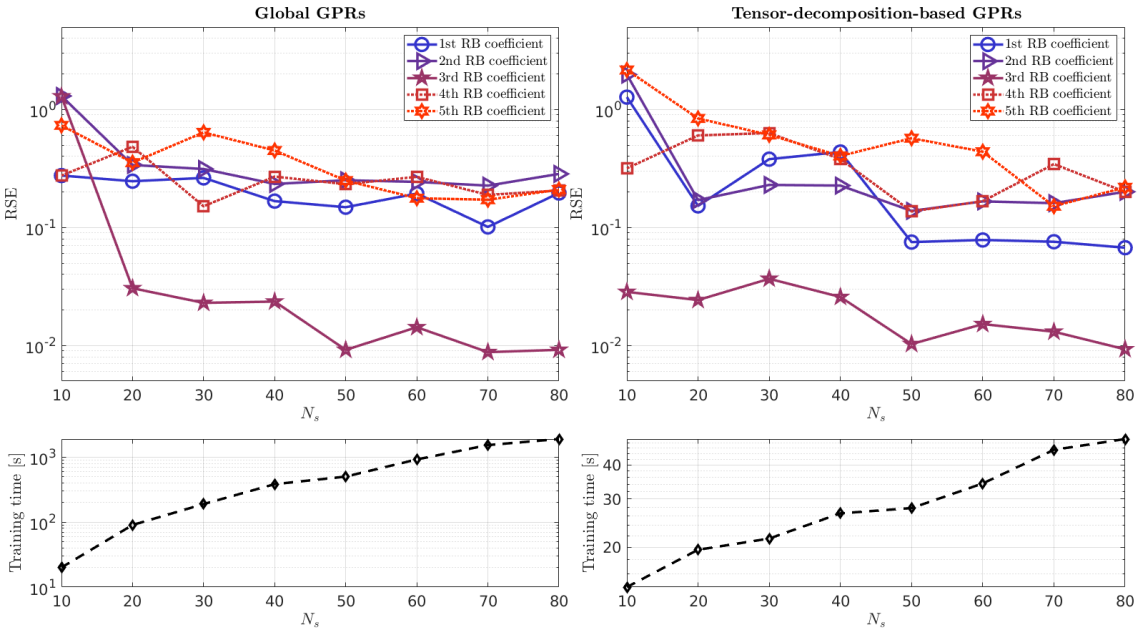

图 13：截断椭球主动收缩。全局（左上）和基于张量分解的（右上）POD-GPR降阶模型中与前 5 个降阶基系数相关的相对平方误差随训练集大小的变化。图中还报告了相应的训练时间（底部）。这些结果基于包含 $N_s^{test} = 20$ 个参数的测试集获得，该测试集中的参数在训练期间未被使用。

5 使用 POD-GPR降阶模型的不确定性量化多查询问题

描述物理现象的数学模型取决于一组（规模较大的）参数，这些参数表征不同的物理响应；由于测量难以进行，我们对这些参数的了解十分有限。然而，对于当前应用而言，只有一小部分输入会对特定输出量产生显著影响；这些输出量是位移场的标量函数。因此，确定哪些因素应当进行恰当测量，哪些因素可以任意设定而不影响所选感兴趣量，至关重要。处理参数化模型时的另一项关键任务是推断

	全局高斯过程回归	基于张量分解的高斯过程回归
训练 CPU 时间	501 秒	28 s
相对平方误差(q_1)	0.1487	0.0753
相对平方误差(q_2)	0.2517	0.1384
相对平方误差(q_3)	0.0092	0.0103
相对平方误差(q_4)	0.2331	0.1369
相对平方误差(q_5)	0.2501	0.5711

表 8：截断椭球主动收缩。针对 $N = 30$、$N_s = 50$ 和 $N_t = 50$，采用 ARD-RBF 核的全局回归方法和基于张量分解的回归方法的相关计算数据。

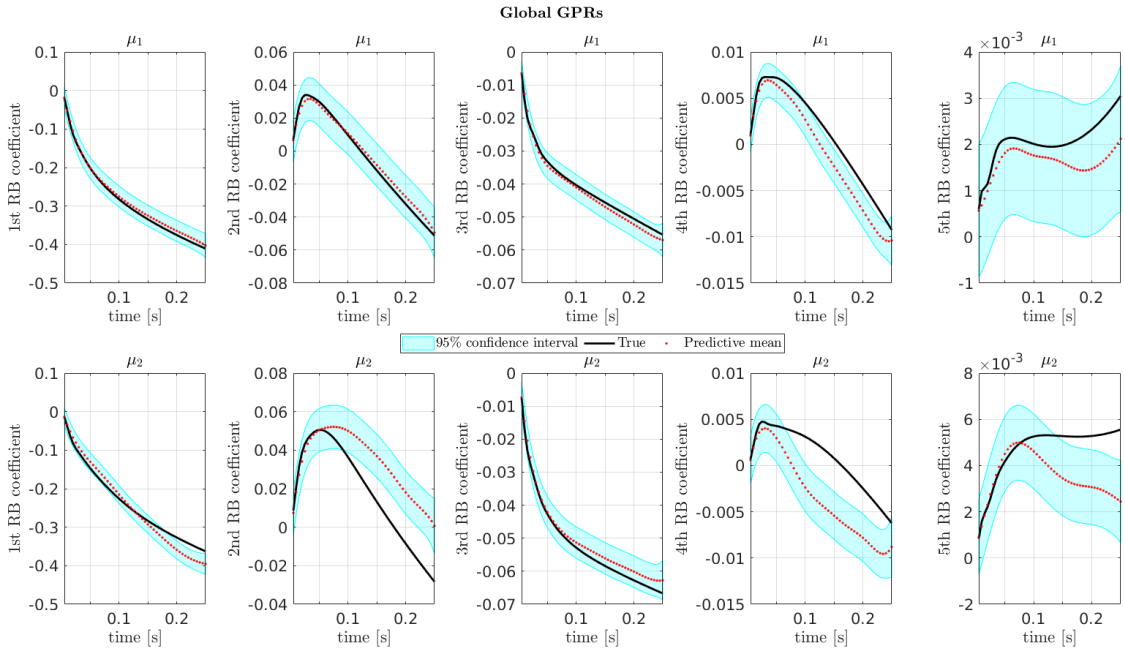

图 14：截断椭球主动收缩。对于不同测试参数，精确 RB 系数（黑色）的时间演化（从左到右）以及相应的全局 POD-GPR ROM 均值（红色虚线）的时间演化（从上到下）。此外，我们报告了 95% 置信水平。

	全局高斯过程回归	基于张量分解的高斯过程回归
在线 CPU 时间	0.25 秒	2.1 秒
加速比	1487	174
$\text{mean}_{\boldsymbol{\mu}}$ 时间平均绝对误差($\boldsymbol{\mu}$)	$3.1 \cdot 10^{-2}$	$2.8 \cdot 10^{-2}$
$\text{mean}_{\boldsymbol{\mu}}$ 时间平均相对误差($\boldsymbol{\mu}$)	$1.6 \cdot 10^{-1}$	$1.4 \cdot 10^{-1}$

表 9：截断椭球主动收缩。全局POD-GPR降阶模型和基于张量分解的 POD-GPR 降阶模型的效率和准确度。

基于观测数据的未知参数。我们展示了如何利用高斯过程回归的后验分布均值进行预测，从而高效地求解这两类问题，即需要反复评估输入输出映射的敏感性分析和参数估计。

下文将针对第 4.1.1 节和第 4.1.2 节所述的数值测试案例，讨论这些多查询问题的求解方法。对于变形梁，我们将参考域中坐标为 (mmm) 的指定点沿 k 轴的位移视为第 k 个感兴趣量，

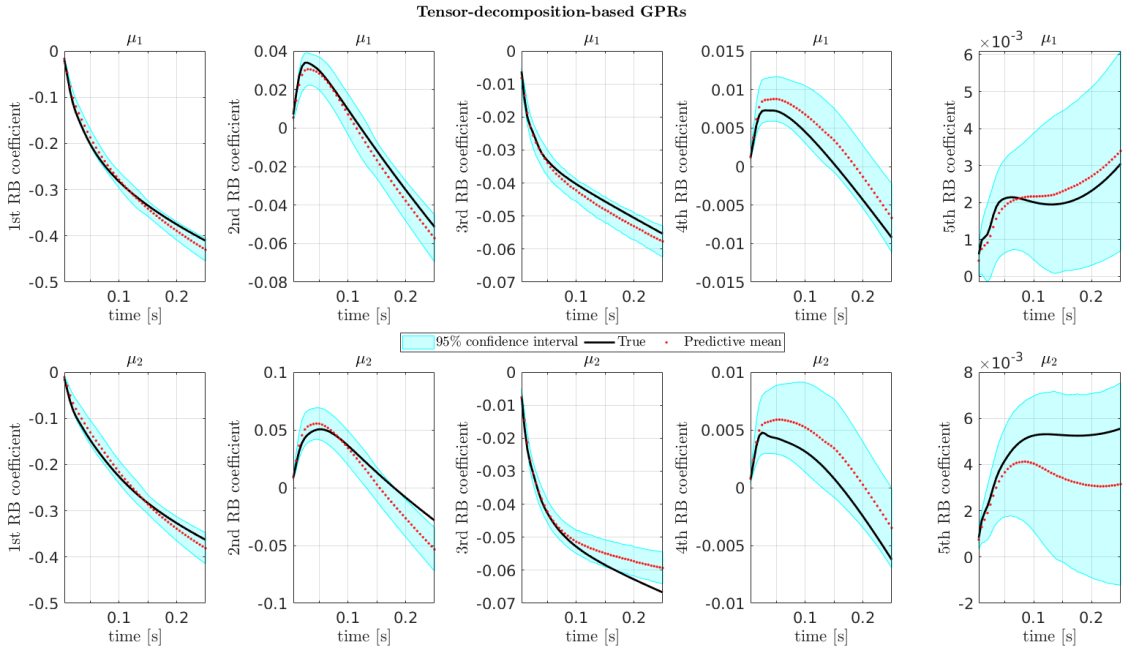

图 15：截断椭球主动收缩。不同测试参数下，精确 RB 系数（黑色）随时间的变化（从左到右），以及相应的基于张量分解的 POD-GPR 降阶模型均值（红色虚线）（从上到下）。此外，还报告了 95% 置信水平。

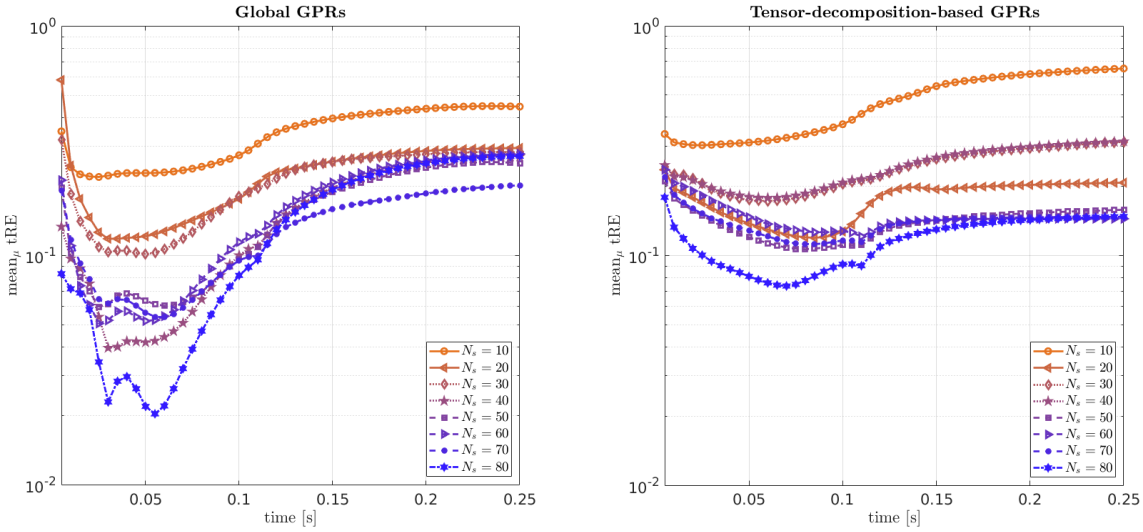

图 16：截断椭球主动收缩。随着训练集大小变化，全局 POD-GPR降阶模型（左）和基于张量分解的 POD-GPR降阶模型（右）近似结果的平均相对误差随时间的变化。

参考域 Ω_0, 中坐标为 $\bar{\boldsymbol{X}} = (10^{-2}\mathrm{m}\ 5\cdot 10^{-2}\mathrm{m}\ 5\cdot 10^{-2}\mathrm{m})$ 的指定点在 $t = j_k\Delta t$ 时刻测得的 z 轴，即

$$y_k(\boldsymbol{\mu}) = \mathbf{u}(\bar{\boldsymbol{X}}, j_k\Delta t; \boldsymbol{\mu}) \cdot \mathbf{e}_z,$$

对于 $j_k = 10$，30，50。在截断椭球主动收缩的情况下，我们考虑位于外表面和内表面上不同点的水平位移和垂直位移，并将其重新发布

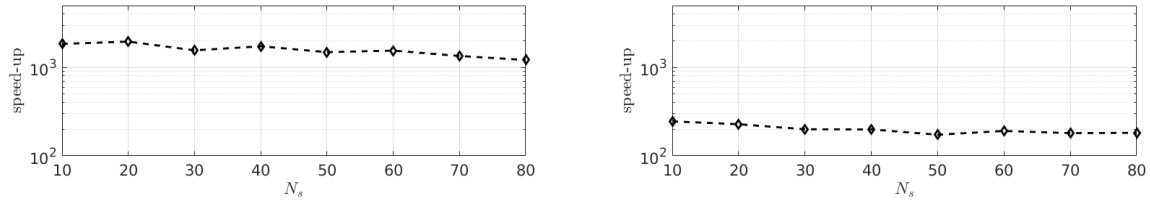

图 17：截断椭球主动收缩。全局（左）和基于张量分解的（右）POD-GPR降阶模型相对于全阶解的近似，在不同训练集规模下的平均计算加速比。

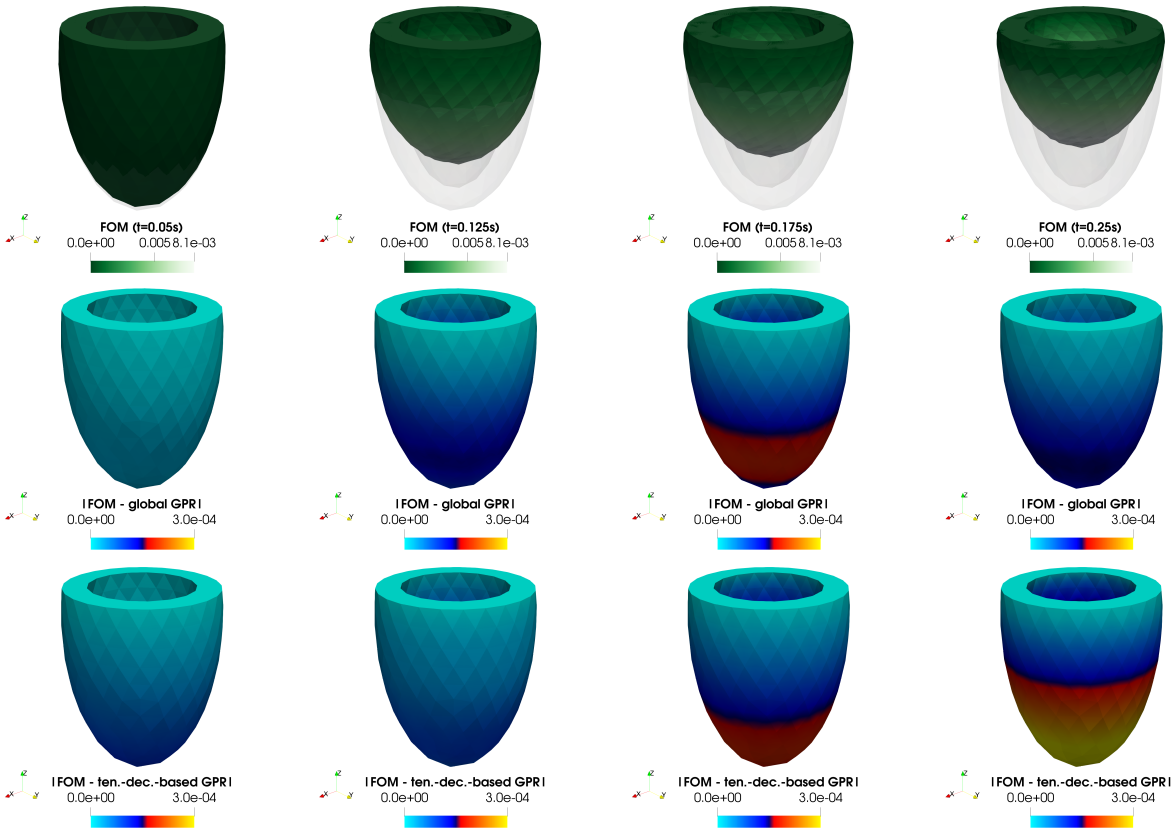

图 18：截断椭球主动收缩。在不同时间点、 $\boldsymbol{\mu} = [7.85, 1.81, 2.21, 4.11, 4.29, 1.76, 51.30$ 千帕 1.92 千帕 64.94 千帕 14.73 千帕 $-98.53°, 104.72°]$条件下，全阶模型位移（顶部），以及全局（中部）和基于张量分解的（底部）POD-GPR降阶模型的近似误差。

在图 19 中，在不同时间点获取，从而输出为

$$
\begin{aligned}
y_k(\boldsymbol{\mu}) &= \mathbf{u}(\bar{\boldsymbol{X}}_{i_k}, j_k \Delta t; \boldsymbol{\mu}) \cdot \mathbf{e}_x \\
y_{k+1}(\boldsymbol{\mu}) &= \mathbf{u}(\bar{\boldsymbol{X}}_{i_k}, j_k \Delta t; \boldsymbol{\mu}) \cdot \mathbf{e}_y \\
y_{k+2}(\boldsymbol{\mu}) &= \mathbf{u}(\bar{\boldsymbol{X}}_{i_k}, j_k \Delta t; \boldsymbol{\mu}) \cdot \mathbf{e}_z
\end{aligned}
$$

对于 $i_k = 1$，……，8 和 $j_k = 10$，30，50。滥用一下记号，我们用 $\boldsymbol{\mu}$（或 y）表示参数向量，既指其作为随机变量（或模型输出随机变量）的形式，也指其取值。为开展不确定性量化研究，我们使用 Dakota 工具包 [ABD+20]，并利用其 Python 直接接口。

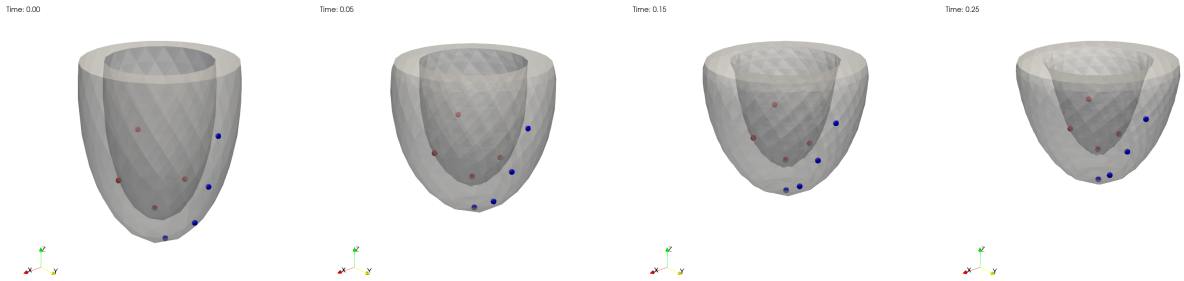

图 19：截断椭球主动收缩。在三个不同时间点测量心外膜（浅红色）和心内膜（深红色）的组织位移。

5.1 敏感性分析（SA）

首先，我们进行全局敏感性分析，以便根据参数对感兴趣量的影响对其进行排序，从而获得有用信息。我们首先采用 Morris 初等效应筛选方法 [Mor91], ，该方法仅需少量数值模拟即可进行定性分析。在本例中，我们将使用高斯过程回归模型得到的结果（提醒一下，这些模型基于由 $N_s = 50$ 采样参数构建的数据集训练，并使用标准化技术进行了适当缩放）与高保真模型的结果进行比较。因此，我们通过计算 Sobol' 一阶效应指数和总效应指数 [Sob90], ，进行基于方差的全局敏感性分析，以此提供更定量的排序标准，尽管这需要更多的输入-输出评估。由于我们通过开展独立的敏感性分析来分析多个输出，因此这里只对单变量模型输出作形式化介绍。

5.1.1 基本效应

初等效应检验是一种筛选方法，能够克服逐个设计和基于导数的方法的主要局限。它通过考察输入的广泛变化范围，并对多个局部导数近似取平均值，以较少的模型评估次数识别出以下输入因子：（i）可忽略不计；（ii）呈线性且具有可加性；或（iii）呈非线性，或与其他因子存在交互作用。一般性不失，假设参数域为 p 维单位超立方体。因此，给定将 $[0,1]^p$ 划分为 $\iota \in \mathbb{N}$ 个级别的分区 Ω_ι ，与第 i 个输入因子相关联的初等效应，对于 $i = 1, \ldots, p$，定义为

$$EE_i(\boldsymbol{\mu}) = \frac{y(\boldsymbol{\mu} + \mathbf{e}_i \Delta^\mu) - y(\boldsymbol{\mu})}{\Delta^\mu},$$

其中 $\boldsymbol{\mu}$，$\boldsymbol{\mu} + \mathbf{e}_i \Delta^\mu \in \Omega_\iota$，其中 $\mathbf{e}_i$ 是除第 i 个分量外其余分量均为零的单位向量，Δ 是步长，其取值为 $\{1/(\iota-1), \ldots, (\iota-2)/(\iota-1)\}$。由于每个初等效应都量化了局部行为，因此通过估计其分布的统计量来获得全局敏感性度量。通过从 Ω_ι 中随机抽取不同的 $\boldsymbol{\mu}$ ，可以构建 EE_i 分布的均值和标准差。此外，为避免抵消效应，还会计算绝对值分布 $|EE_i|$ 的均值。因此，对于 $r \in \mathbb{N}$ 条轨迹，即在 Ω_ι 中抽样得到的点集 $\boldsymbol{\mu}_1$, ……， $\boldsymbol{\mu}_r$，我们可以获得第 i 个输入的以下敏感性度量

$$m_i = \frac{1}{r}\sum_{j=1}^{r} EE_i(\boldsymbol{\mu}_j), \quad m_i^* = \frac{1}{r}\sum_{j=1}^{r} \left|EE_i(\boldsymbol{\mu}_j)\right|, \quad sd_i = \frac{1}{r-1}\sum_{j=1}^{r} \left(EE_i(\boldsymbol{\mu}_j) - m_i\right)^2, \quad i = 1, \ldots, p.$$

在我们的设置中，我们固定层数 $\iota = 6$ ，并选择 $\Delta^\mu = {}_2{}^{\iota}{}_{(\iota-1)}$ 以确保等概率抽样。此外，我们考虑 $r = 20$ 条轨迹，对应于 $r(p+1)$ 次输入-输出评估，从而在结果的可靠性与分析所需的计算资源之间取得良好平衡。

m_i 和 m_i^* 均可用于量化第 i 个输入因子对输出 y 的单独影响，而 sd_i 则估计其效应集合中由非线性效应以及与其他因子的交互作用所导致的影响。sd_i 值较低，说明第 i 个参数的效应与评估 EE_i 时所处的位置无关，因此也与其他输入的取值无关。

测试 1：梁的变形。对于第一个问题，我们在图20（上图）中报告了使用全阶模型计算的各感兴趣量基本效应的估计均值$\mathbf{m}^* = [m_1^*, \ldots, m_p^*]^T$和标准差$\mathbf{sd}^* = [sd_1, \ldots, sd_p]^T$；在图20的中图和下图中，则展示了使用POD-GPR降阶模型输出计算得到的相同统计量。为更清晰地展示结果，对每个模型的$\mathbf{m}^*$ 和$\mathbf{sd}$均进行了最小-最大归一化。更多详情见表10。

通过基于张量分解的方法计算得到的基本效应与高保真结果高度吻合。无论如何，输入参数的排序始终能够得到正确识别。借助代理模型，可以在数秒而非数小时内获得准确的敏感性分析结果，从而通过识别影响较小的输入来缩减参数空间。

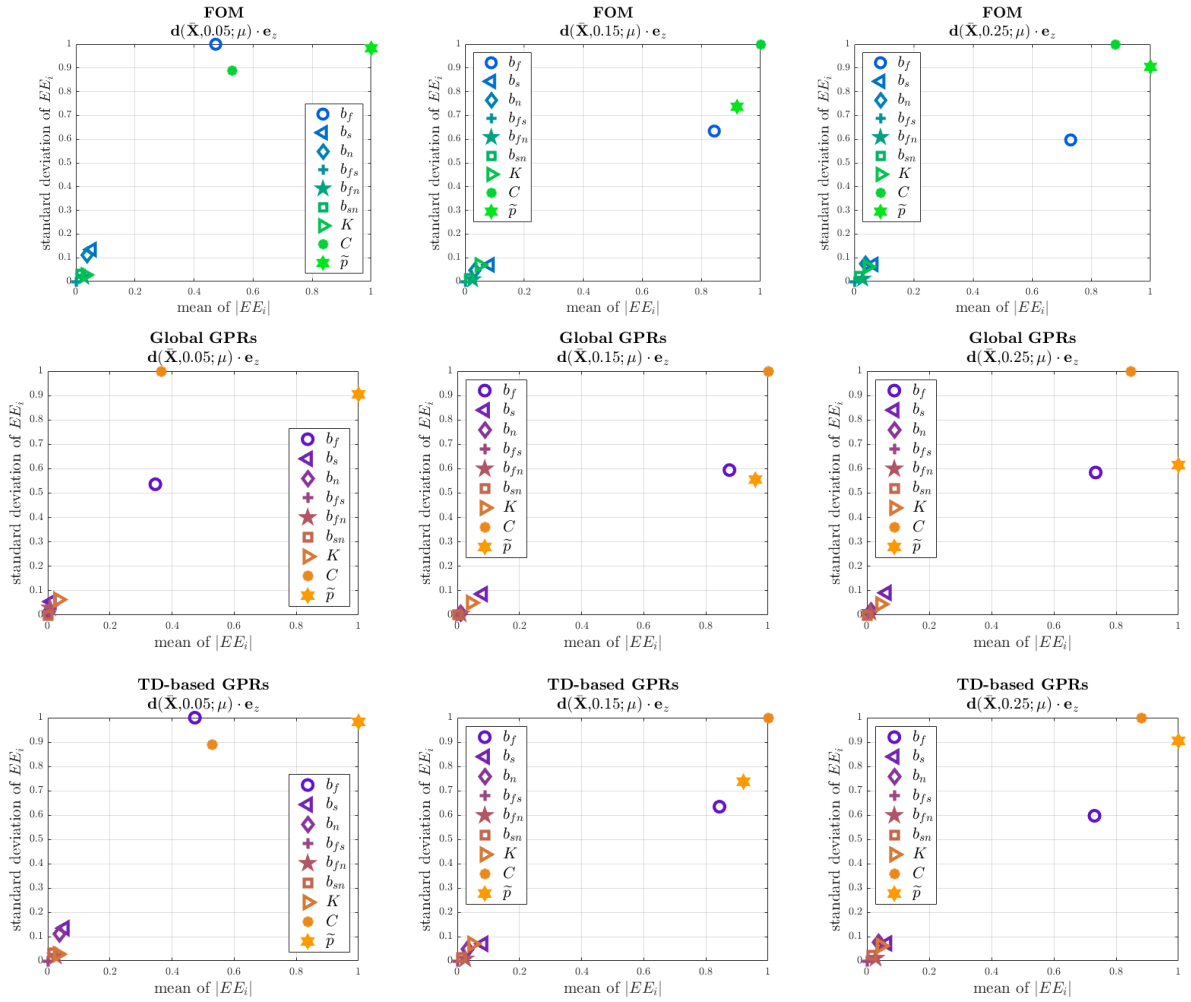

图20：梁的变形。分别使用全阶模型（上）、全局POD-GPR降阶模型（中）和基于张量分解的 POD-GPR 降阶模型（下）的输出计算得到的Morris度量。感兴趣量为某一点 P 沿 z 轴的位移，在三个不同的时刻（从左至右，$t = 0.05$，0.15，0.25）。

测试 2：截断椭球主动收缩。由于该基准测试的复杂度较高，我们仅依靠 POD-GPR 降阶模型计算基本效应。具体而言，全局方法需要 18 s 完成分析，而基于张量分解的方法则需要约 6 min，几乎占计算 $r(p+1) = 260$ 输入-输出评估所需时间的 100%。

在图22和图23中，我们报告了使用 POD-GPR 降阶模型计算的 Morris 指数散点图，这些指数对应于心外膜上两个不同点的感兴趣量；这两个点在图21中标出（即，P_1 靠近心尖处，以及 P_2 位于心尖与基底之间处）。特别是，对于第一个

	FOM	全局高斯过程回归	基于张量分解的高斯过程回归
在线 CPU 时间	3 小时 11 分钟	18 s	25 s
加速比	–	645	450
$\lvert EE_1\rvert$ （b_f）在 $t = 0.25$ 秒时的均值	$2.5 \cdot 10^3$	$2.0 \cdot 10^3$	$2.3 \cdot 10^3$
$\lvert EE_8\rvert$ (C)在 $t = 0.25$ s时的均值	$2.8 \cdot 10^3$	$2.3 \cdot 10^3$	$2.8 \cdot 10^3$
$\lvert EE_9\rvert$ ($\widetilde{p}$)在 $t = 0.25$ s时的均值	$3.0 \cdot 10^3$	$2.7 \cdot 10^3$	$3.2 \cdot 10^3$

表10：梁的变形。采用 POD-GPR-ROM 方法计算基本效应的计算性能。

在不同时间点考虑该点的垂直位移；对于第二个点，我们关注沿 x轴的位移。感兴趣输出的选择可能因位移的时间、位置或方向而异，并可能对输入参数的排序产生重大影响，因此必须谨慎选择。然而，采用 POD-GPR 方法时，无需预先定义输出，因为 GPR 的训练与感兴趣量无关。尽管全局方法与基于张量分解的方法之间存在少量差异~，但我们观察到，主动张力的斜率 T_a 在两种统计量中均较大，尤其是在考虑沿 z 轴的位移时。另一方面，纤维角 $\boldsymbol{\alpha}_{epi}$ 对与水平位移相关的感兴趣量影响更大。无论如何，两种 POD-GPR 降阶模型都能正确识别影响较小的参数。

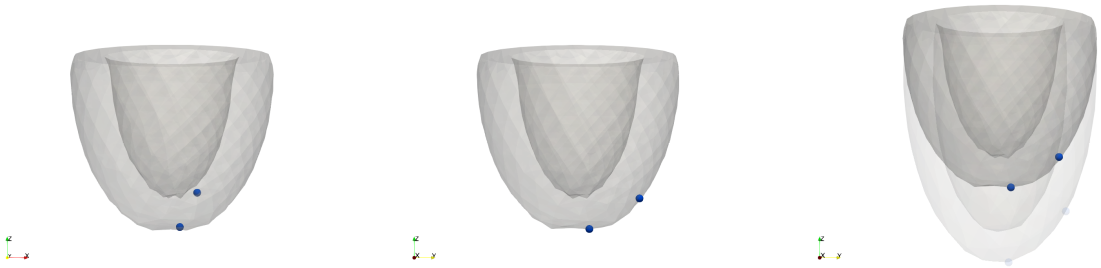

图21：截断椭球主动收缩。从三个不同视角观察时间为 0.25s 时的点 P_1 和 P_2 。

5.1.2 Sobol'指数

基于方差的方法是量化各因素相对重要性的更强大工具，其依据是将模型输出 y 的方差分解为与各输入参数及其交互作用相关的项，即

$$\mathrm{Var}(y) = \sum_i V_i + \sum_{i<j} V_{ij} + \cdots + V_{1\ldots p}, \tag{10}$$

其中 $V_i = \mathrm{Var}(\mathbb{E}[y|\boldsymbol{\mu}^{(i)}])$， $V_{ij} = \mathrm{Var}(\mathbb{E}[y|\boldsymbol{\mu}^{(i)}, \boldsymbol{\mu}^{(j)}]) - V_i - V_j$，依此类推； $\boldsymbol{\mu}^{(i)}$ 是参数向量的第 i 个分量，且 $i = 1$、.....、 p。衡量敏感性的一项主要指标是一阶 *Sobol'*指数

$$S_i = \frac{V_i}{\mathrm{Var}(y)} = \frac{\mathrm{Var}(\mathbb{E}[y|\boldsymbol{\mu}^{(i)}])}{\mathrm{Var}(y)}, \quad i = 1, \ldots, p,$$

它衡量单独改变第 i 个输入时的影响，并对所有输入参数的变化取平均： S_i越大， $\boldsymbol{\mu}^{(i)}$ 对输出 y的影响就越大。注意， $\sum_i S_i \leq 1$。然而，通常无法将各输入对输出的影响分离开来，因此应考察更高阶

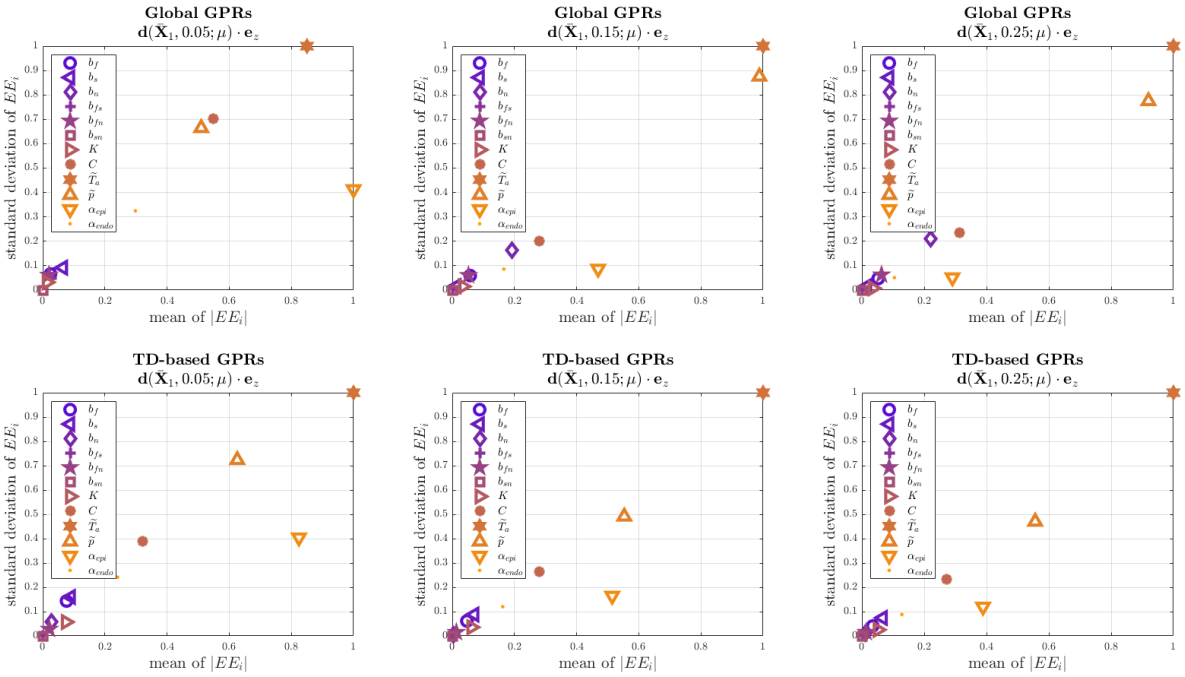

图 22：截断椭球主动收缩。采用全局（上）和基于张量分解的（下）POD-GPR 降阶模型计算得到的Morris度量散点图。感兴趣量为心外膜上靠近心尖的点 P_1 在 z 轴方向上的位移，分别取三个不同时刻。

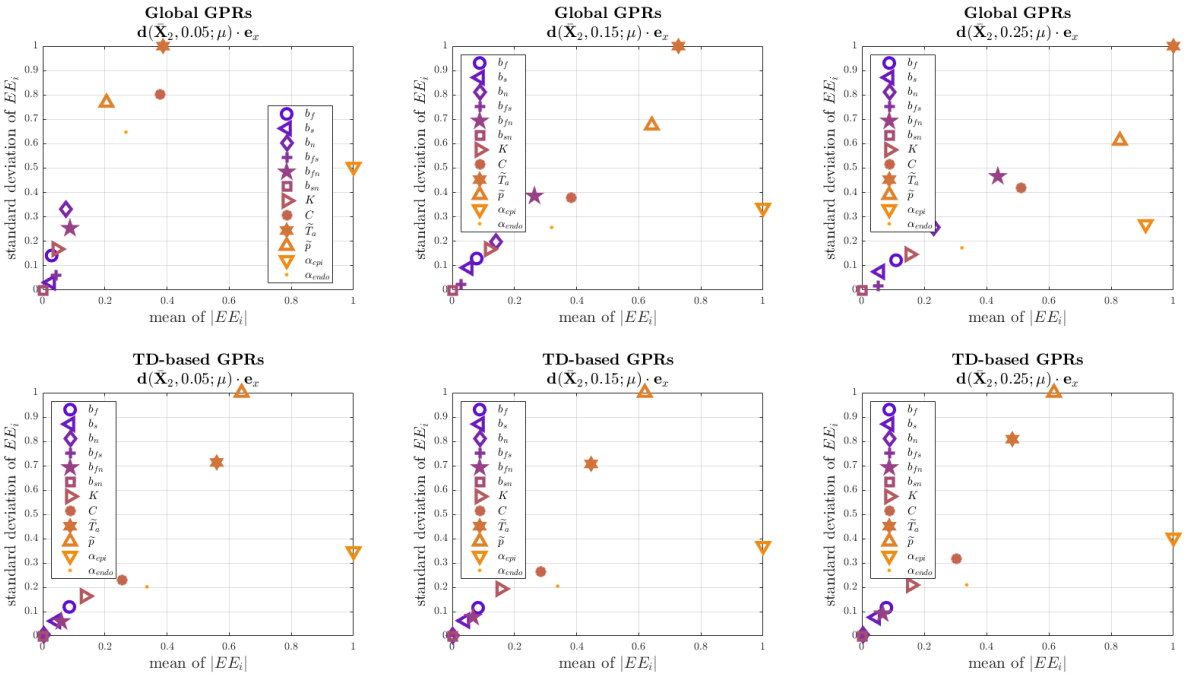

图 23：截断椭球主动收缩。采用全局（上）和基于张量分解的（下）POD-GPR 降阶模型计算得到的Morris度量散点图。感兴趣量为心外膜上位于心尖与基底之间的点 P_2 在 x 轴方向上的位移，分别取三个不同时刻。

交互作用。与其进行需要计算 $2^p - 1$指数的完整敏感性分析，我们采用总效应指数

$$S_{T_i} = \frac{\mathbb{E}[\mathrm{Var}(y|\boldsymbol{\mu}^{(\sim i)})]}{\mathrm{Var}(y)} = \frac{\mathrm{Var}(y) - \mathrm{Var}(\mathbb{E}[y|\boldsymbol{\mu}^{(\sim i)}])}{\mathrm{Var}(y)} = 1 - \frac{\mathrm{Var}(\mathbb{E}[y|\boldsymbol{\mu}^{(\sim i)}])}{\mathrm{Var}(y)},$$

对于 $i = 1, \ldots, p$，其中 $\boldsymbol{\mu}^{(\sim i)} = (\boldsymbol{\mu}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{\mu}^{(i-1)}, \boldsymbol{\mu}^{(i+1)}, \ldots, \boldsymbol{\mu}^{(k)})$ 表示除 $\boldsymbol{\mu}^{(i)}$ 之外所有输入因子的随机向量。在这种情况下，S_{T_i} 越小，$\boldsymbol{\mu}^{(i)}$ 的影响就越小，因此可以在其不确定性范围内任意固定，而不会显著影响关注输出。与 S_i 不同，$\sum_i S_{T_i} \geq 1$ 成立，因为 $S_{T_{i_1}}$ 和 $S_{T_{i_2}}$ $(i_1 < i_2)$ 都考虑了 $\boldsymbol{\mu}^{(i_1)}$ 与 $\boldsymbol{\mu}^{(i_2)}$之间的交互作用。

在这项工作中，我们采用*Saltelli* 方法 [Sal02], ，这是评估 Sobol'指数最常用且高效的方法之一，依赖于对感兴趣输出量进行 $N_{samples}$ 次评估，总共需要进行 $N_{samples}(p+2)$ 次输出评估，以计算一阶 Sobol'指数和总效应指数——因此，与基于方差的敏感性指数的粗略蒙特卡罗估计相比，计算量大幅减少。

测试 1：梁的变形 我们考虑 $N_{samples} = 200$ 次输出评估，因此相应地需要$N_{samples}(p+2) = 2200$次输入-输出评估，并采用全局和基于张量分解的高斯过程回归模型。图 24 验证了此前使用 Morris 基本效应进行的敏感性分析结果，即缩放因子 C、压力载荷的斜率 $\widetilde{p}$ 以及纤维方向上的材料刚度 b_f是当前测试中影响最大的参数，而其他参数对所选输出几乎没有影响，因此可将其固定在各自的定义域内。更多详情见表11。

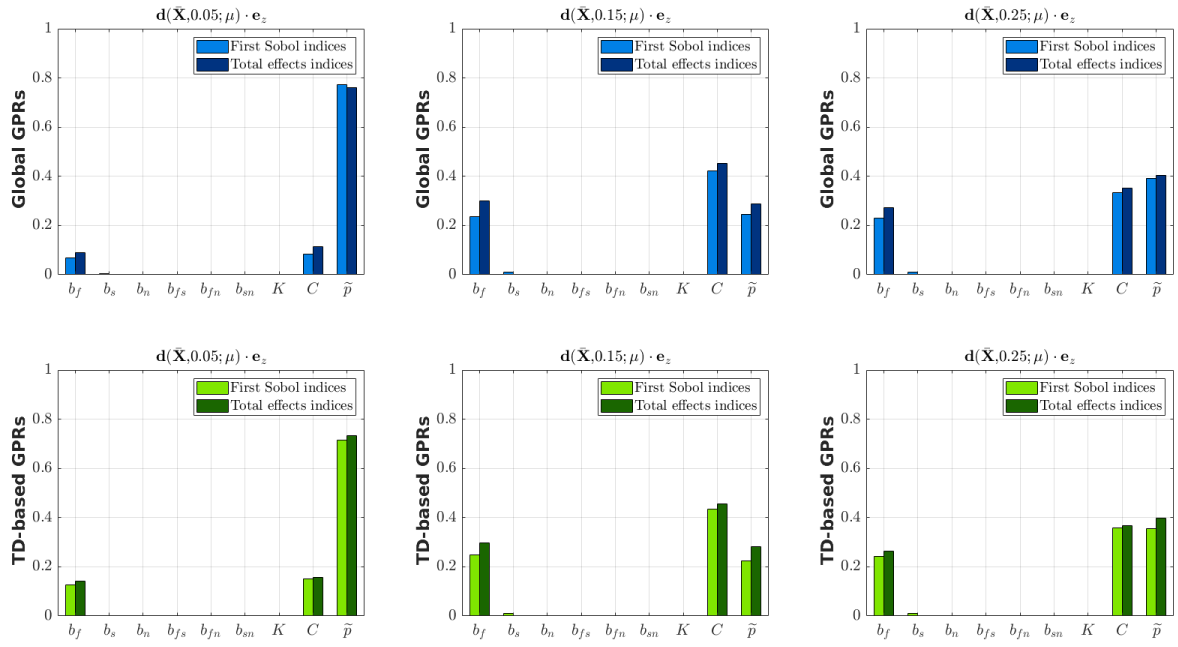

图 24：梁的变形。使用全局（上图）和基于张量分解的 POD-GPR 降阶模型（下图）计算得到的 Sobol'指数柱状图。感兴趣量为某点 P沿z轴的位移，取三个不同的时刻。

此外，我们计算了所有 $n = 1$、…、N_t 的 Sobol'指数。图 25 展示了以下 Sobol'指数的推广形式

$$\frac{\int_0^t \mathrm{Var}(\mathbb{E}[y(\tau)|\boldsymbol{\mu}^{(i)}])d\tau}{\int_0^t \mathrm{Var}(y(\tau))d\tau}, \quad \frac{\int_0^t \mathbb{E}[\mathrm{Var}(y(\tau)|\boldsymbol{\mu}^{(\sim i)})]d\tau}{\int_0^t \mathrm{Var}(y(\tau))},$$

对于最有效的输入，即 b_f、C 和 $\widetilde{p}$，其影响会随时间变化。我们观察到，与材料输入相关的指数会随着时间推移而增加，而压力参数的影响则会在达到最大斜率时减弱

	FOM	全局高斯过程回归	基于张量分解的高斯过程回归
在线 CPU 时间	1 天 8 小时 45 分钟	147 秒	290 秒
加速比	–	804	406
S_1 (b_f)（$t = 0.25$ 秒时）	0.25	0.23	0.24
S_8 (C)（$t = 0.25$ 秒时）	0.37	0.33	0.36
S_9 $(\widetilde{p})$（$t = 0.25$ 秒时）	0.35	0.39	0.36
S_{T_1} (b_f)（$t = 0.25$ 秒时）	0.28	0.27	0.26
S_{T_8} (C)（$t = 0.25$ 秒时）	0.38	0.35	0.37
S_{T_9} $(\widetilde{p})$ 在 $t = 0.25$ 秒时	0.38	0.41	0.40

表11：梁的变形。用于计算 Sobol'指数的 POD-GPR-ROM 方法的计算性能。

输出。然而，当关注例如时变模型输出时，针对给定时间步长 t^n 的每个预测分别进行独立的敏感性分析，其中 $n = 1$、.....、N_t，可能会导致不理想的结果。事实上，这些 N_t 变量彼此相关，因此无法从分离的分析中提取重要信息。在这种情况下，需要采用专门针对函数型或多变量输出的敏感性分析方法，例如 [CMW06], ，其中输出会在适当基中展开，然后将标准敏感性分析方法应用于该展开的系数；以及 [GJKL14、LMM11、AGS20],，其中提出了广义Sobol'敏感性指数。

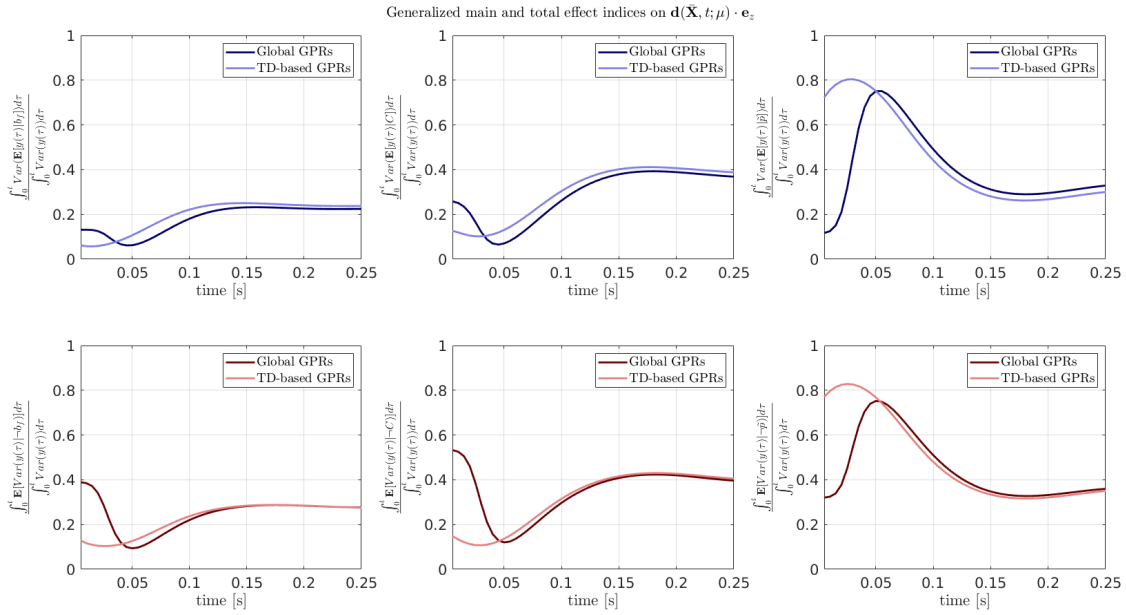

图 25：梁的变形。使用全局和基于张量分解的 POD-GPR 降阶模型计算的 b_f、C 和 $\widetilde{p}$ 的 Sobol'主效应（上）和总效应（下）指数随时间的变化。

测试 2：截断椭球主动收缩 对于第二个基准测试，我们再次考虑$N_{samples} = 200$，在本例中对应于 $N_{samples}(p + 2) = 2800$ 次POD-GPR降阶模型运行。通过Sobol敏感性分析得到的输入参数排序结果，尤其是对影响较小参数的识别，与Morris筛选结果一致。图26和图27展示了与第5.1.1节中所报告的相同点相关的感兴趣量的敏感性~指数，表明 T_a 具有很大影响，尤其会影响朝向基底的位移；此外，正如不同时刻总效应值较大所表明的那样，它还表现出很强的非线性交互作用。关于纤维

角度和心外膜 $\boldsymbol{\alpha}_{epi}$，其影响在第二个点的水平位移上清晰可见，该点位于心尖与基底之间。几乎所有与材料定律相关的参数的指数都非常小，这意味着在不显著影响感兴趣输出计算的情况下，可以在其变化范围内任意固定这些参数。

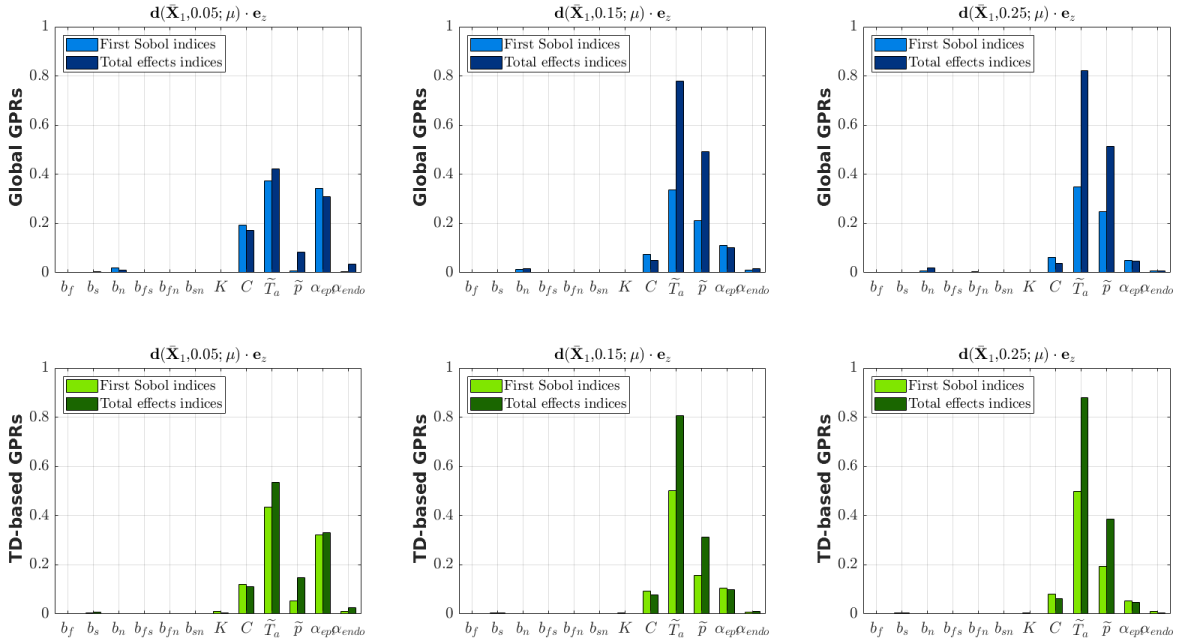

图 26：截断椭球主动收缩。使用全局（上）和基于张量分解的（下）POD-GPR降阶模型计算的 Sobol'指数柱状图。感兴趣量为心外膜上靠近心尖的点 P_1 沿 z 轴的位移，取自三个不同时刻。

5.2 参数估计

最后，我们讨论贝叶斯框架下参数估计问题的求解，即将所有输入都描述为随机变量，并求其概率密度函数（PDF）；随着新数据的不断获得，这些函数会从先验认知出发进行更新。

给定一个观测值 $\mathbf{y}_{obs}$，它对应于输出随机变量 $\mathbf{y}$ 的一次实现，我们希望推断产生这些数据的底层概率分布。请注意，与上一节不同，我们不假设 $\mathbf{y}$ 是单变量模型输出，因此记号有所变化。具体而言，我们将 $\mathbf{y}_{obs}$ 视为在 FOM 解$\mathbf{u}_h(\boldsymbol{\mu}^*)$ 上计算得到的感兴趣量向量，其中参数向量为 $\boldsymbol{\mu}^* \in \mathcal{P}$。为模拟实验误差，我们考虑加性、独立同分布的高斯噪声 $\boldsymbol{\varepsilon} \sim \mathcal{N}(0, \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\varepsilon}})$，因此$\mathbf{y}_{obs} = \mathbf{y}(\boldsymbol{\mu}^*) + \boldsymbol{\varepsilon}$。随机向量$\boldsymbol{\mu}$ 的后验概率密度函数可根据贝叶斯公式写为

$$\pi(\boldsymbol{\mu}|\mathbf{y}_{obs}) \propto \pi(\mathbf{y}_{obs}|\boldsymbol{\mu})\pi_0(\boldsymbol{\mu}),$$

其中

- $\pi(\mathbf{y}_{obs}|\boldsymbol{\mu})$ 是似然；
- $\pi_0(\boldsymbol{\mu})$ 是输入的先验概率密度函数，反映了人们对这些参数可能已有的认知。如果没有先验知识，可以使用非信息先验。

根据测量误差的假设，似然为 $\pi(\mathbf{y}|\boldsymbol{\mu}) = \pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{y} - y(\boldsymbol{\mu}))$，其中$\pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 是噪声 $\boldsymbol{\varepsilon}$的概率密度函数。最后，可以通过从后验分布中反复抽样，计算有用的统计指标，例如后验均值和协方差。

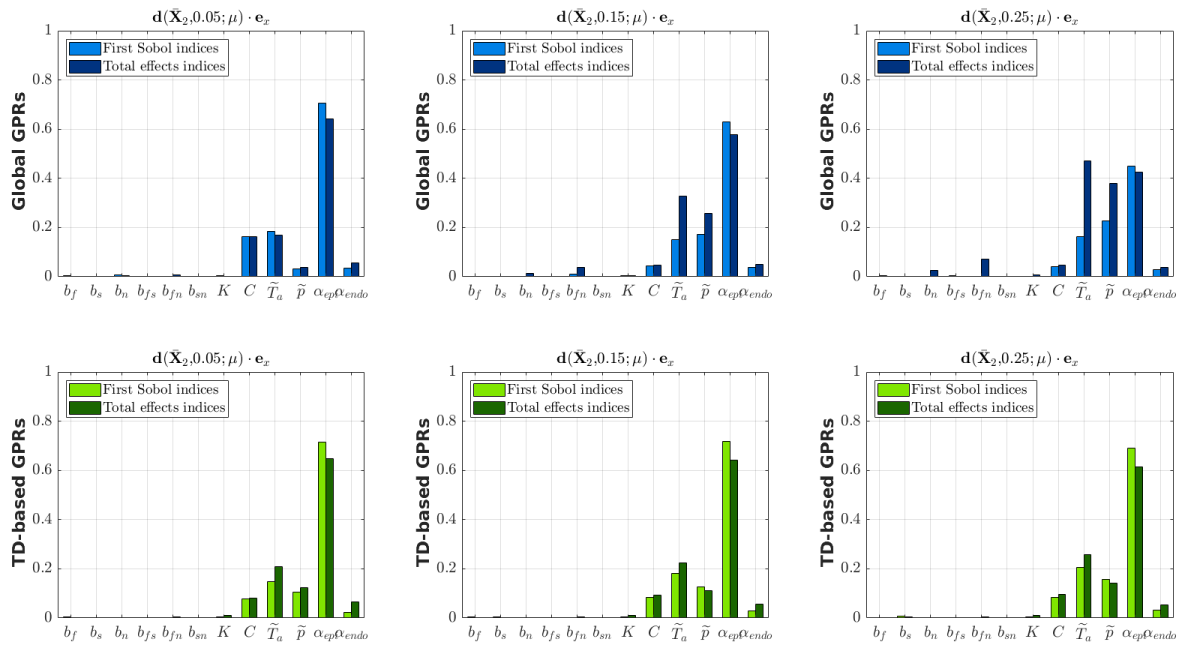

图27：截断椭球主动收缩。使用全局（上）和基于张量分解的（下）POD-GPR 降阶模型计算得到的 Sobol'指数柱状图。感兴趣量为位于心外膜上、心尖与基底之间的点 P_2 在 x 轴方向上的位移，取三个不同的时刻。

马尔可夫链蒙特卡洛（MCMC）方法是一类广为人知的概率分布抽样技术。本文采用 Metropolis-Hastings算法，其核心思想是生成一系列 N_{MC} 样本（ N_{MC} 固定但足够大），使得每次迭代时，都根据指定的提议分布 π_{prop}选择新的候选值，并依据似然和先验的性质，以一定概率接受或拒绝该候选值。为减少初始样本选择所引入的偏差，我们进行预热，即丢弃 MCMC 运行开始时的$N_{burn\text{-}in}$ 次迭代；此外，每隔 N_{thin}次迭代仅保留一个样本，因此链迭代的总次数为 $\lfloor (N_{MC}-N_{burn\text{-}in})/N_{thin} \rfloor$。

测试 1：梁的变形。回到第4.1.1节讨论的梁的变形问题，我们采用针对 $N_s = 50$ 构建的全局和基于张量分解的 POD-GPR 降阶模型。相对于用于求解正问题的全阶模型，这些模型的解具有 $L^2(\Omega_0)$-绝对误差，时间平均值为 $4\cdot 10^{-4}$。用于生成观测值$\mathbf{y}_{obs}$ 的目标参数 $\boldsymbol{\mu}^*$ 值，以及链的起始点 $\boldsymbol{\mu}^0$ 值，列于表12。Metropolis-Hastings算法的输入则列于表13。

	b_f	b_s	b_n	b_{fs}	b_{fn}	b_{sn}	K [千帕]	C [千帕]	$\widetilde{p}$ [千帕]
$(\cdot)^*$	6.2	1.2	2.8	5.8	5.8	2.8	27	1.2	0.0058
$(\cdot)^0$	8	2	2	4	4	2	50	2	0.004

表12：梁的变形。输入参数的马尔可夫链目标值和初始值。

对预热和抽稀操作后得到的 MCMC 链样本用于计算图28中报告的 $\boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\varepsilon}} = 10^{-5}\mathbb{I}$ 和 $10^{-6}\mathbb{I}$的后验密度函数，其中 $\mathbb{I}\in\mathbb{R}^{N_{QoI}\times N_{QoI}}$表示单位矩阵，且 $N_{QoI}=3$。此外，对于每个参数，链的起始点 $\boldsymbol{\mu}^0$ 和目标参数$\boldsymbol{\mu}^*$ 分别以黑色虚线和黑色实线表示。我们观察到

N_{MC}	10000	π_0	$\mathcal{U}[\mathcal{P}]$(非信息先验)
$N_{burn\text{-}in}$	500	$\pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}$	$\mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma_{\boldsymbol{\varepsilon}}^2\mathbb{I})$，其中 $\sigma_{\boldsymbol{\varepsilon}}^2 = 10^{-5}$ 或 10^{-6}
N_{thin}	4	π_{prop}	$\mathcal{U}[\mathcal{P}]$

表13：梁的变形。Metropolis-Hastings算法的输入。

使用 POD-GPR 降阶模型，我们能够正确识别与纤维方向材料刚度相关的参数 b_f、乘法常数 C 和压力斜率 $\widetilde{p}$，而其他参数则无法识别。这些结果证实了例如图 24 中报告的敏感性分析结果：该分析将 b_f，C 和 $\widetilde{p}$ 确定为影响最大的输入，而其他输入则不具影响力。至于生成 MCMC 链所需的 CPU 时间，全局方法的计算时间不到 12 分钟，而基于张量分解的方法的总运行时间约为 23 分钟。若依靠全阶模型，则需要 8 天 17 小时，这表明在多查询场景中采用高效降阶模型至关重要。

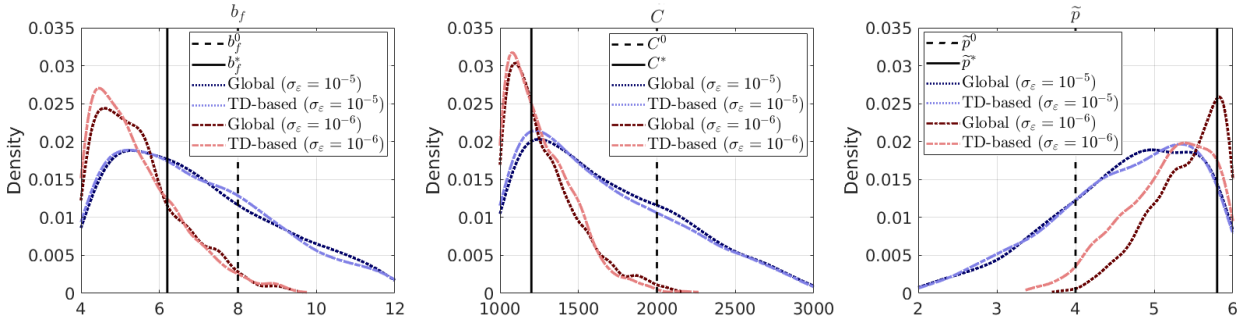

图28：梁的变形。对于两个不同的 σ_ε值，使用全局和基于张量分解的 POD-GPR 降阶模型计算的最具影响力输入参数的 MCMC 样本得到的拟合后验密度函数。竖线表示链的起始点（虚线）和目标值（实线）。

测试 2：截断椭球主动收缩。最后，我们对收缩截断椭球进行参数估计。然而，由于该基准测试的计算复杂度较高，且需要进行大量数值模拟，因此我们仅采用全局 POD-GPR 模型，该模型在在线阶段具有较短的 CPU 时间。回顾一下，在此情况下，相对于全阶模型，时间平均 $L^2(\Omega_0)$绝对误差约为 $3 \cdot 10^{-2}$ 。

马尔可夫链的起始点和目标值见表14。此外，假设对生成观测值的输入值有一定的先验知识，我们将均匀分布的支持范围缩小至整个参数域的一部分。MCMC模拟所采用的数值设置与表13所示的上一个测试案例相同，但链样本数量增加至 $N_{MC} = 25000$，高斯噪声的标准差现设为 $\sigma_\varepsilon = 10^{-7}$。

	b_f	b_s	b_n	b_{fs}	b_{fn}	b_{sn}	K [千帕]	C [千帕]	$\widetilde{p}$ [千帕]	$\widetilde{T}_a$ [千帕]	$\boldsymbol{\alpha}_{epi}$ [°]	$\boldsymbol{\alpha}_{endo}$ [°]
$(\cdot)^*$	7.16	2.21	1.79	4.42	3.58	2.21	56	1.7	66.3	14.4	-99.3	80.7
$(\cdot)^0$	8	2	2	4	4	2	50	2	60	15	-90	90

表14：截断椭球主动收缩。输入参数对应的马尔可夫链目标值和起始值。

使用全局 GPR 模型计算的概率密度函数、链起始点 $\boldsymbol{\mu}^0$ 和目标参数$\boldsymbol{\mu}^*$ 分别以深蓝色点线、黑色虚线和黑色实线显示于图 29 中，

~分别对应每个输入参数。我们观察到，正如敏感性分析结果所预期的那样，主动张力 T_a 和心外膜处的纤维角 $\boldsymbol{\alpha}_{epi}$ 均得到了正确推断；敏感性分析结果表明，这些输入总体上是影响最显著的输入。相应地，其余参数的识别效果通常较差。就生成 MCMC 链所需的 CPU 时间而言，全局方法需要 25 分钟的计算时间，而依赖全阶模型则需要超过 100 天；如果底层问题的维度 N_h 进一步增加，这种方法将在计算上变得难以承受。

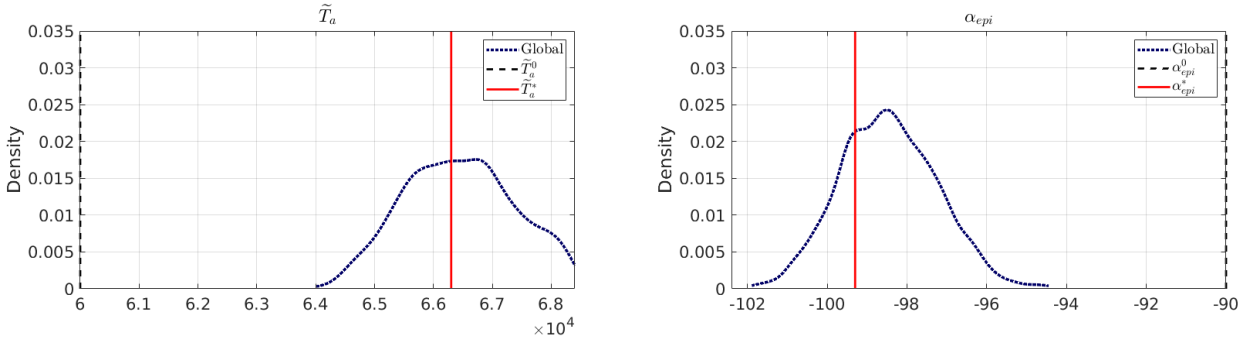

图 29：截断椭球的主动收缩。使用全局 POD-GPR 降阶模型计算得到的最具影响力输入参数的 MCMC 样本，构建出的拟合后验密度函数，适用于$\sigma_\varepsilon = 10^{-7}$。垂直线分别表示链的起始点（虚线）和目标值（实线）。

6 结论

本文采用 POD-GPR 降阶模型求解参数化非线性时变问题。与高保真全阶模型相比，该方法能够以低得多的计算成本，充分准确地捕捉状态解的动力学。具体而言，利用高斯过程回归近似 POD 投影系数，可以避免采用侵入式超降阶技术，同时仍能将物理规律嵌入降阶模型。这些方法的另一项优势是：一方面，当只需要特定空间位置或时间点的解时，无需计算完整的解动力学；另一方面，由于高斯过程的训练独立于输出量，因此无需预先指定输出量，感兴趣量可根据具体应用在线选取。

关于高斯过程回归的构建，我们比较了全局方法和基于张量分解的方法。我们测试了不同的核函数，以及用于高斯过程输入/输出数据的缩放技术，结果表明，ARD-RBF 协方差函数和标准化缩放更为理想。最后，通过针对训练集大小进行收敛性分析，我们找到了准确度与在线效率之间的良好平衡。

与高保真全阶模型相比，两种 POD-GPR 降阶模型的近似误差都很小，能够准确预测参数空间内新输入值对应的系统解，也能准确预测训练时未使用的时间点。就计算成本而言，基于张量分解的方法在离线阶段效率最高，尤其是在问题规模增大时。另一方面，全局 POD-GPR 降阶模型的在线效率更高，因此当需要进行数百或数千次输入-输出评估时，应优先采用该方法。最后，POD-GPR 降阶模型在解决多查询问题方面的能力也得到了成功验证，包括全局敏感性分析和参数估计。

致谢

LC 和 PZ 感谢伦巴第大区 NEWMED 项目在 POR FESR 2014–2020 资助框架下提供的部分支持。AM、SF 和 PZ 是国家高等数学研究所（INdAM）国家科学计算组（GNCS）的成员。SF 获得由欧盟下一代计划资助的 PNRR-PE-AI FAIR 项目支持。AM 和 PZ 感谢 GNCS 资助的“科学计算与机器学习在生物医学应用中的协同发展”项目提供的部分支持。

MG 感谢 *Sectorplan B`eta*（荷兰）在“计算科学数学”重点领域下提供的资金支持。

参考文献

[ABD+20] B Adams、W Bohnhoff、K Dalbey、M Ebeida、J Eddy、M Eldred、R Hooper、P Hough、K Hu、J Jakeman、M Khalil、K Maupin、JA Monschke、E Ridgway、A Rushdi、D Seidl、J Stephens、和 J Winokur。《Dakota：用于设计优化、参数估计、不确定性量化和敏感性分析的多层并行面向对象框架：6.13 版用户手册。技术报告，桑迪亚国家实验室（SNL-NM），新墨西哥州阿尔伯克基（美国），2020。

[ADVN13] C Audouze、F De Vuyst 和 PB Nair。参数化时变偏微分方程的非侵入式降阶建模。偏微分方程数值方法方程，29(5):1587–1628，2013。

[AGS20] Alen Alexanderian、Pierre A Gremaud 和 Ralph C Smith。基于方差的敏感性分析，用于时变过程。*Reliability Engineering & System Safety*，196:106722，2020。

[APLK19] F Alsayyari、Z Perk´o、D Lathouwers 和 JL Kloosterman。一种非侵入式降阶建模方法，采用本征正交分解和局部自适应稀疏网格。《计算物理学杂志》，399:108912，2019。

[AZF12] D Amsallem，MJ Zahr 和 C Farhat。基于局部降阶基的非线性模型降阶。*International Journal for Numerical Methods in Engineering*，92(10):891–916，2012年。

[BGB22] Nicol`o Botteghi、Mengwu Guo 和 Christoph Brune。动力学模型的深度核学习基于高维噪声数据的模型。*Scientific Reports*，12(1):21530，2022年。

[BGW15] P Benner、S Gugercin 和 K Willcox。基于投影的模型降阶方法综述针对参数化动力学系统。*SIAM Review*，57(4):483–531，2015年。

[BHKE20] A B¯erziņš、J Helmig、F Key 和 S Elgeti。标准化的非侵入式降阶建模采用不同的回归模型，并应用于复杂流动问题。*arXiv* 预印本 *arXiv:2006.13706* ，2020。

[BMNP04] M Barrault、Y Maday、NC Nguyen 和 AT Patera。一种“经验插值”方法：用于高效地对偏微分方程进行降阶基离散。*Comptes Rendus Mathematique*，339(9):667–672，2004。

[BMQ17] D Bonomi、A Manzoni 和 A Quarteroni。用于模型降阶的矩阵离散经验插值法在心脏力学中的非线性参数化问题。《计算力学与工程方法》，324:300–326，2017。

[CFM22] L Cicci、S Fresca 和 A Manzoni。Deep-hYROMnet：一种基于深度学习的算子近似-用于非线性参数化偏微分方程超降阶的逼近。《科学计算杂志》计算，93(2):57，2022年10月。

[CFMQ22] L Cicci、S Fresca、A Manzoni 和 A Quarteroni。基于深度学习的算子逼近，通过降阶建模高效逼近心脏力学通过基于深度学习的算子逼近进行降阶建模来处理力学问题。*arXiv* 预印本 *arXiv:2202.03904*，2022年。

[CGMH23] Paolo Conti、Mengwu Guo、Andrea Manzoni 和 Jan S Hesthaven。多保真度代理建模：使用长短期记忆网络。《计算力学与应用方法》与工程，404:115811，2023。

[CHJ+18] W Chen、JS Hesthaven、B Junqiang、Y Qiu、Z Yang 和 Y Tihao。用于流体动力学的贪婪非侵入式降阶模型。AIAA Journal，56(12):4927–4943，2018年。[CLLZ20] K Cheng、Z Lu、C Ling 和 S Zhou。代理模型辅助的全局敏感性分析：概述。Structural and Multidisciplinary Optimization，61(3):1187–1213，2020年。[CMW06] K Campbell、MD McKay 和 BJ Williams。当模型输出为函数时的敏感性分析。Reliability Engineering & System Safety，91(10):1468–1472，2006年。第四届模型输出敏感性分析国际会议（SAMO 2004）。[CMW15] T Cui、YM Marzouk 和 KE Willcox。用于逆问题贝叶斯求解的数据驱动模型降阶。International Journal for Numerical Methods in Engineering，102(5):966–990，2015年。[CS10] S Chaturantabut 和 DC Sorensen。通过离散经验插值进行非线性模型降阶。SIAM Journal on Scientific Computing，32(5):2737–2764，2010年。[DHO12] M Drohmann、B Haasdonk 和 M Ohlberger。基于经验算子插值的非线性参数化演化方程降阶基近似。SIAM Journal on Scientific Computing，34(2):A937–A969，2012年。[FDM21] S Fresca、L Dede' 和 A Manzoni。一种基于深度学习的非线性时变参数化偏微分方程降阶建模综合方法。Journal of Scientific Computing，87(2):1–36，2021年。[FM22] Stefania Fresca 和 Andrea Manzoni。POD-DL-ROM：通过本征正交分解增强基于深度学习的非线性参数化偏微分方程降阶模型。Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering，388:114181，2022年。[FMWvBW10] M Frangos、Y Marzouk、K Willcox 和 B van Bloemen Waanders。代理模型与降阶建模：大规模统计逆问题方法比较。大规模逆问题与不确定性量化，第123–149页，2010年。[FMZ23] N Franco、A Manzoni 和 P Zunino。一种针对参数依赖偏微分方程降阶建模的深度学习方法。Mathematics of Computation，92(340):483–524，2023。[GCM95] JM Guccione、KD Costa 和 AD McCulloch。搏动犬心脏左心室力学的有限元应力分析。Journal of biomechanics，28(10):1167–1177，1995年。[GH18] M Guo 和 JS Hesthaven。利用高斯过程回归进行非线性结构分析的降阶建模。Computer methods in applied mechanics and engineering，341:807–826，2018年。[GH19] M Guo 和 JS Hesthaven。面向时变问题的数据驱动降阶建模。Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering，345:75–99，2019。[GJKL14] F Gamboa、A J anon、T Klein 和 A Lagnoux。多维和函数型输出的敏感性分析。Electronic Journal of Statistics，8(1):575–603，2014年。[GLH+21] Z Gao、Q Liu、JS Hesthaven、BS Wang、WS Don 和 X Wen。利用人工神经网络对流动主导流动进行非侵入式降阶建模，并应用于瑞利-泰勒不稳定性。Commun. Comput. Phys.，30(1):97–123，2021年。[GMA+22] Mengwu Guo、Andrea Manzoni、Maurice Amendt、Paolo Conti 和 Jan S Hesthaven。使用人工神经网络进行多保真度回归：对参数依赖输出量的高效近似。Computer methods in applied mechanics and engineering，389:114378，2022年。[GMW22] Mengwu Guo、Shane A McQuarrie 和 Karen E Willcox。用于数据驱动降阶建模的贝叶斯算子推断。Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering，402:115336，2022年。

[GPy12] GPy。GPy：Python中的高斯过程框架。http://github.com/SheffieldML/ GPy，自2012年起。[GTS17] F Ghavamian、P Tiso 和 A Simone。用于应变软化黏塑性的POD–DEIM模型降阶。Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering，317:458–479，2017年。[Guo21] Mengwu Guo。关于将神经网络理解为高斯过程的简要说明。arXiv预印本arXiv:2107.11892，2021年。[HO03] G.A. Holzapfel 和 R.W. Ogden。《心血管系统软组织生物力学》。CISM国际机械科学中心。Springer Vienna，2003年。[HPR22] JS Hesthaven、C Pagliantini 和 G Rozza。时变问题的降阶基方法。《数值学报》，31:265–345，2022年。[HRS16] JS Hesthaven、G Rozza 和 B Stamm。参数化偏微分方程的认证降阶基方法。施普林格，2016年。[HU18] JS Hesthaven 和 S Ubbiali。利用神经网络对非线性问题进行非侵入式降阶建模。《计算物理学杂志》，363:55–78，2018年。[KGH20] M Kast、M Guo 和 JS Hesthaven。一种用于非线性问题降阶建模的非侵入式多保真度方法。Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering，364:112947，2020年。[LBN+17] Jaehoon Lee、Yasaman Bahri、Roman Novak、Samuel S Schoenholz、Jeffrey Pennington 和 Jascha Sohl-Dickstein。深度神经网络作为高斯过程。arXiv预印本arXiv:1711.00165，2017年。[LGA+15] S Land、V Gurev、S Arens、CM Augustin、L Baron、R Blake、C Bradley、S Castro、A Crozier、M Favino、TE Fastl、T Fritz、H Gao、A Gizzi、BE Griffith、DE Hurtado、R Krause、X Luo、MP Nash、S Pezzuto、G Plank、S Rossi、D Ruprecht、G Seemann、NP Smith、J Sundnes、JJ Rice、NA Trayanova、D Wang、ZJ Wang 和 SA Niederer。心脏力学软件的验证：用于测试主动与被动材料行为的基准问题与解答。《皇家学会会刊A辑：数学、物理与工程科学》，471(2184):20150641，2015年。[LGMS17] L Le Gratiet、S Marelli 和 B Sudret。基于元模型的敏感性分析：多项式混沌展开与高斯过程。载于《不确定性量化手册》，第1289–1325页。施普林格，2017年。[LM14] J Li 和 YM Marzouk。用于逆问题贝叶斯求解的代理模型自适应构建。SIAM Journal on Scientific Computing，36(3):A1163–A1186，2014年。[LMM11] Matieyendou Lamboni、Herv“e Monod 和 David Makowski。用于衡量动态模型中输入因子全局贡献的多变量敏感性分析。Reliability Engineering & System Safety，96(4):450–459，2011年。[LMQR14] T Lassila、A Manzoni、A Quarteroni 和 G Rozza。流体动力学中的模型降阶：挑战与展望，第235–273页。施普林格国际出版公司，查姆，2014年。[Mor91] MD Morris。用于初步计算实验的析因抽样方案。Technometrics，33:161–174，1991年。[Mur12] KP Murphy。《机器学习：概率视角》。麻省理工学院出版社，2012年。[NMA15] F Negri、A Manzoni 和 D Amsallem。通过矩阵离散经验插值实现参数化系统的高效模型降阶。《计算物理学杂志》，303:431–454，2015年。

[ODR20] G Ortali、N Demo 和 G Rozza。面向流体动力学工程问题的数据驱动 POD 框架中的高斯过程方法。arXiv 预印本 arXiv:2012.01989，2020年。[PW16] Benjamin Peherstorfer 和 Karen Willcox。用于基于投影的非侵入式模型降阶的数据驱动算子推断。《计算力学与工程方法》，306：196–215，2016年。[QMN16] A Quarteroni、A Manzoni 和 F Negri。《偏微分方程降阶基方法：导论》。施普林格国际出版公司，2016年。[QPO+18] E Qian、B Peherstorfer、D O'Malley、VV Vesselinov 和 K Willcox。方差和敏感性指数的多保真度蒙特卡罗估计。《SIAM/ASA 不确定性量化期刊》，6(2)：683–706，2018年。[RR16] A Radermacher 和 S Reese。将基于 POD 的模型降阶与经验插值应用于非线性弹性力学。International Journal for Numerical Methods in Engineering，107(6)：477–495，2016年。[Sal02] A Saltelli。充分利用模型评估来计算敏感性指数。《计算机物理通讯》，145(2)：280–297，2002年。[SDM21] M Salvador、L Dede' 和 A Manzoni。通过核 POD 和神经网络对参数化偏微分方程进行非侵入式降阶建模。《计算机与数学及其应用》，104：1–13，2021年。[SMPW19] R Swischuk、L Mainini、B Peherstorfer 和 K Willcox。基于投影的模型降阶：面向物理规律驱动机器学习的公式。《计算与流体》，179：704–717，2019年。[Sob90] IM Sobol'。非线性数学模型的敏感性估计。《数学建模》，2(1)：112–118，1990年。[Sud08] B Sudret。利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)：964–979，2008年。[TDR13] P Tiso、R Dedden 和 D Rixen。一种用于降低非线性结构有限元模型复杂度的修正离散经验插值法。载于《国际设计工程技术会议暨计算机与信息工程会议》，第55973卷，第V07BT10A043页。美国机械工程师学会，2013年。[TR13] P Tiso 和 DJ Rixen。用于有限元结构动力学的离散经验插值法。载于《非线性动力学专题》第1卷，第203–212页。施普林格，2013年。[WHM13] S Walton、O Hassan 和 K Morgan。利用本征正交分解和径向基函数对非定常流动进行降阶建模。《应用数学建模》，37(20-21)：8930–8945，2013年。[WHR19] Q Wang、JS Hesthaven 和 D Ray。利用人工神经网络对非定常流进行非侵入式降阶建模，并将其应用于燃烧问题。《计算物理学杂志》，384：289–307，2019年。[WR06] CKI Williams 和 CE Rasmussen。《用于机器学习的高斯过程》，第2卷（3）。麻省理工学院出版社，马萨诸塞州剑桥，2006年。[XFPN17] D Xiao、F Fang、CC Pain 和 IM Navon。一种用于一般时变非线性偏微分方程的参数化非侵入式降阶模型及其误差分析与应用。《计算力学与工程方法》，317：868–889，2017年。[YMK21] L Yang、X Meng 和 GE Karniadakis。贝叶斯物理信息神经网络：利用含噪数据求解偏微分方程正问题与逆问题。《计算物理学杂志》，425：109913，2021年。

[YYG19] J Yu、C Yan 和 M Guo。流体问题的非侵入式降阶建模：简要综述。机械工程师学会会刊 *G*辑：航空航天工程学报，233(16)：5896–5912，2019年。

[ZGH19] Zhenying Zhang、Mengwu Guo 和 Jan S Hesthaven。具有局部非线性效应的大型结构的模型降阶。《计算力学与工程方法》，353：491–515，2019。[ZLL21] Y Zhao、L Li 和 K Li。通过高斯过程回归对参数化电磁散射问题进行非侵入式降阶建模。*arXiv* 预印本 *arXiv:2103.12472*，2021。