arXiv:2304.06252v1 [stat.AP] 13 Apr 2023

基于自适应主动子空间的高维可靠性分析元建模

Jungho Kim[a]、Ziqi Wang*[a]、Junho Song†[b]

[a]*Department of Civil and Environmental Engineering, University of California, Berkeley, CA, USA*
[b]*Department of Civil and Environmental Engineering, Seoul National University, Seoul, Republic of Korea*

摘要

为应对高维概率空间中的可靠性分析挑战，本文提出了一种新的元建模方法，将主动子空间、异方差高斯过程和主动学习相结合。利用主动子空间识别高维计算模型的低维显著特征。通过异方差高斯过程在低维特征空间中构建计算替代模型。主动学习自适应地引导替代模型训练，使其趋向于对失效概率有显著贡献的关键区域。所提方法的一个关键特征是，将三个主要组成部分——主动子空间、异方差高斯过程和主动学习——相结合，以便与代理建模协同自适应地优化特征空间映射。这种耦合使所提方法能够通过低维替代建模准确求解复杂的高维可靠- 性问题。最后，通过研究高维非线性函数和结构工程应用的数值示例，验证所提方法的性能。

关键词：主动学习、主动子空间、降维、高维、元建模、结构可靠性

1. 引言

工程系统的性能评估会受到普遍存在的不确定性的显著影响，这些不确定性源于数据缺乏、建模近似，以及系统及其环境固有的随机性。因此，量化并理解不确定性的影响至关重要。前向不确定性量化（UQ）和可靠性分析是用于分析不确定性对工程系统影响的正式计算框架。前者旨在获取一般性的感兴趣量（QoI）统计量，而后者则关注失效概率。本研究探讨了前向不确定性量化和可靠性分析中尚未解决的挑战之一——在高维空间中高效估计稀有事件概率。

通常，稀有事件概率估计需要对计算模型进行大量评估，以求解多维积分。当（1）模型涉及复杂的高保真物理仿真，且（2）输入随机变量数量较多时，这一挑战会更加严峻。第一个问题使蒙特卡罗模拟（MCS）不再适用，因此应设计需要尽可能少的模型评估次数的“巧妙”算法。然而，第二个问题却有利于MCS；对于通用高维积分而言，MCS是一种颇具吸引力的选择（有时甚至是唯一选择）。针对稀有事件模拟，人们提出了多种先进的方差缩减技术，例如子集模拟 [1][2][3]和重要抽样[4][5]。然而，这些先进方法通常需要进行数千次模型评估，因此在计算模型代价高昂的问题中的应用受到限制。

*通讯作者：Ziqi Wang；ziqiwang@berkeley.edu
†通讯作者：Junho Song；junhosong@snu.ac.kr

用于解决这两个问题的元建模方法存在局限，因为高维元建模通常受到维数灾难的影响 [6][7][8]。一种自然的解决方案是将元建模与降维技术结合起来，分两步进行：（1）将输入变量映射到低维特征空间／流形；（2）在降维后的特征空间中构建替代模型。为此提出的若干方法仅利用输入变量的观测数据，即不与计算模型结合的无监督学习。例如，Kalogeris和Papadopoulos（2020年）提出了基于扩散映射的元建模，通过扩散算子的特征函数确定低维流形的参数化 [9]。Giovanis和Shields（2018年）提出了一种将流形学习与元模型相结合的方法，即将子空间结构化特征投影到Grassmann流形上[10]。随后，该框架通过结合多点非线性核降维技术得到了进一步发展，这种方法称为格拉斯曼扩散映射 [11][12]。无监督降维实现简单，在某些应用中可能效果良好。然而，当高维输入缺乏规则性，或低维表示呈现不适合元建模的复杂拓扑结构时，这种方法会显现出明显的局限性 [6][13][14]。

另一方面，作为一种监督式降维技术，主动子空间方法通过计算计算模型输出 [15] 切空间中的最大变化方向，为高维计算模型确定低维特征空间。与计算模型的紧密耦合有助于主动子空间方法克服无监督降维的局限性，但代价是需要进行梯度计算。主动子空间已越来越多地应用于前向不确定性量化和可靠性分析。例如，Jiang和 Li（2017年）以及 Zhou 和Peng（2021年）采用基于主动子空间的降维方案，以促进概率密度演化方法在高维地震可靠性分析中的应用 [16][17]。Navaneeth 和Chakraborty（2022年）提出了一种高维可靠性分析框架，将稀疏多项式混沌展开与主动子空间算法相结合 [18]。

在现有进展的基础上，本文提出一种新的自适应元建模方法：基于自适应主动子空间的异方差高斯过程（AaS-hGP）。在 AaS-hGP 中，通过在外循环中结合主动学习方案，主动子空间算法能够自适应地识别并优化高维计算模型的低维特征。针对给定的降维特征空间，构建异方差高斯过程（hGP），作为原始高维计算模型的低维代理模型。在所提方法中，hGP 有其优势，因为它能够处理降维特征空间中的低维代理建模所产生的预测误差。降维、代理建模与主动学习的结合，使 AaS-hGP 框架能够实现较高的计算效率和精度，从而为高维可靠性分析和稀有事件模拟提供了一种颇具吸引力的方案。

本文首先在第 2 节简要概述高维可靠性问题的一般形式，以及基于降维的元建模。第 3 节依次介绍所提 AaS-hGP 框架的以下细节：(1) 通过主动子空间识别低维特征；(2) 通过 hGP 代理建模在降维特征空间中进行响应预测；(3) 主动学习方案；以及 (4) AaS-hGP 算法。第 4 节中的数值示例展示了所提 AaS-hGP 方法在高维可靠性问题中的性能。第 5 节讨论了所提方法涉及的各种实际问题、局限性及未来研究课题。最后，第 6 节给出了总结和结论性意见。

2. 背景

2.1. 高维可靠性分析

可靠性定义为在考虑来自各种来源的不确定性后，系统保持正常运行的概率 [19][20]。考虑一个由 D维基本随机变量向量 $\boldsymbol{X} = [X_1, X_2, ..., X_D]$构成的系统，该向量代表不确定性的来源；以及一个由$\boldsymbol{X}$传播而来的性能度量 Y，代表系统发生故障的倾向。性能度量 Y 表示为

$$Y = \mathcal{M}(\boldsymbol{X}) , \tag{1}$$

其中，$\mathcal{M}:\ \boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^D\mapsto Y\in\mathbb{R}$ 表示一种通常涉及基于非线性物理的模拟的一般数学模型。

在可靠性问题中，失效概率 P_f 可表示为 D 重积分

$$P_f=\mathbb{P}\left(\mathcal{M}\left(\boldsymbol{X}\right)\geq y_f\right)=\int_{\mathcal{M}(\boldsymbol{x})\geq y_f} f_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x}=\int_{\mathbb{R}^D}\mathbb{I}\left(\mathcal{M}\left(\boldsymbol{x}\right)\geq y_f\right)f_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x}\,, \tag{2}$$

其中，$\mathbb{P}(\cdot)$ 表示概率，$f_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})$ 表示随机向量$\boldsymbol{X}$的联合概率密度函数（PDF），$\boldsymbol{x}$ 是 $\boldsymbol{X}$ 的实现值，y_f 是用于定义失效的预设阈值，而 $\mathbb{I}(\mathcal{M}(\boldsymbol{x})\geq y_f)$ 表示二元指示函数：当 $\mathcal{M}(\boldsymbol{x})\geq y_f$ 时取“1”，否则取“0”。值得注意的是，在可靠性领域，失效事件 $\mathcal{M}(\boldsymbol{x})\geq y_f$ 通常表示为 $G(\boldsymbol{x})\leq 0$，其中 $G(\cdot)$ 是极限状态函数。我们采用当前的符号表示法，以突出可靠性与采用通用计算模型 $\mathcal{M}$ 的不确定性量化（UQ）表述之间的紧密联系。求解式（2）通常需要对模型 $\mathcal{M}$进行大量仿真；一般而言，随着 $\boldsymbol{X}$ 的维数增加，[21][22] 也会变得愈发困难。

2.2. 降维与元建模

降维的目的是用低维特征向量 $\boldsymbol{\Psi}\in\mathbb{R}^{d_r}$表示高维特征向量。降维可表示为

$$\boldsymbol{\Psi}=\mathcal{H}\left(\boldsymbol{X};\boldsymbol{\theta}_{\mathcal{H}}\right),\quad \hat{\boldsymbol{X}}=\mathcal{H}^{-1}\left(\boldsymbol{\Psi};\boldsymbol{\theta}_{\mathcal{H}}\right), \tag{3}$$

其中，$\mathcal{H}:\ \boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^D\mapsto\boldsymbol{\Psi}\in\mathbb{R}^{d_r}$ 表示降维函数，$\boldsymbol{\theta}_{\mathcal{H}}$ 表示用于表征降维的参数，D 和 d_r 分别表示向量 $\boldsymbol{X}$ 和$\boldsymbol{\Psi}$的维度，$\mathcal{H}^{-1}:\ \boldsymbol{\Psi}\in\mathbb{R}^{d_r}\mapsto\hat{}\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^D$ 表示重构函数。请注意，由于降维映射通常不是双射，重构函数 $\mathcal{H}^{-1}$ 往往是近似的。已有多种方法用于构造 $\mathcal{H}(\cdot)$，以进行可靠性分析和优化（全面综述见参考文献[23]）；这些方法可分为线性降维方法和非线性降维方法。线性方法的示例包括主成分分析、多维尺度分析、费希尔线性判别分析和局部保持投影；非线性方法的示例包括核主成分分析、拉普拉斯特征映射、扩散映射、等距映射、局部线性嵌入和自编码器。降维的最优参数通常通过最小化原始 $\boldsymbol{X}$ 与其重构结果$\hat{}\boldsymbol{X}=\mathcal{H}^{-1}(\mathcal{H}(\boldsymbol{X}))$之间的距离度量来获得。

元建模的动机 [24][25][26] 很简单：如果能够用廉价的代理模型有效替代昂贵的计算模型，那么可靠性与不确定性量化分析以及其他外循环模拟都将显著提速。在降维特征空间中构建的 $Y=\mathcal{M}(\boldsymbol{X})$元模型可表示为

$$\hat{Y}=\hat{\mathcal{M}}\left(\boldsymbol{\Psi};\boldsymbol{\theta}_{\hat{\mathcal{M}}}\right)=\hat{\mathcal{M}}\left(\mathcal{H}\left(\boldsymbol{X};\boldsymbol{\theta}_{\mathcal{H}}\right);\boldsymbol{\theta}_{\hat{\mathcal{M}}}\right), \tag{4}$$

其中 $\hat{}\,\mathcal{M}:\boldsymbol{\Psi}\in\mathbb{R}^{d_r}\mapsto\hat{}Y\in\mathbb{R}$ 是一个元模型，$\boldsymbol{\theta}_{\hat{}\mathcal{M}}$ 表示元模型的参数。降维与元建模相结合的最终目标是准确估计感兴趣量，即 P_f 式（2）中的量。因此，与其分别训练降维模型和元模型，不如对二者进行联合训练，以尽可能减小失效概率估计误差。

3. 所提方法：AaS-hGP

在本节中，我们通过开发一种自适应主动子空间元建模框架，来解决具有高维数和计算成本高昂模型的可靠性分析问题（图 1）。同时，还引入了一种主动学习算法，通过自适应选择训练点来训练元模型，从而实现高效收敛。

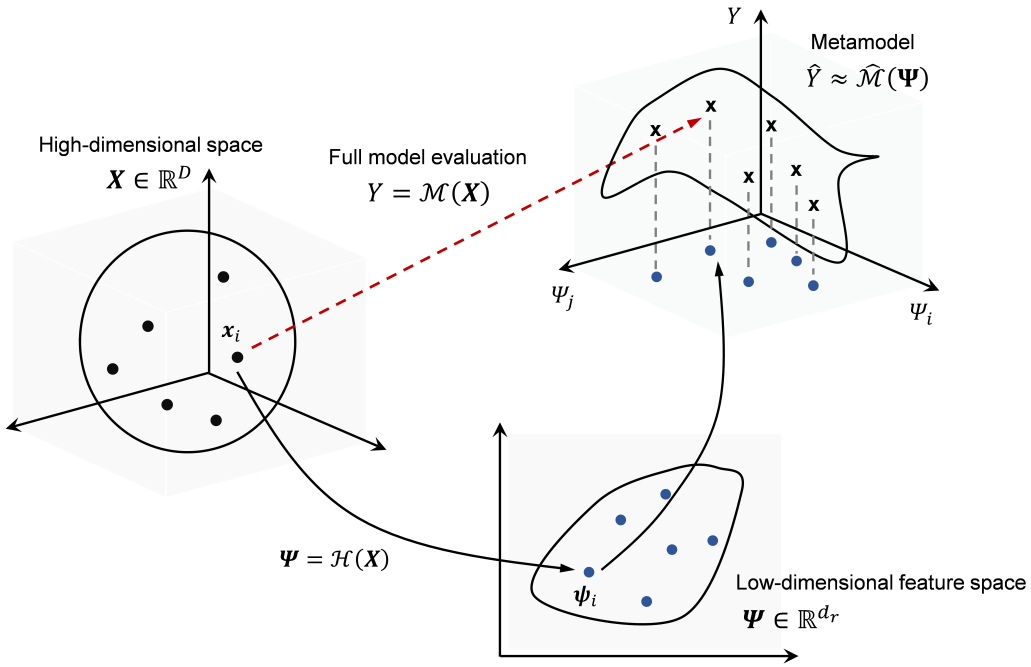


图1: **所提出的高维可靠性分析元建模框架示意图。**

3.1. 通过主动子空间识别低维特征

无监督降维不使用计算模型中的信息 $\mathcal{M}$。这种做法假设输入 $\boldsymbol{X}$ 具有低维表示，这对于某些可靠性问题可能并不适用，例如具有弱相关随机变量的问题（关于各种无监督降维方案的初步研究，参见附录A）。作为一种监督式降维方法，主动子空间利用 $\mathcal{M}$ 的切空间来识别低维特征。以下介绍AaS-hGP背景下主动子空间方案的详细信息。

假设模型 $\mathcal{M}$ 在式(1)中相对于$f_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})$连续、可微且平方可积，则主动子空间是模型响应在其中表现出显著变化的子空间。它由对称半正定$\ll D$矩阵的相对少量（ $D \times D$个）特征向量 $\boldsymbol{C}$ 定义，表示为 [15]

$$\boldsymbol{C} = \int \nabla_{\boldsymbol{X}} \mathcal{M}(\boldsymbol{x}) \nabla_{\boldsymbol{X}} \mathcal{M}(\boldsymbol{x})^T h_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x} = \mathbb{E}_h \left[\nabla_{\boldsymbol{X}} \mathcal{M}(\boldsymbol{x}) \nabla_{\boldsymbol{X}} \mathcal{M}(\boldsymbol{x})^T \right], \tag{5}$$

其中， $\nabla_{\boldsymbol{X}} \mathcal{M}(\boldsymbol{x})$表示 $\mathcal{M}(\cdot)$相对于 $\boldsymbol{x}$ 的梯度（列向量），而 $\mathbb{E}_h[\cdot]$ 表示相对于“学习核” $h_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})$的期望。在所提出的 AaS-hGP 框架中，学习核 $h_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})$由试验设计（DoE）方案控制。例如，如果采用基于 $f_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})$随机样本的全局试验设计，那么 $h_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x}) = f_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})$。如果由主动学习算法指导试验设计，$h_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})$将在学习过程中不断变化。请注意，无需预先指定$h_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})$的参数形式，因为 $h_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})$的样本将根据预先指定的试验设计方案生成。矩阵 $\boldsymbol{C}$ 为对称半正定矩阵，因此可进行实特征值分解：

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{W} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{W}^T, \quad \boldsymbol{\Lambda} = diag(\lambda_1, ..., \lambda_D), \tag{6}$$

其中 $\boldsymbol{\Lambda}$是一个二 对角矩阵，其元素为 $\boldsymbol{C}$ 按降序排列的非负特征值
阶，即 $\lambda_1 \geq ... \geq \lambda_D \geq 0$，而 $\boldsymbol{W}$ 是 $D \times D$ 正交矩阵，其列对应于

$\boldsymbol{C}$的特征向量。可以将特征值矩阵和特征向量矩阵划分为

$$\boldsymbol{\Lambda} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Lambda}_r & \\ & \boldsymbol{\Lambda}_s \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{W} = [\boldsymbol{W}_r \ \boldsymbol{W}_s], \tag{7}$$

其中， $\boldsymbol{\Lambda}_r = diag(\lambda_1, ..., \lambda_{d_r})$表示前 d_r 个特征值（也是最大的特征值）， $\boldsymbol{W}_r$ 表示 $\boldsymbol{W}$的前 d_r列。假设 λ_{d_r} 与 λ_{d_r+1} 之间存在显著的谱隙，则 $\mathcal{M}(\boldsymbol{X})$可以用由以下子空间定义的低维表示来近似:

$$\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{W}_r^T \boldsymbol{X}, \tag{8}$$

其中， $\boldsymbol{\Psi} \in \mathbb{R}^{d_r}$ 是低维特征向量，称为活跃变量，由投影矩阵 $\boldsymbol{W}_r$确定。投影矩阵 $\boldsymbol{W}_r$ 定义了在假设 $\boldsymbol{W}_s$ 方向上的变化可以忽略不计的情况下， $\mathcal{M}(\boldsymbol{X})$对沿相应特征向量方向的$\boldsymbol{X}$ 扰动作出的平均响应。在实现过程中，投影算子由基于梯度样本和降维维数参数 d_r得到的数值 C 确定。

降维维数 d_r 可能是一个关键参数，会显著影响所提方法的准确性。因此，理想情况下应通过 d_r 代理建模来确定，即根据其对替代模型预测准确性的实测贡献来确定d_r 。考虑 n 个 $\boldsymbol{x}_i$的训练样本， $i = 1, ..., n$，相应的 $y_i = \mathcal{M}(\boldsymbol{x}_i)$，以及 $\nabla y_i = \nabla_{\boldsymbol{X}} \mathcal{M}(\boldsymbol{x}_i)$。下面给出一种递归算法（算法1），利用以下均方误差度量来确定 d_r：

$$\varepsilon_d = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \hat{\mathcal{M}} \left(\boldsymbol{\psi}_i; d_r, \boldsymbol{\theta}_{\hat{\mathcal{M}}} \right) \right)^2}, \tag{9}$$

其中 $\boldsymbol{\psi}_i$ 表示 $\boldsymbol{x}_i$的特征空间投影，即 $\boldsymbol{\psi}_i = \boldsymbol{W}_r^T \boldsymbol{x}_i$； $\hat{}\ \mathcal{M}(\cdot)$ 和 $\boldsymbol{\theta}\ \hat{}_{\mathcal{M}}$ 分别表示元模型预测和相应的元建模参数。元建模过程的详细内容将在下一节介绍。式（9）中的误差度量反映了 d_r 对代理建模误差的贡献。从 $d_r = 1$开始，AaS-hGP 迭代增加 d_r ，直到 ε_d 小于指定的阈值 ε_d^t。需要注意的是，每个学习步都会监测误差度量，以便根据当前训练数据集确定最优维数。此外还要指出，给定数据集（$\boldsymbol{x}_i$， y_i， ∇y_i），递归过程在确定 d_r时无需额外评估模型函数$\mathcal{M}$。

Al算法1 确定 AaS-hGP 中最优降维维数的自适应规则 d_r^*

在每次学习迭代中，给定 n 个训练三元组 $[\boldsymbol{x}_i, y_i, \nabla y_i]^T$, $i = 1, ..., n$，以及式 (5) 中的平均导数泛函矩阵 $\boldsymbol{C}$:$d_r \leftarrow 1$；确定式 (8) 所描述的 d_r 维特征映射；预测 $\boldsymbol{\psi}_i = \boldsymbol{W}_r^T \boldsymbol{x}_i$ 处的替代模型响应，即 $\hat{}y_i = \hat{}\mathcal{M}\left(\boldsymbol{\psi}_i;\ d_r, \boldsymbol{\theta}\hat{}_{\mathcal{M}}\right)$；计算式 (9) 中的 ε_d ；当 $\varepsilon_d > \varepsilon_d^t$ 时，执行 $d_r \leftarrow d_r + 1$；确定式 (8) 所描述的 d_r 维特征映射；预测 $\boldsymbol{\psi}_i = \boldsymbol{W}_r^T \boldsymbol{x}_i$ 处的替代模型响应，即 $\hat{}y_i = \hat{}\mathcal{M}\left(\boldsymbol{\psi}_i;\ d_r, \boldsymbol{\theta}\hat{}_{\mathcal{M}}\right)$；计算式 (9) 中的 ε_d ；结束 $d_r^* \leftarrow d_r$;

3.2. 使用异方差高斯过程在低维特征空间中估计响应

采用基于高斯过程（GP）的元模型，将低维特征向量 $\boldsymbol{\psi}_i$ 映射为模型预测值 $\hat{}y_i$。考虑一组样本的主动子空间映射，$\mathcal{W}_\mathcal{D} = [\boldsymbol{W}_r^T\boldsymbol{x}_i,\ldots, \boldsymbol{W}_r^T\boldsymbol{x}_n]^T$以及相应的模型响应观测数据 $\mathcal{Y}_\mathcal{D} = [\mathcal{M}(\boldsymbol{x}_i)\ldots, \mathcal{M}(\boldsymbol{x}_n)]^T$。降维特征空间中的观测数据（$\mathcal{W}_\mathcal{D}$, $\mathcal{Y}_\mathcal{D}$）不可避免地会包含噪声，这些噪声源于数据有限以及特征空间投影固有的误差，进而导致特征空间中替代模型过拟合 [27][6]。因此，元建模应纳入降维特征表示可能带来的变异性。为此，采用能够纳入输入相关噪声的异方差高斯过程（hGP）模型，在降维特征空间中进行模型响应预测。

引入hGP模型：高斯分布的异方差噪声 $\varepsilon(\boldsymbol{\psi})$ 后，模型响应 y 表示为以下

$$y = f(\boldsymbol{\psi}) + \varepsilon(\boldsymbol{\psi}), \quad \varepsilon(\boldsymbol{\psi}) \sim N(0, r(\boldsymbol{\psi})), \tag{10}$$

其中，$f(\boldsymbol{\psi})$ 是响应的潜在函数，假设其为均值为 $\mu_f(\boldsymbol{\psi})$、协方差核为 $k_f(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\psi}')$ 的高斯过程的一次实现；$r(\boldsymbol{\psi}) = exp(g(\boldsymbol{\psi}))$ 是异方差噪声的方差，其参数化方式可确保方差为正。$g(\boldsymbol{\psi})$ 是一个潜在函数，通过 GP 先验 $g(\boldsymbol{\psi}) \sim GP(\mu_0, k_g(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\psi}'))$ 引入，用于处理依赖于输入的噪声。hGP模型由两个潜在函数$f(\boldsymbol{\psi})$ 和 $g(\boldsymbol{\psi})$ 及其（增广）超参数组成，即 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\mathcal{M} = \{\boldsymbol{\theta}_f, \boldsymbol{\theta}_g, \mu_0\}$，其中 $\boldsymbol{\theta}_f$和 $\boldsymbol{\theta}_g$分别表示核函数 $k_f(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\psi}')$ 和 $k_g(\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\psi}')$ 的参数。因此，附录 B 中所述的传统 GP 模型解析响应预测方程不适用于 hGP 模型。

异方差 GP 模型的超参数可以通过边缘化变分近似方案来确定。L´azaro-Gredilla 等人（2013）利用两组参数——变分均值向量 $\boldsymbol{m}$ 和协方差矩阵 $\boldsymbol{V}$ [28]——提出了精确边缘似然的以下解析可处理下界：

$$b_{MV}(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{V}) = \ln f_N(\boldsymbol{y}_\mathcal{D}; \boldsymbol{0}, \boldsymbol{K_f} + \boldsymbol{R}) - \frac{1}{4}tr(\boldsymbol{V}) - KL\left(f_N(\boldsymbol{g}; \boldsymbol{m}, \boldsymbol{V}) || f_N(\boldsymbol{g}; \mu_0\boldsymbol{1}, \boldsymbol{K_g})\right), \tag{11}$$

其中，$f_N(\cdot)$ 表示多元高斯分布的概率密度函数，$tr(\cdot)$ 是迹算子，$KL(\cdot|\cdot)$ 表示两个概率密度函数之间的 Kullback-Leibler 散度，$\boldsymbol{K_f}$ 和 $\boldsymbol{K_g}$ 分别是 $f(\boldsymbol{\psi})$ 和 $g(\boldsymbol{\psi})$ 的协方差矩阵，$\boldsymbol{R}$是一个对角矩阵，其元素为 $R_{i,\,i} = \exp(m_i - V_{i,\,i}/2)$ $i = 1, \ldots\ldots n$。随后，可以通过最大化该下界来估计超参数。

给定超参数后，可以推导出 y_* 在点 $\boldsymbol{\psi}_*$ 处的预测均值和方差函数 [28]

$$\mu_{\hat{Y}}(\boldsymbol{\psi}_*) = \boldsymbol{k}_{\boldsymbol{f}_*}^T(\boldsymbol{K_f} + \boldsymbol{R})^{-1}\boldsymbol{y}_\mathcal{D}, \tag{12}$$

$$\sigma_{\hat{Y}}^2(\boldsymbol{\psi}_*) = \exp(\chi_* + \eta_*^2/2) + \gamma_*^2, \tag{13}$$

其中 χ_*、η_*^2 和 γ_*^2 表示由两个潜在函数 $f(\boldsymbol{\psi})$ 和 $g(\boldsymbol{\psi})$ 的核矩阵所描述的参数集合，即 $\chi_* = \boldsymbol{k}_{\boldsymbol{g}_*}^T(\boldsymbol{\Lambda} - \frac{1}{2}\boldsymbol{I})\boldsymbol{1} + \mu_0$、$\gamma_*^2 = k_{f_{**}} - \boldsymbol{k}_{\boldsymbol{f}_*}^T(\boldsymbol{K_f} + \boldsymbol{R})^{-1}\boldsymbol{k}_{\boldsymbol{f}_*}$和 $\eta_*^2 = k_{g_{**}} - \boldsymbol{k}_{\boldsymbol{g}_*}^T(\boldsymbol{K_g} + \boldsymbol{\Lambda}^{-1})^{-1}\boldsymbol{k}_{\boldsymbol{g}_*}$；$\boldsymbol{k}_{\boldsymbol{f}_*}$ 和 $\boldsymbol{k}_{\boldsymbol{g}_*}$ 分别表示潜在函数 $f(\boldsymbol{\psi})$ 和 $g(\boldsymbol{\psi})$ 在预测位置 $\boldsymbol{\psi}_*$ 与 n 个观测点 $\mathcal{W}_\mathcal{D}$ 之间的协方差函数向量；$\boldsymbol{\Lambda}$ 是一个引入的半正定对角矩阵，用于以降阶形式重新参数化变分参数 $\boldsymbol{m}$ 和 $\boldsymbol{V}$。

方程$\mu_{\hat{Y}}(\boldsymbol{\psi}_*)$ 和 $\sigma_{\hat{Y}}^2(\boldsymbol{\psi}_*)$ 分别出现在式（12）和（13）中，在异方差噪声假设下，分别作为特征向量 $\boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{\psi}_*$ 处模型响应 Y预测的均值和方差。请注意，这两个量都可用于主动学习方案，下一节将对此进行介绍。图 2 展示了一个 hGP预测示例，其中跨特征变量 ψ的投影观测值（红点）具有异方差噪声。

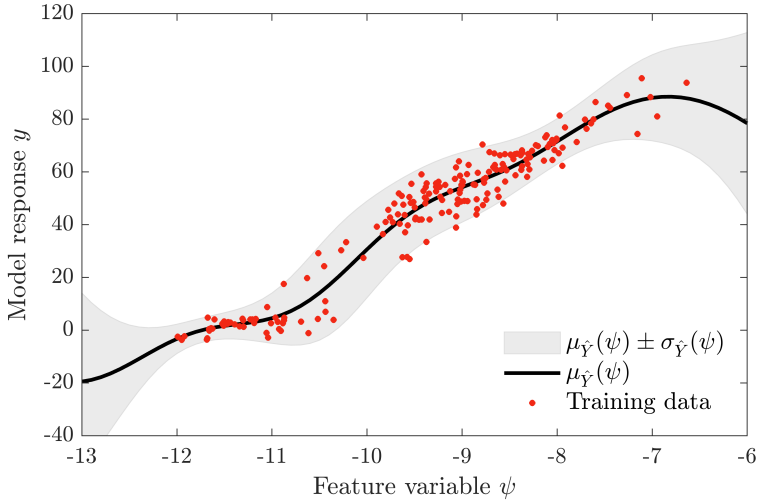


图 2 *Due to imperfections of the feature space projection*：**使用特征变量的 hGP 模型及其预测示意图。**, *the feature-response samples contain heteroscedastic noise. The hGP model has the desirable property to capture such heteroscedastic noise.*

3.3. 通过主动学习自适应训练元模型

所提出的 AaS-hGP 方法采用自适应 DoE 策略，利用有限的训练点 [24][29]训练替代模型。由于 AaS-hGP 的计算目标是较小的失效概率，因此我们需要提高元模型在对失效概率有显著贡献的关键区域中的保真度。因此，学习准则应设计为：（1）引导训练过程趋近于极限状态面，即 $\{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^D : \mathcal{M}(\boldsymbol{x}) = y_f\}$；（2）确保训练点稀疏分布，从而有效捕捉模型在关键区域 $\mathcal{M}$ 中的特性。

因此，构建学习准则，使下一个训练点 $\boldsymbol{\psi}^*$ 在满足 $\boldsymbol{\psi}^*$ 接近极限状态面的约束下，最大化其与现有训练点之间的距离，同时 hGP 的预测方差较大，即:

$$\boldsymbol{\psi}^* = \underset{\boldsymbol{\psi} \in \mathcal{W}_c}{\arg\max} \min_{\boldsymbol{\psi}' \in \mathcal{W}_\mathcal{D}} \|\boldsymbol{\psi} - \boldsymbol{\psi}'\|, \tag{14}$$

其中， $\mathcal{W}_\mathcal{D}$ 是一组现有训练点，用于构建当前主动子空间和元模型； $\mathcal{W}_c$ 是由下式定义的关键候选训练集:

$$\mathcal{W}_c = \left\{ \boldsymbol{\psi} \in \mathcal{W}_0 : \frac{|y_f - \hat{\mu}_{\hat{Y}}(\boldsymbol{\psi})|}{\hat{\sigma}_{\hat{Y}}(\boldsymbol{\psi})} \leq \varepsilon_c \right\}, \tag{15}$$

其中， $\mathcal{W}_0$ 是由 $\boldsymbol{X}$ 的高维随机样本经概率密度函数 $f_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})$映射得到的随机样本候选训练集； ε_c是学习的截断值（建议取$\varepsilon_c = 2.0$）；$\hat{\mu}_{\hat{Y}}(\boldsymbol{\psi})$和$\hat{\sigma}_{\hat{Y}}(\boldsymbol{\psi})$分别是根据式（12）和式（13）得到的位置 $\boldsymbol{\psi}$处预测结果的 hGP 均值和标准差。式（14）和式（15）体现了探索与利用之间的权衡，用于选择位于目标失效面附近且与现有训练点差异最大的训练样本。确定下一个训练点 $\boldsymbol{\psi}^*$后，即可确定相应的高维输入 $\boldsymbol{x}^*$ ，并计算模型响应 $y^* = \mathcal{M}(\boldsymbol{x}^*)$及其梯度 $\nabla y^* = \nabla_{\boldsymbol{X}} \mathcal{M}(\boldsymbol{x}^*)$，以更新主动子空间和 hGP 模型。需要注意的是，训练点 $\boldsymbol{\psi}^*$ 并非通过在 $\mathbb{R}^{d_r}$ 中搜索来选取，而是从预先离散化、且已知（$\boldsymbol{x}$， $\boldsymbol{\psi}$）配对关系的训练候选点集合中搜索得到。因此，对于离散化训练候选点集合中的所有点， $\boldsymbol{\psi}$ 与 $\boldsymbol{x}$ 之间的映射都是逐点一一对应的。这一特性进一步表明，AaS-hGP 无需重构映射 $\mathcal{H}^{-1}$: $\boldsymbol{\Psi} \in \mathbb{R}^{d_r} \mapsto \hat{X} \in \mathbb{R}^D$。

ˆ 在主动学习过程中，使用训练好的 hGP 模型和随机样本估计每个学习步的失效概率 P_f，即

$$\hat{P}_f \cong \mathbb{P}\left(\hat{\mathcal{M}}(\boldsymbol{\Psi}) \geq y_f\right) = \frac{\sum_{k=1}^{N} \mathbb{I}\left(\mu_{\hat{Y}}(\boldsymbol{\psi}_k) \geq y_f\right)}{N}, \tag{16}$$

其中，$\mathbb{I}\left(\mu_{\hat{Y}}(\boldsymbol{\psi}_k) \geq y_f\right)$ 是利用式（12）中的响应预测构造的二元指示函数，当 $\mu_{\hat{Y}}(\boldsymbol{\psi}_k) \geq y_f$ 时取“1”，否则取“0”。失效概率估计的相对变化用于构造 AaS-hGP 的收敛准则：

$$\epsilon_p^{(m)} = \left| \frac{\hat{P}_f^{(m)} - \hat{P}_f^{(m-1)}}{\hat{P}_f^{(m)}} \right|, \tag{17}$$

其中 ˆ$P_f^{(m)}$ 表示在第 m 个学习步中对失效概率的估计值。随着主动学习的进行，AaS-hGP 会监测方程 $\epsilon_p^{(m)}$（17）中连续两个步骤的 值是否变得足够小 且 趋于停滞 。具体而言，在每次迭代中，都会计算第 m 个学习步的值 $\epsilon_1^{(m)} = \epsilon_p^{(m)}$，以及定义为 $\epsilon_2^{(m)} = |\epsilon_1^{(m-1)} - \epsilon_1^{(m)}|$ 的收敛“趋势”。如果 $\epsilon_1^{(m)}$ 和 $\epsilon_2^{(m)}$ 分别小于指定的容差 ϵ_1^{tol}和 ϵ_2^{tol}，则终止主动学习迭代。

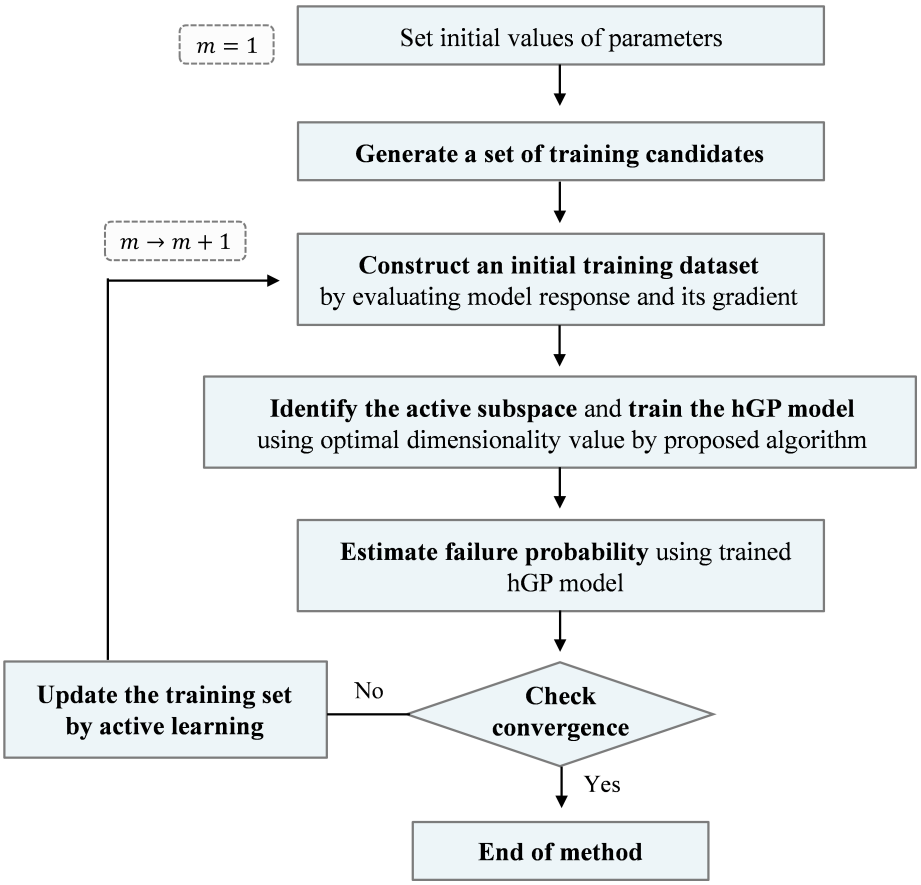


图3： **AaS-hGP 算法流程图**。

3.4. AaS-hGP 算法

图3中的流程图展示了所提出的 AaS-hGP 高维可靠性分析方法的基本步骤，概述如下：

步骤 1：初始化

- 设置收敛容差 ϵ_1^{tol}、 ϵ_2^{tol}和 ε_d^t，并确定初始训练集的大小、n_0以及样本的大小， N、 $n_0 \ll N$。
- 生成一组训练候选点 $\mathcal{X}_0 = \{\boldsymbol{x}_k, k = 1, ..., N\}$，来自 $f_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{x})$。
- 生成一个初始训练集 $\mathcal{X}_{\mathcal{D}} = \{\boldsymbol{x}_i, i = 1, ..., n_0\}$。
- 对于 $\mathcal{X}_{\mathcal{D}}$ 中的每个样本，评估模型响应及其梯度，以获得集合 $\mathcal{Y}_{\mathcal{D}}$ 和 $\nabla\mathcal{Y}_{\mathcal{D}}$。

步骤 2：识别主动子空间并训练 hGP模型

- 给定 $\mathcal{X}_{\mathcal{D}}$， $\mathcal{Y}_{\mathcal{D}}$ 和 $\nabla\mathcal{Y}_{\mathcal{D}}$，识别由式(8) 表示的主动子空间映射，并使用算法 1估计的最优维数值，在主动子空间中构建 hGP模型。对于算法1中的每个试验维数值，使用 $\mathcal{W}_{\mathcal{D}}$ 和 $\mathcal{X}_{\mathcal{D}}$，通过最大化式(11)来训练 hGP模型，其中 $\mathcal{W}_{\mathcal{D}}$ 是将 $\mathcal{X}_{\mathcal{D}}$ 投影到当前主动子空间中得到的。

步骤 3：使用 hGP模型进行蒙特卡罗模拟

- 使用 hGP模型进行蒙特卡罗模拟，以获得失效概率。

步骤 4：收敛性检查

- 如果 满足停止准则后，终止算法并输出失效概率；否则 ,继续进行**步骤 5**。

步骤 5：通过主动学习更新训练集

- 将 $\mathcal{X}_0$ 投影到当前主动子空间中，得到 $\mathcal{W}_0$。
- 求解式（14），以获得下一个训练点 $\boldsymbol{\psi}^* \in \mathcal{W}_0$ 并找到相应的 $\boldsymbol{x}^* \in \mathcal{X}_0$。
- 将新的训练点 $\boldsymbol{x}^*$ 添加到训练集 $\mathcal{X}_{\mathcal{D}}$中，即 $\mathcal{X}_{\mathcal{D}} \leftarrow \mathcal{X}_{\mathcal{D}} \cup \{\boldsymbol{x}^*\}$。
- 在新的训练点 $\boldsymbol{x}^*$处计算 $y^* = \mathcal{M}(\boldsymbol{x}^*)$ 和 $\nabla y^* = \nabla_{\boldsymbol{X}}\mathcal{M}(\boldsymbol{x}^*)$。
- 用 $\mathcal{Y}_{\mathcal{D}} \leftarrow \mathcal{Y}_{\mathcal{D}} \cup \{y^*\}$ 和 $\nabla\mathcal{Y}_{\mathcal{D}} \leftarrow \nabla\mathcal{Y}_{\mathcal{D}} \cup \{\nabla y^*\}$更新 $\mathcal{Y}_{\mathcal{D}}$ 和 $\nabla\mathcal{Y}_{\mathcal{D}}$。
- 生成一组新的训练候选点 $\mathcal{X}_0$。
- 返回**步骤 2**。

4. 数值示例

通过三个高维算例展示所提 AaS-hGP 方法及其性能。第一个算例是一个非线性数学模型，用于测试该方法在不同维度下的性能。接下来的两个算例分别为一个空间桁架结构和一座钢格构输电塔，以进一步研究所提方法在实际结构可靠性问题中的适用性。

4.1. 例 *1*：非线性数学函数

考虑如下非线性数学函数： [30][18]

$$Y = \mathcal{M}(\boldsymbol{X}) = \prod_{j=1}^{D} \mathcal{M}_j(X_j), \quad \mathcal{M}_j(X_j) = \frac{4X_j - 2 + \lambda_j}{1 + \lambda_j}, \tag{18}$$

其中 X_j， $j = 1, \ldots\ldots, D$ 是在 $[0, 1]$范围内均匀分布的基本随机变量， D 是维数，且 λ_j 是表征输入随机变量 X_j 对输出 Y影响的非负模型参数。较小的 λ_j 表示 X_j具有显著的一阶效应。因此，式（18）中的模型函数适合用于检验所提出的方案能否识别出正确的低维子空间。参数值设定为 $\lambda_j = 1$当 $j = 1, \ldots\ldots$，4 时，以及 $\lambda_j = 500$ 在其他情况下。因此，在该参数设定下，有效维数为 4。需要注意的是，一般而言，传统的无监督降维技术（例如PCA 和扩散映射）无法有效解决当前问题，因为所有随机变量彼此独立，即 $\boldsymbol{X}$的概率空间不具有低维结构。失效事件定义为模型输出超过预设阈值 $y_f = 0.65$。研究了四个维数值：D=30、50、70 和 100。

按照第3节所述的流程，采用 50 个初始试验设计点应用 AaS-hGP 方法。收敛容差 ϵ_1^{tol}和 ϵ_2^{tol}设为 0.001。图 4 展示了均方误差（见公式（9））随主动子空间维数变化的情况，这是算法1 的副产品。结果表明， $d_r = 4$ 足以实现较小的预测误差，因此，所提方案确定了合适的降维方式，与先验设定的参数值一致。图 5 展示了所提方法在最终步骤之前探索的所有训练数据点，这些点被投影到降维特征空间的不同平面中，即（ψ_1， ψ_2）、（ψ_1， ψ_3）和（ψ_2， ψ_3）平面。图5第一列中的灰色圆圈表示从原始样本空间映射而来的候选训练集样本。黑色加号标记表示用于构建初始元模型的初始训练点。红色叉号标记表示主动学习阶段自适应添加的训练点。图 5 第二列和第三列比较了降维特征空间中的元模型预测与原始模型响应；蓝色圆圈和红色叉号分别表示被识别为位于安全区域和失效区域的样本。结果证实，元模型预测与实际模型响应一致，且所提方法能够捕捉降维特征空间中的所有失效模式。

可靠性分析结果如表 1 所示，其中列出了通过 20 次独立运行得到的失效概率估计，以及模型评估的平均次数。结果与直接蒙特卡罗模拟、一阶可靠性方法（FORM） [19], 和 AK-MCS 方法 [31]的结果进行了比较。此外，还列出了基于随机选取的（全局）DoE 点进行主动子空间元模型预测所得到的“非自适应”结果（仅使用第 3.4 节 AaS-hGP 算法中的步骤 2–3）。直接蒙特卡罗模拟结果$P_{f,MCS}$ 被视为参考解。可靠性方法的准确性和效率通过 N_s进行比较，即模型函数评估次数、梯度评估次数 N_g、失效概率估计 P_f、广义可靠性指标 $\beta_g = -\Phi^{-1}(\hat{P}_f)$，以及相对于参考解的相对误差，即 $\varepsilon_p = |\hat{P}_f - \hat{P}_{f,MCS}|/\hat{P}_{f,MCS}$。对于 AaS-hGP， N_s 是初始训练点数量（n_0）与主动学习过程中模型评估次数之和。如表 1 所示，由于采用线性近似，FORM 分析产生了较大的误差。AK-MCS 需要大量模型模拟（超过 3,000 次），但仍无法得到准确结果。需要指出的是，对于 $D > 50$ ，由于输入变量数量庞大，主动学习和元建模效果不佳，因此 AK-MCS 分析不可行。结果表明，所提方法仅需少量模型函数调用和梯度调用，便能在高维问题中准确估计失效概率。相比之下，“非自适应”方法即使使用更多训练点，误差仍然较大。

图6 展示了四种不同维度下 AaS-hGP分析的收敛历史。图中将估计的失效概率归一化，即除以 $P_{f,MCS}$。在每种情况下，随着迭代次数（训练点）增加，失效概率估计逐渐趋近参考解。不同维度下所需学习迭代次数的箱线图如图 7所示，这表明

AaS-hGP 能够以有限的计算预算高效处理高维可靠性问题。

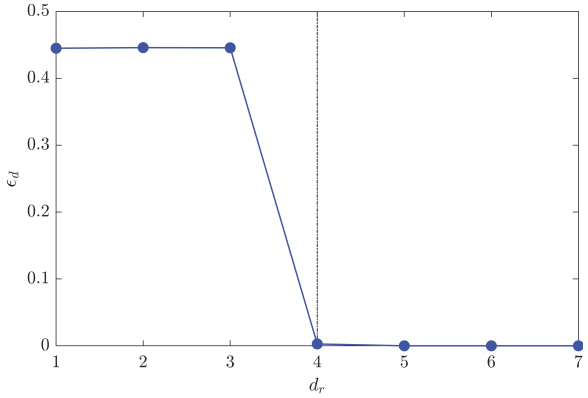


图 4：**误差　　代理建模作为降维维数函数的误差。** *This figure is a byproduct of Algorithm 1. It suggests that the algorithm correctly identifies the effective dimensionality as* $d_r = 4$.

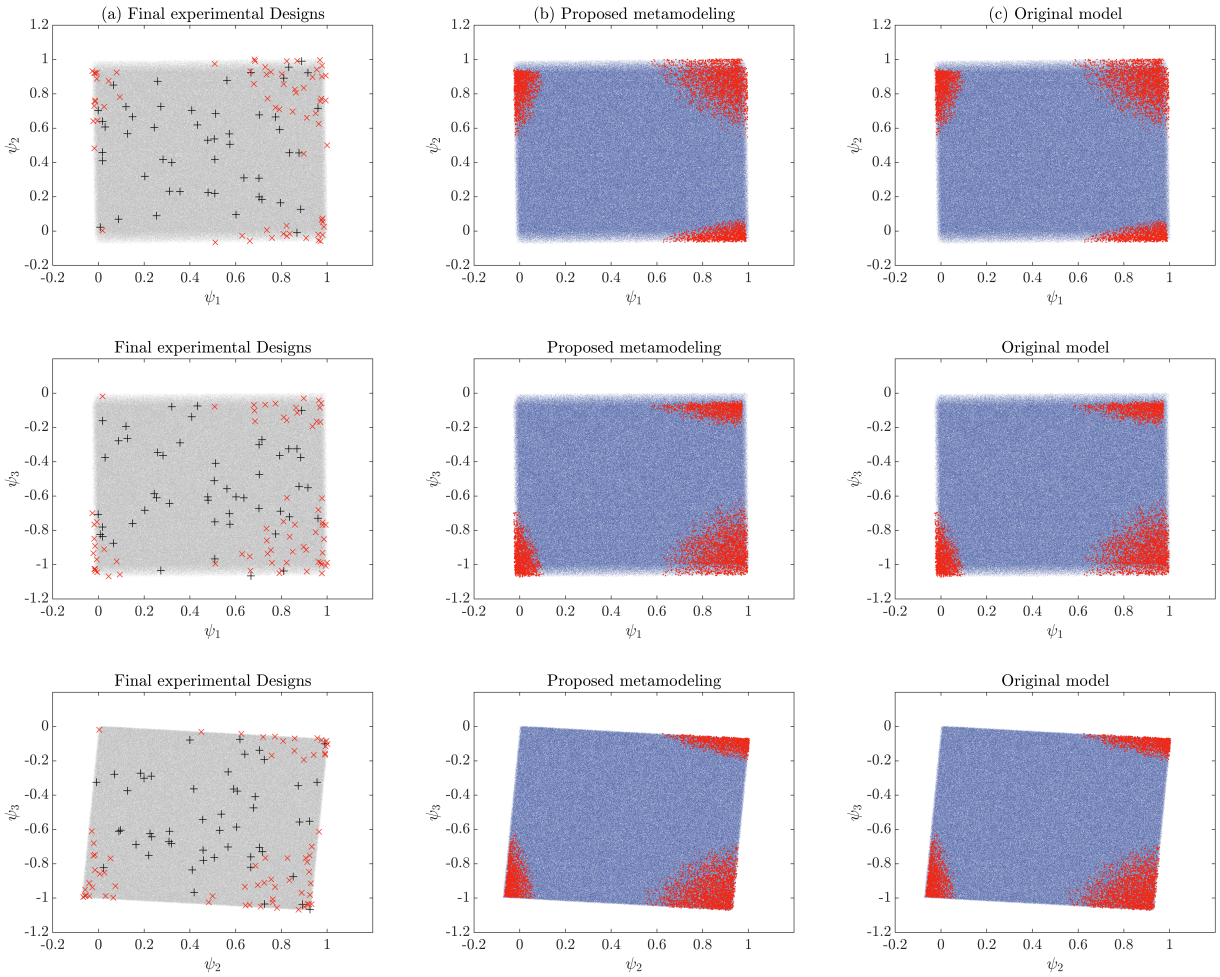


图 5： **例 1 最终学习阶段降维特征空间不同平面中模型响应的比较**($D = 50$)**：(a) 最终试验设计，(b) 所提方法的预测结果，(c) 原始模型响应。**

表 1： **AaS-hGP 与其他可靠性分析方法在例 1 中的性能**。

维度	方法	$\hat{P}_f$	N_s	N_g	$\hat{\beta}_g$	ε_p(%)
$D=30$	MCS	5.77×10^{-3}	10^6	-	2.53	-
	FORM	3.86×10^{-4}	12	12	3.36	93.31
	AK-MCS	4.00×10^{-5}	$>3,000$	-	3.94	99.30
	AaS-hGP（含全局设计实验）	5.81×10^{-3}	300	300	2.52	0.69
	AaS-hGP	5.80×10^{-3}	104	104	2.52	0.52
$D=50$	MCS	4.96×10^{-3}	10^6	-	2.58	-
	FORM	2.18×10^{-5}	16	16	4.09	99.56
	AK-MCS	8.20×10^{-5}	$>3,000$	-	3.77	98.35
	AaS-hGP（使用全局设计实验）	4.51×10^{-3}	450	450	2.61	9.07
	AaS-hGP	4.95×10^{-3}	123	123	2.58	0.21
$D=100$	MCS	3.33×10^{-3}	10^6	-	2.71	-
	FORM	1.78×10^{-8}	26	26	5.51	99.99
	AK-MCS	-	-	-	-	-
	AaS-hGP（采用全局设计实验）	3.06×10^{-3}	700	700	2.74	8.11
	AaS-hGP	3.33×10^{-3}	147	147	2.71	0.15

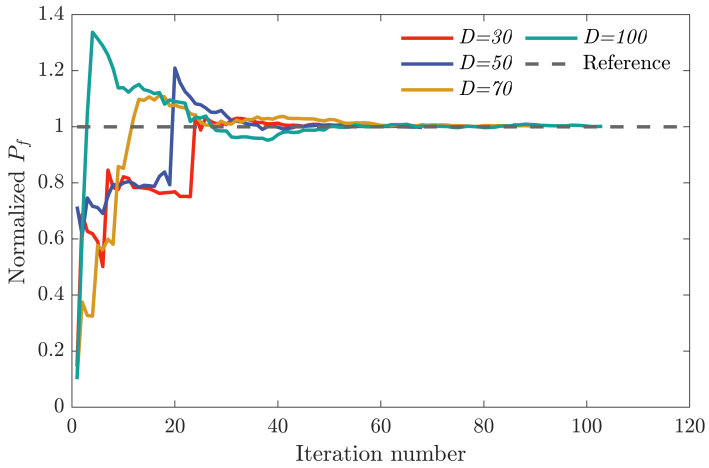


图 6: **例 1 所提方法的收敛历史**.

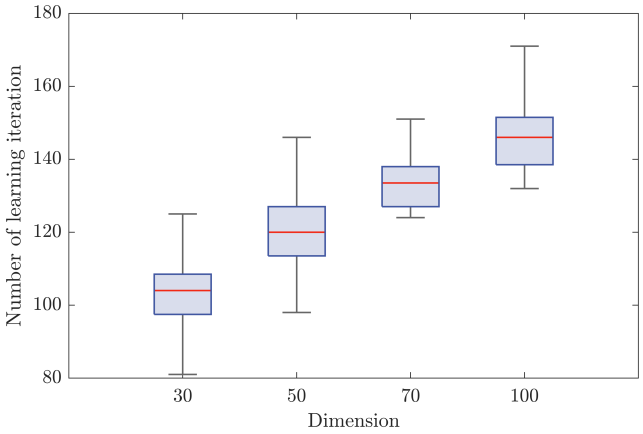


图7： **不同维度下例 1所需的学习迭代次数。**

4.2. 示例 *2*：空间桁架结构

作为一项工程应用，本例研究图中所示的空间桁架结构 8 [32]。该桁架由二十五个单元和十个节点组成，承受五个水平载荷（P_1，P_2，P_4，P_6和 P_7）以及两个垂直载荷（P_3 和 P_5）。模型响应函数定义为系统的最大位移，可表示为

$$Y = \mathcal{M}(\boldsymbol{X}) = \max\left(u_h(\boldsymbol{X}), u_v(\boldsymbol{X})\right), \tag{19}$$

其中 u_h 和 u_v 表示结构顶端水平方向和竖直方向的峰值位移。随机向量 $\boldsymbol{X}$ 包含五十七个相互独立的随机变量，即 $\boldsymbol{X} = [X_1, X_2, ..., X_{57}]$，这些随机变量会影响结构响应。这些随机变量与外部荷载、横截面积和弹性模量相关。表 2 总结了所有随机变量的分布模型和参数。结构失效定义为最大响应超过预先规定的阈值 $y_f = 0.45$，单位为 $y_f = 0.45$。

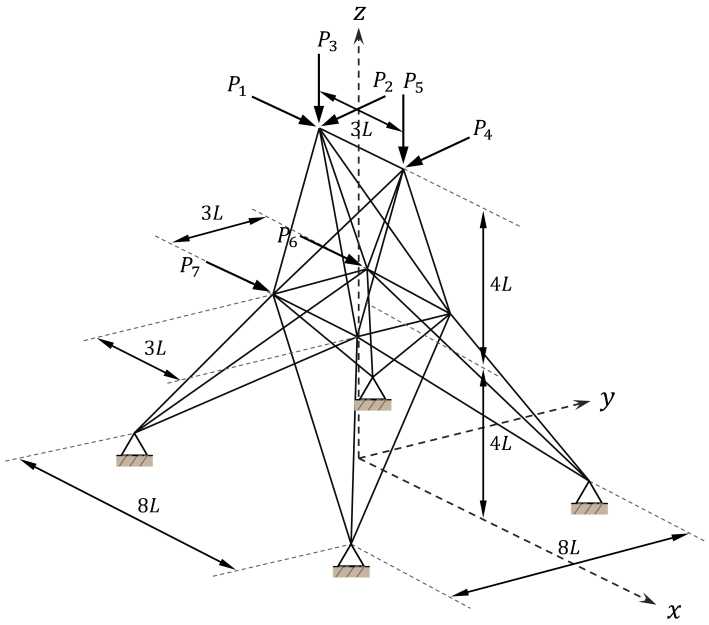


图 8： **空间桁架结构。**

表 2: **示例 2 中随机变量的分布模型和参数。**

变量编号	随机变量	分布	Mean	变异系数
1	$P_1\,(N)$	对数正态分布	1000	0.1
2-5	$P_2 - P_5\,(N)$	对数正态分布	10000	0.05
6	$P_6\,(N)$	对数正态分布	600	0.1
7	$P_7\,(N)$	对数正态分布	500	0.1
8-32	$E_1 - E_{25}(m^2)$	对数正态分布	10^7	0.05
33	$A_1\,(m^2)$	高斯分布	0.4	0.1
34-37	$A_2 - A_5(m^2)$	高斯分布	0.1	0.1
38-41	$A_6 - A_9(m^2)$	高斯分布	3.4	0.1
42-43	$A_{10} - A_{11}(m^2)$	高斯分布	0.4	0.1
44-45	$A_{12} - A_{13}(m^2)$	高斯分布	1.3	0.1
46-49	$A_{14} - A_{17}(m^2)$	高斯分布	0.9	0.1
50-53	$A_{18} - A_{21}(m^2)$	高斯分布	1.0	0.1
54-57	$A_{22} - A_{25}(m^2)$	高斯分布	3.4	0.1

表3 展示了估计的失效概率以及模型函数和梯度评估的次数。蒙特卡罗模拟结果通过 10^6 结构仿真获得。需要指出的是，即使使用大量训练点，AK-MCS 方法也无法提供可靠的估计。需要指出的是，AaS-hGP 生成了与参考解 $P_{f,MCS}$ 一致的准确结果，与其他可靠性方法相比，计算成本显著降低。

图 9 比较了元模型预测与原始模型响应，它们以主动子空间中第一（即最主要）特征 ψ_1 为横轴绘制。蓝色圆圈和红色叉号标记分别表示安全域和失效域中的样本。结果证实，所提出的元建模方法能够生成与实际模型响应一致的预测。图 10 展示了模型响应 y 与代理模型预测值 $\hat{y}$的散点图。理想情况下，散点图应呈现一条直线。结果再次证实，所提出的方法适用于高维可靠性分析，且具有较高准确性。

从不同初始训练点开始的AaS-hGP分析的收敛历史如图11所示。在每种情况下，尽管初始训练数据集具有随机性，经过100次学习迭代后，失效概率估计值都接近参考解。收敛历史证实，AaS-hGP的主动学习方案能够有效确保该方法对初始训练点可能存在的变化具有稳健性。

表 3: **性能　　与其他可靠性分析方法相比，AaS-hGP 在空间桁架示例中的表现**

方法	$\hat{P}_f$	N_s	N_g	$\hat{\beta}_g$	ε_p(%)
MCS	2.61×10^{-4}	10^6	-	3.47	-
FORM	1.08×10^{-7}	43	43	5.18	99.96
AK-MCS	2.86×10^{-5}	$> 3,000$	-	4.02	89.05
AaS-hGP（使用全局试验设计）	1.72×10^{-4}	500	500	3.58	34.10
AaS-hGP	2.63×10^{-4}	153	153	3.47	0.76

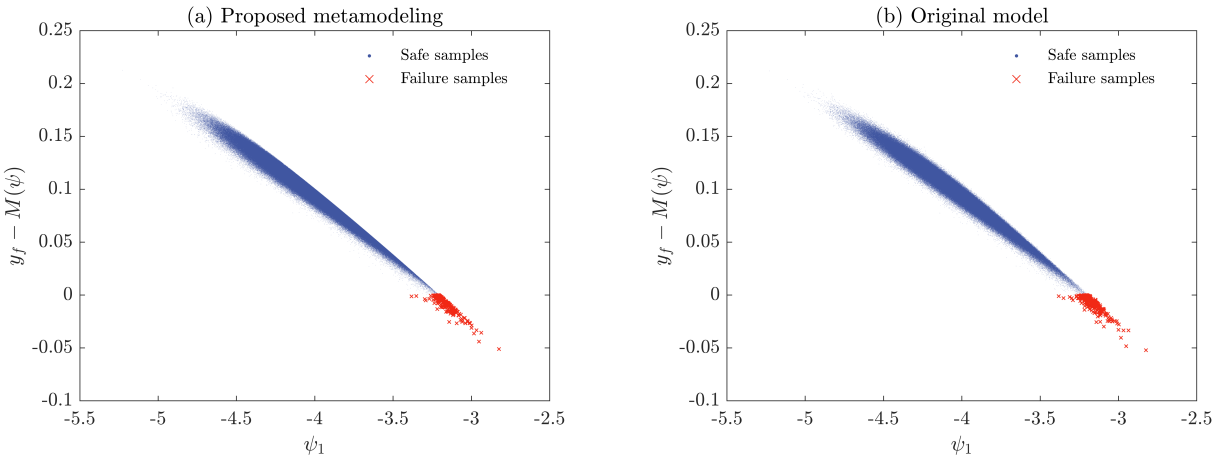


图9：**示例 2 最终学习阶段模型响应与主导特征的关系：(a) 所提方法的预测结果和 (b) 原始模型响应。**

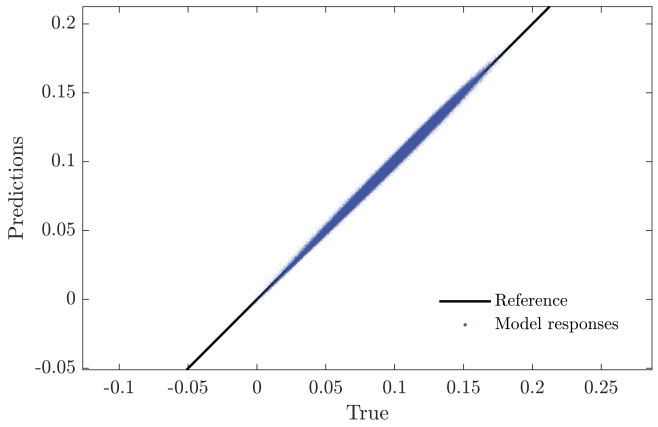


图10：**示例 2 中通过所提出的元模型预测和蒙特卡罗模拟得到的模型响应散点图。**

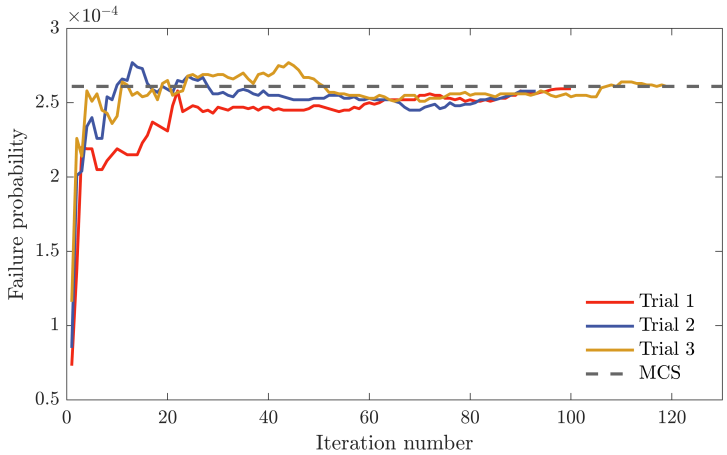
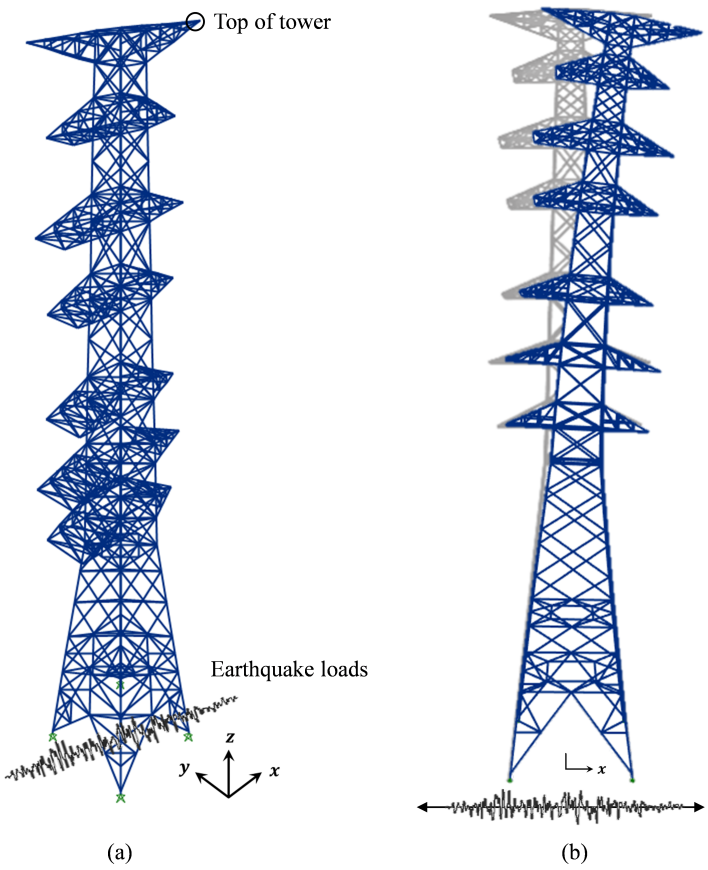


图11：**示例 2的所提方法收敛历史。**

4.3. 示例 *3*：钢格构输电塔

本示例研究一座承受地震荷载的输电塔。图12展示了该输电塔的有限元模型，该模型由 SAP2000 软件创建，用于进行非线性时程分析 [33]。塔高为 86.6m，每个区段由若干带有横担的连续塔段组成。假设基础为刚性，即模型在底部固定。采用时间步长为 $\Delta t = 0.02$ 的埃尔森特罗地震实测地震动记录来模拟地震荷载，并沿横向施加，如图 12所示。

将二十九个框架的横截面积 A 以及三种钢材的材料属性，即弹性模量 E和屈服强度 f_y视为随机变量，这些变量可能对塔架的失效产生主导影响 [34][22]。表4 总结了三十五个随机变量的分布模型及参数。模型函数 $\mathcal{M}$ 为塔架顶部沿横向的响应；当顶部位移超过阈值 0.193m时，即定义为失效。采用有限差分法计算梯度，针对每个变量维度进行额外仿真；对于基于物理的模型，也可以采用其他方法。（关于梯度计算的讨论，参见第5.1 节。）AaS-hGP 方法采用了一个包含 50 个样本的初始训练集。同样，表5 证实，AaS-hGP 能够成功处理这一涉及有限元仿真的高维可靠性问题。



Figu图 12：**有限元模　　型输电塔：(a) 透　　视图和 (b) 正视图**　　.

表 4: **输电塔随机变量的分布模型和参数。**

随机变量	分布	Mean	变异系数
A_i (mm^2)	高斯分布	μ_{A_i}	0.07
E_{s240} (Mpa)	对数正态分布	20万	0.03
E_{s250} (Mpa)	对数正态分布	200,000	0.03
E_{s335} (Mpa)	对数正态分布	200,000	0.03
$f_{y,s240}$ (Mpa)	对数正态分布	240	0.05
$f_{y,s250}$ (Mpa)	对数正态分布	250	0.05
$f_{y,\ s335}$ (Mpa)	对数正态分布	335	0.05

* 对于 $i = 1$, ..., 29 * μ_{A_i}，它们是确定性参数，在输电塔结构的每个框架中均在 [344, 26195]范围内变化

表 5: **与输电塔示例的其他可靠性分析方法相比，AaS-hGP 的性能。**

方法	$\hat{P}_f$	N_s	N_g	$\hat{\beta}_g$	ε_p(%)
MCS	4.50×10^{-3}	10^4	-	2.61	-
AK-MCS	-	-	-	-	-
AaS-hGP (采用全局设计实验)	8.78×10^{-4}	100	100	3.13	80.49
AaS-hGP	4.53×10^{-3}	86	86	2.61	0.66

5. 实际问题、局限性与未来方向

5.1. 梯度计算

值得关注的一个实际问题是，主动子空间方法需要对计算模型进行梯度评估。在计算机辅助工程中，基于物理的模型的梯度通常可通过有限元软件获得，例如 OpenSees [35]。如果无法直接求导，则可采用数值微分方案（例如有限差分法、复数值方法和基于伴随变量的策略），利用对各变量施加的扰动和／或物理方程的平衡条件来近似计算梯度 [36]。

近年来，正向和反向自动微分（也称为算法微分）日益普及，并被视为有限差分法和直接微分法的替代方案。自动微分重新定义了梯度算子的语义，使其按照微积分的链式法则传播导数 [37][38]。它通过在计算机代码执行期间累积数值来计算梯度，从而生成数值导数评估结果，而非导数表达式；其所需计算资源与原始模型评估所兼容。通用自动微分工具箱 [39][37] 已开发出来，并应用于设计优化、计算流体力学和最优控制等多种工程问题；这使得主动子空间方法的梯度计算变得轻而易举。

5.2. 低概率问题

本文通过将失效概率降至 10^{-4}来测试所提方法的性能。如果关注极小的失效概率（例如 10^{-7}，则与直接蒙特卡罗模拟相比，方差缩减方法 [2][5][3]更为合适（第 3.4节算法的第3 步）。方差缩减方法与所提 AaS-hGP 方法相结合，用于高维可靠性估计，值得开展进一步研究。

5.3. 可靠性约束下的决策

尽管本文证明了所提方法在高维可靠性评估中有效，但考虑这些可靠性的设计优化对于不确定性下的最优决策也至关重要。基于可靠性的设计优化通常涉及全局优化算法以及可靠性指标相对于设计变量的灵敏度[20][40]。因此，将外层随机优化算法引入所提 AaS-hGP 方法，有望解决涉及高维不确定性的基于可靠性的设计优化问题。

6. 结论

本文提出了一种新的基于自适应降维的元建模框架，用于高维可靠性分析，称为基于自适应主动子空间的异方差高斯过程（AaS-hGP）。AaS-hGP的主要目标是利用有限的计算预算，解决具有高维不确定性和昂贵计算模型的可靠性问题。所提出的方法通过结合主动子空间映射与主动子空间中的hGP元建模，识别最优的低维特征。所提出的主动学习方案通过识别对失效概率有显著贡献的关键训练数据点，进一步减少训练点的数量。

通过多个数值示例成功展示了所提方法的性能和优点，这些示例包括一个高维非线性数学函数和工程应用。在每个示例中，所提方法仅需少量模型函数和梯度评估即可获得准确结果。输电塔示例表明，AaS-hGP 能够有效处理由有限元法定义的高成本计算模型。

致谢

作者衷心感谢韩国电力公社工程建设公司（KEPCO E&C）提供本文所用输电塔的有限元模型。该模型由该公司与建国大学的 Tae- Hyung Lee 教授共同开发。J. Song 的研究工作得到韩国政府资助的韩国国家研究基金会（NRF）项目（NRF-2021R1A2C2003553）以及首尔国立大学建设与环境工程研究所的支持。作者谨此致谢。

附录A. 将主动子空间用于降维的动机

本附录介绍了关于各种降维方案的初步研究。考虑以下高维线性模型函数：

$$Y = \mathcal{M}(\boldsymbol{X}) = \beta_0\sqrt{D} - \sum_{j=1}^{D} X_j\,, \tag{A.1}$$

其中，X_j，$j = 1$，……，D为标准高斯分布随机变量；D 表示维度；β_0 表示模型参数。对于阈值 $y_f = 0$，无论输入 $\boldsymbol{X}$ 的维数如何，失效概率均设为 $P_f = \Phi(-\beta_0)$。注意，该模型函数具有“精确”的一维特征映射：

$$\Psi_* = \sum_{j=1}^{D} X_j\,, \tag{A.2}$$

可用于以完美精度预测失效概率。精确特征映射的示意图见图A.1。

为数值识别低维特征，我们使用 Van Der Maaten 等人（2009）开发的降维工具箱，测试了多种降维技术，例如主成分分析、核主成分分析、扩散映射和局部线性嵌入 [23]。表 A1 列出了所研究的降维方法及其参数。对于每种降维方法，通过使用全局优化算法最小化式（ $\boldsymbol{\theta}_{\mathcal{H}}$ 3）中的元建模误差，确定其最优参数值，即9式（）。选择元建模误差最小的降维方法，并在图 A.1(b) 中报告结果。

图A.1(b) 展示了使用 100 个训练点绘制的精确特征与识别出的特征之间的散点图。模型参数为 $\beta_0 = 3$，因此 $P_{f,\ exact} = 1.35 \times 10^{-3}$。维度设为 $D = 100$，目标降维维数固定为 $d_r = 1$，以检验能否识别出“精确”特征。结果表明，表A.1中列出的无监督技术未能检测出“精确”的特征映射，最佳失效概率估计为 $\hat{}$ $P_f = 8.20 \times 10^{-5}$，与正确值相差甚远。另一方面，主动子空间准确地解决了这个问题。

表 A.1：**降　维方法及初步研究中考察的参数设置**　　**y**.

降维方法	参数
PCA	None
扩散映射	$0.5 \leq t \leq 20,\ 0.5 \leq \sigma \leq 3$
核主成分分析（采用多项式核）	$0.5 \leq a \leq 5,\ 0.5 \leq b \leq 5$
局部线性嵌入（LLE）	$3 \leq k \leq 10$
海森矩阵 LLE	$3 \leq k \leq 10$
最大方差展开	$5 \leq k \leq 15$
拉普拉斯特征映射	$5 \leq k \leq 15,\ \sigma = 1$

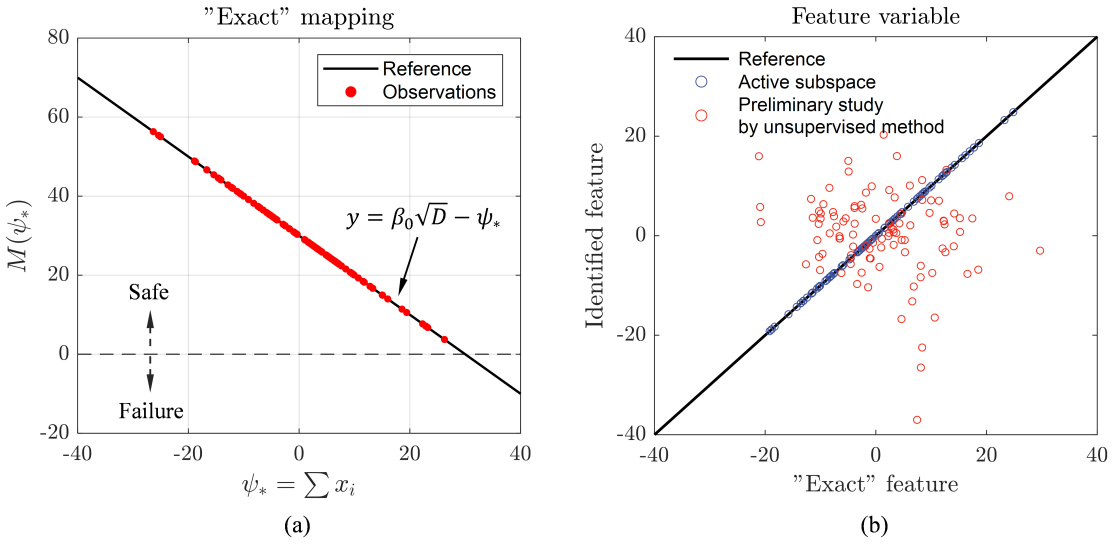


图 A.1：**(a)“精确”映射示意图，以及 (b) 高维线性示例中由最佳无监督方法和主动子空间获得的特征散点图**.

附录 B. 齐性 GP 模型的基本理论

高斯分布过程模型的核心假设是，输入 $\boldsymbol{x}$， $y(\boldsymbol{x})$处的响应是高斯分布过程 [41]，记作

$$f(\boldsymbol{x}) \sim GP\left(\mu_f(\boldsymbol{x}), k_f\left(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'; \boldsymbol{\theta_f}\right)\right), \tag{B.1}$$

其中， $\mu_f(\boldsymbol{x}) = \mathbb{E}[y(\boldsymbol{x})]$ 是均值函数； $k_f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \mathbb{E}[(f(\boldsymbol{x}) - \mu_f(\boldsymbol{x}))(f(\boldsymbol{x}') - \mu_f(\boldsymbol{x}'))]$ 是协方差函数（或“核”函数）； $\boldsymbol{\theta_f}$ 是一组用于表征该过程的参数，通常称为超参数。

GP 通常 假设观测数据包含齐性高斯分布噪声 ε，其可表示为

$$\mathcal{Y} = f(\boldsymbol{x}) + \varepsilon, \tag{B.2}$$

其中，高斯分布噪声 ε 彼此在统计上相互独立，并且服从方差为常数 σ_n^2的相同分布。给定 n 个输入 $\boldsymbol{x}_{\mathcal{D}} = [\boldsymbol{x}_1, ..., \boldsymbol{x}_n]^T$的训练样本及其对应的含噪观测数据 $\boldsymbol{\mathcal{Y}}_{\mathcal{D}} = [\mathcal{Y}(\boldsymbol{x}_1) ..... \mathcal{Y}(\boldsymbol{x}_n)]^T$，最优超参数估计值 $\hat{\boldsymbol{\Theta}}$ 可通过最大似然估计（MLE）方法 [41], 获得，即

$$\hat{\boldsymbol{\Theta}} = \arg\max_{\boldsymbol{\Theta}} \ln p(\boldsymbol{\mathcal{Y}}_{\mathcal{D}} | \boldsymbol{x}_{\mathcal{D}}, \boldsymbol{\Theta}), \tag{B.3}$$

$$\ln p(\boldsymbol{\mathcal{Y}}_{\mathcal{D}} | \boldsymbol{x}_{\mathcal{D}}, \boldsymbol{\Theta}) = -\frac{1}{2}\boldsymbol{\mathcal{Y}}_{\mathcal{D}}^T(\boldsymbol{K_f} + \sigma_n^2\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{\mathcal{Y}}_{\mathcal{D}} - \frac{1}{2}\ln|\boldsymbol{K_f} + \sigma_n^2\boldsymbol{I}| - \frac{n}{2}\ln 2\pi, \tag{B.4}$$

其中 $\boldsymbol{K_f}$ 是 th e 协方差矩阵，其元素定义为 $K_{f_{i,j}} = k_f(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$ $i, j = 1, ..., n$；以及 $\boldsymbol{I}$ 是 $(n \times n)$ i 单位矩阵。

然后，GP 模型可以使用最优超参数预测新输入点处的响应。具体而言，在零均值函数下，新点 $\boldsymbol{x}_*$ 处的响应预测 $\mu_{\hat{Y},GP}(\cdot)$ 及其对应的预测方差 $\sigma^2_{\hat{Y},GP}(\cdot)$ 可计算为

$$\mu_{\hat{Y},GP}(\boldsymbol{x}_*) = \boldsymbol{k}_{f_*}^T(\boldsymbol{K_f} + \sigma_n^2\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{\mathcal{Y}}_{\mathcal{D}}, \tag{B.5}$$

$$\sigma^2_{\hat{Y},GP}(\boldsymbol{x}_*) = k_{f_{**}} - \boldsymbol{k}_{f_*}^T(\boldsymbol{K_f} + \sigma_n^2\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{k}_{f_*}, \tag{B.6}$$

其中 $\boldsymbol{k}_{f_*} = [k_f(\boldsymbol{x}_*, \boldsymbol{x}_1) ..., k_f(\boldsymbol{x}_*, \boldsymbol{x}_n)]^T$包含预测位置 $\boldsymbol{x}_*$与n 观测点 $\boldsymbol{x}_{\mathcal{D}}$之间的协方差；以及 $k_{f_{**}} = k_f(\boldsymbol{x}_*, \boldsymbol{x}_*)$。因此，在同方差噪声假设下，GP 模型不仅提供均值估计$\mu_{\hat{Y},GP}(\boldsymbol{x}_*)$，还通过 $\sigma^2_{\hat{Y},GP}(\boldsymbol{x}_*)$量化预测的不确定性。

参考文献

[1] Siu-Kui Au 和 James L Beck。基于动力分析的子集模拟及其在地震风险中的应用。 *Journal of Engineering Mechanics* 129 8 901 917, 2003 , ( ): – 。

[2] Konstantin M Zuev、James L Beck、Siu-Kui Au 和 Lambros S Katafygiotis。贝叶斯后处理器及子集模拟的其他改进方法，用于估计高维下的失效概率。 *Computers & structures* 92 283 296, , : – 。[3] 2012 Ziqi Wang、Marco Broccardo 和 Junho Song。用于可靠性分析中子集模拟的哈密顿蒙特卡洛方法。 *Structural Safety*, 76:51–67, 2019。[4] Ziqi Wang 和 Junho Song。使用冯·米塞斯-费舍尔混合分布进行高维可靠性分析的基于交叉熵的自适应重要性抽样。 *Structural Safety*, 59:42–52, 2016。[5] Iason Papaioannou、Sebastian Geyer 和 Daniel Straub。采用灵活混合模型改进的基于交叉熵的重要性抽样。 *Reliability Engineering & System Safety*, 191:106564, 2019。[6] Christos Lataniotis、Stefano Marelli 和 Bruno Sudret。通过监督式降维将经典代理建模扩展至高维：一种数据驱动方法。 *International Journal for Uncertainty Quantification*, 10(1), 2020年。

[7] Jungho Kim和JunhoSong。基于自适应高斯过程的分位数代理模型与敏感性分析，用于高效的基于可靠性的设计优化。 *Mechanical Systems and Signal Processing*，161:107962，2021年。[8] Katiana Kontolati、DimitriosLoukrezis、Dimitrios G Giovanis、LohitVandanapu和Michael DShields。黑箱型问题中高维不确定性量化的无监督学习方法综述。 *Journal of Computational Physics* 464 111313, 2022 ，：。[9] IKalogeris和 V Papadopoulos。基于扩散映射的代理建模：一种替代性的机器学习方法。 *International Journal for Numerical Methods in Engineering*，121(4):602–620，2020年。[10] Dimitris G Giovanis和Michael DShields。利用Grassmann流形变分对具有超高维响应的复杂系统进行不确定性量化。 *Journal of Computational Physics*，364:393–415，2018年。[11] Dimitris G Giovanis和 MichaelDShields。使用Grassmann流形上的高斯过程回归为高维模型构建数据驱动代理模型。 *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*，370:113269，2020年。[12] Ketson R Dos Santos、DimitriosG Giovanis和MichaelD Shields。基于Grassmann扩散映射的高维数据降维与分类。 *SIAM Journal on Scientific Computing*，44(2):B250–B274，2022年。[13] MingyangLi 和Zequn Wang。用于高维可靠性分析的深度学习。 *Mechanical Systems and Signal Processing* 139 106399, 2020 ，：。[14] Zhong-ming Jiang、De-ChengFeng、Hao Zhou和Wei-Feng Tao。针对罕见失效事件的高维可靠性分析的递归降维方法。 *Reliability Engineering & System Safety*，213:107710，2021年。[15] Paul G Constantine、EricDow和 QiqiWang。主动子空间方法的理论与实践：在克里金曲面中的应用。 *SIAM Journal on Scientific Computing*，36(4):A1500–A1524，2014年。[16] Zhongming Jiang和JieLi。采用降维的高维结构可靠性。 *Structural Safety* 69 35 46, ，：–。2017 [17] Tong Zhou 和 Yongbo Peng。用于基于pdem的高维可靠性分析的主动学习与主动子空间增强。 *Structural Safety*，88:102026，2021年。[18] N Navaneeth 和Souvik Chakraborty。代理模型辅助的主动子空间与主动子空间辅助的代理模型——高维结构可靠性分析的新范式。 *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*，389:114374，2022年。[19] Armen DerKiureghian。 *Structural and system reliability*。剑桥大学出版社，2022年。[20] Junho Song、Won-HeeKang、Young-JooLee 和 JunhoChun。结构系统可靠性：理论概述及其在优化中的应用。 *ASCE-ASME Journal of Risk and Uncertainty in Engineering Systems Part A: Civil*，，（）：*Engineering* 7 2 03121001, 2021 。[21] UmbertoAlibrandi。随机动力分析的响应面法。 *Reliability Engineering & System Safety*，12644 53，2014 年：–。[22] JunghoKim、Sang-ri Yi 和Junho Song。通过基于主动学习的异方差高斯过程估计随机风激励下的首次通过概率。 *Structural Safety*，100:102268，2023。[23] Laurens Van Der Maaten、EricPostma、Jaap Van den Herik等。降维：一项比较研究。 *J Mach Learn Res* 10 66 71 ，（-）：13，2009。[24] G ´ *Journal of computational Physics* 230 6 2345 2367, 2011 eraudBlatman和 Bruno Sudret。基于最小角回归的自适应稀疏多项式混沌展开。，（）：–。[25] JizeZhang和 AlexandrosATaflanidis。通过基于克里金的自适应独立提议和延迟拒绝加速马尔可夫链蒙特卡罗。 *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*，355:1124–1147，2019。[26] JunghoKim和 Junho Song。用于可靠性分析的n维球概率自适应克里金（Pak-BN）。 *Structural Safety*，85:101924，2020年。[27] LanHuong Nguyen和 Susan Holmes。有效降维的十条快速提示。 *PLoS computational biology*，15 6( ):e1006907，2019。[28] Miguel L ´azaro-Gredilla、Michalis K Titsias、Joc hem Verrelst和GustavoCamps-Valls。利用异方差高斯过程反演生物物理参数。 *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*，11(4):838–842，2013。[29] TaeyongKim、Oh-Sung Kwon和JunhoSong。基于聚类的自适应地震动选择算法，用于高效估计结构脆弱性。 *Earthquake Engineering & Structural Dynamics*，50(6):1755–1776，2021年。[30] Amandine Marrel、Bertrand Iooss、Fran.cois Van Dorpe 和ElenaVolkova。利用高斯过程对复杂计算机代码进行建模的高效方法。 *Computational Statistics & Data Analysis*，52(10):4731–4744，2008。[31] Benjamin Echard、NicolasGayton和Maurice Lemaire。AK-MCS：一种结合克里金法与蒙特卡罗模拟的主动学习可靠性方法。 *Structural Safety*，33(2):145–154，2011。[32] HRahami、AKaveh和YGholipour。通过力法和遗传算法对桁架进行尺寸、几何与拓扑优化。 *Engineering Structures*，30(9):2360–2369，2008。[33] Hyo-Sang Park、Byung Ho Choi、JungJoong Kim和 Tae-HyungLee。韩国高压输电塔的抗震性能评估。 *KSCE Journal of Civil Engineering*，20:2499–2505，2016。[34] Faris Albermani、SritawatKitipornchai 和 RickyWK Chan。输电塔的失效分析。 *Engineering failure analysis* 16 6 1922 1928, 2009 ，（）：–。[35] Arash Altoontash。 *Simulation and damage models for performance assessment of reinforced concrete beam-column joints*。斯坦福大学，2004。[36] Kyung K Choi 和 Nam-Ho Kim。 *Structural sensitivity analysis and optimization 1: linear systems*。SpringerScience & Business Media，2004。[37] Adam Paszke、Sam Gross、Soumith Chintala、Gregory Chanan、Edward Yang、Zachary DeVito、Zeming Lin、Alban Desmaison、LucaAntiga和AdamLerer。PyTorch中的自动微分。2017年。[38] Atilim Gunes Baydin、Barak A Pearlmutter、Alexey AndreyevichRadul 和 Jeffrey Mark Siskind。自动微分-

化在机器学习中的应用：综述。 *Journal of Marchine Learning Research*，18：1–43，2018年。[39] J Willkomm 和 A Vehreschild。《ADiMat 手册》，2013年。 *URL http://adimat. sc. informatik. tu-darmstadt. de/doc*。[40] DJ Jerez、HA Jensen 和 M Beer。随机激励下结构系统的基于可靠性的设计优化：概述。 *Mechanical Systems and Signal Processing*，166：108397，2022年。[41] Christopher KI Williams 和 Carl Edward Rasmussen。 *Gaussian processes for machine learning*，第 2 卷。麻省理工学院出版社，剑桥，马萨诸塞州，2006年。