arXiv:2603.12870v1 [math.NA] 13 Mar 2026

参数化系统的物理学与数据驱动代理建模：综述与新视角

Matteo Giacomini[1,2]和 Pedro D´ıez[1,2,*]

摘要

代理模型在用户定义的输入参数与感兴趣的输出量之间建立紧凑的关系，从而能够在多查询场景下高效评估复杂的参数化系统。这些能力对于广泛的应用至关重要，包括优化、控制、数据同化、不确定性量化，以及制造业、个性化医疗、智慧城市和可持续发展等各个领域中不断兴起的数字孪生技术。本文综述了构建代理模型的成熟方法，这些方法或利用支配定律和系统动力学结构的知识（*physics-based*），或利用实验观测（*data-driven*），以及结合这两种范式的混合方法。通过将代理模型的设计重新视为一个函数逼近问题，本文根据以下两项选择对现有方法进行了评述：(i) 降阶基；(ii) 合适的近似准则。本文综述了属于科学机器学习领域的方法，旨在总结以下方面的既有知识、近期进展与新视角：基于适当正交分解、适当广义分解和人工神经网络的降维、物理学驱动代理建模与数据驱动代理建模；利用来自不同保真度来源的信息的多保真度方法；以及用于提升代理模型质量的自适应采样、增充和数据增强技术。

关键词：代理模型、科学机器学习、多保真度、正交分解、广义正交分解

1 引言

复杂工程系统通常由一组用户定义和/或依赖于问题的参数来表征。在现实场景中，这些系统可能具有大量参数，且这些参数往往是不确定的。自 Box 和 Wilson 的开创性工作以来 [29]，响应面已广泛应用于计算科学与工程领域，用以建立分析系统的输入参数与感兴趣的输出量之间紧凑、易于理解且可解释的关系。这一理念自然延伸至参数问题的代理模型，即寻求对高维数据进行低维（即紧凑）表示。

本文综述了构建基于物理学、数据驱动型和混合型代理模型的成熟技术，并在函数

[1]数值计算实验室（LaC`aN），土木工程学院，Universitat Polit`ècnica de Catalunya - BarcelonaTech（UPC），西班牙巴塞罗那。[2]国际工程数值方法中心（CIMNE），西班牙巴塞罗那。

* 通讯作者：Pedro D´ıez *E-mail:* pedro.diez@upc.edu

逼近问题的框架下重新审视这一任务。该框架有助于从两个关键组成部分的角度考察文献中已有的解：

- 函数表示的近似准则的定义；
- 为感兴趣量对参数的函数依赖关系构建（降阶）基。

这一视角构成本综述结构的基础，其中第2节聚焦于近似策略，第3、4和5节描述构建降阶基的不同方法。此类技术在现实、多查询且数据稀缺场景中构建低维参数化表示的实际部署，取决于高效处理异构数据（即不同保真度的模型）的能力，亦即尽量减少所需信息量。因此，多保真建模（第6节）和自适应数据集采样（第7节）在文稿的专门章节中加以讨论。这些主题并不特定于某一类技术，而是作为贯穿性使能因素，提升基于物理学的、数据驱动的以及混合方法在代理建模中的准确性、鲁棒性与效率。文稿结构的详细介绍见第1.4。

文献中已有多篇关于参数化系统降阶建模与代理建模的综合评述，涵盖一般性专著 [20–22]，以及针对特定主题的评述，例如降维 [117], 、动力系统的基于投影的方法 [23], ，以及作为输入输出控制系统的降阶模型 [18]。本研究从函数逼近的视角出发，采用统一的观点探讨代理模型的构建，以补充上述研究成果。这使我们能够综述参数化系统代理建模的通用 技术，涵盖基于物理、数据驱动和混合建模方法。具体而言，本文着重讨论高效代理模型开发中的方法学方面，并对不同领域的解进行连贯分析。事实上，从应用数学和计算科学到特定领域的工程学科，不同学术群体都对这些主题做出了许多重要贡献。在此背景下，不同群体用于分类的同一套术语并不总是独一无二且前后一致。本文将降阶模型 定义为在降阶空间中求解分析系统控制方程的模型（例如通过投影方法求解），而将代理模型 这一概念用于指代更广泛的一类模型，它们能够对关注量进行函数逼近。这种分类并未将代理模型局限于纯数据驱动方法，也允许融合数据与物理知识的混合技术。最后，值得注意的是，对现有方法进行全面、公平的比较极具挑战性（甚至可能无法做到），因为每种方法的优缺点都取决于选取哪些特定应用进行基准测试。事实上，文献中已提出许多针对特定物理和工程问题的代理模型解；对于计算流体力学和结构力学领域的专题综述，读者可参阅 [211, 215]。

基于上述通用目的的考量，本文从方法学角度评估所综述的代理建模技术，而非通过针对具体应用的基准测试进行评估。全文讨论围绕一组评价准则展开，这些准则反映了代理模型构建的关键方法学方面，包括低维表示相对于高保真模型的侵入程度、近似空间的性质（例如线性或非线性）、所需训练数据量、面对系统维度增加和参数变化时的鲁棒性，以及所得代理模型的可解释性。此外，本文还考量了所综述方法在实践中的性能，包括离线训练阶段的计算成本、在线评估的效率、对多查询场景的可扩展性，以及所得代理模型是否适用于涉及多个感兴趣量的实时分析、优化或决策支持应用

。这些准则并非旨在对所介绍的方法进行定量排名，而是为不同方法提供共同的分析视角，将其置于统一框架之中，以便以连贯且有条理的方式讨论各自的优势、局限性和方法学权衡。

本节余下部分将介绍函数逼近问题，并回顾构建（参数化）代理模型所涉及的主要概念，为下文的综述奠定基础。

1.1 参数化全阶模型

通常将描述系统行为的模型称为全阶模型。基于物理的全阶模型依赖于通过常微分方程和／或偏微分方程组对问题进行数学表述。在此背景下，每个全阶模型实例都需要对这类方程进行离散化，从而得到（可能规模庞大的）线性或非线性代数方程组。数据驱动的全阶模型既可以根据实验观测构建，也可以根据数值仿真器生成的数据集构建。在许多实际情形中，这些仿真器被视为黑箱模型，只能获取其输入-输出数据（例如，源代码受专有权保护的商业软件）。此外，这类数据集也可以由经验模型或半经验模型生成，而这些模型的内部表述并非源自底层系统的第一性原理物理定律。在所有这些情况下，代理模型都是直接根据可用数据推断得到的，无需显式访问或利用控制方程。

在常见的工程场景中，需要针对输入参数的不同组合对全阶模型进行评估。这通常意味着需要多次查询模型，从而在高维流形上生成解。相关应用包括优化、控制、反演分析和不确定性量化等。为了使这些问题变得可处理，需要构建此类高维解（或依赖于这些解的感兴趣量）的低维表示，从而实现对参数化模型的高效实时评估。

1.2 代理模型作为函数逼近

将系统描述为一个函数，该函数把取值于允许值集合 $\mathcal{P} \subset \mathrm{IR}^{\mathrm{n_p}}$ 中的输入参数 $\boldsymbol{\mu} = [\mu_1\, \mu_2 \ldots \mu_{\mathrm{n_p}}]^\top$ 转换为输出向量 $\mathbf{x} = [x_1\, x_2 \ldots x_{\mathrm{n_o}}]^\top$，其中 $\mathrm{n_p}$ 和 $\mathrm{n_o}$ 分别表示参数数量和系统输出的维数。因此，输出 $\mathbf{x}$ 被视为 $\boldsymbol{\mu}$ 的函数，并由代理模型 $\mathbf{S} : \mathrm{IR}^{\mathrm{n_p}} \to \mathrm{IR}^{\mathrm{n_o}}$ 近似，使得

$$\mathbf{x}(\boldsymbol{\mu}) \approx \mathbf{S}(\boldsymbol{\mu}). \tag{1}$$

请注意，方程（1）是函数逼近问题的一般形式，其中 $\mathbf{S}$ 是所求的低维表示，用于表示将输入参数 $\boldsymbol{\mu}$ 映射为高维数据 $\mathbf{x}(\boldsymbol{\mu})$ 的映射。在此语境下，$\mathbf{x}$ 可以表示由基于物理学的全阶模型求得的某个偏微分方程的解，也可以表示某个感兴趣的量，例如在不了解底层数学模型的情况下通过实验测得的力。

与函数逼近问题中的常见情形一样，需要考虑四个方面。

- **对真实系统的了解 -**关于连接输入和输出的函数 $\mathbf{x}(\boldsymbol{\mu})$ 的现有信息（如有），即对真实系统行为的任何先验知识，这些知识可能来自实验观测或数学表述。

- **可用数据 -** 关于函数 $\mathbf{x}(\boldsymbol{\mu})$ 的可观测数据（即输入和输出）的信息。数据通常由一组离散点构成，即对于 $i = 1, \ldots, \mathrm{n_s}$，由点对 $(\boldsymbol{\mu}_i, \mathbf{x}_i)$ 组成，

n_s 是样本数量，使得 $\mathbf{x}_i := \mathbf{x}(\boldsymbol{\mu}_i)$。

- **近似准则 -**选择用于建立拟合可用数据的策略。近似准则规定了实现最佳拟合所采用的规则，也就是方程（$\approx$）中"1"的含义。实际上，该准则提供了一种合适的数值度量，用于衡量代理模型得到的响应函数$\mathbf{S}(\boldsymbol{\mu}_i$与真实数据$\mathbf{x}_i$之间的差异，其中 $i = 1, \ldots\ldots, n_s$。不同近似准则的综述将在第2节介绍。

- **近似类型 -**所选的基，即用于表示$\mathbf{S}(\boldsymbol{\mu})$的函数类型。函数类型的选择十分广泛，例如多项式、样条、其他具有解析表达式的函数（如径向基函数）、神经网络，或以构造方式确定的其他函数。在高维数据背景下，选择一种能够降低函数表示维度的基至关重要，这有助于确定合适的低秩近似或降阶模型（ROM） [45]。第3、4和5节将详细介绍构造此类降阶基的不同策略。

请注意，上述四点密切相关，可用数据会影响函数类型和近似准则的选择。

1.3 验证、确认与不确定性量化

代理模型常被用于加速外循环应用，例如优化、控制和反演分析等。这需要对感兴趣量在参数变化下进行反复评估，因此权衡此类计算的效率与可信度至关重要。评估并控制因模型与现实不符以及所采用的数值离散而产生的误差（即验证与确认 [11]），对于保障涉及现实问题的决策流程的可靠性起着关键作用。这些挑战要求将准确、高效且可靠的误差估计与模型更新策略和自适应过程相结合，以提高代理模型的整体质量。

此外，考虑数据不确定性 [226]对于构建可信代理模型至关重要。一方面，用户定义参数经常受到噪声影响，并且仅在一定测量精度范围内已知。另一方面，复杂系统的运行条件通常具有不确定性。因此，量化系统输出的不确定性，对于在高维、多查询的复杂系统背景下进行推断并预测感兴趣量的可靠性范围至关重要。

在此背景下，与验证与确认（V&V）和不确定性量化（UQ）相关的研究自然构成了参数化系统代理模型领域文献中的关键方面。在这一情境下，代理模型的若干关键性能方面自然凸显出来，包括外推能力、误差估计、置信界、对参数变化的鲁棒性，以及稳定性或发散特性。对此类性质的评估高度依赖具体问题，通常需要仔细权衡代理模型构建方法、底层物理系统的特征，以及所采用的验证与确认和不确定性量化框架。尽管这些方面对于降阶模型与代理模型至关重要，本文重点关注用于构建参数化系统通用代理模型的方法论基础，涵盖基于物理、数据驱动和混合方法。全面综述代理模型的验证与确认、不确定性量化和自适应误差控制策略超出了本文的范围，感兴趣的读者可参阅综述文章 [191]。

1.4 文稿结构

本文结构安排如下。第 2 节回顾了维度为 1 时函数逼近的不同近似准则的表述，从多项式插值到最小二乘逼近，以及径向基函数、克里金法、移动最小二乘法和通过人工神经网络实现通用逼近等更先进的技术。接下来的三节分别讨论通过适当正交分解（第 3节）、适当广义分解（第 4节）和神经网络（第 5节）构建降阶基。针对每种方法，相应章节均回顾了文献中的现有研究，涵盖降维以及纯数据驱动和基于物理的代理模型构建。第 6 节专门讨论多保真模型，并综述融合不同保真度和来源数据的现有方法。第 7节讨论了采样、数据库增充和数据增强方面的挑战。最后，第8节总结了本文的讨论，并提出了开放问题、当前趋势和未来展望。这些研究是数字孪生技术的重要构建模块，有助于实现高效、可扩展且可信的数字孪生技术。

2 重温函数逼近准则

尽管用于代理建模的近似准则最终应用于所选定的降阶表示之中，但它们的表述可以独立于降阶空间的具体构造。因此，本节首先回顾函数逼近的基本原理，包括基于插值与回归两种情形。第 3、4和5 节随后介绍三种不同的方法，用以设计合适的降阶基；这些降阶基与此处讨论的近似策略相结合，即可构建参数化代理模型。

设 $\mathtt{n_p} = 1$ 且 $\mathtt{n_o} = 1$。相应的近似问题在于：从一组 $\mathtt{n_s}$ 数据对 $(\mu_i,\ x_i)$ 出发，其中$x_i = x(\mu_i),\ i = 1, \ldots\ldots, \mathtt{n_s}$，确定标量函数 $x(\mu)$ 的代理模型 $\mathtt{S}(\mu)$。

2.1 多项式插值

多项式插值是指确定一个次数为 $\mathtt{n_s} - 1$ 的多项式 $\mathtt{S_L}(\mu)$ 作为响应函数，使其与数据对 $(\mu_i,\ x_i)$ 相匹配，即对 $i = 1, \ldots\ldots, \mathtt{n_s}$，有 $\mathtt{S_L}(\mu_i) = x_i$。

这要求将多项式的次数设置为样本数 $\mathtt{n_s}$ 减一。如果采样点互不相同（即 $\mu_i \neq \mu_j$ 对于 $i \neq j$），则存在唯一的 $\mathtt{n_s} - 1$ 次多项式函数 $\mathtt{S_L}(\mu)$拟合这些数据。

因此，多项式插值响应可计算为一组多项式基函数的线性组合，即

$$\mathtt{S_L}(\mu) := \sum_{i=1}^{\mathtt{n_s}} x_i\, L_i(\mu), \tag{2}$$

其中 $L_i(\mu)$ 表示第 i 个拉格朗日多项式函数，定义为

$$L_i(\mu) := \frac{\prod_{j \neq i} \mu - \mu_j}{\prod_{j \neq i} \mu_i - \mu_j}. \tag{3}$$

将这一思想推广到多个维度是很直接的，即 $\mathtt{n_p} > 1$。为得到 L_i，必须构造相应的多项式基，以推广（3），使其满足

$L_i(\boldsymbol{\mu}_j) = \delta_{ij}$，其中 δ_{ij} 为克罗内克δ函数。如果样本位于笛卡尔格点上，这一点就很容易实现；也就是说，参数空间采用网格进行离散化，该网格由 n_p 个一维离散化的张量积构成，每个参数维对应一个一维离散化。

请注意，计算工作量和数据复杂度会随n_p呈指数级增长，从而引发所谓的维数灾难。为减轻这一计算负担，尤其是在高维情形下，已有研究提出通过在笛卡尔网格中恰当选取数量较少的采样点来应对，例如采用稀疏网格框架 [35]。利用这些采样点，稀疏网格随机配置法 [179] 能够显著降低计算成本，同时保留拟合多项式响应函数的能力。

注 1 (谱近似)。 也可以选择其他基函数，例如，用正交多项式替换(2)来构造谱近似 *[229]*。若需要考虑含噪评估，这种插值过程可推广为回归问题。在此背景下，多项式混沌展开（*PCE*）*[85, 268, 269]*可视为一种多项式插值形式，它在随机输入空间上使用正交基。具体而言，*PCE* 系数以最小二乘意义进行估计，将均值响应投影到正交多项式基上，同时滤除噪声。这一框架已被广泛用于构建代理模型，尤其是用于不确定性量化；相关基础性研究见 *[27, 28, 142, 267]* ，近期综述见 *[156]*。

2.2 非多项式插值

基于插值的函数逼近也可以通过允许用户选择其他类型的基函数来构造。例如，在所提出的函数基同样完备的前提下，可以使用三角函数代替多项式。事实上，泰勒展开通过多项式之和来近似任意给定函数，而傅里叶展开则通过三角项之和完成同样的任务。

文献中还提出了其他技术，这些技术在函数逼近类型（即函数空间 $S(\mu)$ 所属的空间）方面具有更大的灵活性。本节将回顾径向基函数（RBF）和高斯过程回归（GPR）。

径向基函数插值的基本范式是构造如下形式的近似 $S_{RBF}(\mu)$

$$S_{RBF}(\mu) := \sum_{i=1}^{n_s} w_i \phi(|\mu - \mu_i|) \tag{4}$$

其中，w_i 表示第 i 个权重，ϕ 是一个给定的径向基函数，它取决于点 μ（即函数需要求值的位置）与采样点 μ_i 之间的距离，其中 $i = 1, \ldots\ldots, n_s$。通常，径向基函数 $\phi(r)$ 的定义满足 $\phi(0) = 1$，且 $\phi(r)$ 随着 r 增大而减小。例如，高斯径向基函数的表达式为 $\phi(r) = e^{-\varepsilon^2 r^2}$ [199]。

给定由 n_s 个样本点 (μ_i, x_i) 组成的集合，通过计算权重 w_i 来满足插值性质，即对于 $i = 1, \ldots, n_s$，有 $S_{RBF}(\mu_i) = x_i$。由此需要求解线性方程组

$$\boldsymbol{A} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_{n_s} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n_s} \end{bmatrix}, \tag{5}$$

其中 $\boldsymbol{A}$ 为一个维度为 $n_s \times n_s$、元素 $[\boldsymbol{A}]_{ij}$ 定义如下的矩阵

$$[\boldsymbol{A}]_{ij} := \phi(|\mu_i - \mu_j|). \tag{6}$$

请注意，$\boldsymbol{A}$ 的对角项均等于 1，而非对角项小于 1；如果相关采样点之间的距离足够大，非对角项通常可以忽略不计。

在假设数据无噪声的情况下，高斯过程回归（GPR），也称为克里金法，是一种插值技术，其得到的函数逼近通过核函数评估和训练数据隐式定义，而非通过显式的参数化解析表达式定义。值得注意的是，此处的回归一词应从广义的统计意义上理解，指的是学习输入输出关系，以便对未见过的数据进行预测。克里金法的原理假设，响应函数 $\mathrm{S}_{\mathtt{GPR}}(\mu)$ 在每个点的取值都是一个服从高斯（或正态）分布的随机变量。还假设对应两个不同点的变量服从二元正态分布，并且其协方差仅取决于两点之间的距离 r 。因此，该协方差由核函数 $\kappa(r)$给出，其作用与上文所述的径向基函数 ϕ 类似。

遵循贝叶斯更新的思路，通过将样本所提供的信息作为对先验估计的更新来求得近似函数 $\mathrm{S}_{\mathtt{GPR}}(\mu)$，而先验估计可以像用户希望的那样缺乏信息。样本的方差协方差矩阵记为 $\boldsymbol{C}$，其表达式与（6）非常相似。具体而言，对于 $i=1,\ldots,\mathtt{n_s}$ 以及 $j=1,\ldots,\mathtt{n_s}$，矩阵的分量$[\boldsymbol{C}]_{ij}$ 定义如下

$$[\boldsymbol{C}]_{ij} := \kappa(|\mu_i - \mu_j|). \tag{7}$$

类似地，在寻求克里金插值的每个点 $\mu_\star$ ，都会计算定义其与 $\mathtt{n_s}$ 个样本之间空间相关性的向量 $\boldsymbol{\tau}$ ，计算方式如下

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{bmatrix} \kappa(|\mu_1 - \mu_\star|) \\ \kappa(|\mu_2 - \mu_\star|) \\ \vdots \\ \kappa(|\mu_{\mathtt{n_s}} - \mu_\star|) \end{bmatrix}. \tag{8}$$

备注 2 (变异函数)。 与其直接通过核函数κ给出协方差，一种常见的替代方法是计算变异函数 *[180]*。变异函数用于量化数据点之间的不相似性（或变异性），以此对底层空间关系进行建模。实际上，对于距离为 r 的点对，以及 r 的不同取值，通过计算来构造变异函数，

$$\gamma(r) = \frac{1}{2\mathtt{n_{var}}(r)} \sum_{i=1}^{\mathtt{n_s}} \sum_{j=1}^{\mathtt{n_s}} \beta_{ij}(r)(x_i - x_j)^2, \tag{9a}$$

其中，(9a) 中的求和仅限于 $\mathtt{n_{var}}(r)$ 组位置相距约为 r的点对 (i,j)，该距离由系数 $\beta_{ij}(r)$ 确定，使得

$$\beta_{ij}(r) = \begin{cases} 1, & if\ |\mu_i - \mu_j| \in [r-\eta/2, r+\eta/2], \\ 0, & otherwise \end{cases} \tag{9b}$$

其中， η>0是用户定义的容差，用于近似距离 r。因此，(9a)中的函数描述了数据的变异性如何随空间间距增大。随后，将理论变异函数模型（例如球状、指数或高斯模型）拟合到经验值，以获得空间变异性的连续表示。在二阶平稳性的假设下，变异函数可以转换为相应的协方差函数

$$\kappa(r) = \kappa(0) - \gamma(r), \tag{9c}$$

该函数随后用于克里金法，以执行空间插值。

因此，在没有噪声的情况下，克里金法插值 $\mathrm{S}_{\mathtt{GPR}}(\mu_\star)$ 是数据 x_i 的加权和，其权重由线性方程组 $\boldsymbol{C}\boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{\tau}$ 的解得出，即

$$\mathrm{S}_{\mathtt{GPR}}(\mu_\star) := \sum_{i=1}^{\mathtt{n_s}} x_i \lambda_i, \tag{10}$$

其中，权重 λ_i 的计算旨在最小化预测方差，同时确保插值无偏，并利用矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的对称性。

对于无噪声数据，高斯过程回归可提供插值响应面；而存在噪声时，高斯过程回归会纳入噪声方差项，从而生成不再插值观测数据的平滑替代模型。所得代理模型的正则性取决于协方差核的选择，不同的核函数会使预测响应具有不同程度的光滑性。此外，当噪声水平在参数空间中并非常数时，应考虑异方差高斯过程回归 [141] 或随机克里金法 [5] 。将 $\mathrm{S_{GPR}}(\mu_\star)$ 的先验估计视为均值为 θ_{prior} 、方差为 σ^2_{prior}的正态分布，则考虑现有信息后更新得到的（或后验）均值和方差估计为

$$\theta_{\text{posterior}} = \theta_{\text{prior}} + \boldsymbol{\tau}^\top \boldsymbol{C}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta}_{\text{prior}}), \tag{11a}$$

$$\sigma^2_{\text{posterior}} = \sigma^2_{\text{prior}} - \boldsymbol{\tau}^\top \boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{\tau}, \tag{11b}$$

其中，$\mathbf{x}$ 是样本向量 $\mathbf{x} = [x_1\, x_2 \ldots x_{\mathtt{n_s}}]^\top$，而 $\boldsymbol{\theta}_{\text{prior}}$ 是采样点处的先验均值估计向量。因此，给定观测数据（μ_i，x_i），对于 $i = 1$、.....、$\mathtt{n_s}$，后验均值可提供新样本 $\mu_\star$ 处的最佳估计，以及模型的空间相关性 $\boldsymbol{\tau}$。

请注意，从算法角度来看，RBF 和克里金插值都可扩展到高维参数空间（$\mathtt{n_p} \gg 1$），因为它们的计算复杂度取决于样本数 $\mathtt{n_s}$ ，而非参数个数 $\mathtt{n_p}$。当然，构建准确代理模型所需的样本数通常会随参数个数 $\mathtt{n_p}$增加，因此第 7 节将详细讨论高效的采样策略。

2.3 最小二乘逼近

设 $\mathbb{P}_m$ 为次数不超过 m的多项式空间。最小二乘逼近 $\mathrm{S_{LS}}(\mu)$ 在由 $\mathbb{P}_m$ 构成的线性近似空间中求得，其形式为

$$\mathrm{S_{LS}}(\mu) := \sum_{k=0}^{m} a_k P_k(\mu), \tag{12}$$

其中，$\{P_0\, P_1 \ldots P_m\}$ 表示空间 $\mathbb{P}_m$的一组基。通常，这些基具有这样的性质：P_k 是一个次数为 k的多项式；例如，对于单项式基，有 $P_k(\mu) = \mu^k$。

设 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 表示参数空间 $\mathcal{P}$中的一个标量积。该标量积可定义为连续形式

$$\langle f, g \rangle = \int_{\mathcal{P}} \alpha(\mu) f(\mu) g(\mu)\, d\mu, \tag{13a}$$

其中 $\alpha(\mu)$ 表示一个经过适当定义的权函数，或者在离散层面上表示为

$$\langle f, g \rangle = \sum_{i=1}^{\mathtt{n_s}} \alpha_i f(\mu_i) g(\mu_i). \tag{13b}$$

最小二乘准则旨在求得 $\mathrm{S_{LS}}(\mu)$，以使距离最小

$$\begin{aligned} &\|\mathrm{S_{LS}}(\mu) - x(\mu)\|^2 \\ &\qquad = \langle \mathrm{S_{LS}}(\mu) - x(\mu), \mathrm{S_{LS}}(\mu) - x(\mu) \rangle, \end{aligned} \tag{14}$$

这相当于求解该优化问题

$$\mathrm{S_{LS}}(\mu) = \arg\min_{\mathrm{S}_\star \in \mathbb{P}_m} \|\mathrm{S}_\star(\mu) - x(\mu)\|^2. \tag{15}$$

请注意，函数 $\mathrm{S}_{\mathrm{LS}}(\mu)$ 在最小二乘意义下为所有数据提供最佳全局逼近，但不保证满足插值性质，即对于任意$i = 1, \ldots\ldots, \mathrm{n_s}$，$\mathrm{S}_{\mathrm{LS}}(\mu_i) \neq x_i$。

因此，通过求解正规方程，即线性代数方程组，可以得到最小二乘解

$$\mathbf{M}\mathbf{a} = \mathbf{b}, \tag{16}$$

其中，$\mathbf{a} = [a_0\, a_1 \ldots a_m]^\top$ 是式 (12) 中未知系数构成的向量，$\mathbf{M}$ 是 $(m+1)\times(m+1)$ 矩阵，其元素为 $[\mathbf{M}]_{k\ell} := \langle P_k, P_\ell\rangle$；$\mathbf{b}$ 是元素由 $[\mathbf{b}]_k := \langle P_k, x\rangle$ 给出的向量。如果基 $\{P_0\, P_1 \ldots P_m\}$ 是正交的（即，对于 $k \neq \ell$，$\langle P_k, P_\ell\rangle = 0$），则系数满足 $a_k = \langle x, P_k\rangle / \langle P_k, P_k\rangle$。利用离散标量积 (13b)，得到的最小二乘近似为

$$\mathrm{S}_{\mathrm{LS}}(\mu) := \sum_{k=0}^{m} \left[\frac{\sum_{i=1}^{\mathrm{n_s}} \alpha_i x_i P_k(\mu_i)}{\sum_{i=1}^{\mathrm{n_s}} \alpha_i P_k(\mu_i) P_k(\mu_i)} \right] P_k(\mu). \tag{17}$$

注 3（标量积的选择）。每种标量积都对应一组不同的正交多项式基。因此，标量积 $\langle \cdot, \cdot \rangle$，尤其是权函数 α 的选择，决定了逼近性质。

作为最小二乘方法的替代，极小极大准则同样采用形如(12)的近似，并建议通过最小化 $\mathcal{P}$中的最大误差来确定该函数，从而得到问题

$$\mathrm{S}_{\mathtt{minimax}}(\mu) = \arg \min_{\mathrm{S}_\star \in \mathbb{P}_m} \max_{\mu_\star \in \mathcal{P}} |\mathrm{S}_\star(\mu_\star) - x(\mu_\star)|. \tag{18}$$

尽管极小极大准则颇具吸引力，因为它能够控制最坏情形下的近似（而非像最小二乘那样控制其平均），但它会得到一个非线性方程组，用以确定(12)中的未知权。尽管如此，在(13a)中选取 $\alpha(\mu) = 1/\sqrt{1-\mu^2}$ 时，所得的正交多项式族称为切比雪夫多项式，而最小二乘准则（只需求解线性问题(16)）能够对极小极大解$\mathrm{S}_{\mathtt{minimax}}(\mu)$给出非常好的近似。事实上，若 $x(\mu)$是次数为 $m+1$的多项式，则切比雪夫逼近满足 $x(\mu) - \mathrm{S}_{\mathrm{LS}}(\mu) \propto P_{m+1}(\mu)$。此外，由于 $P_{m+1}(\mu)$是一个在 -1 与 $+1$ 之间振荡 m 次的函数，因此$\mathrm{S}_{\mathrm{LS}}(\mu)$恰好与极小极大近似重合。

注 4（最优采样点）。如果关于函数 $x(\mu)$ 的信息是离散的（即，在不同点 μ_i处的值，其中 $i = 1, \ldots, \mathrm{n_s}$），则必须采用标量积的离散形式（13b）来计算 $\mathbf{b}$。这自然引出了如何最优选择采样点的问题。经典做法是将 $\mathrm{n_s}$ 个点选为 $\mathrm{n_s}-1$ 次切比雪夫多项式的零点。在这种情况下，由相应求积法则所导出的离散正交性会产生与连续切比雪夫多项式密切相关的多项式基，并使其逼近性质在求积精确的次数范围内得以保留。因此，所得近似表现出近极小极大行为，并能有效缓解龙格现象，使切比雪夫节点成为基于离散数据进行多项式插值的近最优选择。

2.4 移动最小二乘近似

移动最小二乘（MLS）近似基于上述标准最小二乘方法，其原理源自光滑粒子流体动力学（SPH）方法。有关该主题的完整介绍，感兴趣的读者请参阅 [119]。

SPH 的思想源自 [154]，其做法是将函数 $x(\mu)$ 近似为

$$\mathrm{S}_{\mathtt{SPH}}(\mu) := \sum_{i=1}^{\mathtt{n_s}} \underbrace{C_\rho \omega_i \Phi\left(\frac{\mu-\mu_i}{\rho}\right)}_{=:N_i(\mu)} x_i, \tag{19}$$

其中 Φ 是窗函数（也可视为核函数），ρ 是膨胀参数，用于计入每个采样点 μ_i的影响半径，ω_i 度量该采样点影响区域的面积（或超体积），C_ρ 是归一化系数。所得基函数 $N_i(\mu)$是窗函数 Φ的简单缩放。

移动最小二乘法采用类似的表述，利用同一基 $\{P_0\, P_1 \ldots P_m\}$，即空间 $\mathbb{P}_m$的基；该基在第 2.3 节中为标准最小二乘方法而引入。其思想是取基函数

$$N_i^{\mathtt{MLS}}(\mu) := \boldsymbol{\alpha}(\mu)^\top \mathbf{P}(\mu_i) \Phi\left(\frac{\mu-\mu_i}{\rho}\right), \tag{20}$$

其中$\mathbf{P} = [P_0\, P_1 \ldots P_m]^\top$ 汇集直至次数 m的多项式基函数，$\boldsymbol{\alpha}$ 是待确定的 μ 的未知函数向量。由此需求解线性方程组以计算 $\boldsymbol{\alpha}$ 对所有的 μ。也就是说，在所有需要计算代理模型的点 μ_i，$i = 1$，.....，$\mathtt{n_s}$ 处，均成立

$$\mathbf{M}(\mu)\boldsymbol{\alpha}(\mu) = \mathbf{P}(\mu), \tag{21}$$

其中 $\mathbf{M}(\mu)$ 是定义如下的加权质量矩阵（或格拉姆矩阵）

$$\mathbf{M}(\mu) := \sum_{i=1}^{\mathtt{n_s}} \mathbf{P}(\mu_i)\mathbf{P}(\mu_i)^\top \Phi\left(\frac{\mu-\mu_i}{\rho}\right). \tag{22}$$

请注意，式（22）中的求和可以进一步限定为仅考虑接近值 μ_i 的点，该值是窗函数的中心。在此语境下，邻域的概念应结合膨胀参数 ρ来理解。

因此，得到的移动最小二乘近似为

$$\mathrm{S}_{\mathtt{MLS}}(\mu) := \sum_{i=1}^{\mathtt{n_s}} x_i\, N_i^{\mathtt{MLS}}(\mu), \tag{23}$$

并且满足以下性质：

- **阶 m -一致性或再现性**：对于次数不超过 m 的多项式 $x(\mu)$，该近似是精确的。
- **自适应性 -** 通过添加新的采样点并调整膨胀参数 ρ，可轻松提升离散化的局部准确性，使其与点之间的特征距离成正比（通常记作 h）。
- **正则性 -** 移动最小二乘形函数 $N_i^{\mathtt{MLS}}(\mu)$ 及其对应的近似 $\mathrm{S}_{\mathtt{MLS}}(\mu)$ 与窗函数 Φ具有相同的正则性。
- **非插值性 -** 与标准最小二乘回归类似，近似 $\mathrm{S}_{\mathtt{MLS}}(\mu)$ 并非插值，即一般而言 $\mathrm{S}_{\mathtt{MLS}}(\mu_i) \neq x_i$，对于 $i = 1, \ldots, \mathtt{n_s}$。

2.5 通过人工神经网络实现通用近似

人工神经网络，或简称神经网络（NN），是通过一组由用户定义的神经元层连接输入和输出参数的响应模型。前馈神经网络自然地提供

一种通过非线性回归策略进行函数逼近的灵活框架，在该策略中，函数的形式是从数据中隐式学习得到的，而不是由用户预先定义的。根据通用逼近定理的奠基性结论 [116], 至少包含一个隐藏层且具有适当非线性激活函数的前馈神经网络，可以以任意精度逼近任意连续函数。

设$\mathtt{n_l}$ 为该网络的层数，并用$\mathtt{n_n^k}$ 表示第k层中的神经元数目。第 j个神经元在第 k层中的状态由 s_j^k表示。在全连接架构中，第 k层的每个节点都与第（$k-1$）层中的所有神经元相连，并且权重$w_{j,\ \ell}^k$ 与每条连接相关联。此外，每个神经元都带有固有偏置 b_j^k。一种简单架构在第一层具有一个输入参数，三个隐藏层各含两个神经元，输出层含一个神经元，如图1所示。

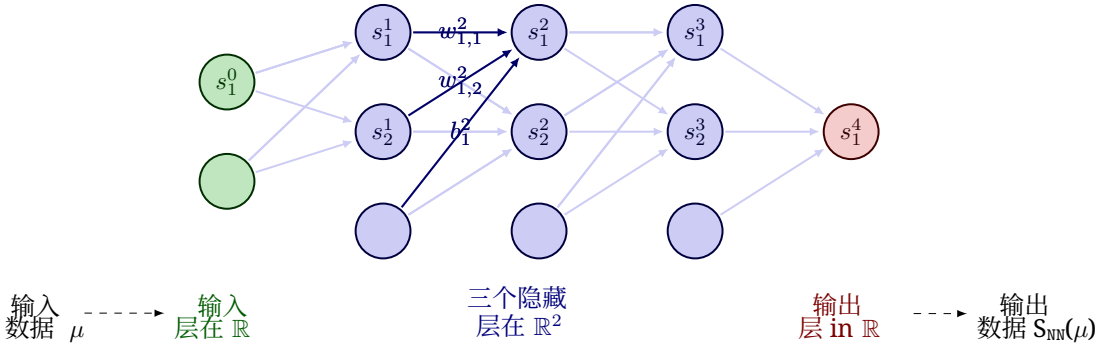

图1：具有一个输入神经元、三个隐藏层（各含两个神经元）和一个输出神经元的神经网络示意图。在每一层中，空白圆点与偏置相关联。

每个神经元的状态定义为

$$s_j^k = g\left(\sum_{\ell=1}^{\mathtt{n_n^{k-1}}} w_{j,\ell}^k s_\ell^{k-1} + b_j^k\right), \tag{24}$$

其中， g 是所谓的激活函数，它是一个将每个神经元的输入和偏置转换为其输出状态的函数（通常为非线性函数）。常用的激活函数包括修正线性单元（ReLU）、双曲正切和 Sigmoid 函数，参见例如 [1]。

为了完整地表征神经网络，需要通过训练过程确定权重 $w_{j,\ell}^k$ 和偏置 b_j^k，从而根据输入数据学习回归函数的形式。其目标是最小化损失函数，该函数根据适当定义的度量评估网络计算出的预测值 $\mathtt{S_{NN}}(\mu_i)$与真实数据 x_i之间的不匹配，所针对的是 $\mathtt{n_s}$ 个实现值 (μ_i, x_i)。常用的损失函数包括平均绝对误差（MAE）和均方误差（MSE），其定义如下

$$\mathcal{L}_{\mathtt{MAE}} := \frac{1}{\mathtt{n_s}} \sum_{i=1}^{\mathtt{n_s}} |\mathtt{S_{NN}}(\mu_i) - x_i|, \tag{25a}$$

and

$$\mathcal{L}_{\mathtt{MSE}} := \frac{1}{\mathtt{n_s}} \sum_{i=1}^{\mathtt{n_s}} (\mathtt{S_{NN}}(\mu_i) - x_i)^2, \tag{25b}$$

分别为。

上述最小化问题可采用多种受梯度下降启发的方法求解，例如随机梯度下降和Adam优化器。此外，

请注意，此类优化问题通常需要引入正则化项。正如前文针对LS和移动最小二乘近似所述，基于神经网络的响应函数并非插值函数，并且对于任意$_{\text{NN}}(\mu_i) \neq x_i$，对于任意 $i = 1, \ldots\ldots, \mathrm{n_s}$。关于神经网络的详细介绍，感兴趣的读者可参阅 [1]。

3 本征正交分解

上一节介绍的近似策略为表征感兴趣量的参数依赖性提供了基础工具。本节将概述本征正交分解（POD）的主要思想，介绍一种构建降阶基的方法，用于代理模型的函数逼近。获得这样的降阶基后，便可采用第2 节讨论的近似技术，近似约化系数对输入参数的依赖关系。

POD 是一种降维技术，可用于构建纯数据驱动的代理模型（采用插值/近似的 POD，以下简称*PODI*），以及基于物理学的代理模型（采用投影的 POD，以下简称*POD-RB*），遵循降阶基（RB）框架 [111, 186, 200]。PODI 和 POD-RB 代理模型都依赖于由快照数据构建的降阶空间，但本文采用的分类方式主要基于算法，并侧重于确定低维近似系数所采用的策略。具体而言，POD-RB 方法通常依赖于将控制方程侵入式投影到降阶空间上；而 PODI 方法通常是非侵入式的，在无法显式获取底层物理问题算子的情况下，构建用户定义参数与约化系数之间的代理映射。值得注意的是，文献中也提出了混合策略，参见例如 [182], ；根据具体实现方式，这些类别之间的界限可能并不清晰。

3.1 使用本征正交分解进行降维

设 $\mathrm{n_p} = 1$ 与 $\mathbf{x}_i$、 $i = 1, \ldots\ldots, \mathrm{n_s}$ 为一组数据，这些数据针对输入参数 μ 的 $\mathrm{n_s}$ 个取值，由实验或高保真仿真获得。这些向量通常称为快照，经中心化后收集于矩阵 $\boldsymbol{X}$ 中，使得

$$\begin{aligned} \boldsymbol{X} &= [\widehat{\mathbf{x}}_1 \ \widehat{\mathbf{x}}_2 \ \ldots \ \widehat{\mathbf{x}}_{\mathrm{n_s}}], \\ \widehat{\mathbf{x}}_i &= \mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}, \text{ and } \bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{\mathrm{n_s}} \sum_{i=1}^{\mathrm{n_s}} \mathbf{x}_i. \end{aligned} \tag{26}$$

在某些情况下，建议对 $\boldsymbol{X}$ 中的快照进行缩放或归一化，以避免其中部分快照被过度代表，例如当数据包含数量级差异显著的不同变量（如不可压缩流动中的速度和压力）时。值得注意的是， $\boldsymbol{X}$ 中快照集合的选择会显著影响使用本征正交分解构建的代理模型的质量。为此，第7 节回顾了与采样方法以及用于充实样本稀疏数据集的数据增强策略相关的一些思路。

本征正交分解基于奇异值分解（奇异值分解），用于消除收集在 $\boldsymbol{X}$中的数据里的冗余信息。 $\boldsymbol{X}$ 的奇异值分解如下

$$\boldsymbol{X} = \widetilde{\boldsymbol{U}} \boldsymbol{\Sigma} \widetilde{\boldsymbol{V}}^{\top}, \tag{27}$$

其中 $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathrm{IR}^{\mathrm{n_o} \times \mathrm{n_s}}$ 是一个对角矩阵，包含 $\boldsymbol{X}$ 按降序排列的奇异值，$\sim$ $\sim$ $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_{\mathrm{n_s}} \geq 0$，而 $\boldsymbol{U} \in \mathrm{IR}^{\mathrm{n_o} \times \mathrm{n_o}}$和 $\boldsymbol{V} \in \mathrm{IR}^{\mathrm{n_s} \times \mathrm{n_s}}$ 是两个酉矩阵。

$\sim$前 $\mathrm{n_s}$ 列 $\boldsymbol{U}$ 构成由快照生成的线性子空间的一组标准正交基。最相关的信息包含在最前面的列中，它们对应于

~较大的奇异值。实践中，会保留前 $\mathtt{n_{POD}}$ 列 $\boldsymbol{U}$，其中 $\mathtt{n_{POD}}$ 满足

$$\sum_{i=1}^{\mathtt{n_{POD}}} \sigma_i \geq (1-\varepsilon) \sum_{i=1}^{\mathtt{n_s}} \sigma_i, \tag{28}$$

其中，因子 $1-\varepsilon$ 表示前 $\mathtt{n_{POD}}$ 个模态所捕获相对能量的下界，$\varepsilon > 0$ 为用户定义的阈值。

这种降阶通过仅用保留的 $\mathtt{n_{POD}}$ 个模态来表示未知量 $\mathbf{x}$ 实现，因为预计 $\mathtt{n_{POD}}$ 远小于 $\mathtt{n_s}$，且 $\mathtt{n_s}$ 通常远小于高保真系统的维度 $\mathtt{n_o}$。具体而言，有

$$\mathbf{x} \simeq \bar{\mathbf{x}} + \boldsymbol{U}\mathbf{z} = \bar{\mathbf{x}} + \sum_{i=1}^{\mathtt{n_{POD}}} [\widetilde{\boldsymbol{U}}]_i z_i, \tag{29}$$

其中，$\mathbf{z} = [z_1\, z_2 \ldots z_{\mathtt{n_{POD}}}]^\top$ 是 POD系数向量，$\boldsymbol{U}$是包含~的前 $\mathtt{n_{POD}}$ 列的矩阵 $\boldsymbol{U}$。

注 5 (高阶奇异值分解)。上述策略可推广至高维问题（$\mathtt{n_p} > 1$），即涉及多个参数 $\boldsymbol{\mu}$ 时。相应的降阶方法基于高阶奇异值分解 *[59, 243]*，，这是 *[240]*提出的一种正交分解的特殊情形。尽管这种方法能够对高维空间进行降阶描述，但无法再保证这种表示具有唯一性，因此存在得到次优代理模型的风险。为解决这一问题，第 *4* 节介绍了基于所谓后验真广义分解分离的技术。

3.2 PODI

根据（29），对于数据集 $\boldsymbol{X}$ 中的每个条目，快照 ^$\mathbf{x}_i$, $i = 1, \ldots, \mathtt{n_s}$ 均可表示为 POD 基的形式：

$$\widehat{\mathbf{x}}_i \simeq \boldsymbol{U}\mathbf{z}_i. \tag{30}$$

定义矩阵 $\boldsymbol{Z} = [\mathbf{z}_1\, \mathbf{z}_2\, \ldots \mathbf{z}_{\mathtt{n_s}}] \in \mathbb{R}^{\mathtt{n_{POD}} \times \mathtt{n_s}}$，用于收集全部 $\mathtt{n_s}$ 个快照的 POD 系数。由此可得

$$\boldsymbol{X} \simeq \boldsymbol{U}\boldsymbol{Z}. \tag{31}$$

将（31）左乘 $\boldsymbol{U}^\top$，即可得到原始数据集中所有快照的截断 POD 系数向量，即：

$$\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{X}. \tag{32}$$

从（29）中构造的降阶近似出发，通过适当计算（29）中的系数，即可针对参数的新取值 $\boldsymbol{\mu}_\star$ 确定代理模型。PODI 由 [157]，首次提出，它采用标准的函数逼近技术，包括插值和回归方法。

首先，该方法将 $\boldsymbol{\mu}_\star$ 表示为用于构建高保真解数据集的 $\mathtt{n_s}$ 组参数 $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}$ 的线性组合。具体做法是在参数空间 $\mathcal{P}$ 中进行插值，即定义向量 $\mathbf{w}_\star$，其中包含 $\mathtt{n_s}$ 个权重，使得

$$\boldsymbol{\mu}_\star = \boldsymbol{\Theta}\mathbf{w}_\star, \tag{33}$$

其中，矩阵 $\boldsymbol{\Theta} = [\boldsymbol{\mu}_1\, \boldsymbol{\mu}_2\, \ldots\, \boldsymbol{\mu}_{\mathtt{n_s}}] \in \mathbb{R}^{\mathtt{n_p} \times \mathtt{n_s}}$的每一列收集了与 $\boldsymbol{X}$中的快照相关联的一组参数。随后，通过使用权重 $\mathbf{w}_\star$对与 $\mathtt{n_s}$ 个快照相关联的POD系数进行插值，可以得到与 $\boldsymbol{\mu}_\star$ 相关联的降阶近似的新一组系数 $\mathbf{z}_\star$，从而得到

$$\mathbf{z}_\star = \boldsymbol{Z}\mathbf{w}_\star, \tag{34}$$

在点 $\boldsymbol{\mu}_\star$ 处求值得到的PODI代理模型（29），即，

$$\mathbf{S}_{\mathtt{POD}}(\boldsymbol{\mu}_\star) := \bar{\mathbf{x}} + \boldsymbol{U}\mathbf{z}_\star. \tag{35}$$

值得注意的是，上述框架也可以扩展到非插值函数近似的情形，例如第 2.3、2.4 和 2.5 节回顾的回归方法。更具体地说，文献中提出了多种策略，在 PODI 中对快照进行插值/近似，包括三次样条插值 [157], 在格拉斯曼流形的切空间上进行插值 [4], 针对散乱数据的双变量插值 [3], 分段线性多项式函数 [178], 径向基函数 [250], 稀疏网格配置 [263],移动最小二乘 [202], 在稀疏网格点上进行最小二乘 [148], 克里金法或高斯过程回归 [98,264,265], 前馈神经网络 [112], 长短期记忆网络 [257],k近邻回归模型 [231], 以及 Transformer 网络 [262]。需要注意的是，在第 1.2 节介绍的函数近似框架中，不应将上述不同方法视为本质上截然不同的建模范式。事实上，所有这些方法都是在引入解的降阶表示后，用于解决同一个基础问题——近似参数化输入输出映射的不同策略。它们的主要区别在于近似空间及其关联的代理映射如何构建和使用；此外，各方法所采用的假设、侵入性程度，以及在数据需求、表达能力、鲁棒性和泛化能力方面的权衡也各不相同。基于几何插值的方法（例如，在矩阵流形或格拉斯曼流形上进行插值）会显式利用降阶子空间的结构特性，而回归和学习方法（例如，神经网络）则通过通用函数表示来近似相同的映射。

当然，面对高维函数时，传统的插值和近似方法可能会变得计算上不可行，因为它们需要难以管理的大量数据。在此背景下，受相关研究工作的推动 [32]，稀疏性促进策略日益受到关注。此外，近年来，研究者致力于数据增强流程，通过构造能够引入相关信息的人工快照来丰富数据量不足的数据集，并将其加入训练集（参见第7.2节）。

3.3 POD-RB

假设上一节介绍的数据$\mathbf{x}_i$, $i = 1, \ldots, \mathtt{n_s}$ 来自一个已知的全阶求解器（例如，求解有限元模型，或类似地求解有限体积模型或采用有限差分法）。每个快照都是一个维度为 $\mathtt{n_o}$ 的向量，由线性方程组的解得到:

$$\boldsymbol{K}(\boldsymbol{\mu})\mathbf{x}(\boldsymbol{\mu}) = \mathbf{f}(\boldsymbol{\mu}), \tag{36}$$

其中， $\boldsymbol{K}$ 和$\mathbf{f}$ 分别表示由所研究数学模型的离散化所产生的矩阵和右端向量。

对于新参数值$\mathbf{z}$ （29）中的系数 $\boldsymbol{\mu}_\star$ ，另一种求解策略是要求物理模型在降阶空间中成立。具体而言，将高保真模型（投影36）投影到由降阶基所张成的低维空间 $\boldsymbol{U}$ （29）中引入，即要求系统的物理定律在降阶空间中成立。在此背景下，选取系数$\mathbf{z}$，**从而确保代理模型按构造满足描述所研究现象的物理定律。遵循降阶基的思路，通过对全阶系统（36）进行伽辽金投影，可确定$\mathbf{z}$**（29），由此得到 POD-RB 系统

$$\left[\boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{K}(\boldsymbol{\mu})\boldsymbol{U}\right]\mathbf{z} = \boldsymbol{U}^\top \mathbf{f}(\boldsymbol{\mu}) - \boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{K}(\boldsymbol{\mu})\,\bar{\mathbf{x}}, \tag{37}$$

规模缩减为$\mathtt{n_{POD}} \ll \mathtt{n_s}$。

值得注意的是，尽管POD-RB需要访问用于执行物理仿真的高保真求解器，但所得代理模型满足分析系统的底层物理定律。相反，尽管PODI允许在不与底层高保真求解器通信的情况下构建代理模型，但其近似能力更为有限，并且在考虑外推时往往失效。这一观察促使人们对深度学习解的兴趣日益增长，以利用其在本征正交分解背景下的泛化能力，如第3.2节所述。

如果底层物理学由非线性模型描述，则应将方程（36）替换为 by a c相应的非线性问题

$$\mathcal{L}_{\boldsymbol{\mu}}(\mathbf{x}(\boldsymbol{\mu}))[\mathbf{x}(\boldsymbol{\mu})] = \mathbf{f}(\boldsymbol{\mu}), \tag{38}$$

其中 $\mathcal{L}_{\boldsymbol{\mu}}$（$\odot$）[$\odot$]是非线性偏微分方程（例如纳维–斯托克斯方程）的离散化。在此背景下，尽管可以进行降阶，但（37）中所述的投影需要使用全阶解$\mathbf{x}$（$\boldsymbol{\mu}$）对非线性模型（38）**进行求值**。

（38）中非线性的引入，自然凸显了经典基于POD的代理模型所面临的若干当代挑战。特别是，当解流形呈现显著的非线性特征时，依赖线性近似空间可能导致收敛缓慢或准确性下降。这一局限性可以形式化地联系到不利的Kolmogorov n-宽度 [49]衰减。在这些情形下，增加降阶基的维度并不一定能够提高准确性，从而限制了线性子空间近似的有效性。

这些考量推动了近年来大量相关研究，旨在通过非线性降维技术克服线性子空间的局限性。早期例子包括核主成分分析（KPCA） [219] 和局部线性嵌入（LLE） [210]，它们旨在通过将数据嵌入低维非线性流形来捕捉非线性结构。在此基础上，人们发展出了多种非线性代理模型方法，例如利用局部最大熵近似进行流形学习 [166], 基于弥散近似的流形行走 [143], 以及基于核方法的POD扩展 [63,214]。尽管这些方法能够在存在非线性解流形时显著提升近似能力，但在现有的大多数实现中，它们通常会对用于生成快照的高保真模型具有侵入性。这一观察促使人们日益关注基于机器学习的非线性降阶表示。特别是，利用自编码器的深度学习方法旨在构建具有良好表达能力的非线性代理模型，同时缓解经典非线性流形技术的一些侵入性约束（见第5.3节）。与此同时，人们提出了将基于投影的方法与数据驱动组件（例如算子学习 [190] 和闭合建模 [227]相结合的混合方法，以增强代理模型在强参数变化下的鲁棒性和泛化能力。

总体而言，这些进展反映出一种更广泛的转变：人们正转向能够兼顾物理结构 [86], 可解释性与可解释性 [246] 的代理建模策略，以提升高度非线性和高维参数设置下的近似准确性、计算效率与实际适用性。尽管全面回顾这些新兴方向超出了本文的范围，但在此加以讨论有助于理解基于线性本征正交分解的模型的局限性，并阐明非线性方法和数据辅助方法在本文所采用的广义函数近似框架中的作用。

值得注意的是，尽管非线性降维技术通过克服线性子空间的局限性，增强了代理模型的逼近能力，但仍需使用全阶解$\mathbf{x}(\boldsymbol{\mu})$ 对所得低维模型进行评估，见（38），这显著限制了将问题投影到降阶空间所带来的计算优势。在此背景下，需要采用超降阶方法，以经济地评估相关

算子。文献中提出的可用解决方案包括：缺失 POD [72,260],超约简配置 [212], 最佳点插值 [176], 缺失点估计 [8],离散经验插值方法（DEIM） [41], 最小二乘Petrov-Galerkin（LSPG）投影 [36], 近似张量Gauss-Newton方法（GNAT） [37], 能量守恒采样与加权（ECSW）方法 [73], 以及经验求积方法 [107]。

需要注意的是，经典超约简方法通常具有侵入性，因为它们需要访问高保真求解器，因此会对工业环境造成额外限制。为解决这一问题，人们提出了不同的策略。一方面，纯数据驱动过程直接根据数据近似降阶算子，无需访问全阶模型的算子 [138, 190]。另一方面，近年来深度学习算法也被用于超缩减。例如， [42] 提出了物理增强神经网络（PRNN）范式，以避免对非线性问题进行超缩减； [48] 提出在非线性POD-DEIM算法中训练神经网络来替代DEIM； [114]则讨论了一种神经经验插值方法（NEIM）。

从性能角度来看，基于POD的代理模型通常在构建降阶基后具有极高的在线效率，因此对实时应用和多查询应用尤其具有吸引力。然而，这一优势往往伴随着昂贵的离线阶段；对于 POD-RB，还需要以侵入方式访问高保真求解器；此外，当底层解流形呈现强非线性特征或具有高维参数依赖性时，模型的表达能力也会受到限制。正如前文所述，这些因素对经典的基于 POD的代理模型造成了实际限制，并促使人们探索其他或互补策略。特别是，基于学习的方法和混合数据辅助方法旨在通过提升灵活性、可扩展性和鲁棒性来缓解其中一些限制，同时力求保留基于POD的降阶表示所具备的效率优势 [30, 78, 170, 251]。

4 适当广义分解

构建函数代理模型时，适当广义分解（PGD）框架是一种不同于本征正交分解（POD）的替代方案，其相关介绍见 [46]。基于第 2 节中引入的近似概念，这里将 PGD 作为构建降阶基的一种策略进行回顾，以便为参数化系统提供代理表示。与 POD-RB 等基于投影的方法不同，PGD 将参数依赖性直接嵌入解的分离表示中。具体而言，其核心思想是通过可分离表示来近似快照集合，也就是将其表示为以下各项之和： m秩一项：

$$\mathbb{X}^m_{\mathtt{PGD}} := \sum_{j=1}^{m} \sigma^j \mathbf{f}^j_{\mathrm{x}} \otimes \mathbf{\Psi}^j_1 \otimes \mathbf{\Psi}^j_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{\Psi}^j_{\mathrm{n_p}}. \tag{39}$$

式（39）中的每一项称为模态，是向量 $\mathbf{f}^j_{\mathrm{x}}$（封装数据的空间依赖性）与 $\mathtt{np}$ 个向量 $\mathbf{\Psi}^j_k$、 $k = 1$、.....、$\mathtt{np}$（各自依赖于一个参数 μ_k）的乘积。此外， σ^j 表示第 j 个模态的幅值。该框架在保留高效代理建模所需降低复杂度之优势的同时，给出感兴趣量的显式函数逼近。与本征正交分解的讨论类似，PGD 也可根据计算分离表示模态所采用的策略，构建基于物理的代理模型与数据驱动代理模型。本节其余部分将介绍用于构造分离近似（39）的不同 PGD 策略。

4.1 后验 PGD

假设快照集合 $\mathbb{X}$ 按照张量结构构造，即对每个参数 μ_k、 $k=1$、……、$\mathtt{n_P}$ 各构造一个矩阵 $\boldsymbol{X}$（见式（26））。所得高维张量 $\mathbb{X}$特征为$\mathtt{n_p}+1$ 维。

后验 PGD，也称为 [168] 中的 PGD 分离，或 [62],中的最小二乘 PGD，采用贪心方法计算分离近似（39）。注意到

$$\mathbb{X}^m_{\mathtt{PGD}} = \sigma^m \mathbf{f}^m_{\mathtt{x}} \otimes \boldsymbol{\Psi}^m_1 \otimes \boldsymbol{\Psi}^m_2 \otimes \cdots \otimes \boldsymbol{\Psi}^m_{\mathtt{n_p}} + \mathbb{X}^{m-1}_{\mathtt{PGD}}, \tag{40}$$

the 后验 PGD 算法假设已知 $m-1$个模态，以计算第 m 个张 rm in t量的 PGD 展开，如下所示:

$$\begin{aligned}\left(\mathbf{f}^m_{\mathtt{x}}, \boldsymbol{\Psi}^m_1, \ldots, \boldsymbol{\Psi}^m_{\mathtt{n_p}}\right) = \\ \arg\min \left\| \mathbb{X} - \mathbb{X}^{m-1}_{\mathtt{PGD}} - \sigma^m \mathbf{f}^m_{\mathtt{x}} \otimes \boldsymbol{\Psi}^m_1 \otimes \cdots \otimes \boldsymbol{\Psi}^m_{\mathtt{n_p}} \right\|_2,\end{aligned} \tag{41}$$

也就是说，它通过最小化全阶数据 $\mathbb{X}$与此前计算出的近似 $\mathbb{X}^{m-1}_{\mathtt{PGD}}$之间的残差差异，来确定向量（$\mathbf{f}^m_{\mathtt{x}}$、 $\boldsymbol{\Psi}^m_1$、……、 $\boldsymbol{\Psi}^m_{\mathtt{n_p}}$），其中该近似包含 $m-1$项。更具体地说，贪心过程旨在每一步计算最佳近似$\sigma^m \mathbf{f}^m_{\mathtt{x}} \otimes \boldsymbol{\Psi}^m_1 \otimes \cdots \otimes \boldsymbol{\Psi}^m_{\mathtt{n_p}}$，以描述目标张量 $\mathbb{X}-\mathbb{X}^{m-1}_{\mathtt{PGD}}$中尚未解决的部分 $\mathbb{X}$。从实践角度来看，非线性问题（41）采用交替方向方案求解，计算依赖于基本的张量运算（即分离张量的乘积与求和）。后验 PGD 策略的概要见算法 1。该方法在 [62], 中进行了严格介绍，并可通过开源库 [1,2] 获取；这些库为最终用户提供黑箱，从而能够无缝执行基于 PGD 的运算。

算法 1 后验 PGD 算法

输入：对于贪心增丰循环，容差的值 $\eta^\star$。对于交替方向循环，幅值变化容差的值 η_σ 以及最大迭代次数 $\mathbf{n_{i_o}}$。1：计算 $\mathbf{n_s}$ 个快照。2：设置 $m \leftarrow 1$ 并初始化空间模态的幅值 $\sigma^1 \leftarrow 1$。3：当 $\sigma^m/\sigma^1 > \eta^\star$ 时，执行 4：设置 $q \leftarrow 1$ 并初始化参数模态。5：当 $\varepsilon_\sigma > \eta_\sigma$ 或 $q <$ $\mathbf{n_i}$ 时，执行 6：计算秩一空间模态。7：依次计算秩一参数模态。8：更新停止准则 $\varepsilon_\sigma = (\sigma^{m,q} - \sigma^{m-1})/\sigma^{m,q}$。9：增加交替方向迭代的计数器 $q \leftarrow q+1$。10：结束循环。11：增加模态计数器 $m \leftarrow m+1$。12：结束循环

在新点 $\boldsymbol{\mu}_\star$ 处评估所得的 PGD 替代模型，只需针对参数 $[\boldsymbol{\mu}_\star]_k$ 的相应取值，分别计算每个参数模态 $\boldsymbol{\Psi}^j_k$（ $k=1$、……、$\mathtt{n_P}$）和 $j=1$、……、 m。由此得到一组标量系数 $\mathrm{b}^j_k := \boldsymbol{\Psi}^j_k([\boldsymbol{\mu}_\star]_k)$，作为线性组合中各空间模态 $\mathbf{f}^j_{\mathtt{x}}$ 的权重:

$$\mathbf{S}_{\mathtt{PGD}}(\boldsymbol{\mu}_\star) := \sum_{j=1}^{m} \sigma^j \mathbf{f}^j_{\mathtt{x}} \prod_{k=1}^{\mathtt{n_p}} \mathrm{b}^j_k. \tag{42}$$

[1] https://git.lacan.upc.edu/zlotnik/algebraicPGDtools
[2] https://git.lacan.upc.edu/encapsulated-pgd/demo

与本征正交分解（POD）不同，这种方法可无缝适用于任意数量的 $\mathtt{np}$ 个参数，并提供最优的参数数据 $\mathbb{X}$的分离表示。在此背景下，后验 PGD 是注释 5中讨论的高阶奇异值分解框架的自然替代方案。该算法将模态的幅值用作停止准则，因为它能相对衡量 PGD 展开中新计算项的重要性。当然，也可以考虑其他策略，例如引入适当的误差控制程序，以针对问题中的未知量或给定的感兴趣量，参见例如 [82]和 [130]。

值得注意的是，所得代理模型（42）完全由数据驱动，因为控制方程并未在降阶空间中施加。在此背景下，后验 PGD 是第3.2节所讨论的 PODI 解的一种替代方法，并自然地得到非侵入式代理模型。请注意，与 PODI 不同，这种方法不属于基于投影的降阶模型。

注释 6 (参数模态的解释**)。** 请注意，参数模态 $\boldsymbol{\Psi}_k^j$ 既可以视为向量（例如，在 (39)中），也可以视为变量 $[\boldsymbol{\mu}]_k$ 的函数（用于计算 b_k^j）。通常，向量 $\boldsymbol{\Psi}_k^j$ 表示相应函数在一维网格上的节点值，该网格对第k个参数维进行离散。在这种情况下，计算 b_k^j 只需进行简单的插值。不过，也可以采用更复杂的模态函数表示，例如将表示该模态的函数基系数收集到向量 $\boldsymbol{\Psi}_k^j$ 中。

4.2 稀疏促进PGD

为降低构建快照集合 $\mathbb{X}$所需的计算成本（尤其是在高维问题中），文献讨论了不同策略，以避免对 $\mathbb{X}$ 的张量结构的需求。其目标是从稀疏数据出发构造分离近似，而不是按照快照的笛卡尔分布对参数空间进行采样。

第一种稀疏PGD变体称为 s-PGD，由 [120]提出。该策略采用配点法，构造 PGD 分离展开来近似式（41）中的范数。在此背景下，有限的数据量与高阶多项式逼近相结合，导致了过拟合现象。为避免这一问题，s-PGD 采用次数自适应策略，限制首批 PGD 模态的次数保持较低，并在 PGD 解需要刻画更高阶变化时逐步提高次数。

基于类似的思路， [152] 提出了一种基于自适应稀疏网格的最小二乘 PGD 策略 [31, 196]。其思路是构造 PGD 分离近似，仅最小化按稀疏网格选取的采样点上的误差，从而为高维参数问题构建简约的代理模型。请注意，与 [120], 不同， [152] 所计算的 PGD 模态完全由式（41）中残差的最小化确定，不附加任何约束。

在 [205]，（41）中，标准（欧几里得或弗罗贝尼乌斯）范数被参数空间 $\mathcal{P}$中的范数所取代。此外，用于构建数据集的采样点被用作积分点，并配以适当的离散权重，以计算新引入的范数。因此，求积权重经过调整，以多维牛顿–柯特斯的方式优化积分阶数。值得注意的是，本研究为（39）的空间近似和参数近似所选用的函数是标准 $\mathcal{C}^0$ 有限元形函数。尽管这些函数比高阶多项式更加稳定，并且凭借其紧支撑和较小的模板使系统更加稀疏，但其光滑性可能不足（例如，一阶导数存在跳跃，二阶导数存在奇异性）。因此，在计算分离近似（39）时，稀疏 PGD 会引入一个正则化项，以惩罚近似函数梯度的欧几里得范数。

最后， [216] 讨论 s-PGD 的两种变体，即正则化稀疏 PGD（rs-PGD）和双重稀疏 PGD（s2-PGD）。一方面，rs-PGD 通过引入两个正则化项，将岭回归与 LASSO 回归相结合：其中一个基于 $\mathcal{L}_2$ 范数，另一个基于未知量的 $\mathcal{L}_1$ 范数。前者可平滑 PGD 响应面以避免过拟合，后者则通过仅保留近似中最相关项的贡献，使解变得稀疏。另一方面，s2-PGD 通过在每个 PGD 方向上分别施加 LASSO 正则化来促进稀疏性。

4.3 先验 PGD

与第3.3 节关于本征正交分解的论述类似，也可以通过在降阶层面强制满足物理定律，构建基于 PGD 的代理模型。这一框架引出了所谓的先验PGD 理念，即利用贪心算法依次最小化底层控制方程的残差，构造分离表示（39）中的秩一近似$\mathbf{f}_{\mathrm{x}}^{m}$， $\boldsymbol{\Psi}_{1}^{m}$，……， $\boldsymbol{\Psi}_{\mathtt{n_p}}^{m}$。对于线性方程，对所有 $\boldsymbol{\mu} \in \mathcal{P}$，这将得到以下问题的解

$$\mathbb{K}_{\mathtt{PGD}}(\boldsymbol{\mu})\mathbb{X}_{\mathtt{PGD}}^{m} = \mathbb{F}_{\mathtt{PGD}}(\boldsymbol{\mu}), \tag{43}$$

其中， $\mathbb{K}_{\mathtt{PGD}}$ 和 $\mathbb{F}_{\mathtt{PGD}}$ 是所谓的分离张量，见 [62], ，其定义如下

$$\mathbb{K}_{\mathtt{PGD}}(\boldsymbol{\mu}) := \sum_{j=1}^{M_K} \boldsymbol{K}^j \xi^j(\boldsymbol{\mu}) = \sum_{j=1}^{M_K} \boldsymbol{K}^j \prod_{k=1}^{\mathtt{n_p}} \xi_k^j(\mu_k), \tag{44a}$$

$$\mathbb{F}_{\mathtt{PGD}}(\boldsymbol{\mu}) := \sum_{j=1}^{M_f} \mathbf{f}^j \eta^j(\boldsymbol{\mu}) = \sum_{j=1}^{M_f} \mathbf{f}^j \prod_{k=1}^{\mathtt{n_p}} \eta_k^j(\mu_k), \tag{44b}$$

其中 $\boldsymbol{K}^j$ 和 ξ^j （分别为$\mathbf{f}^j$ 和 η^j）是与矩阵 $\boldsymbol{K}$（$\boldsymbol{\mu}$）相关联的分离表示中的第 j个空间模态和参数模态（分别对应于（36）中的向量$\mathbf{f}$（$\boldsymbol{\mu}$））。

与后验 PGD 不同，该方法并不依赖于预先计算快照的可用性。先验 PGD 的数值策略在算法 2 中作了概述，它基于交替方向法来最小化参数化问题（43）的残差。用户无需选择任何快照来构建降阶模型：贪心算法负责计算全阶解，以在富集过程中最小化系统的残差，而所需的数目 m 项会根据用户定义的容差自动确定。多年来，该方法已成功应用于许多（参数化）物理系统，感兴趣的读者可参阅综述文章 [47]。因此，尽管后验 PGD 高度依赖解的初始数据集来构建精确的代理模型，先验 PGD 却规避了这一问题，因为它不需要对解有任何事先了解。需要注意的是，鉴于富集过程的贪心性质，先验 PGD 按顺序计算模态。相反，与本征正交分解类似，后验 PGD 过程可以很容易地并行化，因为快照计算彼此独立，从而显著降低离线阶段的计算成本。此外，如前所述，后验 PGD 纯粹的数据驱动框架允许构建独立于底层物理问题的非侵入式实现。相反，先验 PGD 需要了解支配物理系统的方程，也就是能够访问矩阵 $\boldsymbol{K}^j$、 $j = 1$、……、M_K 以及向量 $\mathbf{f}^j$、 $j = 1$、……、M_f，这些矩阵和向量与所分析现象的空间离散相关联。在此背景下，PGD 的大多数早期实现相对于空间问题离散化所采用的方法是侵入式的，需要完全访问高保真求解器，从而严重限制了该方法在现实工业场景中的适用性；在这些场景中，商业软件的使用

算法 2 先验 PGD 算法

输入： 对于贪心增丰循环，容差的值为 $\eta^\star$。对于交替方向循环，迭代次数为 $\mathtt{n_i}$。

设置 $m \leftarrow 1$ 并初始化空间模态 $\sigma^1 \leftarrow 1$的幅值。
当 $\sigma^m/\sigma^1 > \eta^\star$ **时执行**
  设置 $q \leftarrow 1$ 并初始化参数预测。
  当 $q < \mathtt{n_i}$ **时**
    收缩空间方向。
    沿参数方向进行投影并组装参数系统（依次针对所有参数）。
    求解参数模态对应的线性系统。
    压缩参数方向。
    沿空间方向投影并组装空间系统。
    求解空间模态对应的线性系统。
    增加交替方向迭代计数器 $q \leftarrow q + 1$。
  结束循环
  增加模态计数器 $m \leftarrow m + 1$。
结束 while 循环

往往更受青睐。近年来，人们投入了大量精力来开发与商业库和开源库集成的非侵入式 PGD 降阶模型，例如 SAMCEF [53], Abaqus [280],OpenFOAM [237, 238], VPS/Pamcrash [205], 以及 MSC-Nastran [38, 39]。

为提供一个完全非侵入式、且与底层物理模型完全无关的框架， [62] 提出将 PGD 替代模型构造为高维离散化方程的低秩近似（36）。由此得到的先验 PGD 方法已集成于开源库[1,2] 中，这些库提供 MATLAB、Python 和 C 的黑箱工具++ ，用于对分离张量执行操作，并以无缝方式构建基于 PGD 的代理模型。关于先验 PGD 与后验 PGD 方法的详细批判性比较和计算比较，请读者参阅 [87]。

总而言之，基于 PGD 的方法构建的参数化代理模型对参数具有显式的函数依赖关系，因此能够提供紧凑的表示，并在在线阶段实现极高的效率。然而，这些方法的性能与底层算子的可分离性假设密切相关。事实上，尽管分离表示能够显著降低计算复杂度，但其有效性取决于低秩、全局可分离结构的存在；当存在强非线性或高度耦合的参数时，这类结构可能难以实现。这些考量自然促使人们探索更灵活的代理模型构造方法，包括基于学习的方法。尤其是，该领域的最新进展包括将 PGD 算法与打靶法结合，以处理非线性动力系统 [146], ，以及利用深度学习增强基于 PGD 的代理模型的混合方法。这些方法包括一种学习张量分解的策略 [153], 、一种将神经网络插值与基于张量分解的代理结构相结合的混合PGD-NN算法 [57], ，以及一种借助学习构造受 PGD 启发的分离表示的技术，该技术通过训练神经网络来学习解的模态 [12]。

5 神经网络

前几节讨论的方法依赖于构建解流形的结构化降阶表示。相比之下，本节概述了近期基于神经网络的方法，用于近似输入参数与感兴趣的输出量之间的关系。这引入了一种互补范式，在该范式中，代理模-

型被构建为学习得到的函数表示。在此背景下，神经网络可以通过两种不同方式加以应用。一方面，可以在第2节介绍的函数近似框架中使用神经网络，从POD或PGD等降阶表示出发，学习感兴趣量的参数依赖性。另一方面，也可以利用神经网络直接学习数据本身的非线性降阶表示，从而提供替代性的降维机制。在许多情况下，这些方法可以被理解为应对第3 节和第4节所讨论的基于投影和分离表示方法局限性的回应，分别针对此前综述的由线性子空间限制、算法侵入性，以及非线性和高维参数区域中的可扩展性所导致的不足。

本节探讨的核心思路是，利用基于第 黑箱 神经网络范式的通用（可能是）函数表示，对数据集合（即快照）进行近似。该范式已在第 2.5 节中介绍。从这一角度来看，神经网络充当万能逼近器，能够捕捉复杂的非线性依赖，并补充前文介绍的代理建模策略。与本征正交分解和 PGD 策略一样，本节还将探讨如何将物理知识融入所得代理模型的基本思路，并遵循学习偏置和归纳偏置的概念。

5.1 使用神经网络进行降维

可通过设置神经网络的输出数据 $\mathrm{S}_{\mathrm{AE}}(\mathbf{x})$，使其表示对作为输入提供的真实数据 $\mathbf{x}$ 的近似，从而构建用于降维的神经网络。在此情境下，通过将信息压缩到一个称为潜在空间的低维流形中，可获得低秩近似。请注意，这一过程是在无监督情境下进行的：没有任何描述对参数 $\boldsymbol{\mu}$ 依赖关系的信息可用，只有快照 $\mathbf{x}_i$ （$i = 1,\ldots,\mathrm{n_s}$），并且这些快照既作为输入，也作为输出。

该架构（见图2）所得网络称为自编码器，其特点是包含一个压缩模块（即编码器），将输入数据的维度降至低维潜在空间，以及一个解压缩模块（即解码器），将信息扩展至与输入相同维度的空间。

自编码器的训练旨在确定网络的权重和偏置，方法是最小化重构输出S_{AE}（$\mathbf{x}_i$）与输入$\mathbf{x}_i$ 之间的偏差，其中 i =1，.....，$\mathrm{n_s}$，例如采用相对于输入规模$\mathrm{n_o}$归一化的平均绝对误差和均方误差损失函数进行度量。

$$\mathcal{L}^{\mathrm{AE}}_{\mathrm{MAE}} := \frac{1}{\mathrm{n_s}\,\mathrm{n_o}} \sum_{i=1}^{\mathrm{n_s}} |\mathrm{S}_{\mathrm{AE}}(\mathbf{x}_i) - \mathbf{x}_i|, \tag{45a}$$

and

$$\mathcal{L}^{\mathrm{AE}}_{\mathrm{MSE}} := \frac{1}{\mathrm{n_s}\,\mathrm{n_o}} \sum_{i=1}^{\mathrm{n_s}} \|\mathrm{S}_{\mathrm{AE}}(\mathbf{x}_i) - \mathbf{x}_i\|^2. \tag{45b}$$

在 [113], 中，自编码器相对于主成分分析（PCA）在降维方面的潜在优越性已得到数值研究，而感兴趣的读者可参阅 [6] ，以了解线性降维与非线性降维算法的详细比较。

5.2 数据驱动与基于物理的近似

本节综述了深度学习在计算科学和工程应用中进行函数逼近方面的贡献，涵盖纯数据驱动方法以及结合物理知识的方法。

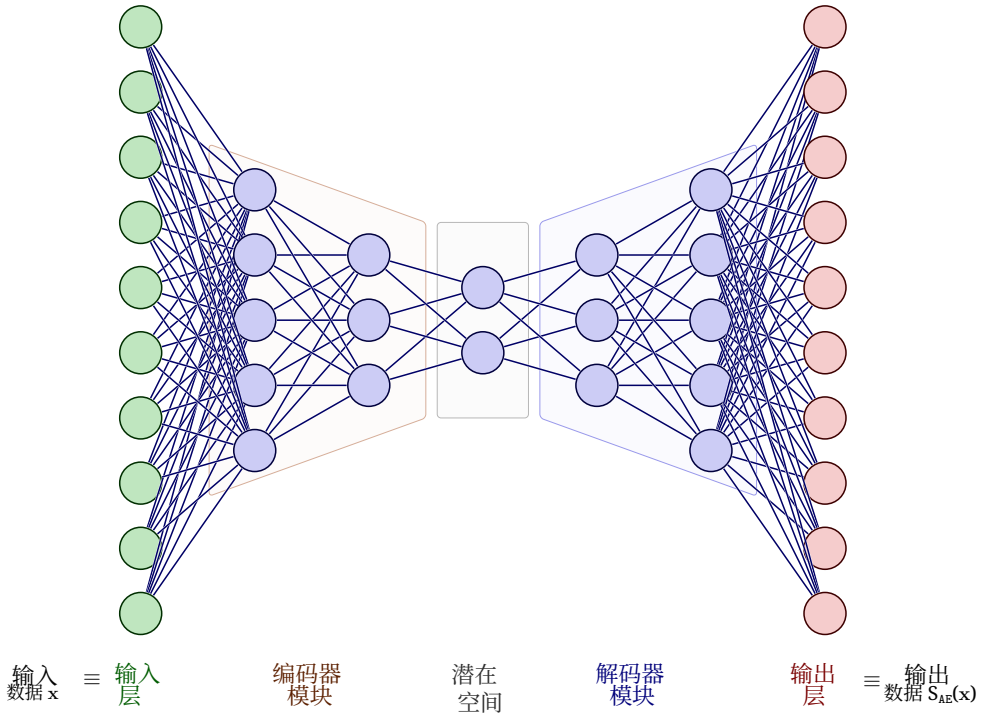

图2：自编码神经网络示意图。

在 [13], 数据驱动方法下，本文讨论了神经网络训练。作者提出了一种多输出前馈神经网络，用于训练并预测取决于问题参数的工程关注量的响应面。在存在低正则性解（例如激波）的情况下，结果凸显了该方法相较于本征正交分解的优越性能。

尽管如此，众所周知，数据驱动模型可能无法提供物理可容许解，尤其是在训练集范围之外进行外推时。与 POD-RB 和先验 PGD 类似，也可以将物理信息纳入基于机器学习的代理模型中，尤其是使用神经网络。据作者所知，现有基于深度学习的函数逼近工作可根据在神经网络框架中引入物理知识的策略分为两类，即学习偏置和归纳偏置。

引入学习偏置的方法会在训练过程中融入物理知识，例如，参见 [151]and [253]，中的 DeepONet 范式，该范式利用通用逼近定理学习（参数化）非线性算子。 [145], 中也讨论了类似方法，即所谓的傅里叶神经算子（FNO）。为降低所得问题的维度， [201] 将 U-Net架构 [209] 与神经算子相结合；前者用于降低维度，而后者则提出在潜在空间中训练神经算子，方法是将 DeepONet 与自编码器相结合。 [7, 206] 还介绍了其他通过学习偏置融合物理学与数据的混合建模示例。

依靠归纳偏置的策略会在神经网络架构中引入物理信息，例如强制满足热力学定律。在 [110]，中，前馈网络融入了 GENERIC框架 [96] ，从而得到一种能够保持底层物理系统结构的神经网络。与前文讨论 DeepONet 时类似，上述保结构神经网络可以与稀疏自编码器结合，以降低问题的维度，并实现对系统的简约表示 [109]。

5.3 基于神经网络的代理模型

本节重点介绍如何利用神经网络进行构建降阶模型和代理模型所需的降维。请注意，这超出了第 3 节讨论的范围；该节主要探讨神经网络在非线性问题的超缩减，以及在经典投影降阶模型生成的降阶空间中进行插值方面的应用。

这一方向最早的研究可追溯至 [144], ，其中采用由卷积层构成的自编码器进行降维，从而得到受经典伽辽金投影降阶模型和 LSPG 投影降阶模型启发的非线性代理模型（即流形伽辽金降阶模型和流形最小二乘彼得罗夫-伽辽金降阶模型）；以及 [270], ，该研究将自编码器与前馈神经网络相连，由后者将问题参数映射到潜在空间表示。 [77]也探讨了类似策略。在这些研究的基础上，研究者探索了与非线性问题的非线性降维相关的多个方面，包括针对浅层掩码自编码器 [132]和深度卷积自编码器 [207]的超缩减技术。

此外，研究者还提出了多种策略，在使用卷积自编码器降低问题维度后进行函数逼近。在 [160], 中，作者使用自编码器压缩潜在空间中的信息，并采用长短期记忆网络（LSTM） [115] 进行插值，这种做法常见于非线性动力系统的数据驱动代理建模（例如，参见 [248]）；而 [261] 在保留 LSTM 的同时，在卷积自编码器中引入自注意力模块，以增强网络提取非局部特征的能力，从而扩展了这一模型。 [124], 将自编码器与径向基函数相结合； [106] 提出使用 Transformer 网络 [244], 在降阶编码空间中学习动力学；而 [256] 则使用卷积自编码器进行压缩，并通过卷积神经网络将问题参数映射到潜在空间。在 [88], 中，作者将前馈神经网络与解码器块相结合，学习从问题参数到外层应用解的映射，该应用涉及弹性结构的参数化拓扑优化。 [125], 提出了一种利用定义在非结构化网格上的仿真数据的替代方法：以结合 Barlow Twins 自监督学习策略的前馈神经网络取代卷积层，以压缩信息 [274] 。

近年来，人们还考虑了其他神经网络架构，例如将变分自编码器与基于投影的本征正交分解 [225]以及 β-变分自编码器 [133]相结合，以提取可与卷积神经网络 [69] 和Transformer [255]耦合的系统低维表示。此外，已有研究提出生成对抗网络 [90]，利用基于自编码器的降维 [52], 来构建生成式降阶模型，而用于预测高维复杂系统动力学的概率代理模型则在 [81]中给出。

基于神经网络的代理建模的最新进展日益聚焦于高维参数设置中与泛化、鲁棒性和可扩展性相关的关键挑战。事实上，尽管自编码器已展现出显著的泛化能力，潜在空间的可解释性往往仍是一项挑战。这一点在将这些技术应用于现实工业场景时尤为关键，因为理解并控制复杂系统所涉及的参数至关重要。关于该主题以及实现可解释潜在空间的解的讨论，感兴趣的读者可参阅 [40, 79, 144]。同样，可解释性已成为日益重要的目标，人们越来越关注特征归因和敏感性分析技术，旨在理解学习到的表示和输入参数如何影响模型预测，从而提高利用机器学习技术构建的代理模型的透明度和可信度 [54, 155]。

5.4 基于图神经网络的代理模型

应用于代理模型的标准神经网络方法，无法利用用于计算全阶问题快照的底层离散化中自然蕴含的空间相关性。

近年来，为解决这一局限性，并支持使用非结构化和变形网格上的数据，文献 [217]提出的图神经网络（GNN）范式受到了越来越多的关注。

从 MeshGraphNets [76,194], 的工作开始，多项研究探索了 GNNs 在模拟物理问题时的适用性，同时考虑所分析区域的底层几何构型。

在数据驱动代理模型的背景下， [97] 表明图自编码器优于标准自编码器，从而能够使用非结构化数据。值得强调的是，根据所呈现的结果，作者得出结论：当潜在空间足够大时，标准的基于POD的降阶模型仍能提供具有竞争力的解。

近期研究还探索了利用底层系统的物理知识来增强 GNNs 的适用性。在 [108], 中，作者提出通过 GENERIC框架 [96]将热力学定律的满足纳入图神经网络架构。 [24] 中也提出了类似的工作，采用了 MeshGraphNets 架构。在 [198], 中，通过耦合一个使用卷积层的基于图的编码器、一个学习物理参数与潜在空间之间映射关系的多层感知机，以及一个用于恢复高维信息的解码器，构建了一个代理模型。 [159] 还利用 GNNs 针对不同几何形状的泛化能力，训练了能够为几何参数化系统学习分离式 PGD 结构的代理模型。

注 7 （数据可用性）。正如第 *3*、*4* 和第 *5* 节所述，基于本征正交分解、*PGD* 或神经网络构建代理模型的一个关键因素是能否获得足够数量的高质量数据。在现实的多查询场景中，高保真数据通常十分稀缺，需要借助其他来源的信息加以补充，而这些信息可能带有噪声、可靠性也较低。在此背景下，优化高保真数据的选择，并设计能够利用来自异构数据源且可信度各异的信息的鲁棒技术，至关重要。这些考量自然引出了后续各节对多保真建模和自适应数据集采样策略的综述；二者是提升复杂参数化情形下代理模型效率、鲁棒性和可扩展性的关键使能技术。从性能角度看，这些技术在代理建模中发挥着核心作用，因为它们直接影响训练成本、数据效率，以及在计算预算有限的情况下满足准确性要求的能力，而不受具体代理模型构建方法的影响。

6 多保真模型

前几节介绍的技术都基于这样一个假设：构建代理模型时可以获得高保真数据。然而，在工程实践中，通常可以获取多种来源的数据，包括实验数据和基于仿真的数据，其可信度各不相同。一般而言，数据中只有少量可靠的高保真结果，而低保真、可能带有噪声的结果则有很多。在这种情况下，能够同时利用不同类型的数据来构建多保真度 代理模型的技术近年来受到越来越多的关注，参见综述论文 [131, 183, 191]。

多保真度方法的理念是利用多个保真度不同的数据集，构建比基于单一数据集所构建的降阶模型更能准确表征待分析现象的代理模型，同时减少对单独使用高保真数据的依赖（以及由此产生的计算成本）。在计算框架中，上述数据集通过不同保真度的仿真获得：高保真度（HiFi）仿真可提供准确但成本高昂且较为稀缺的解，而低保真度（LoFi）仿真则可提供成本低廉的评估，但其分辨率可能不足以捕捉问题的特征。多保真度方法旨在利用低保真数据提取待分析现象的主要趋势，并利用

高保真数据在需要提高准确性时对解进行局部细化。所用数据集之间的相关性使我们能够从低保真数据中推断趋势，并利用这些趋势近似高保真代理模型，尤其是在高保真数据稀缺的配置下。

6.1 基于插值的多保真度模型

受 Kennedy 和 O'Hagan 关于协同克里金的研究启发 [128], ，多位作者探索了利用高斯过程捕捉不同保真度模型之间差异的策略。协同克里金进一步加入了方差估计器，见 [75], ，以确保对所考虑的不同保真度层级上的噪声程度变化具有鲁棒性。在 [103], 中，作者提出了一种层次模型，利用低保真数据的克里金插值描述关注量的趋势，再将低保真空间中的变化映射到高保真数据，以改进代理模型的表示。此外，还可以通过 [104]中讨论的梯度增强克里金方法，将响应面的梯度信息纳入克里金模型的构建。

另一类多保真度方法借鉴了多重网格的思路，采用不同分辨率的网格层次来加速收敛，并在粗网格与细网格之间恰当地传递信息，从而为高维问题构建多保真度框架。沿这一方向的首个方案是多层蒙特卡罗（MLMC）方法 [89]。MLMC 引入多个近似层级（大量低成本低保真数据和少量高成本高保真数据），并利用望远镜求和恒等式，将高保真模拟的期望表示为低保真度近似中相邻层级差值的总和。在 [175],中，作者设计了一种多保真度策略，利用低保真度估计器降低高保真度估计器的抽样方差，由此得到一种与 MLMC 密切相关的方法，并适当定义控制变量估计量 [174]。遵循空间近似层次结构的相同思路， [232] 提出了多层随机配置（MLSC）和多层准蒙特卡罗（MLQCM），在每一层采用基于稀疏网格和准蒙特卡罗的求积公式。 [173], 讨论了另一种基于随机配置的多保真度方法：作者首先对大量低保真配置进行采样，然后采用贪心过程选出有限数量的点来评估高保真模型，并将这些点用作多保真度代理模型的配置点。类似地，多指标蒙特卡罗（MIMC） [102] 和多指标随机配置（MISC） [101] 分别采用蒙特卡罗和稀疏网格求积，并将上述望远镜求和恒等式应用于离散化的多指标。引入多指标能够显著降低层次差值的方差，同时使每个参数的离散化彼此独立。最后，[197] 针对复杂的船舶工程场景开展基准测试，比较基于 MISC 和随机径向基函数的代理模型的准确性与性能 [249],；其中，径向基函数采用在训练步骤中确定的随机核。另一种基于确定性径向基函数的多保真度策略，见 [230], ，其做法是利用低保真数据调整基于径向基函数的模型的预测，通过适当定义的相关矩阵和缩放因子，使其与高保真输出相匹配。

注释 8（采用插值的多保真代理模型）。 尽管可以通过多种策略获取不同保真度的数据集（例如，在全阶计算中采用不同级别的网格细化），但降阶模型为构建参数系统的低保真数据提供了自然框架。在此背景下，已有多项研究探索将降维技术与上述策略相结合，以构建多保真降阶模型。在 *[165],* 中，采用本征正交分解与变保真模型相结合，通过对一个数据集进行奇异值分解来构建降阶基；该数据集包含在区域内固定样本点处选取的低保真快照和高保真快照。另一种方法旨在计算桥接函数，将从低保真快照获得的本征正交分解系数映射到与高保真数据相关联的模态系数空间 *[254]*。最后，本征正交分解与克里金法 *[19, 26]* 及协同克里金 *[266]* 相结合，以构建响应面

在一个利用不同保真度的数据构建的降维空间中。

6.2 基于回归的多保真模型

非插值多保真模型利用第 2 节所述回归型方法的原理。 [279], 以低保真数据作为基函数，通过最小二乘回归最小化高保真数据与经缩放的低保真数据之间的差异，从而进行线性回归。此框架随后扩展为采用移动最小二乘法 [252] ，以同时计算低保真缩放因子和差异函数的系数，确保数据融合准确。

回归类多保真模型也通过贝叶斯推断得到增强。在 [272], 中，构建了一个基于多项式混沌展开的多保真模型，使用低保真数据进行初步的广泛探索，并在后验近似不足的关键区域使用高保真数据。同样，贝叶斯推断也被纳入回归参数的估计中 [273]。在此背景下，作者提出将基于低保真数据进行回归的确定性模型（例如核岭回归）与基于高斯过程回归的贝叶斯模型相结合，以考虑低保真数据与高保真数据之间的差异。这项工作还探讨了一种结合深度神经网络和贝叶斯神经网络的方案，分别用于确定性回归和统计回归。与核岭回归密切相关的支持向量回归 [242] 及其变体，在引入核函数将输入空间映射到高维特征空间后，已被成功用于识别和描述低保真数据与高保真数据之间的关系 [223, 224]。

为提供带有不确定性估计的多保真预测，文献中通常采用高斯过程。所提出的策略在对不同保真度层级之间相关性的建模方式上有所不同：线性共区域化模型假设低保真数据和高保真数据是共享潜在高斯过程的线性组合 [83]；非线性共区域化模型（例如，参见 [258], ）则执行非线性变换，以在不同保真度层级间传播潜在基函数，并对相应权重采用矩阵高斯过程先验，从而突破线性假设；深度高斯过程 [105] 依靠由高斯过程构成的层级结构，通过非线性变换将低保真数据映射为高保真数据；非线性自回归高斯过程回归（NARGP） [193] 则使用高斯过程对不同保真度之间的差异进行建模，并从数据中学习相关非线性函数的形式。有关该主题的最新综述，感兴趣的读者可参阅 [66]。

注 9 （采用回归的多保真代理模型）。如注 *8* 中所述，在多保真度设置中，可以利用降阶模型定义低保真数据。在 *[127]*, 中，作者利用低保真数据，通过非线性自回归高斯过程确定所需高保真仿真的参数位置，并利用高保真快照构建本征正交分解基。为降低参数空间的维度， *[208]* 提出融合通过主动子空间 *[50]*或非线性水平集学习 *[275]*, 获得的低保真模型，并利用上述 *NARGP* 范式与高保真数据相结合。作者进一步在此基础上，结合主动子空间以降低参数空间的维度，利用 *NARGP* 建模不同保真度之间的关系，并以低保真数据引导高保真计算的选取；同时采用带径向基函数的 *PODI*，降低由高保真数据构建的解空间的维度 *[233]*。

6.3 基于神经网络的多保真度模型

近年来，人们对利用神经网络构建多保真度代理模型的兴趣日益浓厚。在 [164], 中，通过结合一个基于低保真数据训练、用于学习粗略近似的网络，以及两个旨在捕捉低保真数据与高保真数据之间线性和非线性相关性的网络，构建了一种深度神经网络架构。在 [163] 中，该框架进一步扩展，以通过贝叶斯推断技术量化不确定性；在 [118] 中，则扩展为利用 DeepONet 学习算子

框架。类似地， [277]文献讨论了一种基于卷积神经网络的三网络架构，用于整合两种保真度的数据，并根据先前计算出的最优解，动态地将新的高保真数据点纳入数据集。

另一种方法在 [99] 中针对前馈神经网络提出，在 [51] 中针对长短期记忆网络提出。该方法采用多分支架构，分别处理低保真数据和高保真数据，再通过融合层将两者合并；融合层整合来自两种保真度的信息，并提取其相关性，以改进预测。在 [185], 中，提出了一种一次性训练范式：在编码器/解码器架构中使用卷积，将不同保真度的输入数据同时压缩到潜在空间，并在其中进行多保真度数据融合。该架构在概念上与 U-Net 有相似之处——即采用带有跳跃连接的编码器/解码器结构——这也是 [123]的基础。在这项工作中，循环残差 U-Net 引入了迁移学习流程：先使用低保真数据进行批量训练，再使用高保真数据训练输出层，并最终微调整个网络的参数。 [58] 对使用双保真模型生成的数据进行迁移学习的策略作了详细讨论。

最后，MFNets 范式 [93] 通过将高保真数据和低保真数据（即不同保真度的信息源）定义为有向无环图中的节点，重新审视了多保真度设置。在此背景下，节点之间的连接表示相关数据源之间存在的相关性，并使用一组潜变量作为数据的紧凑表示。此外，在 [92], 中，数据融合是在一次性训练过程中完成的，该训练同时使用所有保真度的数据，并利用预先定义图中的连接。

注 10 （使用神经网络的多保真代理模型）。 在基于神经网络的多保真设置框架中，低保真数据通过基于投影方法和神经网络架构的降阶模型生成。*POD-DL-ROM* *[78]* 首先使用随机化 *POD* 进行降维。随后，通过预训练和微调训练自编码器：预训练仅使用低保真数据，而微调依赖高保真数据，以进一步压缩信息并构建降阶基系数的潜在表示。文献 *[222]*讨论了一种类似方法，该方法利用自编码器进行降维，并利用迁移学习进行多保真训练。在 *[60]*, 中，作者提出了一种多保真代理模型，将线性降维（通过 *PODI* 或缺失 *POD*）与 *DeepONet* 相结合，以发现完整阶（高保真）模型与降阶（低保真）模型之间的相关性，并校正相关失配。处理多保真数据的另一种方法是利用高保真数据计算网格中的空间信息，通过图结构 *[169]*实现。在该工作中，降维通过一个由针对基于图的数据而设计的前馈层组成的神经网络完成，因此能够自然地将不同分辨率网格上计算得到的解作为训练输入。文献 *[135]* 同样利用基于图的信息，采用卷积层训练图神经网络架构进行降维，并遵循多层次范式：通过迁移学习，在低保真代理模型的残差上训练高保真代理模型。

7 数据集采样、增充和增强

多保真策略旨在高效利用具有不同准确性水平的可用信息，而实现高效代理模型的一种互补方法则依赖于控制此类信息的获取位置与方式。也就是说，选择一组参数值的过程——针对这些参数值将快照计算为分析系统的全阶实例——对所得代理模型的准确性与竞争力起着关键作用。

本节所讨论的方法针对代理建模中数据效率的互补方面。统计采样策略侧重于参数实例的选择，而自适应增充和主动学习旨在迭代地精炼训练数据集

基于代理误差指标，而数据增强技术则力求提高可用数据的有效规模与多样性。尽管这些方法作用于代理模型构建流程的不同阶段，它们的共同目标是在有限的计算或实验预算下最大化训练数据的信息含量。在这一更广阔的视角下，传感器布置等相关主题可被理解为参数空间采样的实验设计对应物，并且当代理模型由观测数据训练时尤为相关。

关于最优采样，已知切比雪夫点能够使插值误差最小，因此在一维情况下是最优的（见注4）。然而，在更高维空间中，样本采用张量结构构造，点的数量会随着所分析参数的数量呈指数级增长。因此，采样的目标是确定捕捉问题最相关特征所需的最少全阶解数量。这可以通过两种主要方法实现：统计采样或自适应采样。一方面，统计采样利用统计学依据选择快照，而不利用解的任何信息。其目标是最大限度地探索参数空间。这些技术包括拉丁超立方采样 [161],质心 Voronoi 镶嵌 [67], 以及拉丁化 Hammersley 和 Halton 序列 [213]。另一方面，自适应采样依靠贪心算法估计要纳入数据集的参数最优值，以使给定的误差度量最小化。以下小节将回顾若干自适应采样策略，以及全阶解数据集的增充与增强方法。

7.1 自适应采样与增充

受 [95, 245], 启发，人们在 ROM 文献中提出了自适应采样策略，利用对底层物理模型的了解，例如通过模型约束优化问题 [34]和基于残差的误差估计 [100]。在 [195], 中，针对增量 POD 方法设计了一种策略，通过在线顺序计算快照，并根据适当的误差估计选择参数值，从而减少需要计算的快照数量。

上述方法依赖于受开创性工作启发的贪心过程 [16] ，并且需要访问用于计算快照的全阶模型，以确定新采样点的位置，因此不适用于纯数据驱动模型。在 [172], 中，提出了一种仅利用先前计算的 PGD 近似来选择采样点最优位置的策略。其思路是找出 PGD 近似的残差（39）最大的点，并采用基于 DEIM 的准则。具体而言，首先选择物理区域中模态$\mathbf{s}_1$ 使函数$\mathbf{f}_{\mathrm{x}}^1$ （绝对值）达到最大值的点作为第一个采样点。因此，利用第一模态来选择第一个采样点。类似地，第二个采样点定义为函数绝对值$\mathbf{s}_2$ 达到最大值的位置

$$\mathbf{r}_{\mathrm{x}}^2 := \mathbf{f}_{\mathrm{x}}^2 - \frac{\mathbf{f}_{\mathrm{x}}^2(\mathbf{s}_1)}{\mathbf{f}_{\mathrm{x}}^1(\mathbf{s}_1)}\mathbf{f}_{\mathrm{x}}^1 \tag{46}$$

达到最大值，其中 $\mathbf{r}_{\mathrm{x}}^2$ 是通过减去第一模态的适当倍数，对第二空间模态 $\mathbf{f}_{\mathrm{x}}^2$ 进行修正后得到的，使得 $\mathbf{r}_{\mathrm{x}}^2(\mathbf{s}_1) = \mathbf{0}$。类似地，选择第 k 个采样点 $\mathbf{s}_k$，此处函数 $|\mathbf{r}_{\mathrm{x}}^k|$达到最大值，其中

$$\mathbf{r}_{\mathrm{x}}^k := \mathbf{f}_{\mathrm{x}}^k - \sum_{i=1}^{k-1} d_i^k \mathbf{f}_{\mathrm{x}}^i, \tag{47}$$

以及系数 d_i^k的设计旨在保证$\mathbf{r}_{\mathrm{x}}^k(\mathbf{s}^j) = \mathbf{0}$ 对于 $j = 1, \ldots, k-1$。请注意，此处再次援引了备注6中讨论的分离描述中模态的对偶向量函数解释。

这一策略是在物理空间采样（寻找传感器的最优位置）的背景下提出的，旨在恰当地求解反问题。类似的思路也值得用于对参数空间进行最优采样，并生成能够为代理模型提供最佳信息的高保真快照。

基于类似的思路，许多作者提出了纯数据驱动、且适合与黑箱求解器进行非侵入式耦合的采样方法。在此背景下，自适应采样策略需要在局部开发与全局探索之间取得平衡 [228]。前者倾向于将新采样点置于估计误差最大的区域，但存在仅探索参数空间一部分的风险。后者负责将新采样点定位在远离已有样本之处（例如借助距离准则），以发现参数空间的新区域。CVVor [271]将用于估计最大误差区域的交叉验证（CV）开发与利用基于距离准则进行探索的Voronoi（Vor）图相结合。类似地，智能采样算法（SSA）求解一组基于交叉验证开发与基于距离的探索的优化问题 [84]，而空间填充交叉验证权衡（SFCVT） [10] 则依靠留一交叉验证进行开发，并依靠距离准则进行探索。驱动开发的另一种方法基于对关注量梯度的近似估计。在此背景下，局部线性近似（LOLA）将该策略与用于探索的Voronoi剖分相结合 [55]，，而基于泰勒展开的自适应设计（TEAD）在 [167]中利用基于距离的度量进行探索。此外，已提出若干准则，以便更系统地平衡局部开发与全局探索。例如，全局拟合期望改进（EIGF） [139] 通过选择预期能使全局代理模型误差降幅最大的点来偏向开发，同时借助不确定性估计进行基于方差的探索，从而将采样引导至信息不足的区域。最大化期望预测误差（MEPE） [149]通过识别代理模型呈现较高局部预测误差的区域来实现开发，并将其与由预测熵期望降幅最大化所驱动的探索相结合。蒙特卡洛站点间投影技术（MIPT） [56] 通过将蒙特卡洛样本投影到局部影响方向上，以细化代理模型呈现显著变异性的区域，从而平衡开发与探索；同时将样本分布到站点间位置，以捕捉响应面中更大的变化。

值得注意的是，上述技术主要针对仅使用一个模型生成数据时的采样问题。在多保真模型的情况下，自适应采样步骤需要考虑保真度层级的信息。在此背景下， [122]提出了 MISC 算法的一种自适应版本（即第 6.1节），以平衡仿真的数值误差、代理模型误差和参数重要性采样，参见 [235]，，该方法将重点放在与稀有事件相关的参数空间关键区域。在 [188]，中，作者采用不同保真度的代理模型层级进行重要性采样，利用先前根据低保真数据计算得到的偏置密度，加快使用高保真数据的优化过程，并降低稀有事件概率的方差。另一种基于非层次保真度的方法，通过两步自适应采样策略兼顾准确性和效率：首先确定最有可能带来改进的高保真位置，然后从所有保真度中选取下一个样本，以最大化准确性提升与相应计算成本之比 [43]。最后， [68] 中提出的混合自适应采样算法（MASA）采用委员会查询方法进行局部开发，选择不同代理模型（或所研究的保真度）所得预测之间差异最显著的候选样本，同时最大化样本间距以实现探索。有关代理模型自适应采样策略的详细讨论，请参阅 [61, 80, 150]。

7.2 数据增强

如前所述，所构建代理模型的质量很大程度上取决于用于训练的数据集是否丰富。然而，当全阶模型具有非线性、参数数量众多，且每个快照的成本特别高昂时（例如，对于大规模、耦合、多物理场或多尺度问题），构建适当的代理模型训练集在计算上可能难以实现。

为解决这一问题，数据增强策略旨在通过构造人工快照，提供训练集中不存在的、有意义的额外信息，从而减少构建初始数据集所需的计算投入。其思路是在不针对新的参数值求解全阶模型的情况下生成新样本。近年来，文献中提出了多种不同的方法。在 [63], 中，作者对快照进行了一系列低成本的代数运算，以丰富训练集中的信息，并构建 POD近似。在 [171], 中，作者提出在数据增强过程中施加质量守恒和动量守恒约束，以设计符合底层物理规律的新人工快照。在 [177], 中，则采用一种生成式方法，利用非线性激活函数组合已有快照中的信息。

由此得到的数据增强过程能够使后验降阶模型近似的质量不再受初始数据集质量的制约。这是通过向现有数据集中加入新信息实现的；这些数据集的采样均匀，但其中样本可能较少。值得注意的是，如果生成的数据集用于求解方程（如 POD-RB），这种增充策略是可靠的，因为在降阶空间中求解方程时，物理规律会在最终解中得到遵循。对于其他降阶模型策略，例如 PODI，最终结果则取决于增强数据的物理合理性。因此，在这些情况下（尤其是该方法为非侵入式时），生成新人工快照的方法必须可信，并且需要采用适当的技术评估其可靠性。

8 结论与未来展望

本文概述了利用基于物理学和数据驱动方法，构建复杂工程系统（参数化）函数代理模型的成熟技术。这些策略在众多应用领域日益重要，因为这些领域需要高效的计算工作流程，以便反复评估复杂模型。本文从函数逼近的角度重新审视了代理建模，着重指出不同研究群体之间共同的方法学基础，并探讨了具有代表性的降维和函数表示技术。

尽管本文综述聚焦于参数化系统代理建模的方法学方面，但该领域正在迅速发展，且影响已超越学术研究。尤其是，代理模型因有望支持在智慧城市、工业4.0、个性化医疗和可持续发展等数据丰富环境中高效分析复杂系统，而日益受到业界关注；在这些领域，通常需要实时分析。

8.1 批判性讨论

按照本综述采用的函数逼近视角，构建代理模型可以理解为将一种近似策略与解流形的适当降阶表示相结合。第3、4、5和6 节介绍的方法，主要区别在于如何处理这两个方面，但也呈现出若干共同的考量。下面的讨论将依据第1节提出的标准，综合这些见解，并着重探讨方法上的主要权衡，包括侵入性、

数据需求、计算效率、表达能力和可解释性。

基于投影的方法依赖于构建低维线性子空间，以近似解流形的主导特征。当在降阶层面强制满足控制方程时（例如在 POD-RB 中），所得代理模型具有可解释性，但往往需要对全阶求解器进行侵入式访问，从而限制了其在工业场景中的适用性。尽管其数学基础允许进行严格的误差估计和稳定性分析，但对线性子空间的依赖可能会限制其对强非线性问题或呈现复杂参数依赖性的系统的表达能力。

以 PGD 为代表的分离表示使代理表示能够具有显式的参数依赖性，从而避免在在线评估阶段求解任何降阶问题。这可以显著缓解多参数问题中的维数灾难。因此，当解具有低秩可分结构时，PGD 为参数化建模提供了一个强有力的框架。然而，对于高度非线性或弱可分系统，构建此类分离表示可能变得困难，且该方法的效率可能强烈依赖于底层问题的结构。

相比之下，纯数据驱动方法（例如 PODI、后验 PGD、神经网络、...）提供了灵活的函数逼近，能够直接从数据中捕捉复杂的非线性关系，但其物理可解释性通常较低。这些方法能够逼近高度非线性函数，因此在经典线性降阶表示不足以应对的问题中颇具吸引力。在这些策略中，神经网络尤其引人关注，因为它们不仅可用于逼近参数映射，还可用于学习解流形本身的非线性降阶表示。这些模型的性能通常取决于是否有足够丰富的训练数据集，因此适用于数据丰富的环境，而不太适用于计算科学与工程中通常出现的数据稀缺场景。

最后，多保真策略旨在结合不同准确性水平的模型所提供的信息，以降低代理模型构建的计算成本。通过利用低保真模型与高保真模型之间的相关性，这些方法能够有效利用有限的高保真数据，并提供一个灵活的框架来整合异构信息源。然而，其有效性取决于不同保真度之间是否存在合适的层级关系，以及它们之间相关性的强弱。因此，在此背景下，确立离散化误差与模型误差之间的权衡至关重要。

总而言之，基于投影的方法和物理信息方法能够提供结构、可解释性以及坚实的理论基础，而数据驱动方法则具有更大的灵活性，能够捕捉复杂的非线性行为。当存在多个信息源时，多保真框架通过提高数据效率来补充这些方法。因此，与其将这些策略视为相互竞争的替代方案，不如将其视为能够结合使用、以应对参数化系统中不同建模挑战的互补工具。

这些差异凸显出，代理建模策略的选择最终取决于底层物理模型的特征、离散化方式、参数空间的维度以及训练数据的可用性。因此，不同方法之间的直接定量比较本质上取决于具体问题。由此，对特定应用进行系统的基准评估需要精心设计的测试案例和一致的评估设置，因而超出了本文方法学综述的范围。

8.2 开放性挑战

基于全文所述的方法论讨论，仍有若干方面有待进一步研究，以加深对代理建模技术的理解并推动其实际部署

。以下小节列出了该领域部分开放问题与未来展望，涵盖成熟度和研究准备度不同的议题。这些挑战分为三类：

- 代理建模技术的可扩展性和计算效率；
- 代理预测的准确性、可靠性和鲁棒性；
- 代理模型描述用户定义的输入参数与感兴趣的输出量之间潜在关系的表达能力。

文献中已经讨论了其中一些主题，但所提出的解决方案尚未完全成熟，也未达到可投入生产的水平。其他主题则代表了目前全球多个研究团队正在探索的研究方向。最后，我们还纳入了一系列新兴主题，它们可能会对未来几年代理建模方法的发展产生重大影响。

8.2.1 可扩展性和计算效率

代理建模技术未来发展的核心目标之一，是将其应用于参数众多、规模庞大的现实工程应用。要实现这一愿景，就需要相关方法在面对高维参数空间和复杂物理模型时仍能保持高效且具备可扩展性，同时能够充分利用现代化、便携式计算基础设施。

- **高参数维数**——许多现实的工程与科学应用都具有极多的参数。因此，适用于处理此类高维问题的降维技术，将在面向现实应用开发、部署和采用代理模型方面发挥关键作用。除本文所综述的方法外，近年来还提出了其他成功的降维方法，包括低秩近似 [158], 张量列分解 [181],以及动态模态分解 [239]。

- **大物理尺度**——基于物理的代理模型与数据驱动代理模型的构建，依赖于一个可能大规模的全阶问题的多个实例的解。为使此类计算可承受，若干方面仍需进一步发展，包括通过区域分解 [15, 33, 64, 65] 或动态子结构 [25, 184, 221, 247] 构建局部降阶模型，以及与高性能计算基础设施的接口，参见例如 [70]。这些方案为在大型多组件系统中利用局部性、模块化与并行性提供了有前景的方向，从而在模型规模增大时保证可扩展性与计算效率。

- **计算范式** -为推动数字孪生技术的普及和扩展，需要拓展已评述的代理模型构建策略，以适应现有的计算范式。一方面，许多行业依赖遗留系统（例如 [241]中讨论的基于 Fortran 的系统），而其计算基础设施缺乏连接能力，无法按照工业4.0范式与交互式数字孪生无缝集成。另一方面，中小企业获取（并维护）参数化代理建模解决方案所需的硬件和软件前期投入，可能成为瓶颈。为解决前者，未来几年需要开发针对代理方法量身定制的封装工具。对于后者，基于云计算和数字孪生即服务（DTaaS）的模型 [2]有望降低小型组织的准入门槛。此外，需要实时或近乎实时反馈的应用可能会遇到实际瓶颈，即通信

传感器与代理模型本身之间的时延，这会限制其提供即时响应的能力。在此背景下，边缘计算通过在设备上本地执行计算、减少与云服务器之间的数据交换并加快更新，为数字孪生提供了尚未充分探索的可能性 [278]。最后，还需进一步探索量子计算等新型计算范式，以评估其构建复杂系统代理模型的适用性。近期一项研究采用量子无约束二元优化和量子近似优化算法进行动态模态分解，对此进行了探讨 [9]。

8.2.2 准确性、可靠性与鲁棒性

随着代理模型日益融入决策工作流，确保其预测的可靠性和鲁棒性已成为一项基本要求。这需要持续推进数据管理、确认与标准化实践，以及能够支持不确定性下可信决策的建模策略。

- **数据质量 -** 代理模型的准确性和鲁棒性很大程度上取决于用于训练的输入数据的质量和保真度。第6节讨论的多保真度框架，结合针对性的不确定性量化策略，预计将得到进一步发展，以应对噪声数据等具有挑战性的问题 [129, 192],非层次保真度 [140, 276], 缺失和不完整数据。此外，近期提出了一种多保真度替代性非递归框架，通过利用不同信息来源之间的所有相关性，绕过现有嵌套采样策略在准确性方面的局限 [91]。

- **验证与确认 -** 结果的再现性对于科学进步至关重要。尽管如此，在科学机器学习领域，缺乏标准化基准以及数据和源代码的获取受限，削弱了已开展研究的潜在影响。为解决这一问题，近期一篇论文借鉴计算科学与工程领域验证与确认方面的现有知识，勾勒出一份迈向可信科学机器学习的路线图 [121]。未来几年还需考虑的其他关键方面包括：按照 FAIR原则，提升该领域生成的研究数据的可发现性、可访问性、互操作性和可重用性 [259]。

- **校准与不确定性量化 -** 在数字孪生应用中可靠部署代理模型面临的一项关键挑战，是对预测不确定性进行校准，尤其是因为经典的内置不确定性表达式在实践中未必经过良好校准，参见例如 [17]关于高斯过程回归的情况。这个问题在数据稀缺和外推情形下尤为重要 [14, 74], ，因为只有具备可靠且经过良好校准的不确定性估计，才能为不确定性下的决策提供可信的解 [147, 220, 234]。

8.2.3 模型能力与表达能力

除效率和可靠性之外，未来的代理建模框架还需要提供更丰富的建模能力，以捕捉日益复杂的物理现象，并适应不断演变的异构数据流。在保持可解释性和泛化能力的同时，提升代理模型的表达能力，是未来几年的一个重要研究方向。

- **模型复杂性 -**非线性问题、多尺度现象、混沌动力学、不连续解和分岔解，对现有代理建模方法仍构成重大计算挑战，未来仍需专门努力。在此

背景下，基于模型发现的替代方法，例如非线性动力学稀疏辨识（SINDy） [32], 已被提出，用以规避在代理模型构建过程中逼近复杂物理模型所带来的计算困难。

- **泛化 -** 具备足够丰富的 训练数据集，对于构建具有泛化能力的精准代理模型至关重要，尤其是在参数外推和领域感知方面。目前，文献中正探索多种解决方案来应对这一问题，包括通过重要性采样识别参数空间中的关键区域 [187], 借助数据增强生成快照 [171] 以及最优传输 [236], 迁移学习 [126] 和元学习 [44] ，以利用先验知识而无需大量重新训练；此外，还包括变分自编码器 [255] 和生成对抗网络 [52]等生成模型。

- **自适应 -** 开发能够动态适应新问题和新数据的模型，对于最大限度降低重新训练成本至关重要。在此背景下，在线学习 和持续学习 策略有望在未来几年取得显著进展。一方面，在线学习侧重于根据新的流式数据，实时调整为某项任务设计的模型。此类研究提出的解决方案包括动态低秩近似 [136], 动态数据驱动应用系统（DDDAS）中的低秩更新 [189], 即时降阶模型 [195,204], 在线自适应基底细化 [71], 动态模态分解 [239], 利用卡尔曼滤波进行序贯数据同化与整合 [162] 以及传输映射 [94]。另一方面，持续学习 [134] 旨在动态学习新任务，同时保留训练过程中获得的先验知识，因此有望为自适应代理模型带来巨大优势，并推动数字孪生在复杂时变过程中的应用。类似地，近期提出的强化孪生范式 [218] 旨在利用强化学习构建数字孪生。

- **可解释性与说明性 -**尽管非侵入性是降阶方法应用于现实场景的一项重要优势，但若完全依赖黑箱 代理模型，就很难理解并论证由此得到的预测。在此背景下，研究者日益关注如何依据现有科学知识来解释代理模型输入与输出之间的关系 [203]，以及如何用人类可理解的概念来说明模型 [54] 。

致谢

本研究部分获得西班牙科学、创新与大学部以及西班牙国家研究局 MICIU/AEI/10.13039/501100011033 的资助（拨款协议编号：TED2021-132021B-I00，授予 MG；PID2023-149979OB-I00，授予 MG；PID2023-153082OB-I00，授予 PD）；EIT KIC RawMaterials 项目协议 21123、欧盟委员会 MSCA 项目（编号：101120556-EARTHSAFE）以及加泰罗尼亚自治区政府的资助（拨款协议编号：2021-SGR-01049）。MG 是加泰罗尼亚自治区政府 Serra Húnter 计划的研究员。

利益冲突

作者声明，他们不存在利益冲突。

参考文献

[1] C.C. Aggarwal。《神经网络与深度学习》，第10卷。施普林格，2018年。

[2] S. Jiang, H. Li, Z. Zhang, 一种新的参数模型，《先进工程信息学》，47:101225，2021年。[3] D. Alonso、A. Velazquez 和 J.M. Vega。生成计算高效降阶模型的一种方法。《应用力学与工程中的计算机方法》，198(33- 36):2683–2691，2009年。[4] D. Amsallem 和 C. Farhat。用于调整降阶模型的插值方法及其在气动弹性中的应用。《AIAA期刊》，46(7):1803–1813，2008年。[5] B. Ankenman、B.L. Nelson 和 J. Staum。用于仿真元建模的随机克里金。《运筹学》，58(2):371–382，2010年。[6] F. Anowar、S. Sadaoui 和 B. Selim。降维算法（主成分分析、核主成分分析、线性判别分析、多维标度分析、奇异值分解、局部线性嵌入、等距映射、拉普拉斯特征映射、独立成分分析、t-分布随机邻域嵌入）的概念与实证比较。《计算机科学评论》，40:100378，2021年。[7] F. As’ad 和 C. Farhat。用于数据驱动非线性黏弹性建模的力学信息深度学习框架。《应用力学与工程中的计算机方法》，417:116463，2023年。[8] P. Astrid、S. Weiland、K. Willcox 和 T. Backx。基于本征正交分解的模型中的缺失点估计。《IEEE自动控制汇刊》，53(10):2237–2251，2008年。[9] K. Asztalos、R. Steijl 和 R. Maulik。在近期量子计算机上进行降阶建模。《计算物理学杂志》，510:113070，2024年。[10] V. Aute、K. Saleh、O. Abdelaziz、S. Azarm 和 R. Radermacher。基于交叉验证的单响应自适应实验设计，用于确定性计算机仿真的克里金元建模。《结构与多学科优化》，48:581–605，2013年。[11] I. Babuska 和 J.T. Oden。计算工程与科学中的验证与确认：基本概念。《应用力学与工程中的计算机方法》，193(36- 38):4057–4066，2004年。[12] S. Baharlouei、J.M. Taylor、C. Uriarte 和 D. Pardo。一种用于求解线性参数偏微分方程的最小二乘神经网络（LS-Net）。《应用力学与工程中的计算机方法》，437:117757，2025年。[13] K. Balla、R. Sevilla、O. Hassan 和 K. Morgan。神经网络在预测翼型和机翼气动系数中的应用。《应用数学建模》，96:456–479，2021年。[14] J. Barnett、C. Farhat 和 Y. Maday。利用神经网络增强基于投影的模型降阶，以缓解柯尔莫哥洛夫可约性障碍。《计算物理学杂志》，492:112420，2023年。[15] J. Barnett、I. Tezaur 和 A. Mota。用于无缝耦合非线性降阶模型与全阶模型的施瓦茨交替法。技术报告 SAND2022-10280R，计算机科学研究所2022年夏季会议论文集，S.K. Seritan 和 J.D. Smith 编，桑迪亚国家实验室，2022年。[16] M. Barrault、Y. Maday、N.C. Nguyen 和 A.T. Patera。一种“经验插值”方法：在偏微分方程高效约化基离散中的应用。《数学报告》，339(9):667–672，2004年。[17] L.S. Bastos 和 A. O’Hagan。高斯过程仿真器的诊断方法。《技术计量学》，51(4):425–438，2009年。

[18] U. Baur、P. Benner 和 L. Feng。线性与非线性系统的模型降阶：一种系统理论视角。《工程计算方法档案》，21(4):331– 358，2014年。[19]T. Benamara、P. Breitkopf、I. Lepot、C. Sainvitu 和 P. Villon。多保真POD代理辅助优化：概念与空气动力学设计研究。《结构与多学科优化》，56:1387–1412，2017年。[20] P. Benner、S. Grivet-Talocia、A. Quarteroni、G. Rozza、W. Schilders 和 L.M. Silveira。《模型降阶——第1卷：系统驱动与数据驱动方法和算法》。德古意特，2021年。[21] P. Benner、S. Grivet-Talocia、A. Quarteroni、G. Rozza、W. Schilders 和 L.M. Silveira。《模型降阶——第2卷：基于快照的方法和算法》。德古意特，2021年。[22] P. Benner、S. Grivet-Talocia、A. Quarteroni、G. Rozza、W. Schilders 和 L.M. Silveira。《模型降阶——第3卷：应用》。德古意特，2021年。[23] P. Benner、S. Gugercin 和 K. Willcox。参数化动力系统基于投影的模型降阶方法综述。《SIAM评论》，57(4):483–531，2015年。[24] C. Bermejo、A. Bad´ıas、D. Gonz´alez 和 E. Cueto。融入热力学信息的 MeshGraphNets：用于模拟任意形状物体周围的流动。《工程科学高级建模与仿真》，12(1):27，2025年。[25] A. Berthet、E. Perrey-Debain、J.-D. Chazot 和 S. Germ`es。利用基于POD的模型降阶方法，对采用频率相关材料的机械系统进行动态子结构分析。《声学与振动杂志》，569:117941，2024年。[26] A. Bertram、C. Othmer 和 R. Zimmermann。通过多保真数据驱动降阶建模实现实时车辆空气动力学设计。载于*2018 AIAA/ASCE/AHS/ASC*结构、结构动力学与材料会议，第0916页，2018年。[27] G. Blatman 和 B. Sudret。利用稀疏多项式混沌展开高效计算全局敏感性指标。《可靠性工程与系统安全》，95(11):1216–1229，2010年。[28] G. Blatman 和 B. Sudret。基于最小角回归的自适应稀疏多项式混沌展开。《计算物理学杂志》，230(6):2345–2367，2011年。[29] G.E.P. Box 和 K.B. Wilson。论最优条件的实验实现。《英国皇家统计学会杂志：B辑（方法论）》，13(1):1–38，1951年。[30] S. Brivio、S. Fresca、N.R. Franco 和 A. Manzoni。POD-DL-ROM误差估计：一种借助本征正交分解增强的深度学习框架，用于非线性参数化偏微分方程的降阶建模。《计算数学进展》，50(3):33，2024年。[31] J. Brumm 和 S. Scheidegger。利用自适应稀疏网格求解高维动态模型。《计量经济学》，85(5):1575–1612，2017年。[32] S.L. Brunton、J.L. Proctor 和 J.N. Kutz。通过非线性动力系统的稀疏辨识，从数据中发现控制方程。《美国国家科学院院刊》，113(15):3932–3937，2016年。[33] A. Buhr、L. Iapichino、M. Ohlberger、S. Rave、F. Schindler 和 K. Smetana。参数化问题的局部化模型降阶。载于《模型降阶手册》。Walter De Gruyter，2020年。

[34]T. Bui-Thanh、K. Willcox 和 O. Ghattas。面向大规模系统及高维参数输入空间的模型降阶。*SIAM Journal on Scientific Computing*，30(6)：3270–3288，2008年。[35] H.-J. Bungartz 和 M. Griebel。稀疏网格。*Acta numerica*，13：147–269，2004年。[36] K. Carlberg、C. Bou-Mosleh 和 C. Farhat。通过最小二乘 Petrov–Galerkin 投影和压缩张量逼近实现高效的非线性模型降阶。*InternationalJournal for Numerical Methods in Engineering*，86(2)：155–181，2011年。[37] K. Carlberg、C. Farhat、J. Cortial 和 D. Amsallem。用于非线性模型降阶的 GNAT 方法：有效实现及其在计算流体力学和湍流中的应用。*Journal of Computational Physics*，242：623–647，2013年。[38] F. Cavaliere、S. Zlotnik、R. Sevilla、X. Larr´ayoz 和 P. D´ıez。惯性释放问题参数化解的非侵入式降阶模型。*International Journal for NumericalMethods in Engineering*，122(16)：4270–4291，2021年。[39] F. Cavaliere、S. Zlotnik、R. Sevilla、X. Larrayoz 和 P. D´ıez。结构动力学中的非侵入式参数化解。*Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*，389：114336，2022年。[40] K. Champion、B. Lusch、J.N. Kutz 和 S.L. Brunton。数据驱动的坐标与控制方程发现。*Proceedings of the National Academy of Sciences*，116(45)：22445–22451，2019年。[41] S. Chaturantabut 和 D.C. Sorensen。通过离散经验插值实现非线性模型降阶。*SIAM Journal on Scientific Computing*，32(5)：2737–2764，2010年。[42]W. Chen、Q. Wang、J.S. Hesthaven 和 C. Zhang。用于非线性问题降阶建模的物理信息机器学习。*Journal of Computational Physics*，446：110666，2021年。[43] Yi-Ping Chen、Liwei Wang、Yigitcan Comlek 和 Wei Chen。用于非分层多保真度自适应采样的潜变量方法。*Computer Methods in Applied Mechanicsand Engineering*，421：116773，2024年。[44] M. Cheng、C. Dang、D.M. Frangopol、M. Beer 和 X.-X. Yuan。从代理建模中迁移先验知识：一种元学习方法。*Computers & Structures*，260：106719，2022年。[45] F. Chinesta、A. Huerta、G. Rozza 和 K. Willcox。模型降阶方法。载于 E. Stein、R. de Borst 和 T.J.R. Hughes 编，《计算力学百科全书第二版》，第1卷“固体与结构”，第3章，第1–36页。John Wiley & Sons, Ltd.，奇切斯特，2017年。[46] F. Chinesta、R. Keunings 和 A. Leygue。用于先进数值仿真的广义正交分解：入门。应用科学与技术 Springer Briefs。施普林格，Cham，2014年。[47] F. Chinesta、P. Ladeveze 和 E. Cueto。基于广义正交分解的模型阶数降阶简评。《工程计算方法档案》，18(4)：395–404，2011年。[48] L. Cicci、S. Fresca 和 A. Manzoni。Deep-HyROMnet：一种基于深度学习的算子近似方法，用于非线性参数化偏微分方程的超缩减。《科学计算杂志》，93(2)：57，2022年。

[49] A. Cohen 和 R. DeVore。高维参数偏微分方程的近似。《数值学报》，24：1–159，2015年。[50] P.G. Constantine。主动子空间：参数研究中降维的新兴思想。工业与应用数学学会，2015年。[51] P. Conti、M. Guo、A. Manzoni 和 J.S. Hesthaven。使用长短期记忆网络的多保真代理建模。应用力学与工程中的计算机方法，404：115811，2023年。[52] D. Coscia、N. Demo 和 G. Rozza。生成对抗降阶建模。《科学报告》，14(1)：3826，2024年。[53] A. Courard、D. N´eron、P. Ladev`eze 和 L. Ballere。将 PGD虚拟图表纳入工程设计流程。《计算力学》，57(4)：637–651，2016年。[54]A. Cremades、S. Hoyas、R. Deshpande、P. Quintero、M. Lellep、W.J. Lee、J.P. Monty、N. Hutchins、M. Linkmann、I. Marusic 和 R. Vinuesa。通过可解释深度学习识别壁面湍流中的重要区域。《自然·通讯》，15(1)：3864，2024年。[55] K. Crombecq、D. Gorissen、D. Deschrijver 和 T. Dhaene。一种用于计算机实验全局代理建模的新型混合序贯设计策略。SIAM Journal on Scientific Computing，33(4)：1948–1974，2011年。[56] K. Crombecq、E. Laermans 和 T. Dhaene。用于基于仿真的建模的高效空间填充与非塌缩序贯设计策略。《欧洲运筹学杂志》，214(3)：683–696，2011年。[57] A. Daby-Seesaram、K. ˇSkardov´a 和 M. Genet。有限元神经网络插值：第二部分——与广义正交分解相结合，用于非线性代理建模。《计算力学》，第1–26页，2025年。[58] S. De、J. Britton、M. Reynolds、R. Skinner、K. Jansen 和 A. Doostan。利用双保真数据对神经网络进行迁移学习，以实现不确定性传播。《国际不确定性量化期刊》，10(6)，2020年。[59] L. De Lathauwer、B. De Moor 和 J. Vandewalle。多线性奇异值分解。SIAM矩阵分析与应用杂志，21(4)：1253–1278，2000年。[60] N. Demo、M. Tezzele 和 G. Rozza。用于降阶建模残差学习的 DeepONet 多保真方法。《工程科学高级建模与仿真》，10(1)：12，2023年。[61] F. Di Fiore、M. Nardelli 和 L. Mainini。主动学习与贝叶斯优化：以目标为导向学习的统一视角。《工程计算方法档案》，第1–29页，2024年。[62] P. D´ıez、S. Zlotnik、A. Garc´ıa-Gonz´alez 和 A. Huerta。面向高维数据的封装式 PGD代数工具箱。《工程计算方法档案》，27：1321–1336，2020年。[63] Pedro D´ıez、Alba Muix´ı、Sergio Zlotnik 和 Alberto Garc´ıa-Gonz´alez。参数问题的非线性降维：核正交分解（kPOD）。《国际工程数值方法杂志》，122(24)：7306–7327，2021年。[64] M. Discacciati、B.J. Evans 和 M. Giacomini。通过重叠区域分解实现基于 PGD 的局部代理模型：计算比较。《分析与设计中的有限元》，253：104475，2026年。

[65] Marco Discacciati、Ben J Evans与Matteo Giacomini。一种通过本征广义分解求解参数化椭圆问题的重叠区域分解方法。应用力学与工程中的计算机方法，418:116484，2024年。[66] B. Do与R. Zhang。多保真贝叶斯优化：综述。《*AIAA*期刊》，第1–37页，2023年。[67] Q. Du、V. Faber与M. Gunzburger。质心Voronoi剖分：应用与算法。《*SIAM*评论》，41(4):637–676，1999年。[68] J. Eason与S. Cremaschi。基于人工神经网络生成代理模型的自适应序贯采样。《计算机与化学工程》，68:220–232，2014年。[69] H. Eivazi、S. Le Clainche、S. Hoyas与R. Vinuesa。从湍流中提取正交且简约的非线性模态。《应用专家系统》，202:117038，2022年。[70] B. Eiximeno、A. Mir´o、B. Begiashvili、E. Valero、I. Rodriguez与O. Lehmkhul。pyLOM：面向流体动力学应用的高性能计算开源降阶模型套件。《计算机物理通讯》，308:109459，2025年。[71] P.A. Etter与K.T. Carlberg。通过向量空间筛分实现降阶模型的在线自适应基底细化与压缩。应用力学与工程中的计算机方法，364:112931，2020年。[72] R. Everson与L. Sirovich。面向缺失数据的Karhunen–Loeve过程。《美国光学学会会刊*A*辑》，12(8):1657–1664，1995年。[73] C. Farhat、P. Avery、T. Chapman与J. Cortial。含有限转动的非线性有限元动力学模型降维，以及为提高计算效率而采用的基于能量的网格采样与加权。《国际工程数值方法杂志》，98(9):625–662，2014年。[74] A. Forrester、A. Sobester与A. Keane。基于代理建模的工程设计：实用指南。John Wiley & Sons，2008年。[75] A.I.J. Forrester、A. S´obester与A.J. Keane。基于代理建模的多保真优化。《英国皇家学会会刊*A*辑：数学、物理与工程科学》，463(2088):3251–3269，2007年。[76] N.R. Franco、S. Fresca、F. Tombari与A. Manzoni。面向参数化偏微分方程的基于深度学习的代理模型：通过图神经网络处理几何变化。《混沌：非线性科学跨学科期刊》，33(12)，2023年。[77] S. Fresca、L. Dede’与A. Manzoni。一种面向非线性时变参数化偏微分方程降阶建模的综合深度学习方法。《科学计算杂志》，87:1–36，2021年。[78] S. Fresca与A. Manzoni。POD-DL-ROM：利用本征正交分解增强面向非线性参数化偏微分方程的基于深度学习的降阶模型。应用力学与工程中的计算机方法，388:114181，2022年。[79] William D Fries、Xiaolong He与Youngsoo Choi。Lasdi：参数化潜在空间动力学识别。应用力学与工程中的计算机方法，399:115436，2022年。[80] J.N. Fuhg、A. Fau与U. Nackenhorst。克里金法自适应采样方法的最新进展与比较综述。《工程计算方法档案》，28:2689–2747，2021年。

[81] H. Gao、S. Kaltenbach与P. Koumoutsakos。用于预测高维复杂系统动力学的生成式学习。《自然·通讯》，15(1):8904，2024年。[82] R. Garc´ıa-Blanco、D. Borzacchiello、F. Chinesta与P. D´ıez。利用目标导向误差评估监测参数化潮流问题的PGD 求解器。《国际工程数值方法杂志》，111(6):529–552，2017年。[83] N. Garland、R. Le Riche、Y. Richet与N. Durrande。基于高斯过程的多学科设计优化多保真度方法。载于不确定性下的航空航天系统分析与优化，第295–320页。施普林格国际出版公司，Cham，2020年。[84] S.S. Garud、I.A. Karimi与M. Kraft。面向代理模型开发的智能采样算法。《计算机与化学工程》，96:103–114，2017年。[85] R.G. Ghanem与P.D. Spanos。随机有限元：一种谱方法。Courier Corporation，2003年。[86] O. Ghattas与K. Willcox。从数据中学习基于物理的模型：逆问题与模型降阶的视角。《数值学报》，30:445–554，2021年。[87] M. Giacomini、L. Borchini、R. Sevilla与A. Huerta。参数化区域中流动的分离响应面：先验与后验 PGD 算法的比较。《分析与设计中的有限元》，196:103530，2021年。[88] M. Giacomini与A. Huerta。基于参数化自编码器的弹性结构拓扑优化代理模型。应用力学与工程中的计算机方法，448:118503，2026年。[89] M.B. Giles。多层蒙特卡罗路径模拟。《运筹学》，56(3):607–617，2008年。[90] I. Goodfellow、J. Pouget-Abadie、M. Mirza、B. Xu、D. Warde-Farley、S. Ozair、A. Courville与Y. Bengio。生成对抗网络。《神经信息处理系统进展》，27，2014年。[91] A.A. Gorodetsky、G. Geraci、M.S. Eldred与J.D. Jakeman。面向多保真度不确定性量化的广义近似控制变量框架。《计算物理学杂志》，408:109257，2020年。[92] A.A. Gorodetsky、J.D. Jakeman与G. Geraci。MFNets：将多保真度代理模型作为信息源有向网络进行数据高效的一次性学习。《计算力学》，68(4):741–758，2021年。[93] A.A. Gorodetsky、J.D. Jakeman、G. Geraci与M.S. Eldred。MFNets：面向贝叶斯学习与预测的多保真数据驱动网络。《国际不确定性量化期刊》，10(6)，2020年。[94] J. Grashorn、M. Broggi、L. Chamoin与M. Beer。用于状态-参数估计的传输映射耦合滤波器，2024年。[95] M.A. Grepl与A.T. Patera。参数化抛物型偏微分方程降阶基近似的后验误差界。《*ESAIM*：数学建模与数值分析》，39(1):157–181，2005年。.[96] M. Grmela与H.C. Ottinger。复杂流体的动力学与热力学。I. 一般形式体系的建立。《物理评论*E*》，56(6):6620，1997年。[97] A. Gruber、M. Gunzburger、L. Ju与Z. Wang。数据驱动降阶建模中神经网络架构的比较。应用力学与工程中的计算机方法，393:114764，2022年。

[98] M. Guo 和 J.S. Hesthaven。利用高斯过程回归进行非线性结构分析的降阶建模。《应用力学与工程中的计算机方法》，341:807–826，2018年。[99] M. Guo、A. Manzoni、M. Amendt、P. Conti 和 J.S. Hesthaven。利用人工神经网络进行多保真度回归：高效近似参数相关输出量。《应用力学与工程中的计算机方法》，389:114378，2022年。[100] B. Haasdonk 和 M. Ohlberger。通过离线/在线分解，为参数化动力系统构建高效降阶模型并进行后验误差估计。《动力系统数学与计算建模》，17(2):145–161，2011年。[101] A.-L. Haji-Ali、F. Nobile、L. Tamellini 和 R. Tempone。随机偏微分方程的多指标随机配点。《应用力学与工程中的计算机方法》，306:95–122，2016年。[102] A.-L. Haji-Ali、F. Nobile 和 R. Tempone。多指标蒙特卡罗：稀疏性与采样的结合。《数值数学》，132:767–806，2016年。[103] Z.-H. Han 和 S. G¨ ortz。用于变保真度代理建模的层次克里金模型。《AIAA期刊》，50(9):1885–1896，2012年。[104] Z.-H. Han、S. G¨ortz 和 R. Zimmermann。通过梯度增强克里金和广义混合桥接函数改进变保真度代理建模。《航空航天科学与技术》，25(1):177–189，2013年。[105] A. Hebbal、L. Brevault、M. Balesdent、E.-G. Talbi 和 N. Melab。利用深度高斯过程，基于不同输入域定义进行多保真度建模。《结构与多学科优化》，63:2267–2288，2021年。[106] A. Hemmasian 和 A. Barati Farimani。利用 Transformer 对流体流动进行降阶建模。Physics of Fluids，35(5)，2023年。[107] J.A. Hernandez、M.A. Caicedo 和 A. Ferrer。通过经验求积对非线性有限元模型进行维数超降阶。《应用力学与工程中的计算机方法》，313:687–722，2017年。[108] Q. Hern´andez、A. Bad´ıas、F. Chinesta 和 E. Cueto。热力学信息图神经网络。《IEEE人工智能汇刊》，5(3):967–976，2022年。[109]Q. Hernandez、A. Badias、D. Gonzalez、F. C hinesta 和 E. Cueto。利用数据对热力学感知降阶模型进行深度学习。《应用力学与工程中的计算机方法》，379:113763，2021年。[110] Q. Hern´andez、A. Bad´ıas、D. Gonz´alez、F. Chinesta 和 E. Cueto。保结构神经网络。《计算物理学杂志》，426:109950，2021年。[111] J.S. Hesthaven、G. Rozza 和 B. Stamm。参数化偏微分方程的认证降阶基方法，第590卷。施普林格，2016年。[112] J.S. 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。[113] G.E. Hinton 和 R.R. Salakhutdinov。利用神经网络降低数据维度。《科学》，313(5786):504–507，2006年。[114] Max Hirsch、Federico Pichi 和 Jan S Hesthaven。用于非线性模型降阶的神经经验插值方法。SIAM Journal on Scientific Computing，47(6):C1264–C1293，2025年。

[115] S Hochreiter。长短期记忆。*Neural Computation MIT-Press*，1997年。[116] K. Hornik、M. Stinchcombe 和 H. White。多层前馈网络是万能逼近器。*Neural Networks*，2(5):359–366，1989年。[117] C.K.J. Hou 和 K. Behdinan。代理建模中的维度缩减：组合方法综述。*Data Science and Engineering*，7(4):402–427，2022年。[118] A.A. Howard、M. Perego、G.E. Karniadakis 和 P. Stinis。用于数据驱动和物理信息问题的多保真深度算子网络。《计算物理学杂志》，493:112462，2023年。[119] A. Huerta、T. Belytschko、S. Fernandez-Mendez、T. Rabczuk、X. Zhuang 和 M. Arroyo。无网格方法。载于 E. Stein、R. de Borst 和 T.J.R. Hughes 编，《计算力学百科全书第二版》，第2卷：基础，第3章，第1–38页。John Wiley & Sons, Ltd.，奇切斯特，2017年。[120] R. Ib´a˜nez、E. Abisset-Chavanne、A. Ammar、D. Gonz´alez、E. Cueto、A. Huerta、J.-L. Duval 和 F. Chinesta。一种多维数据驱动稀疏识别技术：稀疏适当广义分解。*Complexity*，(5608286):1–11，2018年。[121] J.D. Jakeman、L.A. Barba、J.R.R.A. Martins 和 T. O'Leary-Roseberry。可信科学机器学习的验证与确认，2025年。[122] J.D. Jakeman、M.S. Eldred、G. Geraci 和 A. Gorodetsky。用于不确定性量化和敏感性分析的自适应多指标配置。《国际工程数值方法杂志》，121(6):1314–1343，2020年。[123] S. Jiang 和 L.J. Durlofsky。利用多保真训练数据和迁移学习，高效构建地下流动代理模型。《计算物理学杂志》，474:111800，2023年。[124] T. Kadeethum、F. Ballarin、Y. Choi、D. O' Malley、H. Yoon 和 N. Bouklas。利用卷积自编码器对多孔介质中的自然对流进行非侵入式降阶建模：与线性子空间技术的比较。*Advances in Water Resources*，160:104098，2022年。[125] T. Kadeethum、F. Ballarin、D. O'Malley、Youngsoo Choi、N. Bouklas 和 H. Yoon。利用 Barlow Twins 自监督学习对流动与传输问题进行降阶建模。《科学报告》，12(1):20654，2022年。[126] T. Kadeethum、D. O'Malley、Y. Choi、H.S. Viswanathan 和 H. Yoon。渐进式迁移学习推动基于机器学习的降阶建模发展。《科学报告》，14(1):15731，2024年。[127] M. Kast、M. Guo 和 J.S. Hesthaven。一种用于非线性问题降阶建模的非侵入式多保真方法。应用力学与工程中的计算机方法，364:112947，2020年。[128] M.C. Kennedy 和 A. O'Hagan。在可用快速近似的情况下预测复杂计算机代码的输出。*Biometrika*，87(1):1–13，2000年。[129] B.M. Kent、L. Tamellini、M. Giacomini 和 A. Huerta。面向参数化偏微分方程的抗噪多保真代理建模。《计算物理学杂志》，554:114761，2026年。[130] K. Kergrene、L. Chamoin、M. Laforest 和 S. Prudhomme。论适当广义分解方法的目标导向版本。《科学计算杂志》，81(1):92–111，2019年。

[131] H. Khatouri, T. Benamara, P. Breitkopf, and J. Demange. 面向计算密集型仿真设计优化的元建模技术：综述。《工程科学高级建模与仿真》，9(1):1，2022年。[132] Y. Kim, Y. Choi, D. Widemann, and T. Zohdi. 一种快速且准确的、结合浅层掩码自编码器的物理信息神经网络降阶模型。《计算物理学杂志》，451:110841，2022年。[133] P.D. Kingma and M. Welling. 自编码变分贝叶斯，2013年。[134] J. Kirkpatrick, R. Pascanu, N. Rabinowitz, J. Veness, G. Desjardins, A.A. Rusu, K. Milan, J. Quan, T. Ramalho, A. Grabska-Barwinska, D. Hassabis, C. Clopath, D. Kumaran, and R. Hadsell. 克服神经网络中的灾难性遗忘。《美国国家科学院院刊》，114(13):3521–3526，2017年。[135] J. Kneifl, J. Fehr, S.L. Brunton, and J.N. Kutz. 利用图卷积神经网络，对显式结构动力系统进行多层级代理学习。《计算力学》，第1–21页，2024年。[136] O. Koch and C. Lubich. 动态低秩近似。*SIAM*矩阵分析与应用杂志，29(2):434–454，2007年。[137] K. Kontolati, S. Goswami, G.E. Karniadakis, and M.D. Shields. 在潜在空间中学习非线性算子，以实时预测物理系统中的复杂动力学。《自然·通讯》，15(1):5101，2024年。[138] B. Kramer, B. Peherstorfer, and K.E. Willcox. 利用算子推断从数据中学习非线性降阶模型。流体力学年度评论，56(1):521–548，2024年。[139] C.Q. Lam. 用于拟合响应面模型的计算机实验序贯自适应设计。博士论文，俄亥俄州立大学，2008年。[140] R. Lam, D.L. Allaire, and K.E. Willcox. 利用统计代理建模对非分层信息源进行多保真度优化。载于第*56*届*AIAA/ASCE/AHS/ASC*结构、结构动力学与材料会议，第0143页，2015年。[141] Q.V. Le, A.J. Smola, and S. Canu. 异方差高斯过程回归。载于第*22*届国际机器学习会议论文集，第489–496页，2005年。[142] O. Le Maˆıtre and O.M. Knio. 不确定性量化的谱方法：及其在计算流体力学中的应用。施普林格科学与商业媒体，2010年。[143] G. Le Quilliec, B. Raghavan, and P. Breitkopf. 基于流形学习的降阶模型，用于钣金成形中的回弹形状表征与优化。应用力学与工程中的计算机方法，285:621–638，2015年。[144] K. Lee and K.T. Carlberg. 利用深度卷积自编码器对非线性流形上的动力系统进行模型降阶。《计算物理学杂志》，404:108973，2020年。[145] Z. Li, N. Kovachki, K. Azizzadenesheli, B. Liu, K. Bhattacharya, A. Stuart, and A. Anand- kumar. 面向参数化偏微分方程的傅里叶神经算子，2020年。[146] D.-G. Lim, G.-Y. Lee, and Y.-H. Park. 将基于广义正交分解的迭代富集过程与打靶法相结合，用于非线性动力系统的稳态强迫响应分析。《计算力学》，74(5):937–953，2024年。[147] L. Lin, H. Bao, and N. Dinh. 近自主管理与控制系统中数字孪生的不确定性量化与软件风险分析：综述。核能年刊，160:108362，2021年。

[148] Z. Lin, D. Xiao, F. Fang, C.C. Pain, and I.M. Navon. 在稀疏网格上采用最小二乘拟合的非侵入式降阶建模。*International Journal for Numerical Methods inFluids*，83(3):291–306，2017年。[149] H. Liu, J. Cai, and Y.-S. Ong. 通过最大化期望预测误差实现克里金元建模的自适应采样方法。《计算机与化学工程》，106:171–182，2017年。[150] H. Liu, Y.-S. Ong, and J. Cai. 支持基于仿真的复杂工程设计的全局元建模自适应采样综述。《结构与多学科优化》，57:393–416，2018年。[151] L. Lu, P. Jin, G. Pang, Z. Zhang, and G.E. Karniadakis. 基于算子万能逼近定理，通过DeepONet学习非线性算子。自然·机器智能，3(3):218–229，2021年。[152] Y. Lu, N. Blal, and A. Gravouil. 基于自适应稀疏网格的高阶本征广义分解：构建时空焊接计算便查手册的非侵入式策略。《国际工程数值方法杂志》，114(13):1438–1461，2018年。[153] Y. Lu, S. Mojumder, J. Guo, Y. Li, and W.K. Liu. 扩展张量分解降阶方法：训练、预测与不确定性下的设计。应用力学与工程中的计算机方法，418:116550，2024年。[154] L.B. Lucy. 一种检验裂变假说的数值方法。天文学杂志，82:1013–1024，1977年。[155] S.M. Lundberg a nd S.-I. Lee. 一种解释模型预测的统一方法。《神经信息处理系统进展》，30，2017年。[156] N. Luthen, S. Marelli, and B. Sudret. 稀疏多项式混沌展开：文献综述与基准测试。*SIAM/ASA*不确定性量化期刊，9(2):593–649，2021年。[157] H.V. Ly and H.T. Tran. 利用本征正交分解对物理过程进行建模与控制。数学与计算机建模，33(1-3):223–236，2001年。[158] I. Markovsky. 低秩逼近，第139卷。施普林格，2012年。[159] V. Matray, F. Amlani, F. Feyel, and D. N´eron. 一种结合降阶建模与图神经网络的混合数值方法，适用于非参数几何：在结构动力学问题中的应用。应用力学与工程中的计算机方法，430:117243，2024年。[160] R. Maulik, B. Lusch, and P. Balaprakash. 利用循环神经网络和卷积自编码器对对流主导系统进行降阶建模。*Physics of Fluids*，33(3)，2021年。[161] M.D. McKay, R.J. Beckman, and W.J. Conover. 比较三种方法，以选择计算机代码输出分析中的输入变量取值。技术计量学，21(1):239–245，1979年。[162] M. Meldi and A. Poux. 基于卡尔曼滤波的降阶模型，用于湍流的序贯数据同化。《计算物理学杂志》，347:207–234，2017年。[163] X. Meng, H. Babaee, and G.E. Karniadakis. 多保真贝叶斯神经网络：算法与应用。《计算物理学杂志》，438:110361，2021年。[164] X. Meng and G.E. Karniadakis. 一种从多保真数据中学习的复合神经网络：在函数逼近与偏微分方程反问题中的应用。《计算物理学杂志》，401:109020，2020年。

[165] M.J. Mifsud、D.G. MacManus 和 S.T. Shaw。采用本征正交分解的变保真度气动模型。*International Journal for Numerical Methods in Fluids*，82(10)：646–663，2016年。[166] D. Mill´an 和 M. Arroyo。有限弹性动力学模型降阶中的非线性流形学习。应用力学与工程中的计算机方法，261：118–131，2013年。[167] S. Mo、D. Lu、X. Shi、G. Zhang、M. Ye、J. Wu 和 J. Wu。用于全局代理建模的基于泰勒展开的自适应设计策略及其在地下水建模中的应用。*Water Resources Research*，53(12)：10802–10823，2017年。[168] D. Modesto、S. Zlotnik 和 A. Huerta。异质无界区域中参数化亥姆霍兹问题的广义正交分解：港口波浪扰动应用。应用力学与工程中的计算机方法，295：127–149，2015年。[169] O.M. Morrison、F. Pichi 和 J.S. Hesthaven。GFN：一种用于多保真度应用中分辨率不变的降阶算子学习的图前馈网络。应用力学与工程中的计算机方法，432：117458，2024年。[170] J. Mounayer、S. Rodriguez、C. Ghnatios、C. Farhat 和 F. Chinesta。秩缩减自编码器——增强非线性流形上的插值，2024年。[171] A. Muix´ı、S. Zlotnik、M. Giacomini 和 P. D´ıez。用于参数化层流不可压缩纳维–斯托克斯方程本征正交分解方法的数据增强。《国际工程数值方法杂志》，126(1)：e7624，2025年。[172] E. Nadal、F. Chinesta、P. D´ıez、F.J. Fuenmayor 和 F.D. Denia。基于广义正交分解，利用实验数据进行实时参数识别与解重构。应用力学与工程中的计算机方法，296：113–128，2015年。[173] A. Narayan、C. Gittelson 和 D. Xiu。采用多保真度模型的随机配置算法。*SIAM Journal on Scientific Computing*，36(2)：A495–A521，2014年。[174] B.L. Nelson。关于控制变量估计量。*Computers & Operations Research*，14(3)：219–225，1987年。[175] L.W.T. Ng 和 K.E. Willcox。不确定性下优化的多保真度方法。《国际工程数值方法杂志》，100(10)：746–772，2014年。[176] N.-C. Nguyen、A.T. Patera 和 J. Peraire。一种用于高效逼近参数化函数的“最佳点”插值方法。《国际工程数值方法杂志》，73(4)：521–543，2008年。[177] N.C. Nguyen。生成式降阶基方法。应用力学与工程中的计算机方法，437：117754，2025年。[178] S. Niroomandi、I. Alfaro、E. Cueto 和 F. Chinesta。基于降阶模型，在软组织实时仿真中考虑大变形。*Computer Methods andPrograms in Biomedicine*，105(1)：1–12，2012年。[179] F. Nobile、R. Tempone 和 C. G. Webster。一种用于具有随机输入数据的偏微分方程的稀疏网格随机配置法。*SIAM Journal on Numerical Analysis*，46(5)：2309–2345，2008年。[180] M.A. Oliver 和 R. Webster。地统计学基础：变异函数与克里金法，第106卷。施普林格，2015年。[181]I.V. Oseledets。张量列车分解。*SIAM Journal on Scientific Computing*，33(5)：2295–2317，2011年。

[182] G. Padula、M. Girfoglio 和 G. Rozza。采用侵入式与非侵入式技术的降阶模型简述。*PAMM*，24(4)：e202400210，2024年。[183] C. Park、R.T. Haftka 和 N.H. Kim。关于多保真代理模型的说明。《结构与多学科优化》，55：1029–1050，2017年。[184] I. Park 和 D. Papadimitriou。利用基于频响函数的子结构法，对整车进行高效的基于代理模型的NVH优化。*SAE*国际交通进展与当前实践期刊，2(2020-01-0629)：1429–1442，2020年。[185] L. Partin、G. Geraci、A.A. Rushdi、M.S. Eldred 和 D.E. Schiavazzi。卷积编码器/解码器网络中的多保真数据融合。《计算物理学杂志》，472：111666，2023年。[186] A.T. Patera 和 G. Rozza。参数化偏微分方程的约化基逼近与后验误差估计，2007年。[187] B. Peherstorfer、T. Cui、Y. Marzouk 和 K. Willcox。多保真重要性采样。应用力学与工程中的计算机方法，300：490–509，2016年。[188] B. Peherstorfer、B. Kramer 和 K. Willcox。用于稀有事件模拟和失效概率估计的交叉熵方法多保真预处理。*SIAM/ASA*不确定性量化期刊，6(2)：737–761，2018年。[189] B. Peherstorfer 和 K. Willcox。动态数据驱动降阶模型。应用力学与工程中的计算机方法，291：21–41，2015年。[190] B. Peherstorfer 和 K. Willcox。用于非侵入式投影模型降阶的数据驱动算子推断。应用力学与工程中的计算机方法，306：196–215，2016年。[191] B. Peherstorfer、K. Willcox 和 M. Gunzburger。不确定性传播、推断与优化中的多保真方法综述。《*SIAM*评论》，60(3)：550–591，2018年。[192] R. Pellegrini、J. Wackers、R. Broglia、A. Serani、M. Visonneau 和 M. Diez。一种用于含噪评估下全局设计优化问题的多保真主动学习方法。工程计算，39(5)：3183–3206，2023年。[193] P. Perdikaris、M. Raissi、A. Damianou、N.D. Lawrence 和 G.E. Karniadakis。用于高效利用数据进行多保真建模的非线性信息融合算法。《英国皇家学会会刊*A*辑：数学、物理与工程科学》，473(2198)：20160751，2017年。[194] T. Pfaff、M. Fortunato、A. Sanchez-Gonzalez 和 P.W. Battaglia。利用图网络学习基于网格的仿真，2020年。[195] P. Phalippou、S. Bouabdallah、P. Breitkopf、P. Villon 和 M. Zarroug。用于本征正交分解的“即时”快照选择及其在非线性动力学中的应用。应用力学与工程中的计算机方法，367：113120，2020年。[196] C. Piazzola 和 L. Tamellini。算法1040：稀疏网格Matlab工具包——用于高维函数逼近与不确定性量化的稀疏网格Matlab实现。*ACM*数学软件汇刊，50(1)：1–22，2024年。[197] C. Piazzola、L. Tamellini、R. Pellegrini、R. Broglia、A. Serani 和 M. Diez。比较多指标随机配置与多保真随机径向基函数在船舶阻力前向不确定性量化中的表现。工程计算，39(3)：2209–2237，2023年。

[198]F. Pichi、B. Moya 和 J.S. Hesthaven。面向参数化偏微分方程模型降阶的图卷积自编码器方法。《计算物理学杂志》，501:112762，2024年。[199] M.J.D. Powell。用于多变量插值的径向基函数：综述。载于近似算法，第143–167页。克拉伦登出版社，美国，1987年。[200] A. Quarteroni、A. Manzoni 和 F. Negri。偏微分方程的降阶基方法：导论，第92卷。施普林格，2015年。[201] M.A. Rahman、Z.E. Ross 和 K. Azizzadenesheli。U-NO：U形神经算子。《机器学习研究汇刊》，2023年。[202] R.R. Rama、S. Skatulla 和 C. Sansour。采用带插值的本征正交分解对心脏舒张期充盈进行实时建模。《国际固体与结构杂志》，96:409–422，2016年。[203] A.A. Ramabathiran 和 P. Ramachandran。SPINN：面向偏微分方程的稀疏、基于物理且部分可解释的神经网络。《计算物理学杂志》，445:110600，2021年。[204] D. Ramezanian、A.G. Nouri 和 H. Babaee。基于时变流形的被动组分与反应性组分即时降阶建模。应用力学与工程中的计算机方法，382:113882，2021年。[205] M. Rocas、A. Garc´ıa-Gonz´alez、S. Zlotnik、X. Larr´ayoz 和 P. D´ıez。针对采用 VPS/Pamcrash 的汽车碰撞问题的非侵入式不确定性量化。《分析与设计中的有限元》，193:103556，2021年。[206] I.B.C.M. Rocha、P. Kerfriden 和 F.P. Van Der Meer。面向多尺度固体力学的演化物理材料模型机器学习。《材料力学》，184:104707，2023年。[207] F. Romor、G. Stabile 和 G. Rozza。结合卷积自编码器与降阶超配置方法的非线性流形降阶模型。《科学计算杂志》，94(3):74，2023年。[208] F. Romor、M. Tezzele、M. Mrosek、C. Othmer 和 G. Rozza。通过参数空间降维实现多保真度数据融合及其在汽车工程中的应用。《国际工程数值方法杂志》，124(23):5293–5311，2023年。[209] O. Ronneberger、P. Fischer 和 T. Brox。U-Net：用于生物医学图像分割的卷积网络。载于 N. Navab、J. Hornegger、W. Wells 和 A. Frangi 编，医学图像计算与计算机辅助干预——*MICCAI 2015*，《计算机科学讲义》，第234–241页。施普林格·查姆，2015年。[210] S.T. Roweis 和 L.K. Saul。基于局部线性嵌入的非线性降维。《科学》，290(5500):2323–2326，2000年。[211] G. Rozza、G. Stabile 和 F. Ballarin。计算流体力学中的先进降阶方法与应用。工业与应用数学学会，2022年。[212] D. Ryckelynck。先验超降阶方法：一种自适应方法。《计算物理学杂志》，202(1):346–366，2005年。[213] Y. Saka、M. Gunzburger 和 J. Burkardt。超立方体中的拉丁化、改进拉丁超立方抽样与CVT点集。《国际数值分析与建模杂志》，4(3-4):729–743，2007年。

[214]M. Salvador、L. Dede 和 A. Manzoni。基于核 POD 与神经网络的参数化偏微分方程非侵入式降阶建模。《计算机与应用数学》，104:1–13，2021年。[215] D. Samadian、I.B. Muhit 和 N. Dawood。数据驱动代理模型在结构工程中的应用：文献综述。《工程计算方法档案》，32(2):735–784，2025年。[216] A. Sancarlos、V. Champaney、E. Cueto 和 F. Chinesta。基于分离表示的参数模型正则化回归。《工程科学高级建模与仿真》，10(1):4，2023年。[217] F. Scarselli、M. Gori、A.C. Tsoi、M. Hagenbuchner 和 G. Monfardini。图神经网络模型。《*IEEE* 神经网络汇刊》，20(1):61–80，2008年。[218] L. Schena、P.A. Marques、R. Poletti、S. Ahizi、J. Van den Berghe 和 M.A. Mendez。强化孪生：从数字孪生到基于模型的强化学习。《计算科学杂志》，82:102421，2024年。[219] B. Sch¨olkopf、A. Smola 和 K.-R. M¨uller。核主成分分析。载于国际人工神经网络会议，第583–588页。施普林格，1997年。[220] K. Sel、A. Hawkins-Daarud、A. Chaudhuri、D. Osman、A. Bahai、D. Paydarfar、K. Willcox、C. Chung 和 R. Jafari。精准医学数字孪生的验证、确认与不确定性量化：综述与展望。《*npj* 数字医学》，8(1):40，2025年。[221] P. Sengupta 和 S. Chakraborty。结构健康监测应用中有限元模型更新的模型降阶与子结构技术最新综述。《工程计算方法档案》，第1–32页，2025年。[222] Y. Shen、H.C. Patel、Z. Xu 和 J.J. Alonso。应用带自编码器的多保真度迁移学习以高效构建代理模型。载于*AIAA SCITECH 2024* 论坛，第0013页，2024年。[223] M.-L. Shi、L. Lv 和 L. Xu。基于极限支持向量回归的多保真代理模型：融合不同保真度数据以用于工程设计。《工程计算》，40(2):473–493，2023年。[224] Maolin Shi、Liye Lv、Wei Sun 和 Xueguan Song。基于支持向量回归的多保真代理模型。《结构与多学科优化》，61(6):2363–2375，2020年。[225] T. Simpson、K. Vlachas、A. Garland、N. Dervilis 和 E. Chatzi。VpROM：一种用于处理非线性系统参数依赖关系的新型变分自编码器增强降阶模型。《科学报告》，14(1):6091，2024年。[226] R.C. Smith。不确定性量化：理论、实现与应用。工业与应用数学学会，2024年。[227] W. Snyder、C. Mou、H. Liu、O. San、R. DeVita 和 T. Iliescu。降阶模型闭合：简要教程。载于《力学与流固耦合及其应用的最新进展：*Bong Jae Chung* 纪念文集》，第167–193页。施普林格，2022年。[228] A. S´obester、S. J Leary 和 A.J. Keane。基于全局响应面近似模型的优化策略设计。《全球优化杂志》，33:31–59，2005年。[229] P. Solin、K. Segeth 和 I. Dolezel。高阶有限元方法。Chapman and Hall/CRC，2003年。

[230] X. Song, L. Lv, W. Sun, and J. Zhang. 基于径向基函数的多保真代理模型：探索高保真模型与低保真模型之间的相关性。《结构与多学科优化》, 60:965–981, 2019年。[231] R. S wischuk, L. Mainini, B. Peherstorfer, and K. Willcox. 基于投影的模型降阶：基于物理的机器学习方法。*Computers & Fluids*, 179:704–717, 2019年。[232] A.L. Teckentrup, P. Jantsch, C.G. Webster, and M. Gunzburger. 一种适用于具有随机输入数据的偏微分方程的多层随机配置法。*SIAM/ASA*不确定性量化期刊, 3(1):1046–1074, 2015年。[233] M. Tezzele, L. Fabris, M. Sidari, M. Sicchiero, and G. Rozza. 一种结合参数空间降维与非侵入式POD的多保真方法及其在客船船体结构优化中的应用。*International Journal for Numerical Methods in Engi-neering*, 124(5):1193–1210, 2023年。[234] A. Thelen, X. Zhang, O. Fink, Y. Lu, S. Ghosh, B. D Youn, M.D. Todd, S. Mahadevan, C. Hu, and Z. Hu. 数字孪生综合综述（第二部分）：不确定性量化与优化的作用、电池数字孪生及展望。《结构与多学科优化》, 66(1):1, 2023年。[235] S.T. Tokdar and R.E. Kass. 重要性采样：综述。《威利跨学科评论：计算统计学》, 2(1):54–60, 2010年。[236] S. Torregrosa, V. Champaney, A. Ammar, V. Herbert, and F. Chinesta. 基于最优传输的代理参数元模型。《数学与计算机模拟》, 194:36–63, 2022年。[237] V. Tsiolakis, M. Giacomini, R. Sevilla, C. Othmer, and A. Huerta. 针对OpenFOAM中参数化不可压缩流问题的非侵入式适当广义分解。《计算机物理通讯》, 249:107013, 2020年。[238] V. Tsiolakis, M. Giacomini, R. Sevilla, C. Othmer, and A. Huerta. 利用适当广义分解求解OpenFOAM中湍流不可压缩流的参数化解。《计算物理学杂志》, 449:110802, 2022年。[239] J.H. Tu, C.W. Ro wley, D.M. Luchtenburg, S.L. Brunton, and J.N. Kutz. 关于动态模态分解：理论与应用。《计算动力学杂志》, 1(2):391– 421, 2014年。[240] L.R. Tucker. 关于三模因子分析的一些数学札记。《心理计量学》, 31(3):279–311, 1966年。[241] W Vanderbauwhede. 通过自动程序转换使遗留Fortran代码具备类型安全性。《超级计算杂志》, 78(2):2988–3028, 2022年。[242] V. Vapnik, S. Golowich, and A. Smola. 用于函数逼近、回归估计和信号处理的支持向量方法。《神经信息处理系统进展》, 9, 1996年。[243] M.A.O. Vasilescu and D. Terzopoulos. 图像集合的多线性分析：张量脸。载于 A. Heyden, G. Sparr, M. Nielsen, and P. Johansen 编，计算机视觉——*ECCV 2002*，《计算机科学讲义》，第447–460页。Springer Berlin Heidelberg, 2002年。[244] A. Vaswani, N. Shazeer, N. Parmar, J. Uszkoreit, L. Jones, A.N. Gomez, L. Kaiser, and I. Polosukhin. 注意力就是你所需要的一切。《神经信息处理系统进展》, 2017年。

[245] K. Veroy and A.T. Patera. 参数化定常不可压缩Navier–Stokes方程的认证实时求解：严格的约化基后验误差界。*International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 47(8-9):773–788, 2005年。[246] R. Vinuesa, S.L. Brunton, and G. Mengaldo. 可解释人工智能：向学习者学习，2026年。[247] K. Vlachas, K. Tatsis, K. Agathos, A.R. Brink, D. Quinn, and E. Chatzi. 结构系统降阶建模与子结构方法的耦合：考虑部件非线性。载于动态子结构，第*4*卷：第*39*届*IMAC*结构动力学会议暨展览会论文集（*2021*），第35–43页。施普林格，2021年。[248]P.R. Vlachas, W. Byeon, Z.Y. Wan, T.P. Sapsis, and P. Koumoutsakos. 利用长短期记忆网络对高维混沌系统进行数据驱动预测。《英国皇家学会会刊*A*辑：数学、物理与工程科学》，474(2213):20170844, 2018年。[249] S. Volpi, M. Diez, N.J. Gaul, H. Song, U. Iemma, K.K. Choi, E.F. Campana, and F. Stern. 基于随机径向基函数与不确定性量化的动态元模型的开发与确认。《结构与多学科优化》, 51:347– 368, 2015年。[250] S. Walton, O. Hassan, and K. Morgan. 利用本征正交分解和径向基函数对非定常流体流动进行降阶建模。*Applied MathematicalModelling*, 37(20-21):8930–8945, 2013年。[251] Z.Y. Wan, P. Vlachas, P. Koumoutsakos, and T. Sapsis. 复杂动力系统极端事件的数据辅助降阶建模。*PloS one*, 13(5):e0197704, 2018年。[252] S. Wang, Y. Liu, Q. Zhou, Y. Yuan, L. Lv, and X. Song. 基于移动最小二乘的多保真代理模型：融合不同保真度数据以服务工程设计。《结构与多学科优化》，64(6):3637–3652, 2021年。[253] S. Wang, H. Wang, and P. Perdikaris. 利用物理信息DeepONet学习参数化偏微分方程的解算子。*Science Advances*, 7(40):eabi8605, 2021年。[254] X. Wang, J. Kou, and W. Zhang. 用于定常流估计的多保真代理降阶建模。*International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 92(12):1826–1844, 2020年。[255] Y. Wang, A. Solera-Rico, C. Sanmiguel Vila, and R. Vinuesa. 迈向最优 β-结合Transformer的变分自编码器，用于湍流降阶建模。*International Journal of Heat and Fluid Flow*, 105:109254, 2024年。[256] Y. Wang, S. Zhou, and Y. Zhang. 利用卷积神经网络进行参数化模型降阶。《国际数值分析与建模杂志》, 21(5), 2024年。[257] Z. Wang, D. Xiao, F. Fang, R. Govindan, C.C. Pain, and Y. Guo. 利用深度学习识别降阶流体动力系统模型。*International Journal forNumerical Methods in Fluids*, 86(4):255–268, 2018年。[258] Z. Wang, W. Xing, R. Kirby, and S. Zhe. 用于物理模拟的多保真高阶高斯过程。载于人工智能与统计国际会议，第847–855页。PMLR, 2021年。

[259]M.D. Wilkinson, M. Dumontier, I.J. Aalbersberg, G. Appleton, M. Axton, A. Baak, N. Blomberg, J.-W. Boiten, L.B. da Silva Santos, P.E. Bourne, J. Bouwman, A.J. Brookes, T. Clark, M. Crosas, I. Dillo, O. Dumon, S. Edmunds, C.T. Evelo, R. Finkers, A. Gonzalez-Beltran, A.J.G. Gray, P. Groth, C. Goble, J.S. Grethe, J. Heringa, P.A.C. 't Hoen, R. Hooft, T. Kuhn, R. Kok, J. Kok, S.J. Lusher, M.E. Martone, A. Mons, A.L. Packer, B. Persson, P. Rocca-Serra, M. Roos, R. van Schaik, S.-A. Sansone, E. Schultes, T. Sengstag, T. Slater, G. Strawn, M.A. Swertz, M. Thompson, J. van der Lei, E. van Mulligen, J. Velterop, A. Waagmeester, P. Wittenburg, K. Wolstencroft, J. Zhao和B. Mons。科学数据管理与管护的FAIR指导原则。*Scientific Data*, 3(1):160018, 2016年。[260] K. Willcox。基于缺失本征正交分解的非定常流感知与估计。*Computers & Fluids*, 35(2):208–226, 2006年。[261] P. Wu, S. Gong, K. Pan, F. Qiu, W. Feng和C.C. Pain。采用带自注意力的卷积自编码器的降阶模型。*Physics of Fluids*, 33(7), 2021年。[262] P. Wu, F. Qiu, W. Feng, F. Fang和C. Pain。基于Transformer神经网络的非侵入式降阶模型及其应用。*Physics of Fluids*, 34(11), 2022年。[263] D. Xiao, F. Fang, A.G. Buchan, C.C. Pain, I.M. Navon和A. Muggeridge。Navier–Stokes方程的非侵入式降阶建模。应用力学与工程中的计算机方法, 293:522–541, 2015年。[264] D. Xiao, C.E. Heaney, L. Mottet, F. Fang, W. Lin, I.M. Navon, Y. Guo, O.K. Matar, A.G. Robins和C.C. Pain。基于机器学习的城市环境湍流降阶模型。*Building and Environment*, 148:323–337, 2019年。[265] M. Xiao, P. Breitkopf, R.F. Coelho, C. Knopf-Lenoir, M. Sidorkiewicz和P. Villon。基于CPOD与克里金法的模型降阶。《结构与多学科优化》, 41(4):555–574, 2010年。[266] M. Xiao, G. Zhang, P. Breitkopf, P. Villon和W. Zhang。基于多保真数据的扩展协同克里金插值方法。*Applied Mathematics and Computation*, 323:120–131, 2018年。[267] D. Xiu。随机计算的数值方法：一种谱方法途径。普林斯顿大学出版社, 2010年。[268] D. Xiu和G.E. Karniadakis。随机微分方程的Wiener–Askey多项式混沌。*SIAM Journal on Scientific Computing*, 24(2):619–644, 2002年。[269] D. Xiu和G.E. Karniadakis。基于广义多项式混沌对流动模拟中的不确定性进行建模。《计算物理学杂志》, 187(1):137–167, 2003年。[270] J. Xu和K. Duraisamy。用于时空动力学参数预测的多层卷积自编码器网络。应用力学与工程中的计算机方法, 372:113379, 2020年。[271] S. Xu, H. Liu, X. Wang和X. Jiang。一种基于Voronoi图与交叉验证、面向全局元建模的稳健误差追踪序贯采样方法。*Journal ofMechanical Design*, 136(7):071009, 2014年。[272] L. Yan和T. Zhou。面向逆问题中贝叶斯推断的自适应多保真多项式混沌方法。《计算物理学杂志》, 381:110–128, 2019年。[273] J. Yi, J. Cheng和M.A. Bessa。实用多保真机器学习：确定性模型与贝叶斯模型的融合, 2024年。

[274] J. Zbontar, L. Jing, I. Misra, Y. LeCun和S. Deny。Barlow Twins：通过冗余消减实现的自监督学习。载于M. Meila和T. Zhang编，第*38*届国际机器学习会议论文集，机器学习研究论文集第139卷，第12310–12320页。PMLR，2021年7月18日至24日。[275] G. Zhang, J. Zhang和J. Hinkle。学习非线性水平集以用于函数逼近中的降维。《神经信息处理系统进展》, 32, 2019年。[276] L. Zhang, Y. Wu, P. Jiang, S.-K. Choi和Q. Zhou。一种纳入多种非层级低保真数据的多保真代理建模方法。《先进工程信息学》, 51:101430, 2022年。[277] X. Zhang, F. Xie, T. Ji, Z. Zhu和Y. Zheng。用于气动外形优化的多保真深度神经网络代理模型。应用力学与工程中的计算机方法, 373:113485, 2021年。[278] Y. Zhang。面向数字孪生的边缘计算。载于《数字孪生：架构、网络与应用》，第41–59页。Springer Nature Switzerland，Cham，2024年。[279] Y. Zhang, N.H. Kim, C. Park和R.T. Haftka。基于单一线性回归的多保真代理模型。《*AIAA*期刊》, 56(12):4944–4952, 2018 年。[280] X. Zou, M. Conti, P. Dı́ez 和 F. Auricchio。一种非侵入式正规广义分解格式及其在生物力学中的应用。《国际工程数值方法杂志》, 113(2):230–251, 2018年。