基于PCE代理模型和贝叶斯优化的结构参数快速反演方法

李翼飞¹, 任青文^{1*}, 王启明², 曹茂森¹, 黄丹¹

1. 河海大学力学与材料学院, 南京 210098;

2. 河海大学理学院, 南京 210098

* E-mail: renqw@hhu.edu.cn

收稿日期: 2021-01-13; 接受日期: 2021-04-12; 网络版发表日期: 2021-09-18

国家重点研发计划(编号: 2018YFC0406703)和国家自然科学基金重点项目(批准号: 51739006)资助

摘要 为保证工程结构的安全, 根据实测资料进行反演分析, 获取真实环境下的材料参数值具有重要价值. 而现有的参数反演方法普遍存在计算效率与精度不可兼得的问题. 本文利用小样本构建基于混沌多项式展开 (polynomial chaos expansions, PCE) 的高精度代理模型, 并采用贝叶斯优化进行参数反演. 新方法基于大型结构响应随机量化方法, 充分利用复杂因素影响下结构响应随机特性, 并依据贝叶斯后验更新方法, 仅需要少量正向计算样本, 便可高效、精确地进行大型结构的参数反演. 某混凝土拱坝材料参数的反演算例表明, 与基于贝叶斯优化算法直接进行迭代优化反演方法和基于Kriging代理模型的反演方法相比, 本文所构建的方法具有优异的计算效率, 适合于大型复杂结构问题的快速反演, 为实际工程中在线反演和实时预测提供了新的发展维度.

关键词 结构参数快速反演, 代理模型, 混沌多项式展开, 贝叶斯优化, 有限元

1 引言

我国的大坝数量均居世界第一^[1], 修建的规模和技术难度也居世界前列. 大坝作为水利水电枢纽的主要建筑物, 其安全性是人们十分关心的重要问题. 然而, 由于实际运行环境的复杂性, 气象、水文、地质条件的不确定性, 现有的设计和分析水平还难以完全考虑所有因素. 加上可能出现设计无法考虑的极端情况, 如超标暴雨和洪水、超强地震等, 增加了大坝的安全风险. 为及时了解和评估变化环境下大坝的安全

性, 利用实测数据进行反演分析已成为当前的主要手段. 为此, 需要收集大坝在实际运行环境下的响应量, 如位移、应力、温度、渗流等, 通过反演分析, 获得相对真实的大坝和地基材料的力学、热力学和渗流参数^[2-5], 然后根据这些参数进行正分析以预测大坝的安全性. 鉴于问题的复杂性, 正分析主要采用有限元方法, 而反演分析是一个多峰、非凸、高维的优化问题, 需要反复进行大量的正分析. 尤其是在高坝建设过程中分期施工蓄水时, 基于监测数据的快速反演分析可以为蓄水时拱坝的安全性预测提供保障. 但由于坝体

引用格式: 李翼飞, 任青文, 王启明, 等. 基于PCE代理模型和贝叶斯优化的结构参数快速反演方法. 中国科学: 技术科学, 2022, 52: 928–940
Li Y F, Ren Q W, Wang Q M, et al. Fast inversion method of structural parameters based on PCE surrogate model and Bayesian optimization (in Chinese). Sci Sin Tech, 2022, 52: 928–940, doi: [10.1360/SST-2021-0018](https://doi.org/10.1360/SST-2021-0018)

形状、力学特性、荷载、边界条件等都在变化, 且有限元模型计算规模大, 单元数常高达数十甚至上百万, 单次正分析时间长, 采用常规的、基于有限元分析的优化方法进行高精度快速反演难以实现。

以计算成本廉价的代理模型代替成本高昂的原模型已成为研究复杂结构设计、工程计算等问题的主流方法。王永强等人^[6]以某混凝土重力坝非溢流坝段为研究对象, 构建了克里金代理模型, 结合遗传算法, 以坝体横断面面积最小为目标对坝体结构进行了优化。程正飞等人^[7]提出基于多目标粒子群算法与代理模型的碾压混凝土坝坝体渗控结构多目标优化方法, 该方法在大大提高渗控结构参数反演效率的同时, 可有效解决传统单目标优化方法难以诠释不同设计参数之间关联性的不足。秦世强等人^[8]基于克里金代理模型和改进的粒子群优化算法, 利用荷载试验数据对菜园坝长江大桥初始有限元模型进行修正, 结果表明修正后模型的频率和位移的相对误差更小。赵林鑫等人^[9]基于极限学习机的人工神经网络模型结合比例边界有限元法, 提出了一种可以快速反演结构缺陷信息的方法。通过研究含缺陷薄板结构算例, 结果表明, 该方法不仅能大大提升计算效率, 还能在含噪信号下具有较好的鲁棒性。吴芳等人^[10]基于马尔可夫链蒙特卡罗方法提出一种基于随机多项式展开代理模型的概率反演算法, 通过降雨入渗非饱和土坡算例研究, 发现与基于数值模型的常规随机反分析相比, 该算法具有更高的寻优效率与精度。此外, 李翔宇^[11]、骆雷^[12]、赵俊哲^[13]、刘棕文^[14]、刘越^[15]等人采用不同的代理模型结合优化算法分别对陶瓷-金属功能梯度涂层材料、汽车碰撞、复合材料层合板、机器人驱动臂座、低速电动车车架进行了优化设计。但现有的研究绝大多数是将代理模型技术和优化算法两者结合起来用于优化设计, 鲜有用来解决大体积混凝土结构的参数反演问题。

本文将代理模型与轻量、高效智能优化算法结合, 建立了基于PCE代理模型和贝叶斯优化的结构参

数快速反演方法, 用以解决分期施工蓄水期混凝土坝参数快速反演问题。首先, 讨论了基于不同试验样本量下的混凝土拱坝实测点处顺河向位移多项式混沌展开(polynomial chaos expansions, PCE)代理模型的适用性和精度, 而后基于小样本PCE模型采用贝叶斯优化方法进行概率意义上最优参数的迭代搜索, 在避免直接采用大型有限元模型进行大量正分析的同时, 充分考虑复杂因素影响下位移响应的随机特性, 以准确、高效地进行参数反演。

2 基于PCE代理模型和贝叶斯优化的力学参数反演算法构建

2.1 代理模型方法

代理模型是利用原模型的有限组输入和相应的响应输出, 以拟合原模型的输入输出行为的一种数学模型。实际工程中的原模型往往具有多参数、高维度、强非线性等特点, 且输入与目标输出之间通常为复杂“黑箱”问题。为了能高效、准确地获得输出结果, 一个有效的方法就是在不降低精度情况下采用高效的模型来替代计算代价昂贵的原模型, 这类模型称为代理模型, 当下流行的如克里金模型、支持向量机模型等。代理模型的构建过程如图1所示。

2.2 PCE代理模型构建

假设一个概率空间 $(\Omega, F, \mathcal{P})$, 其中 Ω 是事件空间, 分布函数 F 是 Ω 上的 σ 代数, $\mathcal{P}$ 是 F 上的概率测度, 如果数学模型的输入向量是随机向量 $X(\omega)$, $\omega \in \Omega$, 则随机响应 $Y(\omega)$ 也是随机变量。考虑 $Y = \mathcal{M}(X)$ 具有有限方差 σ^2 , 根据Soize和Ghanem^[16]的多项式混沌展开如下:

$$Y = \mathcal{M}(X) = \sum_{\alpha \in \mathbb{N}^M} \beta_{\alpha} \psi_{\alpha}(X), \quad (1)$$

式中, M 是输入随机变量的个数, $\mathbb{N}$ 为自然数集合,

图1 代理模型构建过程

Figure 1 Surrogate model building process.

$\mathbb{N}^M$ 是 M 维自然数向量集合, β_α 是待定的展开系数, ψ_α 是关于 $\mathbf{X}$ 的联合概率密度函数正交的多变量基函数, α 为 M 维基函数索引下标.

构建PCE模型首先需要进行试验设计(design of experiments, DOEs), 即选择原模型合适数目和空间分布的输入以及对应的响应输出, 评估或确定输入对响应输出的影响. 试验设计具有多种统计抽样方法, 本文选用拉丁超立方抽样方法(Latin hypercube sampling, LHS), 该方法具有均匀性、高效性等优点, 广泛用于代理模型的构建中^[17].

试验设计中称采用抽样方法生成样本的数量为试验设计值, 记为 N_{DOE} . 在给定 N_{DOE} 时PCE中项的数量通常非常大, 必须要对其进行截断. 主要有两种截断方案: 标准截断^[18]和双曲线截断^[19], 本文采用后一种截断方式, 以向量 q -范数和多项式总阶数 p 共同来定义截断:

$$\mathcal{A}^{M,p,q} = \{\alpha \in \mathcal{A}^{M,p} : \alpha_q \leq p\}, \quad (2)$$

式中, $\mathcal{A}^{M,p} = \{\alpha \in \mathbb{N}^M : |\alpha| \leq p\}$; $|\alpha| = \sum_{i=1}^M 1_{\{\alpha_i > 0\}}$ 称为下标向量 α 的秩, 表示向量 α 中元素大于零的个数; $\alpha_q = \left(\sum_{i=1}^M \alpha_i^q\right)^{1/q}$ 为向量 α 的 q -范数, $\mathcal{A}^{M,p,q}$ 为截断后下标集合, 该集合通过限制多项式非零系数的数量约束了多项式的规模.

为了找到大型随机模型的最优PCE项集, 本文采用最小角回归(least angle regression, LAR)^[19]作为自适应PCE的计算策略, 研究表明 q 取小值可减小多项式中混合阶非零项扩展系数的数量, 能大大提高计算效率, 故文中取 $q < 1$. 由于采用多项式截断方法, 用 ε 表示截断误差, 则有

$$\mathbf{Y} = \mathcal{M}(\mathbf{X}) = \sum_{\alpha \in \mathcal{A}^{M,p,q}} \beta_\alpha \psi_\alpha(\xi) + \varepsilon, \quad (3)$$

式中, $\xi = \Phi^{-1}(F_x(\mathbf{X}))$ 为标准正态变换, $\Phi(\cdot)$ 为标准正态分布函数.

LAR方法估计系数公式为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \underset{\boldsymbol{\beta}}{\text{argmin}} \mathbb{E} \left[(\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\psi}(\xi) - \mathbf{Y})^2 \right] + \lambda \boldsymbol{\beta}_1, \quad (4)$$

式中, $\boldsymbol{\beta}$ 为所有参数构成的列向量, $\boldsymbol{\psi}(\cdot)$ 为基函数构成

的列向量, $\mathbb{E}(\cdot)$ 为数学期望, $\boldsymbol{\beta}_1 = \sum_{\alpha} \boldsymbol{\beta}_{\alpha}$, $\lambda \in R$ 为惩罚因子.

代理模型方法的关键步骤是对数值模型逼近的验证. 本文采用验证误差和留一交叉验证(leave-one-out cross-validation, LOO)两种方法对其精度进行验证. 设 $\{\mathbf{X}_{\text{val}}, \mathbf{Y}_{\text{val}} = \mathcal{M}(\mathbf{X}_{\text{val}})\}$ 为验证集, 那么验证误差 ε_{val} 可通过(5)式计算^[20]:

$$\varepsilon_{\text{val}} = \frac{K-1}{K} \left[\frac{\sum_{i=1}^K \left(\mathcal{M}(\mathbf{X}_{\text{val}}^{(i)}) - \mathcal{M}^{\text{PCE}}(\mathbf{X}_{\text{val}}^{(i)}) \right)^2}{\sum_{i=1}^K \left(\mathcal{M}(\mathbf{X}_{\text{val}}^{(i)}) - \bar{\mu}_{\mathbf{Y}_{\text{val}}} \right)^2} \right], \quad (5)$$

式中, $\bar{\mu}_{\mathbf{Y}_{\text{val}}} = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K \mathcal{M}(\mathbf{X}_{\text{val}}^{(i)})$ 是验证集响应的样本均值,

K 为验证集中样本个数.

而LOO则具有更好的鲁棒性, 该误差定义如下^[20]:

$$\varepsilon_{\text{loo}} = \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{DOE}}} \left(\mathcal{M}(\mathbf{X}^{(i)}) - \mathcal{M}^{\text{PCE}^{(i)}}(\mathbf{X}^{(i)}) \right)^2}{\sum_{i=1}^{N_{\text{DOE}}} \left(\mathcal{M}(\mathbf{X}^{(i)}) - \bar{\mu}_{\mathbf{Y}} \right)^2}, \quad (6)$$

式中, $\mathcal{M}^{\text{PCE}^{(i)}}(\cdot)$ 为将第 i 个样本点从完整试验设计中去除外得到PCE模型.

2.3 基于贝叶斯优化的参数反演算法

根据1.2节建立的PCE模型, 获得的坝体观测点处PCE计算响应值和实测值, 采用贝叶斯优化方法(Bayesian optimization, BO)反演坝体的力学参数.

设坝体上有 m 个观测点, 每个观测点的响应实测值记为 d_i , $i = 1, 2, \dots, m$, 组成响应实测向量 $\mathbf{D} = [d_1, d_2, \dots, d_m]$; 每个观测点响应对应的PCE模型计算值记为 $\hat{d}_i(\boldsymbol{\theta})$, $i = 1, 2, \dots, m$, 它们构成的计算响应向量记为 $\hat{\mathbf{D}}(\boldsymbol{\theta}) = [\hat{d}_1(\boldsymbol{\theta}), \hat{d}_2(\boldsymbol{\theta}), \dots, \hat{d}_m(\boldsymbol{\theta})]$, 其中 $\boldsymbol{\theta}$ 为力学参数构成向量. 则参数反演模型为

$$\begin{cases} \min EV(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{D}) = \|\hat{\mathbf{D}} - \mathbf{D}\|^2 = \sum_{i=1}^m (d_i - \hat{d}_i(\boldsymbol{\theta}))^2, \\ \text{s.t. } \boldsymbol{\theta} \in \Theta, \end{cases} \quad (7)$$

式中, Θ 为参数空间, EV 称为目标函数.

BO算法为基于贝叶斯后验分布理论的逐步迭代寻找目标函数全局最小值的算法, 不需要随机群集算法那样进行大量的随机搜索, 具有鲁棒性好、收敛速

度快等优点^[21~23]. 该算法根据目标函数 EV 的先验信息的假定, 在当前已知样本(或信息)下, 快速在参数空间 Θ 中寻找到下一个较优位置, 并将该较优的位置信息加入到后续迭代中, 从而最快地达到最优解. 本文中 Θ 为高维参数空间, 根据中心极限定理及贝叶斯估计原理, 设在给定的响应实测值 D 和参数 θ 时, 目标函数 EV 服从正态分布:

$$EV | \theta, D \sim \mathcal{N}(0, K), \quad (8)$$

式中, K 为协方差矩阵. 当考虑噪声影响时, 给定响应实测值 D 和参数 θ 时, 目标函数 EV 的观测结果为 z , 且 $z = EV + \varepsilon$, 其中噪声 ε 服从正态分布, 均值为零, 方差为 σ^2 , 即

$$z | EV, \sigma^2 \sim \mathcal{N}(EV, \sigma^2 I). \quad (9)$$

设当前样本为 $S_t = \{(z_1, \theta_1), \dots, (z_t, \theta_t)\}$ 时, 根据高斯过程性质^[21]有

$$p(EV^* | S_t) = \mathcal{N}(\mu_t, \sigma_t^2), \quad (10)$$

式中, EV^* 为预测值. 根据贝叶斯公式, 此时参数 μ_t 和 σ_t^2 的后验估计为^[24]

$$\mu_t(\theta) = k(\theta)^T (K + \sigma^2 I)^{-1} Z, \quad (11)$$

$$\sigma_t^2(\theta) = k(\theta, \theta) - k(\theta)^T (K + \sigma^2 I)^{-1} k(\theta), \quad (12)$$

式中, $Z = (z_1, z_2, \dots, z_t)^T$; $k(\cdot, \cdot)$ 为协方差核函数^[25].

$$k(\theta_1, \theta_2) = \mathbb{E} \left\{ [EV(\theta_1) - \mathbb{E}(EV(\theta_1))] \times [EV(\theta_2) - \mathbb{E}(EV(\theta_2))] \right\}, \quad (13)$$

$K = (K_{mn})_{t \times t}$, $K_{mn} = k(\theta_m, \theta_n)$; $k(\theta)$ 为 θ 与 $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_t$ 的协方差构成的列向量.

在获得当前样本的分布下, 选择合适的参数值作为当前样本下参数值的估计, 在已知后验均值和后验方差时, 根据Srinivas等人^[26]在2010年提出的LCB方法得到新的参数估计值:

$$\theta_{t+1} = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} \alpha(\theta) = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} [\mu_t(\theta) - \sigma_t(\theta)], \quad (14)$$

式中, $\alpha_t(\theta) = \mu_t(\theta) - \sigma_t(\theta)$ 称为采集函数, 由于对采集函数取其最小值, 得到新的参数 θ_{t+1} 估计值优于当前的估计值. 将 θ_{t+1} 加入到样本集 S_t , 得到

$$S_{t+1} = \{(z_1, \theta_1), (z_2, \theta_2), \dots, (z_t, \theta_t), (z_{t+1}, \theta_{t+1})\}.$$

重复上述的过程, 直至找到最优参数. BO算法的伪代码如图2所示^[22].

2.4 基于贝叶斯优化的参数反演算法流程

根据1.2和1.3节, 构建基于PCE模型的大坝力学参数反演流程如图3所示.

3 某拱坝有限元模型及PCE代理模型的构建

3.1 工程概况

某水电站的大坝为碾压混凝土双曲拱坝. 坝顶高程653 m, 坝底高程558 m, 最大坝高95 m, 坝顶宽度5 m, 拱冠梁底宽22.0 m, 拱冠梁厚高比0.232, 坝顶中心线弧长299.56 m, 弧高比3.153, 顶拱中心角80.624°. 大坝共有5个坝段, 设置了4条横缝, 分缝间距约60 m. 坝体设横缝不设纵缝, 横缝采用通缝布置. 溢流表孔布置在坝顶中部, 堰顶高程643.5 m, 共设3孔, 每孔净宽10 m. 大坝于2015年11月建成, 2017年2月开始蓄水.

3.2 拱坝有限元模型构建

(1) 拱坝有限元计算模型

根据拱坝的实际情况, 建立了大坝-地基的数值分析模型.

模型范围: 大坝至上游边界距离为1.5倍坝高, 至下游边界为2.5倍坝高, 至左、右岸和底部各2倍坝高.

模拟对象: 拱坝坝体, 考虑了坝体混凝土的材料分区、坝体分缝、泄洪孔口; 计算范围内的地基岩体和主要结构面.

采用八节点六面体和六节点四面体等参单元对大

算法 1 贝叶斯优化

输入: 参数 θ , 观测值 $z(\theta)$.

输出: 最优参数 $\hat{\theta}$

1: $S \leftarrow$ 初始化样本库 $\{(z_i, \theta_i)\}, i = 1, 2, \dots, t$.

2: **for** $i = t + 1, t + 2, \dots$ **do**

3: 计算后验参数估计 μ_t, σ_t

4: 根据采集函数 $\alpha(\theta)$, 选择一个新的 θ_{i+1} , 使得 $\theta_{i+1} = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} \alpha(\theta)$.

5: $S = S \cup \{(z_{i+1}, \theta_{i+1})\}$.

6: **end for**

图 2 贝叶斯优化过程

Figure 2 Bayesian optimization process.

图 3 基于PCE模型的大坝力学参数反演
Figure 3 Inversion process of dam mechanical parameters based on PCE model.

坝和坝基岩体进行有限元剖分, 图4为构建的三维有限元模型, 表1列出各材料分区的单元数和材料参数.

图5为该拱坝变形监测点布置的立面图, 各测点位置如图中标号所示. 其中测点1, 2处布置正垂监测, 测点3处布置倒垂监测. 由于倒垂基点位于岩基深处, 故而默认其实测绝对位移为0. 通过对各测点正倒垂实测数据的分析, 即可求得坝中测线A1上三个实测点的位移绝对值.

(2) 计算荷载与工况

鉴于本文是针对拱坝建成后初期蓄水情况的坝体

图 4 (网络版彩图)某拱坝三维有限元模型
Figure 4 (Color online) Three-dimensional finite element model of an arch dam.

参数反演, 坝体的自重变形已经完成, 渗流对拱坝自身变形的影响较小, 因此, 本文仅考虑上下游库水压力和温度荷载的组合, 且由于最大封拱温度为 23.37°C , 低于本文温度荷载计算中所选用的平均月气温, 故而有限元计算工况为: 上游水位+下游水位+温升荷载.

(3) 荷载分析

大坝于2017年2月开始蓄水, 初始库水位为570 m. 2017年7月蓄至正常水位648 m.

通过对蓄水期大量水温气温监测数据的分析, 本文选取2017年6月15日及7月15日两个时间测点处的顺河向位移监测数据作为实测位移. 相应的上游库水位分别为647.3和648 m, 下游水位均为571 m, 据此计算大坝的静水压力.

温度荷载计算亦考虑时间变化因素, 水温在考虑日照情况下根据实测数据进行线性插值.

考虑到6月15日和7月15日两天时间内各时刻的气温差异不大, 坝体与空气接触的边界温度采用反演方法确定. 为此, 在考虑日照与否的温度区间内采用拉丁超立方采样法抽样10组数据, 如表2和3中工况1为考虑日照, 工况2为不考虑日照, 工况3~12为两者区间内随机抽样. 根据上述计算工况, 对这12组温度工况分别进行有限元计算求得顺河向位移绝对值, 采用均方根误差判定实测位移和计算位移绝对值之间的差异, 选取最小均方根误差对应的坝体与空气接触的边界温

表 1 某拱坝有限元模型基本参数

Table 1 Basic parameters of an arch dam finite element model

分区	名称	单元个数	密度 (kg/m ³)	弹性模量 (GPa)	泊松比	线性热膨胀系数 (1/°C)
1	坝体	47788	2400	20	0.19	7.00×10 ⁻⁶
2	建基面	2304	2400	20	0.19	7.00×10 ⁻⁶
3	坝体低强度区	4140	2400	16	0.21	7.00×10 ⁻⁶
4	基岩底层	22160	—	12	0.22	—
5	基岩顶层	4983	—	6	0.26	—
6	断层带	129569	—	5	0.3	—
合计	—	210944	—	—	—	—

图 5 (网络版彩图)某拱坝变形监测布置立面图
Figure 5 (Color online) Elevation of an arch dam deformation monitoring layout.

表 2 2017年6月15日坝中测点计算与实测位移均方根差

Table 2 2017-06-15 root mean square difference between calculated and measured displacements in the dam

测点 编号	实测位移 相对值 (mm)	实测位移 绝对值 (mm)	坝体与空气接触的边界温度 (°C)											
			工况1	工况2	工况3	工况4	工况5	工况6	工况7	工况8	工况9	工况10	工况11	工况12
			31.5	26.9	27.88	30.38	29.15	29.09	28.77	29.32	29.77	28.93	28.31	29.7
1	3.62	7.44	4.510	9.93	8.772	5.829	7.277	7.347	7.724	7.077	6.547	7.536	8.266	6.629
2	2.14	3.82	2.411	4.37	3.949	2.887	3.409	3.435	3.571	3.337	3.146	3.503	3.766	3.176
3	1.68	1.68	0.517	1.21	1.058	0.684	0.868	0.877	0.925	0.843	0.776	0.901	0.994	0.786
均方根误差			1.994	1.50	0.852	1.219	0.534	0.517	0.487	0.596	0.831	0.489	0.621	0.790

度作为最优边界温度，得到2017年6月15日和7月15日最优边界温度分别为28.77和27.88°C。计算结果见表2和3。

3.3 坝体反演参数选择
考虑到泊松比和密度对蓄水期大坝变形的影响较小，本文选取的反演参数为坝体和建基面各分区的弹

性模量和线性热膨胀系数, 以及坝基岩体各分区的弹性模量, 共9个需要反演的参数. 以其经验值为概率反演随机变量先验分布的均值, 表4给出了它们的先验分布和统计值.

3.4 拱坝PCE模型构建

首先, 针对表4中的9个随机变量, 采用拉丁超立方抽样方法生成30组有限元输入验证数据集, 并将其代入到有限元模型中进行计算, 提取出图5中三个测点的有限元节点顺河向位移作为表征大坝结构特性的输出变量.

然后, 利用不同样本量的试验设计, 建立不同的

PCE代理模型, 以评价试验设计值不同对PCE模型预测精度的影响, 选择其中合适的代理模型作为后续反演用的PCE模型. 所有代理模型的构建均采用双曲线截断($q=0.75$)且自适应迭代到最优阶数($p=2$), 选用最小角回归方法计算PCE的扩展系数. 考虑6组不同的初始样本量, 试验设计值 N_{DOE} 取值见表5, 构建出相应的PCE代理模型.

本文所有PCE模型构建均在UQLab^[27]中进行. 由于篇幅限制, 本节仅展示2017年6月15日测点1对应的有限元节点顺河向位移PCE模型构建结果.

表5显示了不同试验样本量下, 拱坝测点1处PCE

表 3 2017年7月15日坝中测点计算与实测位移均方根差

Table 3 2017-07-15 root mean square difference between calculated and measured displacements in the dam

测点 编号	实测位移 相对值 (mm)	实测位移 绝对值 (mm)	坝体与空气接触的边界温度 (°C)											
			工况1	工况2	工况3	工况4	工况5	工况6	工况7	工况8	工况9	工况10	工况11	工况12
			31.5	26.9	27.88	30.38	29.15	29.09	28.77	29.32	29.77	28.93	28.31	29.7
1	3.86	8.22	4.510	9.93	8.772	5.829	7.277	7.347	7.724	7.077	6.547	7.536	8.266	6.629
2	2.32	4.36	2.411	4.37	3.949	2.887	3.409	3.435	3.571	3.337	3.146	3.503	3.766	3.176
3	2.04	2.04	0.517	1.21	1.058	0.684	0.868	0.877	0.925	0.843	0.776	0.901	0.994	0.786
均方根误差			2.574	1.10	0.692	1.801	1.027	0.995	0.839	1.123	1.399	0.913	0.695	1.355

表 4 概率反演随机变量先验分布和统计值

Table 4 Probability inversion of the prior distribution and statistical value of random variables

参数	符号	单位	概率分布模型	分布参数
分区1弹性模量	$E1$	GPa	高斯分布	$N(20, 2)$
分区1线性热膨胀系数	$\alpha1$	1/°C	高斯分布	$N(7.00 \times 10^{-6}, 0.70 \times 10^{-6})$
分区2弹性模量	$E2$	GPa	高斯分布	$N(20, 2)$
分区2线性热膨胀系数	$\alpha2$	1/°C	高斯分布	$N(7.00 \times 10^{-6}, 0.70 \times 10^{-6})$
分区3弹性模量	$E3$	GPa	高斯分布	$N(20, 2)$
分区3线性热膨胀系数	$\alpha3$	1/°C	高斯分布	$N(7.00 \times 10^{-6}, 0.70 \times 10^{-6})$
分区4弹性模量	$E4$	GPa	高斯分布	$N(12, 1.2)$
分区5弹性模量	$E5$	GPa	高斯分布	$N(6, 0.6)$
分区6弹性模量	$E6$	GPa	高斯分布	$N(5, 0.5)$

表 5 拱坝测点1处PCE模型基本参数

Table 5 Basic parameters of PCE model at 1 measurement point of arch dam

	$N_{DOE}=5$	$N_{DOE}=10$	$N_{DOE}=20$	$N_{DOE}=25$	$N_{DOE}=30$	$N_{DOE}=40$
验证误差	2.0958	8.0958×10^{-3}	9.3430×10^{-4}	8.7864×10^{-4}	4.9871×10^{-4}	3.1991×10^{-4}
LOO误差	0.1207	7.5794×10^{-3}	1.0495×10^{-3}	2.0231×10^{-4}	1.0183×10^{-4}	8.6073×10^{-4}
非零项扩展系数个数	3	6	12	15	9	11

代理模型的基本参数情况, 图6显示了不同试验样本量下拱坝数值模型与PCE模型对比.

从表5和图6可知, 增加试验样本量可以在一定程度上提高PCE模型的精度. 鉴于后5组 N_{DOE} 所构建的PCE模型的精度均符合工程要求, 本文选用PCE模型试验设计 $N_{\text{DOE}}=20$ 进行后文的参数反演. 表6显示了 $N_{\text{DOE}}=20$ 时, 坝中三个测点对应的有限元节点顺河向绝对位移的PCE模型两种评价误差, 可见, PCE模型得到的位移与有限元计算位移之间的误差很小, 可以替代有限元模型.

3.5 拱坝Kriging模型构建

Kriging代理模型为当下最流行的代理模型方法之一, 为突出本文所构建的PCE代理模型的优势, 亦采用不同样本量的试验设计构建不同的拱坝Kriging模型, 模型误差如表7所示. 对比表6, 同样 $N_{\text{DOE}}=20$ 情况下两者的模型误差相差一到两个量级, 可知Kriging模型在小样本集问题中计算精度远不如PCE模型. 选用试验设计 $N_{\text{DOE}}=100$ 情况下计算精度较为相似的Kriging模型进行后文的参数反演.

表6 拱坝PCE模型误差($N_{\text{DOE}}=20$)

Table 6 PCE model error of arch dam ($N_{\text{DOE}}=20$)

测点编号	LOO误差	验证误差
1	1.0495×10^{-3}	9.3430×10^{-4}
2	8.5499×10^{-3}	3.8182×10^{-3}
3	9.1001×10^{-3}	5.4290×10^{-3}

4 某混凝土拱坝的材料参数反演

4.1 优化算法验证

本文的数值计算环境是基于UNIX的工作站, 该工作站具有双节点, 每个节点有36核CPU、192 G内存. 计算软件采用MATLAB与ANSYS APDL, 均调用12线程来完成数值计算.

基于试验设计为 $N_{\text{DOE}}=20$ 的样本集构建的2017年6月15日拱坝PCE模型, 在该样本集中随机选取一组拱坝材料参数, 如表8所示. 该参数下有限元各节点顺河向位移绝对值如表9所示.

为验证反演算法的正确性, 将表9中的有限元计算结果视为实测位移, 按照2.3节反演过程进行参数反演,

图6 (网络版彩图)拱坝测点1处数值模型与PCE模型对比

Figure 6 (Color online) Comparison of the numerical model and the PCE model at 1 measurement point of arch dam.

表 7 拱坝Kriging模型误差(N_{DOE} 是可变的)

Table 7 Kriging model error of arch dam (N_{DOE} is variable)

测点编号	$N_{DOE}=20$		$N_{DOE}=50$		$N_{DOE}=100$	
	LOO误差	验证误差	LOO误差	验证误差	LOO误差	验证误差
1	6.5230×10^{-2}	2.1557×10^{-2}	2.2997×10^{-2}	3.6164×10^{-3}	6.0539×10^{-3}	7.4646×10^{-4}
2	5.3034×10^{-2}	2.5728×10^{-2}	2.2644×10^{-2}	3.9628×10^{-3}	5.5073×10^{-3}	8.1400×10^{-4}
3	6.2182×10^{-2}	4.2282×10^{-2}	2.2954×10^{-2}	5.2246×10^{-3}	4.4384×10^{-3}	9.8470×10^{-4}

并将反演后的参数值与表8中的参数值进行对比。图7为基于PCE模型的参数反演过程。可以看出, 经过100次迭代, 目标函数的最小值已经接近0。反演后参数值与表8参数对比如表10所示。可以看出, 两者之间的误差很小, 最大相对误差为5.34%, 最小相对误差为0.29%, 计算总耗时为0.244 h, 其中构建PCE模型所用的20个样本计算时间为0.241 h, 通过该算例可见本文所构建的反演算法精度高、耗时短, 可应用于复杂问题的参数反演。

4.2 基于多月多测点实测数据的拱坝坝体参数反演

根据工程现场监测提供的正倒垂观测记录, 从中提取出2017年6月15日和2017年7月15日两组数据进行基于多月实测数据的参数反演, 各实测点顺河向位移绝对值如表11所示。

表 8 验证用有限元模型材料参数

Table 8 Material parameters of finite element model for verification

参数名称	单位	参数值
$E1$	GPa	21.450
$\alpha1$	$1/^{\circ}\text{C}$	6.310×10^{-6}
$E2$	GPa	18.933
$\alpha2$	$1/^{\circ}\text{C}$	7.350×10^{-6}
$E3$	GPa	17.369
$\alpha3$	$1/^{\circ}\text{C}$	6.910×10^{-6}
$E4$	GPa	13.878
$E5$	GPa	5.760
$E6$	GPa	4.686

表 9 验证用有限元模型计算顺河向位移绝对值

Table 9 Calculated absolute value of the displacement along the river of finite element model for verification

节点	1	2	3
位移 (mm)	7.31	3.30	0.79

图 7 基于PCE模型参数反演过程图

Figure 7 Process diagram of parameter inversion.

表 10 算例中参数反演结果

Table 10 Parameter inversion result in the calculation example

参数名称	单位	有限元参数	参数反演结果	相对误差 (%)
$E1$	GPa	21.450	20.763	3.20
$\alpha1$	$1/^{\circ}\text{C}$	6.310×10^{-6}	6.647×10^{-6}	5.34
$E2$	GPa	18.933	18.879	0.29
$\alpha2$	$1/^{\circ}\text{C}$	7.350×10^{-6}	7.648×10^{-6}	4.05
$E3$	GPa	17.369	16.714	3.77
$\alpha3$	$1/^{\circ}\text{C}$	6.910×10^{-6}	7.139×10^{-6}	3.31
$E4$	GPa	13.878	13.366	3.69
$E5$	GPa	5.760	5.486	4.76
$E6$	GPa	4.686	4.585	2.15

表 11 实测点顺河向位移绝对值

Table 11 Absolute value of the displacement along the river of the measured point

日期	水位	实测位移 (mm)		
		节点1	节点2	节点3
2017-06-15	上游647.3 m	7.44	3.82	1.68
2017-07-15	下游571 m	8.22	4.36	2.04

采用20个样本构建的PCE模型进行参数反演, 目标函数为6月15日与7月15日三个测点顺河向计算位移与各自实测位移之间的总误差平方和达到最小, 经过200次迭代优化, 包含构建PCE模型所用20个样本计算时间在内, 计算总耗时为0.698 h. 为比较本文算法的优越性, 分别采用基于BO的直接反演方法和基于Kriging_BO的反演方法进行纵、横向对比, 前者采用MATLAB与ANSYS联合编程方法, 通过MATLAB实时调用有限元模型进行运算^[28], 目标函数相同, 经过200次迭代优化, 计算耗时为27.664小时; 后者采用100个样本构建与本文PCE代理模型精度近似的Kriging代理模型, 目标函数相同, 经过200次迭代优化, 包括构建Kriging模型所用的100个样本计算时间在内, 计算总耗时为3.505 h. 三者反演参数值如表12所示. 可以看出, 基于PCE模型的参数反演方法较直接使用BO算法进行反演效率提升了39.63倍, 较基于Kriging模型的参数反演方法效率提升了5.02倍. 将表12中三组参数分

别代入到对应的有限元模型中, 计算得到各节点的顺河向位移计算绝对值如表13所示.

对表13中数据进行分析可知, 基于PCE的参数反演新算法得到三个测点2个时间点位移计算值与实测值之间的均方根误差为0.4867; 基于BO的参数反演算法得到的均方根误差为0.4243; 基于Kriging的参数反演算法得到的均方根误差为0.4944. 可知三种算法反演精度十分接近且反演效果良好, 但本文所构建的反演算法的效率远高于基于智能优化算法的反演算法, 相比基于Kriging代理模型的反演算法效率也得到了显著提升, 故而更加适用于复杂工程的参数反演.

5 结论

本文针对现有的大型土木工程中参数反演方法普遍存在的计算效率与精度不可兼得问题, 采用PCE模型结合贝叶斯优化算法, 使用小样本构建高精度代理

表 12 几种反演方法参数反演结果对比

Table 12 Comparison of parameter inversion results of several inversion methods

参数名	单位	基于PCE_BO	基于BO	基于Kriging_BO
$E1$	GPa	23.327	22.711	23.646
$\alpha 1$	$1/^{\circ}\text{C}$	6.030×10^{-6}	6.379×10^{-6}	6.083×10^{-6}
$E2$	GPa	22.206	22.406	21.924
$\alpha 2$	$1/^{\circ}\text{C}$	6.308×10^{-6}	5.985×10^{-6}	6.013×10^{-6}
$E3$	GPa	18.576	18.219	18.725
$\alpha 3$	$1/^{\circ}\text{C}$	6.478×10^{-6}	6.168×10^{-6}	5.882×10^{-6}
$E4$	GPa	9.665	10.259	9.745
$E5$	GPa	5.307	5.192	5.201
$E6$	GPa	4.489	4.270	4.053

表 13 基于反演参数的各节点顺河向位移计算值

Table 13 Calculated value of displacement along river direction of each node based on inversion parameters

时间	类别	实测值 (mm)	基于PCE_BO	基于BO	基于Kriging_BO
2017-06-15	节点1	7.44	7.99	7.55	7.93
	节点2	3.82	3.91	3.70	3.65
	节点3	1.68	1.25	1.15	1.14
2017-07-15	节点1	8.22	8.90	8.50	8.71
	节点2	4.36	4.24	4.04	4.12
	节点3	2.04	1.37	1.27	1.26
	均方根误差	—	0.4867	0.4243	0.4944

模型, 并基于实测位移进行参数反演。算例表明, 与直接基于智能优化算法进行迭代优化的参数反演方法和基于当下广为流行的Kriging代理模型反演方法相比,

本文方法反演的精度相当, 但反演的计算效率远高于其他两种反演方法, 适合于大型复杂结构问题的快速反演。

参考文献

- 1 Gao L G, Li T C, Lin C N, et al. Parameter inversion of gravity dam deformation based on improved whale optimization algorithm (in Chinese). *J Water Resour Water Eng*, 2020, 31: 1–7 [高林钢, 李同春, 林潮宁, 等. 基于改进鲸鱼优化算法的重力坝变形参数反演. *水资源与水工程学报*, 2020, 31: 1–7]
- 2 Jiang C L. Inversion analysis of high concrete dams based on swarm intelligence-surrogate model (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Dalian: Dalian University of Technology, 2019 [姜成磊. 基于群体智能-代理模型的高混凝土坝反演分析. 硕士学位论文. 大连: 大连理工大学, 2019]
- 3 Liang G H. Spatio-temporal global surrogate model and application of dam parameter inversion (in Chinese). Dissertation for Doctoral Degree. Beijing: Tsinghua University, 2017 [梁国贺. 时空全域代理模型及大坝参数反演应用. 博士学位论文. 北京: 清华大学, 2017]
- 4 Wang F, Zhou Y H, Zhao C J, et al. Research on thermal parameter inversion of concrete dam based on improved particle swarm algorithm (in Chinese). *J Vib Shock*, 2019, 38: 168–174 [王峰, 周宜红, 赵春菊, 等. 基于改进粒子群算法的混凝土坝热学参数反演研究. *振动与冲击*, 2019, 38: 168–174]
- 5 Zhu Y M, Liu Y J, Xie X K. Test and back analysis for determining the multiple parameters of concrete temperature characteristics (in Chinese). *Chin J Geotech Eng*, 2002, 24: 175–177 [朱岳明, 刘勇军, 谢先坤. 确定混凝土温度特性多参数的试验与反演分析. *岩土工程学报*, 2002, 24: 175–177]
- 6 Wang Y Q, Ma X Y, Li Q F, et al. Gravity dam structure optimization based on Kriging model (in Chinese). *China Rural Water Hydropower*, 2018, 12: 138–142 [王永强, 马孝义, 李青峰, 等. 基于Kriging模型的重力坝结构优化. *中国农村水利水电*, 2018, 12: 138–142]
- 7 Cheng Z F, Wang X L, Ren B Y, et al. Multi-objective optimization of seepage control structure of roller compacted concrete dam based on surrogate model (in Chinese). *J Tianjin Univ (Nat Sci Eng Tech Ed)*, 2019, 52: 793–803 [程正飞, 王晓玲, 任炳昱, 等. 基于代理模型的碾压混凝土坝坝体渗控结构多目标优化. *天津大学学报(自然科学与工程技术版)*, 2019, 52: 793–803]
- 8 Qin S Q, Hu J, Cao H Y, et al. Finite element model modification of long-span arch bridge based on experimental data (in Chinese). *China J Highway Transport*, 2019, 32: 66–76 [秦世强, 胡佳, 曹鸿猷, 等. 基于试验数据的大跨度拱桥有限元模型修正. *中国公路学报*, 2019, 32: 66–76]
- 9 Zhao L X, Jiang S Y, Du C B. Flaws detection in thin plate structures based on SBFEM and machine learning (in Chinese). *Eng Mech*, 2021, 38: 36–46 [赵林鑫, 江守燕, 杜成斌. 基于SBFEM和机器学习的薄板结构缺陷反演. *工程力学*, 2021, 38: 36–46]
- 10 Wu F, Zhang L L, Zheng W T, et al. Probability back analysis of fluid solid coupling unsaturated soil slope based on random polynomial expansion (in Chinese). *J Geotech Eng*, 2018, 40: 2215–2222 [吴芳, 张璐璐, 郑文棠, 等. 基于随机多项式展开的流固耦合非饱和土坡概率反分析. *岩土工程学报*, 2018, 40: 2215–2222]
- 11 Lu F Y. Research on radial basis surrogate model technology and application based on joint strategy (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Xi'an: Xi'an University of Technology, 2018 [卢凤仪. 基于联合策略的径向基代理模型技术及应用研究. 硕士学位论文. 西安: 西安理工大学, 2018]
- 12 Luo L. Research on multi-objective optimization of vehicle crash robustness based on hybrid surrogate model (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Chongqing: Chongqing University, 2018 [骆雷. 基于混合代理模型汽车碰撞稳健性多目标优化研究. 硕士学位论文. 重庆: 重庆大学, 2018]
- 13 Zhao J Z. Research on CMA-ES algorithm based on surrogate model and its application in composite material design (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Changsha: Hunan University, 2018 [赵俊哲. 基于代理模型的CMA-ES算法研究及其在复合材料设计中的应用. 硕士学位论文. 长沙: 湖南大学, 2018]
- 14 Liu L W. Research and application of optimization method based on surrogate model (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Xi'an: University of Electronic Science and Technology of China, 2020 [刘棕文. 基于代理模型的优化方法研究及其应用. 硕士学位论文. 西安: 电子科技大学, 2020]

- 15 Liu Y, Jiang R C, Li X F, et al. Multi-objective optimization of low-speed electric vehicle frame based on surrogate model (in Chinese). *Mach Design*, 2020, 37: 105–109 [刘越, 蒋荣超, 李雪峰, 等. 基于代理模型的低速电动车车架多目标优化. *机械设计*, 2020, 37: 105–109]
- 16 Soize C, Ghanem R. Physical systems with random uncertainties: Chaos representations with arbitrary probability measure. *SIAM J Sci Comput*, 2004, 26: 395–410
- 17 Cavazzuti M. From theory to design scientific and technological aspects in mechanics. In: *Optimization Methods*. Heidelberg: Springer Science & Business Media, 2013
- 18 Fajraoui N, Marelli S, Sudret B. Sequential design of experiment for sparse polynomial chaos expansions. *SIAM ASA J Uncert Quantif*, 2017, 5: 1061–1085
- 19 Blatman G, Sudret B. Adaptive sparse polynomial chaos expansion based on least angle regression. *J Comput Phys*, 2011, 230: 2345–2367
- 20 Marelli S, Sudret B. Report UQLab-V0.9-104: UQLab user manual-Polynomial chaos expansions. Technical Report. Chair of Risk, Safety & Uncertainty Quantification, ETH Zürich, 2015
- 21 Pelikan M. Bayesian optimization algorithm: From single level to hierarchy. Dissertation for Doctoral Degree. Urbana-Champaign: University of Illinois, 2002
- 22 Cui J X, Yang B. Overview of Bayesian optimization methods and applications (in Chinese). *J Software*, 2018, 29: 3068–3090 [崔佳旭, 杨博. 贝叶斯优化方法和应用综述. *软件学报*, 2018, 29: 3068–3090]
- 23 Shahriari B, Swersky K, Wang Z, et al. Taking the human out of the loop: A review of Bayesian optimization. *Proc IEEE*, 2016, 104: 148–175
- 24 Ghahramani Z. Probabilistic machine learning and artificial intelligence. *Nature*, 2015, 521: 452–459
- 25 Rasmussen C E, Williams C K I. *Gaussian Processes for Machine Learning*. Cambridge: MIT Press, 2006
- 26 Srinivas N, Krause A, Kakade S M, et al. Gaussian process optimization in the bandit setting: No regret and experimental design. In: *Proceedings of the 27th International Conference on Machine Learning (ICML-10)*, June 21–24, 2010, Haifa
- 27 Marelli S, Sudret B. Uqlab: A framework for uncertainty quantification in matlab. In: *Processing of Vulnerability, Uncertainty, and Risk: Quantification, Mitigation, and Management*. Liverpool, 2014. 2554–2563
- 28 Lang W. Optimal design of concrete frame structure based on MATLAB and ANSYS mixed programming (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Fuxin: Liaoning Technical University, 2015 [郎威. 基于MATLAB与ANSYS混合编程的混凝土框架结构优化设计. 硕士学位论文. 阜新: 辽宁工程技术大学, 2015]

Fast inversion method of structural parameters based on PCE surrogate model and Bayesian optimization

LI YiFei¹, REN QingWen¹, WANG QiMing², CAO MaoSen¹ & HUANG Dan¹

¹ College of Mechanics and Materials, Hohai University, Nanjing 210098, China;

² College of Science, Hohai University, Nanjing 210098, China

To ensure the safety of engineering structures, conducting inversion analysis according to the measured data and obtaining the material parameter values in the real environment are vital. However, the existing parameter inversion methods have the problem that calculation efficiency and accuracy cannot be achieved simultaneously. In this paper, a high-precision surrogate model based on polynomial chaos expansions is constructed with small samples, and Bayesian optimization is used for parameter inversion. The new method is based on the random quantification method of large-scale structural response, which makes full use of the random characteristics of structural response under the influence of complex factors. According to the Bayesian posterior updating method, the parameter inversion of large-scale structure can be conducted efficiently and accurately with only a few forward calculation samples. The inversion example of material parameters of a concrete arch dam shows that compared with the iterative optimization inversion method based on the Bayesian optimization algorithm and the inversion method based on the Kriging surrogate model, the method constructed in this paper has excellent calculation efficiency and is suitable for rapid inversion of large and complex structural problems; moreover, it provides a new development dimension for online inversion and real-time prediction in actual engineering.

fast inversion of structural parameters, surrogate model, polynomial chaos expansions, Bayesian optimization, finite element

doi: [10.1360/SST-2021-0018](https://doi.org/10.1360/SST-2021-0018)