Kriging-HDMR 非线性近似模型方法 1)

汤 龙 李光耀 2) 王 琥
(湖南大学汽车车身先进设计制造国家重点实验室，长沙 410082)

摘要 提出基于克里金 (Kriging) 插值的高维模型表示 (high dimensional model representation, HDMR) 方法，即 Kriging-HDMR 方法. Kriging-HDMR 方法的最大优势在于：能够明确输入参数的耦合特性，将构造模型复杂度由指数级增长降阶为多项式级增长，进而用有限样本确定待求问题的物理实质. 为了验证算法的建模性能，采用高维非线性函数成功地验证了该算法的可行性，并将该算法初步应用于简单的非线性工程问题，同传统算法相比，其精度和效率都得到了明显提升.

关键词 元模型，HDMR, Kriging, 非线性

中图分类号： O241.3 **文献标识码：** A **文章编号：** 0459-1879(2011)04-0780-05

引 言

随着优化问题复杂度的增加，工程优化的迭代过程中往往都需要大量的仿真计算，即使采用高性能计算机，其计算代价仍不可小视. 为了提高优化过程的效率，目前最为有效的方法是通过建立近似模型来代替物理模型，从而通过对近似模型的求优近似得到真实模型的优化值.

目前国内外主要的近似模型建模方法包括: 人工神经网络 [1], 基于多项式函数的响应面法 [1], Kriging 插值 [1] 以及移动最小二乘法 [2] 等.

通过反复实验验证和比较，这些近似模型技术能够很好地解决诸多学科中的较低维问题. 然而，随着问题复杂度和维数的增加，构建这些近似模型所需要的样本点数量和计算花费呈指数增长，从而使解决高维问题的计算效率大大降低. 这就需要建立一套能够高效地对高维非线性问题精确建模的近似模型方法. 针对这一问题，本文以 HDMR 为核心建立了高维非线性问题的建模方法.

Rabitz 和 Alis [3] 提出 HDMR, 并从理论上证明了对于域 Ω^d (d 代表域的维数) 内任意一个可积函数都存在唯一的 HDMR 表达式，这为建立高维问题下的近似模型方法奠定了基础. 基于此理论，一系列不同种类的 HDMR 方法逐渐形成并应用于各个领域中，本文所采用的中心切面高维模型表示 (Cut-HDMR[3]) 方法是用过指定点的特定的直线，平面和超平面上的信息来建立模型，计算效率高，方便易行.

为了克服高维建模的困难，本文采用 Kriging 技术与 Cut-HDMR 相结合的 Kriging-HDMR. Kriging 是一种插值算法，可以利用最大似然原理根据实际数据自适应优化参数，调整插值结果，对于高维非线性问题，在精度表达上具有一定优势. 为了进一步提高建模效率，本文还给出一套能够识别变量之间耦合性的智能采样策略，保证采用尽可能少的样本建立足够精确的近似模型.

1 HDMR 基本理论

设待求问题设计变量的可行域为 $A^n(A^n \in R^n$, R^n 是 n 维实数空间), 那么输出函数 $f(\boldsymbol{x}) \in R$ 与输入变量 $\boldsymbol{x} \in A^n$ 之间的映射关系可以用 HDMR[3] 来表达

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}) = f_0 + \sum_{i=1}^{n} f_i(x_i) + \sum_{1 \le i < j \le n} f_{ij}(x_i, x_j) + \cdots + \\ \sum_{1 \le i_1 < \cdots < i_l \le n} f_{i_1, i_2, \cdots, i_l}(x_{i_1}, x_{i_2}, \cdots x_{i_l}) + \cdots + \\ f_{1,2,\cdots,n}(x_1, x_2, \cdots, x_n) \end{aligned} \tag{1}$$

式中，f_0 是一个常量，$f_i(x_i)$(非耦合项) 表示变量 x_i 独立作用时对输出函数的影响，可以由关于 x_i 的

2010–08–02 收到第 1 稿，2010–12–09 收到修改稿.
1) 国家重点基础研究发展计划 (2010CB328005), 国家自然科学基金 (10902037) 和中央高校基本科研业务费资助项目.
2) E-mail: gyli@hnu.cn

线性或非线性函数表达，$f_{ij}(x_i,x_j)$(一阶耦合项) 表示变量 x_i 和 x_j 共同作用时对输出函数的影响，随后的项分别反映了逐渐增加的变量共同作用时对输出函数的影响. 该高维模型展开式揭示了输入变量之间耦合性的层次，每一项都有特别的数学含义. 若输入变量之间没有任何耦合关系，那么展开式中只含有常数项和非耦合项.

为了方便计算, 在这里引入 Cut-HDMR[3]. Cut-HDMR 的特点在于通过 $f(\boldsymbol{x})$ 输入空间中与一个指定点 (中心点) 相关的信息来近似地表达 $f(\boldsymbol{x})$. 在输入空间中，以各维度方向向量为基且过中心点的直线，平面以及超平面称作中心基 (Cuts), Cut-HDMR 在 Cuts 上的表达是精确的. 在 Cut-HDMR 方法中，取 $\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_n)\in A^n$ 为中心点，若展开式收敛，则中心点 $\boldsymbol{y}$ 的位置在设计空间中是任意的. 有关 Cut-HDMR 展开式的各分项表达参考文献 [3].

2 Kriging-HDMR

2.1 Kriging 技术

Kriging 技术是基于误差相关性的假设衍生出来的, 即误差估计项在任意两点上都具有相关性, 且这两点越接近，相关程度就越高. 在 Kriging 技术中，假定待求函数 $Y(\boldsymbol{x})$ 的表达式如下

$$Y(\boldsymbol{x})=f(\boldsymbol{x})+Z(\boldsymbol{x}) \tag{2}$$

式中，$f(\boldsymbol{x})$ 是关于 $\boldsymbol{x}$ 的已知函数 (通常是多项式函数), $Z(\boldsymbol{x})$ 是一个高斯过程. 上式中 $f(\boldsymbol{x})$ 是待求函数 $Y(\boldsymbol{x})$ 在设计空间中的一个全局近似模型；式中第 2 项 $Z(\boldsymbol{x})$ 用于估计 $f(\boldsymbol{x})$ 的偏差以确保 Kriging 模型精确通过每个训练样本点. 有关 Kriging 模型的相关理论和构建方法参见文献 [1,4-6].

2.2 Kriging-HDMR 技术

对于大多数工程实际问题，非耦合项和较低阶耦合项对响应函数较为敏感. 为此，Kriging-HDMR 方法仅考虑到一阶耦合项，形如

$$f(\boldsymbol{x})\approx f_0+\sum_{i=1}^{n}\hat{f}_i(x_i)+\sum_{1\le i<j\le n}\hat{f}_{ij}(x_i,x_j) \tag{3}$$

式中，带顶标 ˆ 的项表示 Kriging 近似项.

构造过程如下：

(1) 取在问题域中心位置的点 $\boldsymbol{y}=[y_1,y_2,\cdots,y_i,\cdots,y_n]$ 作为中心点 (因为只要展开式是收敛的，则中心点的位置是任意的), 然后计算输出函数在 $\boldsymbol{y}$ 点的值，得到 f_0.

(2) 在单变量 $x_i([y_1,y_2,\cdots,x_i,\cdots,y_n]^{\mathrm{T}})$ 的取值区间上为非耦合项 $f_i(x_i)=f([y_1,y_2,\cdots,x_i,\cdots,y_n]^{\mathrm{T}})-f_0$ 布点. 在区间两端点的邻域内分别随机产生两个样本点，并计算输出函数在这两点上的值，得到非耦合项 $f_i(x_i)$ 在下界点的值 $f_{i_{\mathrm{L}}}(x_i)=f([y_1,y_2,\cdots,x_{i_{\mathrm{L}}},\cdots,y_n]^{\mathrm{T}})-f_0$ 和在上界点的值 $f_{i_{\mathrm{R}}}(x_i)=f([y_1,y_2,\cdots,x_{i_{\mathrm{R}}},\cdots,y_n]^{\mathrm{T}})-f_0$. 然后用 Kriging 构造 $f_i(x_i)$.

(3) 判断 $f_i(x_i)$ 的线性与非线性. 如果 $\left|\dfrac{\hat{f}(y_i)-f_0}{f_0}\right|\le 10^{-3}$, 则认为 $f_i(x_i)$ 为线性项，非耦合项 $f_i(x_i)$ 的构造终止；否则，继续采样构造 $f_i(x_i)$, 直到满足收敛准则.

(4) 循环执行第 2 和第 3 步直到所有的非耦合项都构造完毕.

(5) 判断模型中是否存在一阶耦合项. 理论上, Kriging 模型在每个训练样本点都是精确的, 即在一组训练样本点上满足 $f_0+\sum\limits_{i=1}^{n}f_i(x_i)=f_0+\sum\limits_{i=1}^{n}\hat{f}_i(x_i)$, 为此构造新样本 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{e}}=[x_{1_{\mathrm{e}}},x_{2_{\mathrm{e}}},\cdots,x_{i_{\mathrm{e}}},\cdots,x_{j_{\mathrm{e}}},\cdots,x_{n_{\mathrm{e}}}]$: 不失一般性，随机取构造非耦合项时用的采样点分量 $x_{i_{\mathrm{L}}}$ 和 $x_{i_{\mathrm{R}}}$ $(i=1,2,\cdots,n)$ 中的一个作为新样本的第 i 维分量 x_{e_i}. 在精确度准则所允许的误差范围内，若 $f(\boldsymbol{x}_{\mathrm{e}})=f_0+\sum\limits_{i=1}^{n}\hat{f}_i(x_{\mathrm{e}_i})$, 则认为模型中不存在一阶耦合项，构造过程结束；否则，转入第 6 步.

(6) 识别耦合的变量组合. 构造新样本点 $[y_1,y_2,\cdots,x_{\mathrm{e}_i},\cdots,x_{\mathrm{e}_j},\cdots,y_n]^{\mathrm{T}}$ $(1\le i<j\le n)$, 在精确度准则所允许的误差范围内，若 $f(x_{\mathrm{e}_i},x_{\mathrm{e}_j},y^{ij})=f_0+\hat{f}(x_{\mathrm{e}_i})+\hat{f}(x_{\mathrm{e}_j})$, 则认为输入变量 x_i 和 x_j 非耦合或者它们的耦合项对输出响应无效；否则认为它们的耦合项对输出响应有效，并建立基于 Kriging 的一阶耦合项 $\hat{f}_{ij}(x_i,x_j)$. 这个步骤继续直到所有的变量组合都已被识别.

以上取样策略很好地利用了 HDMR 层次结构，将问题域划分成多个子域，较好地避免了高维建模的困难；另一方面它揭示了设计变量的特性 (线性与非线性，耦合性), 并且是全局布点，可以较好地反映输出函数的全局特性.

精确度准则和收敛准则都是通过相对误差来定义的，不同的是相对误差的数量级有所区别，精确度准则主要用于输入变量之间耦合性的识别，所允许的相对误差不超过 10^{-5}; 收敛准则包括非耦合项

收敛准则和一阶耦合项收敛准则，针对测试函数这两种准则所允许的相对误差均取 0.01, 而对于工程问题，考虑到计算效率，两种准则可适当放宽，本文设置的相对误差均取 0.1.

3 数值算例

3.1 评价指标

设 $\boldsymbol{X}_i(i=1,2,\cdots,m)$ 是在设计域内随机生成的 m 个服从均匀分布的测试样本点.

(1) R^2

$$R^2 = 1 - \frac{\sum\limits_{i=1}^{m}\left[f(\boldsymbol{X}_i) - \hat{f}(\boldsymbol{X}_i)\right]^2}{\sum\limits_{i=1}^{m}\left[f(\boldsymbol{X}_i) - \bar{f}(\boldsymbol{X}_i)\right]^2} \tag{4}$$

其中， $\bar{f}(\boldsymbol{X}_i)$ 是输出函数在 m 个测试样本点的平均值，这个指标从整体上反映了一个近似模型的精度， R^2 的值越接近 1, 则近似模型越精确.

(2) R_{AAE}

$$R_{\mathrm{AAE}} = \frac{\sum\limits_{i=1}^{m}\left|f(\boldsymbol{X}_i) - \hat{f}(\boldsymbol{X}_i)\right|}{mS_{\mathrm{TD}}} \tag{5}$$

其中， S_{TD} 代表标准差，与 R^2 一样，这个指标从整体上反映了近似模型的精度， R_{AAE} 的值越小，则模型越精确.

(3) R_{MAE}

$$R_{\mathrm{MAE}} = \frac{\max(|f(\boldsymbol{X}_1) - \hat{f}(\boldsymbol{X}_1)|,\cdots,|f(\boldsymbol{X}_m) - \hat{f}(\boldsymbol{X}_m)|)}{S_{\mathrm{TD}}} \tag{6}$$

这是一个局部指标， R_{MAE} 描述了设计空间某个局部域的误差，因此， R_{MAE} 的值越小越好.

3.2 函数算例

算例 1 耦合性测试

采用式 (17) 所示较简单的函数

$$f(\boldsymbol{x}) = x_1^4 + 4x_1^3 + 4x_1^2 + x_2^2,\quad \boldsymbol{x}\in[-3,3]^2 \tag{7}$$

测试 Kriging-HDMR 识别输入变量耦合性的能力. 为了作比较, 首先采用响应面 (response surface method, RSM) 方法解决上述问题：选取多项式基函数进行响应面近似, 然后用最小二乘法确定它们的系数 [7], 进而通过判断耦合项的系数是否为零来确定变量之间的耦合性. 基于同一个训练样本分别取多项式基函数的次数为 3, 4 和 5, 计算结果如表 1; 由结果可见, 用 RSM 方法建模所取多项式基函数的次数对变量耦合性分析结果影响较大，若多项式基函数的次数选取过低 (如表中第 1 行所取次数为 3), 则得到的变量耦合性结果是不正确的. 然而，运用 2.2 节中提出的 Kriging-HDMR 技术，不需要假定参数，只需运用构造非耦合项时采用的训练样本就可以快速准确地识别出变量之间的耦合性；针对此例，计算结果表明输入变量 x_1 与 x_2 是非耦合的， $f_0=0$; 因此，其计算效率和计算精度可以大幅度提升.

表 1 算例 1 的 RSM 模型

Table 1 The response surfaces of case 1

Order of polynomial	Model
3	$f(\boldsymbol{x}) = 3.135\,5x_1^3 - x_1^2x_2 + 0.198\,7x_1x_2^2 - 0.340\,1x_2^3 + 11.741\,8x_1^2 - 1.952\,1x_1x_2 + 1.685\,7x_2^2 + 5.156\,3x_1 + 3.827\,2x_2 - 6.236\,0$
4	$f(\boldsymbol{x}) = x_1^4 + 4x_1^3 + 4x_1^2 + x_2^2$
5	$f(\boldsymbol{x}) = x_1^4 + 4x_1^3 + 4x_1^2 + x_2^2$

算例 2 高维非线性问题测试

首先，取 3 个高维测试函数 (见表 2), 对于同一个函数采用相同的一组训练样本点 (计算费用相同) 分别采用 Kriging-HDMR 和 Kriging 两种方法进行建模并比较它们的精度，计算结果如表 3(为了更为客观地反映该算法的性能，表中的数据是计算 100 次的平均值). 由表中数据分析可知，对于 3 个测试函数的 Kriging-HDMR 模型， R^2 值 (越接近 1, 模型越精确) 都在 0.97 以上， R_{AAE} 值 (越接近 0, 模型越精确) 都在 0 和 0.14 之间， R_{MAE} 值 (越小越好) 都在 0.32 以下，由此可见 Kriging-HDMR 模型能较好地反映真实模型的特性，拟合精度较高；而对于 3 个 Kriging 模型， R^2 值都很低 (0.3 以下，甚至出现负值), 而 R_{MAE} 值都较高 (大于 3), 拟合结果不理想. 以上分析说明，对于高维问题，基于同样的一组训练样本, 采用 Kriging 方法建模得到的近似模型，精度较差，不能作为真实模型的代理模型，然而，采用 Kriging-HDMR 方法却能得到近似程度较高，可用于优化分析的近似模型.

表 2　测试函数

Table 2　Test functions

Function	Expression	Domain of variables
10D function	$f(\boldsymbol{x})=\sum_{i=1}^{9}[(x_i^2)^{(x_{i+1}^2+1)}+(x_{i+1}^2)^{(x_i^2+1)}]$	$x_i\in[0,1]$
10D Griewank	$f(\boldsymbol{x})=\frac{1}{4\,000}\sum_{i=1}^{9}(x_{i+1}-100)^2-\prod_{i=1}^{9}\cos\left[\frac{(x_i-100)}{\sqrt{i}}\right]+1$	$x_i\in[-300,300]$
16D function	$f(\boldsymbol{x})=\sum_{i=1}^{16}\sum_{j=1}^{16}a_{ij}(x_i^2+x_i+1)(x_j^2+x_j+1)$, $a_{ij}\in\{0,1\}$	$x_i\in[-1,0]$

表 3　Kriging **和** Kriging-HDMR **方法的比较**

Table 3　Comparison between Kriging and Kriging-HDMR algorithm

No.	Function	R^2	$R_{\rm AAE}$	$R_{\rm MAE}$
	10D function			
1	Kriging	0.054 3	0.754 0	3.341 9
	Kriging-HDMR	0.992 4	0.066 6	0.164 9
	10D Griewank			
2	Kriging	0.260 6	0.667 7	3.103 9
	Kriging-HDMR	0.999 9	0.005 9	0.017 0
	16D function			
3	Kriging	−6.016 2	2.453 9	5.704 9
	Kriging-HDMR	0.970 7	0.137 6	0.313 4

其次，采用高维测试函数

$$f(\boldsymbol{x})=\sum_{i=1}^{d-1}[(x_i^2)^{(x_{i+1}^2+1)}+(x_{i+1}^2)^{(x_i^2+1)}],\ 0\le x_i\le 1 \tag{8}$$

来测试 Kriging-HDMR 方法的效率. 式 (8) 中，维数 d 分别取 $d=10, 20, 30$ 等不同值，假设每一维的样本点数为 7(经测试，基本可以满足精度要求), 表 4 列出了各阶 HDMR 计算费用的比较. 由此可见，采用 Kriging-HDMR 方法建模所需的样本点数随着问题维数 d 的增长呈多项式 (而并非如传统方法那样呈指数) 增长，从而大幅度提高了建模的效率.

表 4　各阶 HDMR **建模费用的比较** (Kriging-HDMR **的计算点数在程序运行中累计得到**)

Table 4　Comparison of modeling cost among various-order HDMRs for the study problem

Dimension	Kriging-HDMR	Full second-order expansion of HDMR $1+d(s-1)+\frac{d(d-1)}{2}(s-1)^2$ (polynomial)	Full factorial design s^d (exponential)
10	129	1 681	$2.824\,7\times10^{8}$
20	355	6 961	$7.979\,2\times10^{16}$
30	649	15 841	$2.253\,9\times10^{25}$

3.3　工程算例

算例 3　工程问题测试

取一个工程上非线性且各设计参数的耦合性均为未知的 black-box 问题来验证 Kriging-HDMR 在工程上的可行性，为此，本文以汽车吸能装置撞击刚性墙的过程为例，研究吸能装置的尺寸对碰撞吸能的影响 (作为初步的探索性研究，本例中问题维数较低). 这里采用 Liu [7] 提出的算例：以截面为正方形的薄壁构件作为吸能装置，并以构件截面边长 a (30~60 mm) 和薄壁厚度 t (1~3 mm) 作为设计变量，研究它们对比吸能的影响；采用 ANSYS 进行有限元分析，分析模型、材料以及其他参数设置请参考文献 [7]. 采用 Kriging-HDMR 方法进行建模，获得比吸能关于边长 a 和薄壁厚度 t 的响应曲面. 为了客观、全面地反映所建近似模型在设计域内的精确程度，在设计域内随机生成 100 个服从均匀分布的测试样本点，并用它们分别对 Kriging-HDMR 和 RSM 模型进行精度测试，测试结果如表 5 中的后 3 列所示. 由表 5 中数据可知，Kriging-HDMR 解决此类工程问题具有高效准确的优点；此外， Kriging-HDMR 方法给出整体模型的各阶耦合项表达，直观地表明了输出响应与变量之间潜在的函数关系，变量之间的耦合性以及它们对输出响应的敏感程度；这些优点有利于在进一步研究工作中快速有效地完成实验设计，提高建模效率.

表 5 采用 Kriging-HDMR 和响应面方法所得比吸能模型的比较

Table 5 Comparison between Kriging-HDMR and RSM algorithm for case 3

	Number of samples	R^2	R_{AAE}	R_{MAE}
Kriging-HDMR	10	0.9830	0.1009	0.2774
RSM	25[7]	0.7799	0.3949	0.7835

4 结 论

本文提出的 Kriging-HDMR 建模方法，最大优势在于能够反映输入参数之间的耦合性，自动对设计变量的构造基进行判断，具有较高的精度；尤其对于高维问题，它可将计算费用由维数的指数式降解为多项式. 通过数值算例和工程中碰撞问题的比对，本文提出的 Kriging-HDMR 近似模型构造方法一定程度上解决了高维建模的困难，对于非线性问题精确的数学建模具有一定的应用前景. 当然，目前这一技术还并不成熟，本方法针对的问题也仅仅局限于确定性分析，对于近似模型的非确定性和稳健性等方面的诸多工程因素，还需要进一步完善和发展.

参 考 文 献

1 Simpson TW, Peplinski JD, Koch PN, et al. Metamodels for computer-based engineering design: survey and recommendations. *Engineering with Computer*, 2001, 17(2): 129-150

2 Kim C, Wang S, Choi KK. Efficient response surface modeling by using moving least-squares method and sensitivity. *AIAA Journal*, 2005, 43(11): 2404-2411

3 Rabitz H, Alis OF. General foundations of high-dimensional model representations. *Journal of Mathematical Chemistry*, 1999, 25(2-3): 197-233

4 Sasena M. Flexibility and efficiency enhancements for constrained global optimization with kriging approximations. [PhD Thesis]. Michigan: University of Michigan (Mechanical Engineering), 2002

5 Jones DR, Schonlau M, Welch WJ. Efficient global optimization of expensive black-box functions. *Journal of Global Optimization*, 1998, 13(4): 455-492

6 Sacks J, Welch WJ, Mitchell TJ, et al. Design and analysis of computer experiments. *Statistical Science*, 1989, 4(4): 409-435

7 Liu YC. Optimum design of straight thin-walled box section beams for crashworthiness analysis. *Finite Elements in Analysis and Design*, 2008, 44(3): 139-147

(责任编辑：刘希国)

KRIGING-HDMR METAMODELING TECHNIQUE FOR NONLINEAR PROBLEMS [1)]

Tang Long Li Guangyao[2)] Wang Hu

(*State Key Laboratory of Advanced Design and Manufacturing for Vehicle Body of Hunan University, Changsha* 410082*, China*)

Abstract Some large-scale structural engineering problems need to be solved by metamodels. With the increasing of complexity and dimensionality, metamodeling techniques confront two major challenges. First, the size of sample points should be increase exponentially as the number of design variables increases. Second, it is difficult to give the explicit correlation relationships amongst design variables by popular metamodeling techniques. Therefore, a new high-dimension model representation (HDMR) based on the Kriging interpolation, Kriging-HDMR, is suggested in this paper. The most remarkable advantage of this method is its capacity to exploit relationships among variables of the underlying function. Furthermore, Kriging-HDMR can reduce the corresponding computational cost from exponential growth to polynomial level. Thus, the essence of the assigned problem could be presented efficiently. To prove the feasibility of this method, several high dimensional and nonlinear functions are tested. The algorithm is also applied to a simple engineering problem. Compared with the classical metamodeling techniques, the efficiency and accuracy are improved.

Key words metamodel, HDMR, Kriging, nonlinearity

Received 2 August 2010, revised 9 December 2010.

1) The project supported by the National Basic Research Program (2010CB328005), the National Natural Science Foundation of China (10902037) and the Basic Scientific Research Expenses of Central University.

2) E-mail: gyli@hnu.cn