DOI: 10.3901/JME.2019.03.138

针对高维优化问题的快速追峰采样方法*

武宇飞¹ 龙 腾^{1,2} 史人赫¹ WANG G Gary³

- (1. 北京理工大学宇航学院 北京 100081;
2. 北京理工大学飞行器动力学与控制教育部重点实验室 北京 100081;
3. 西门菲莎大学机电工程学院 素里 V3T 0A3 加拿大)

摘要: 基于计算试验设计和代理模型的近似优化策略在现代复杂系统工程设计中得到了广泛应用, 其中追峰采样方法(Mode pursuing sampling, MPS)是一种代表性的近似优化策略。分析并针对 MPS 处理高维优化问题时效率低下的缺陷, 提出了基于重点设计空间的快速追峰采样方法(RMPS-SDS), 将重点设计空间的思想引入 MPS 框架, 定制了一套样本点分配策略以增强 MPS 的局部搜索能力与收敛速度, 从而提高求解高维优化问题的效率。采用一系列标准数值测试问题和工程设计问题检验 RMPS-SDS 方法的性能, 并与 MPS 和 GA 进行了对比研究。研究表明, 在相同模型调用次数前提下, RMPS-SDS 的优化结果更接近理论全局最优解, 且鲁棒性更好。与标准 MPS 相比, RMPS-SDS 方法求解高维优化问题的效率、收敛性和鲁棒性都具有明显优势, 更具有工程实用性。

关键词: 追峰采样; 自适应代理模型; 近似优化; 重点设计空间; 全局优化

中图分类号: V221

A Rapid Mode Pursuing Sampling Method for High Dimensional Optimization Problems

WU Yufei¹ LONG Teng^{1,2} SHI Renhe¹ WANG G Gary³

- (1. School of Aerospace Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081;
2. Key Laboratory of Dynamics and Control of Flight Vehicle of Ministry of Education, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081;
3. School of Mechatronic Systems Engineering, Simon Fraser University, Surrey, BC V3T 0A3, Canada)

Abstract: Approximate optimization strategies using design of computer experiments (DoCE) and metamodels have been widely applied in design of modern complex engineering systems. Mode pursuing sampling method (MPS) is a representative of such optimization algorithms. A rapid mode pursuing sampling method using significant design space concept (notated as RMPS-SDS) is proposed in this work to alleviate the low efficiency problem of MPS in solving high dimensional optimization problems. The idea of significant design space is incorporated into the MPS framework, and a sample point allocation strategy is designed to enhance the local search capability and convergence speed of MPS. RMPS-SDS is tested on a number of standard numerical benchmark problems and two engineering design problems and compared with MPS and GA. The comparison results indicate that with the same computational budget (i.e., the same number of function evaluations), results of RMPS-SDS are much closer to the theoretical global optima with lower standard deviation for multiple runs. It is thus demonstrated that the proposed RMPS-SDS outperforms the standard MPS in terms of efficiency, convergence, and robustness in solving high dimensional optimization problems, which is more promising for engineering practices.

Key words: mode pursuing sampling; adaptive metamodel; approximate optimization; significant design space; global optimization

* 国家自然科学基金(51675047, 11372036)、航空科学基金(2015ZA72004)、北京理工大学国际科技合作专项计划(GZ2018015101)、北京理工大学研究生科技创新(2018CX10001)资助项目。20180321 收到初稿, 20181023 收到修改稿

0 前言

复杂工程设计中应用优化设计技术可以改善设计质量, 缩短设计周期。为了提高设计可信度, 计算耗时的高精度分析模型在工程设计优化中的应用日益广泛, 例如结构有限元分析(Finite element analysis, FEA)、计算流体力学(Computational fluid dynamics, CFD)、计算电磁学(Computational electromagnetics, CEM)等。由于通过有限差分法等方式获得梯度需要反复调用分析模型, 传统的基于梯度的局部搜索算法(如增广拉格朗日乘子法、可行方向法、序列二次规划)并不适用。对于基于概率的全局探索算法(如遗传算法、模拟退火算法、粒子群算法), 分析模型调用次数可达成千上万次, 使计算成本难以接受。为提高计算效率, 基于代理模型的近似优化策略在工程优化领域得到了深入研究与广泛应用^[1-2]。

代理模型的精度与原分析模型相当, 但计算成本较低。目前使用最广泛的代理模型包括多项式响应面(Polynomial response surface method, PRSM)^[3]、径向基函数(Radial basis function, RBF)^[4]、克里金模型(Kriging, KRG)^[5]等。

文献[6]指出, 基于代理模型的近似优化策略可分为静态近似优化策略和自适应近似优化策略。静态近似优化策略要求代理模型在整个设计空间都有较高的近似精度, 精度未达到要求需要更新代理模型; 而自适应近似优化策略着重提高可能存在全局最优点的区域的近似精度, 从而在降低采样数量要求的同时引导优化过程快速收敛到全局最优解。自适应近似优化策略的代理模型更新方式主要有基于空间缩减序列采样和基于空间填充序列采样两种。

基于空间缩减序列采样方法主要包括: 信赖域(Trust region)方法、分割平面(Cutting plane)方法、重点设计空间(Significant design space, SDS)等。部分代表性研究成果总结如下: 龙腾等^[7]提出了基于信赖域的动态 RBF 代理模型优化策略(Optimization strategy using trust region based dynamic RBF optimization strategy, TR-DRBF); CHENG 等^[8]提出了基于信赖域的追峰采样方法(Trust region based mode pursuing sampling, TRMPS); WANG 等^[9]提出了采用分割平面的自适应响应面方法(Adaptive response surface method); 彭磊等^[10, 11]提出了重点设计空间的思想, 并发展了一种序列 RBF 优化策略(Sequential RBF, SRBF); 龙腾等^[12]在 SDS 方法的基础上, 提出了采用智能空间探索策略, 进而发展了一种改进的高效自适应响应面方法(Efficient adaptive response surface

method using intelligent space exploration strategy, ARSM-ISES)等。与信赖域方法和分割平面法相比, SDS 方法直接根据最优性与近似精度构造兴趣区域, 有效提高了代理模型在最优解附近的近似精度, 而且算法参数更少^[6]。

具有代表性的基于空间填充序列采样方法包括: 高效全局优化方法(Efficient global optimization, EGO)^[13]、追峰采样方法(Mode pursuing sampling, MPS)^[14]和基于模糊聚类的全局优化策略(Metamodel-based global optimization using fuzzy clustering for design space reduction, FCR)^[15]等。其中, MPS 算法在处理低维问题时效率明显高于常见的全局优化算法, 而且基于概率分布的有偏采样在理论上保证了 MPS 算法以概率 1 收敛到全局最优解^[14]。然而 DUAN 等^[16]指出, MPS 处理高维问题时存在效率较低的缺陷。本文研究发现, MPS 求解高维问题效率较低, 其主要原因是局部搜索能力不足, 可能连续多次迭代都不能改善目标函数值, 浪费大量计算量。考虑到基于空间缩减序列采样方法的近似策略具有良好的局部搜索能力, 本文将重点设计空间方法与 MPS 算法相结合, 以提高其处理高维优化问题的效率。

本文提出的基于重点设计空间的快速追峰采样方法(Rapid mode pursuing sampling method using significant design space concept, RMPS-SDS)通过一种样本点分配策略, 将样本点分为全局探索样本点和局部搜索样本点, 全局探索样本点沿用基于概率分布的追峰采样机理, 而局部搜索样本点则取自构造的重点设计空间内。采用基于 Maximin 准则的拉丁超方设计进行初始和序列采样, 以提高样本点空间均匀性。最后通过标准测试算例上工程优化案例比较研究, 检验 RMPS-SDS 的性能优势。

1 追峰采样方法简介

1.1 径向基函数简介

径向基函数是一种常用的多变量空间插值型代理模型方法, 其基本形式为

$$\hat{f}_{RBF}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_s} \mathbf{w}_i \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|) = \mathbf{w}^T \boldsymbol{\phi} \quad (1)$$

根据插值条件, 权重系数矢量 $\mathbf{w}$ 可以按式(2)求解

$$\mathbf{w} = \mathbf{A}^T \mathbf{y} \quad (2)$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \phi(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1\|) & \cdots & \phi(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_{n_s}\|) \\ \vdots & & \vdots \\ \phi(\|\mathbf{x}_{n_s} - \mathbf{x}_1\|) & \cdots & \phi(\|\mathbf{x}_{n_s} - \mathbf{x}_{n_s}\|) \end{pmatrix}$$

本文中径向函数 $\phi(r, c)$ 取高斯函数

$$\phi(r, c) = \exp(-cr^2) \quad (3)$$

参数 c 根据经验公式^[6]取为

$$c = \left(\left(\max(x_i) - \min(x_i) \right) / n_s \right)^{1/n_v} \quad (4)$$

式中, n_v 为设计变量 $\mathbf{x}$ 的维度, n_s 为样本点个数。

1.2 追峰采样方法

MPS 算法初始样本点数为

$$n_0 = \frac{(n_v + 1)(n_v + 2)}{2} - 1 + n_v \quad (5)$$

将初始样本点及其真实模型响应值加入高精度样本点集 $\mathbf{Y}$, 用以构造 RBF 代理模型。在设计空间内生成 N (例如取 10 000) 个简单样本点, 将它们及其 RBF 响应值加入简单样本点集 $\mathbf{X}$ 。对 $\mathbf{X}$ 中的样本点按照 RBF 响应值从低到高排列, 等分为 K (例如取 100) 组。根据各组 RBF 响应值的平均值大小及代理模型复相关系数 R^2 构造概率分布模型, 此分布模型使得 RBF 响应值较小的样本点被选取的概率较大, 由此每次迭代在 $\mathbf{X}$ 中取 n_v 个点生成高精度样本点^[14]。

图 1 是 MPS 优化六驼峰函数(Six-hump Camel-back function, SC)时构造分布模型过程的示意图。SC 函数表达式为^[17]

$$f(\mathbf{x}) = 4x_1^2 - \frac{21}{10}x_1^4 + \frac{1}{3}x_1^6 + x_1x_2 - 4x_2^2 + 4x_2^4$$

$$(x_1, x_2) \in [-2, 2]^2 \quad (6)$$

图中 $\hat{f}$ 表示简单样本点对应 RBF 响应值, 从小到大排列; g 表示 10 000 个简单样本点等分为 100 组, 每组 RBF 响应值的均值; $\tilde{g}$ 表示用 g 的最大值减去

图 1 分布模型示意图

各组的 g 值, 即分布模型的概率密度函数; G 表示对 $\tilde{g}$ 值积分并归一化的结果, 即分布模型的分布函数; $\hat{G}$ 表示加速因子 $r > 1$ ^[14]时调整后的分布函数值, 保证 RBF 响应值较小的样本点组被选取的概率较大。

MPS 算法选取 $\mathbf{Y}$ 中真实模型响应值最小的点及距离该点最近的 $(n_v + 1)(n_v + 2)/2$ 个点, 根据所有被选中点的取值范围的上下界构造子区间, 并在该子区间内构造二次响应面, 其表达式为

$$\tilde{y} = \beta_0 + \sum_{i=1}^{n_v} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{n_v} \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^{n_v} \sum_{j>i}^{n_v} \beta_{ij} x_i x_j \quad (7)$$

待定系数 $\beta_0, \beta_i, \beta_{ii}, \beta_{ij}$ 由最小二乘法确定

$$\boldsymbol{\beta} = (\mathbf{X}_c \mathbf{X}_c^T)^{-1} \mathbf{X}_c^T \mathbf{y}_c \quad (8)$$

其中 $\mathbf{X}_c$ 是与构造样本点相关的设计变量矩阵, $\mathbf{y}_c$ 是构造样本点真实模型响应值组成的列矢量。

如果该二次响应面的复相关系数 R^2 接近于 1, 则在子区域内新增 $\text{round}(n_v/2)$ 个高精度样本点, 再次构造二次响应面。如果复相关系数和局部近似精度值满足要求, 则用序列二次规划方法优化响应面, 把得到的最优解加入高精度样本点集 $\mathbf{Y}$ 。当满足最优性准则和近似精度准则^[6]时, 可认为算法收敛。

1.3 追峰采样方法处理高维问题时的缺陷

DUAN 等^[16]对 MPS 及其部分衍生算法的性能进行了详细探讨, 与 GA 相比, MPS 在处理中低维问题($n_v \leq 10$)时具有明显的效率优势, 但是求解高维问题($n_v > 10$)时, MPS 需要大量调用分析模型, 求解效率有待进一步提升。以求解 F16 函数为例, MPS 连续运行 10 次的目标函数调用次数的平均值为 921, 且最终得到的最优解平均值 29.786 与理论最优解 25.875 相差较大^[6]。

本文研究发现, 在处理高维问题的过程中, MPS 会出现连续多次迭代最优性无法改善的情况, 即陷入“平台期”。由图 2 中 MPS 求解 F16 问题的迭代过程可见, 在算法终止前连续 30 次迭代中目标函数值保持不变, 导致了算法收敛速度低下和计算成本极大(目标函数调用 1 050 次)。事实上, MPS 陷入“平台期”时的当前最优解并非 F16 问题的局部最优解, “平台期”现象并非由 MPS 陷入局部最优所导致, 其真实原因在于 MPS 较弱的局部搜索能力。因此, 为了提高 MPS 求解高维优化问题的效率, 亟待进一步增强其局部搜索能力。

作者所提出的基于空间缩减序列采样的 SRBF 算法具有较强的局部搜索能力, 可以在目标函数平均调用 299 次的情况下快速获得理论最优解 25.875^[10]。SRBF 虽然在处理高维问题时效率往往高

于 MPS，但其理论框架不够严谨，难以确保收敛到全局最优解。

图2 MPS 求解 F16 问题的目标函数迭代过程

为此，本文将 SRBF 算法中的核心技术——重点设计空间与 MPS 求解框架进行融合，进一步提升 MPS 的局部搜索能力，有效折中全局探索和局部搜索之间的矛盾。

2 快速追峰采样方法

2.1 快速追峰采样近似优化策略求解框架

涉及高精度模型的非线性工程优化问题的数学模型为

$$\begin{aligned} & \text{find } \mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_v) \\ & \min f(\mathbf{x}) \\ & \text{s.t. } g_j(\mathbf{x}) \geq 0 \quad (j=1, 2, \dots, l), \\ & \quad h_k(\mathbf{x}) = 0 \quad (k=1, 2, \dots, m). \\ & \quad x_{L,i} \leq x_i \leq x_{U,i} \quad (i=1, 2, \dots, n_v) \end{aligned} \quad (9)$$

对于基于代理模型的近似优化策略，求解的目标函数和约束条件 $f(\mathbf{x})$, $g_j(\mathbf{x})$, $h_k(\mathbf{x})$ 变为数值近似模型 $\hat{f}(\mathbf{x})$, $\hat{g}_j(\mathbf{x})$, $\hat{h}_k(\mathbf{x})$ 。

快速追峰采样近似优化策略的具体步骤如下。

(1) 用基于 Maximin 准则的拉丁超方设计进行初始采样，在给定的设计空间内生成 $(n_v + 1)(n_v + 2)/2 - 1 + n_v$ 个高精度样本点，将初始样本点及其真实模型响应值加入高精度样本点集 $\mathbf{Y}$ 。

(2) 用高精度样本点集 $\mathbf{Y}$ 中所有点构造 RBF 代理模型。 $k=1$ 时执行第 4 步，否则执行第 3 步。

(3) 根据样本点分配策略，将 n_v 个高精度样本点分为 n_G 个全局探索样本点和 n_L 个局部探索样本点。分配依据包括设计变量维度 n_v 、目标函数持续未改善迭代次数 χ 、当前 RBF 模型复相关系数 R^2 、上一步迭代中的局部搜索样本点数 n_{L0} 、局部搜索持续改善目标函数的迭代次数 n_i 。具体步骤参见 2.2 节。

图3 快速追峰采样近似优化策略(RMPS-SDS)求解框架

(4) 设计空间内随机生成 N (本文取 $N=10\,000$) 个简单样本点，将它们及其 RBF 响应值加入简单样本点集 $\mathbf{X}$ 。用新增样本点的 RBF 响应值生成概率分布模型进行追峰采样，每次迭代从 $\mathbf{X}$ 中选取 n_G 个样本点(迭代次数 $k=1$ 时，取 $n_G=n_v$)，将新增样本点及其真实模型响应值加入高精度样本点集 $\mathbf{Y}$ 。

(5) 构造重点设计空间进行局部搜索，具体步骤参见 2.3 节。在重点设计空间内通过基于 Maximin 准则的拉丁超方设计新增 n_L 个样本点。

(6) 将 $n_v = n_G + n_L$ 个新增样本点及其真实模型响应值加入高精度样本点集 $\mathbf{Y}$ ，选择高精度样本点集中真实模型响应值最小的点以及与其距离最近的 $(n_v + 1)(n_v + 2)/2$ 个点构造二次响应面，取所有被选中点各维坐标值的最小值和最大值为子区域的上下界。

(7) 如果二次响应面的 R^2 值接近 1 (例如 $R^2 > 0.9$)，则在子区域内新增 $\text{round}(n_v/2)$ 个样本点，用这 $(n_v + 1)(n_v + 2)/2 + 1 + \text{round}(n_v/2)$ 个点重新构造二次响应面并计算复相关系数 R^2 和局部近似精度 Diff ，如果满足 $R^2 > 0.999\,9$ 且 $\text{Diff} \leq 0.01$ ，在子区域内用序列二次规划方法优化二次响应面，将得到的最优点(伪最优解)及其真实模型响应值加

入高精度样本点集 Y 。

(8) 当连续两次迭代目标函数改善程度足够小 ($|f(\mathbf{x}_k^*) - f(\mathbf{x}_{k-1}^*)|/f(\mathbf{x}_k^*) \leq \xi_1$, 通常取 $\xi_1 \leq 0.001$), 且代理模型在最优值 $\mathbf{x}_k^*$ 处近似精度足够高 ($|\hat{f}(\mathbf{x}_k^*) - f(\mathbf{x}_{k-1}^*)|/f(\mathbf{x}_k^*) \leq \xi_2$, 通常取 $\xi_2 \leq 0.01$), 则认为迭代已经收敛, 算法终止。对于高维问题, 通常设定最大迭代次数 $N_{it}^{\max}$ 或最大模型调用次数 $N_{fe}^{\max}$ 以控制计算成本。当迭代次数 $N_{it} \geq N_{it}^{\max}$ 或模型调用次数 $N_{fe} \geq N_{fe}^{\max}$ 时, 同样停止迭代。如果不满足上述收敛准则, 执行第 3 步并更新追峰采样方法中的加速因子。

2.2 样本点分配策略

为有机融合重点设计空间方法与 MPS 框架, 本文提出了一种样本点分配策略, 主要根据设计变量维度 n_v 、目标函数持续未改善迭代次数 χ 、局部搜索持续改善目标函数的迭代次数 n_i 、当前 RBF 模型复相关系数 R^2 以及上一代迭代中的局部搜索样本点值 n_{L0} 构造分配算子, 将 n_v 个新增样本点分为 n_G 个全局探索样本点和 n_L 个局部搜索样本点。当迭代次数 $k=1$ 时, $n_{L0}=0$; 当迭代次数 $k>1$ 时, n_{L0} 是第 $k-1$ 次迭代时的局部搜索样本点数。全局探索样本点沿用基于概率分布模型的追峰采样机理, 局部搜索样本点则取自构造的重点设计空间内。样本点分配策略包括如下步骤。

(1) 统计局部搜索持续改善目标函数的迭代次数 n_i , 当 $n_i > 3$ 时, 设局部搜索标记 $flag=1$; 否则设 $flag=0$;

(2) 当目标函数持续未改善迭代次数 $\chi \geq 2$ 或局部搜索标记 $flag=1$, 且径向基函数复相关系数 $R^2 > 0.9$ 时, 局部搜索样本点数 $n_L > 0$, 执行步骤 3; 否则 $n_L=0$, 执行步骤 4;

(3) 如果局部探索样本点个数 $n_L > 0$, 则取 $n_L = \text{round}(n_v/2) + 2 \times (\chi - 2)$, 执行步骤 4;

(4) 全局探索样本点个数 $n_G = n_v - n_L$, 如果 $n_G \leq 2$, 则取 $n_G = 2$, 且 $n_L = n_v - 2$, 样本点分配策略结束; 如果 $n_G \geq 2$, 则不修改 n_G 和 n_L 的数值, 样本点分配策略结束。

样本点分配策略的伪代码如下。

Algorithm 1. 样本点分配策略

Input: 设计变量维度 n_v ; 目标函数持续未改善迭代次数 χ ; 局部搜索持续改善目标函数的迭代次数 n_i ; 当前 RBF 模型复相关系数 R^2 ; 上一步迭代中的局部搜索样本点数 n_{L0}

Output: 全局探索样本点数 n_G , 局部搜索样本点数 n_L

1 if $n_{L0} > 0$ and $\chi = 0$ then

2 $n_i \leftarrow n_i + 1$

3 elseif $n_{L0} > 0$ and $\chi > 0$ then

4 $n_i \leftarrow 0$

5 $flag \leftarrow 0$

6 end if

7 if $n_i > 3$ then

8 $flag \leftarrow 1$

9 end if

10 if $\chi \geq 2$ or $flag = 1$ and $R^2 > 0.9$ then

11 $n_L \leftarrow \text{round}(n_L/2) + 2 * \text{abs}(\chi - 2)$

12 if $n_L > n_v - 2$ then

13 $n_L \leftarrow n_v - 2$

14 end if

15 else

16 $n_L \leftarrow 0$

17 end if

18 $n_G \leftarrow n_v - n_L$

19 return $[n_G, n_L]$

2.3 重点设计空间构造

重点设计空间(SDS)^[10]是 RMPS-SDS 提高优化效率和收敛性的关键技术。重点设计空间是当前迭代可能最优解附近区域, 该区域可能存在全局最优解。通过逐次增加样本点, 重点设计空间有助于提高 RBF 模型在全局最优解附近的近似精度。重点设计空间的构造方法如下。

(1) 如果当前最优值点处目标模型响应值小于上一次迭代目标模型响应值(如: $y_k^* < y_{k-1}^*$), 或者当前迭代次数 $k=1$, 则 SDS 的尺寸 $\mathbf{B}_k$ 由式(10)计算。式中, 当 $k \geq 2$ 时, SDS 尺寸由最近两次迭代最优值点之间的距离确定; 当 $k=1$ 时, SDS 尺寸由当前可能最优值和初始样本点中最大误差点 $\bar{\mathbf{x}}_{\max}$ 之间的距离确定。样本点处相对误差通过逐一交叉验证(Leave-one out cross validation, LOO-CV)^[18]计算。SDS 的中心 S_{center} 为当前最优值点 $\mathbf{x}_k^*$ 。执行步骤 4。

$$\mathbf{B}_k = \begin{cases} \|\mathbf{x}_k^* - \mathbf{x}_{k-1}^*\| & k \geq 2 \\ \|\mathbf{x}_k^* - \bar{\mathbf{x}}_{\max}\| & k = 1 \end{cases} \quad (10)$$

(2) 如果当前最优解大于上一次迭代可能最优解(如 $y_k^* \geq y_{k-1}^*$), 由 LOO-CV 计算当前可能最优值点处相对误差 ε_k 。

(3) 如果 $\varepsilon_k < \varepsilon_{k-1}$, 则增加当前迭代 SDS 的尺寸为 $\mathbf{B}_k \cdot \alpha$, 其中 SDS 尺寸调节系数 α 是大于 1 的常数。如果 $\varepsilon_k \geq \varepsilon_{k-1}$, 则减小当前迭代 SDS 的尺寸为 $\mathbf{B}_k / \alpha$ 。

(4) 判断当前 SDS 每一维尺寸是否小于最小设计空间尺寸系数(如 $\mathbf{B}_k < \sigma |\mathbf{S}_0|$), 如果是, 则修改该维空间尺寸为 $\sigma |\mathbf{S}_0|$ 。其中 σ 称为最小尺寸系数。

(5) 当前可能 SDS 用符号 $\mathbf{S}_k^t = [\mathbf{B}_k^{(L)}, \mathbf{B}_k^{(U)}]$ 表示, $\mathbf{B}_k^{(L)}$ 和 $\mathbf{B}_k^{(U)}$ 分别表示 SDS 的下边界和上边界, 由式 (11) 计算。为保证 SDS 不超出初始设计空间, 第 k 次迭代 SDS 尺寸为 $\mathbf{S}_k^t$ 和 $\mathbf{S}_0$ 之间的交集, $\mathbf{S}_k = \mathbf{S}_k^t \cap \mathbf{S}_0$ 。

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_k^{(L)} &= \mathbf{S}_{\text{center}} - \mathbf{B}_k \\ \mathbf{B}_k^{(U)} &= \mathbf{S}_{\text{center}} + \mathbf{B}_k \end{aligned} \quad (11)$$

需要注意的是, 根据构造方法, 重点设计空间一般需要 3 次迭代的信息, 为了避免额外增加算法开销, 充分利用 MPS 算法框架得到的高精度样本点信息, 在每一次迭代过程中都构造重点设计空间, 但当 MPS 的局部搜索能力满足要求时不分配局部搜索样本点。

3 算法性能测试

为测试 RMPS-SDS 处理高维问题时的效率, 本文选择了 10 个中高维数值测试问题和 2 个高维工程优化案例, 并将其中的目标函数视为高精度分析模型, 选取标准的追峰采样方法(MPS)和遗传算法(Genetic algorithm, GA)作为对照。对三种算法都设置最大目标函数调用次数 $N_{\text{fe}}^{\text{max}}$, 即当模型调用次数大于 $N_{\text{fe}}^{\text{max}}$ 时终止迭代, 将当前最好结果作为最优解。为排除随机因素影响, 每种算法对各测试算例分别连续优化 10 次, 统计优化结果进行对比分析。

3.1 算法参数设置

MPS 与 RMPS-SDS 的算法参数设置如表 1 所示。

表 1 MPS 与 RMPS-SDS 算法参数设置

可调节参数	MPS 取值	RMPS-SDS 取值
初始高精度样本点数	$(n_v + 1)(n_v + 2)/2 - 1 + n_v$	$(n_v + 1)(n_v + 2)/2 - 1 + n_v$
每次迭代简单样本点数	1×10^4	1×10^4
子区域新增样本点条件	$R^2 > 0.9$	$R^2 > 0.9$
子区域	$R^2 > 0.9999$	$R^2 > 0.9999$
局部优化条件	$\text{Diff} \leq 0.1$	$\text{Diff} \leq 0.1$
目标函数改善程度容差	$\xi_1 \leq 0.001$	$\xi_1 \leq 0.001$
近似精度容差	$\xi_2 \leq 0.01$	$\xi_2 \leq 0.01$
最大目标函数调用次数	$N_{\text{fe}} \geq N_{\text{fe}}^{\text{max}} = 5\ 000$	$N_{\text{fe}} \geq N_{\text{fe}}^{\text{max}} = 5\ 000$
SDS 尺寸	—	2
调节系数 α	—	—
SDS 最小尺寸系数 σ	—	0.05

GA 算法直接使用 Matlab 的 ga 工具包, 相关参数取默认值。为了便于对比研究, 根据 MPS 与

RMPS-SDS 测试问题优化结果, 设置 GA 优化各测试问题时的 $N_{\text{fe}}^{\text{max}}$ 如表 2 所示。

表 2 GA 算法 $N_{\text{fe}}^{\text{max}}$ 设置

测试函数	HN	F16	R10	R20	SUR10	SUR20
$N_{\text{fe}}^{\text{max}}$	300	1 100	5 000	5 000	5 000	5 000
测试函数	ZF10	ZF20	GR10	GR20	WW10	AS10
$N_{\text{fe}}^{\text{max}}$	5 000	5 000	200	400	400	100

3.2 测试问题描述

3.2.1 数值测试问题

Hartman 函数(HN, $n_v = 6$)^[14]

$$f(\mathbf{x}) = -\sum_{i=1}^{n_v} c_i \exp \left[-\sum_{j=1}^{n_v} \alpha_{ij} (x_j - p_{ij})^2 \right] \quad (12)$$

$$x \in [0, 1] \quad i = 1, 2, \dots, n_v$$

其中 α_{ij} , c_i , p_{ij} 取值见文献[14]。

16 维函数(F16, $n_v = 16$)^[14]

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{16} \sum_{j=1}^{16} a_{ij} (x_i^2 + x_i + 1) (x_j^2 + x_j + 1) \quad (13)$$

$$i, j = 1, 2, \dots, 16 \quad x_k \in [-1, 1]$$

$$k = 1, 2, \dots, n_v$$

其中 a_{ij} 取值见文献[14]。

10 维、20 维 Rosenbrock 函数(R10/R20, $n_v = 10 / n_v = 20$)^[16]

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_v-1} \left(100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2 \right) \quad (14)$$

$$x \in [-5, 5] \quad i = 1, 2, \dots, n_v$$

10 维、20 维 SUR-T1-14 函数(SUR10/SUR20, $n_v = 10 / n_v = 20$)^[19]

$$f(\mathbf{x}) = (x_1 - 1)^2 + (x_{n_v} - 1)^2 + n_v \sum_{i=1}^{n_v-1} (n_v - i) (x_i^2 - x_{i+1})^2 \quad (15)$$

$$x_i \in [-3, 2] \quad i = 1, 2, \dots, n_v$$

10 维、20 维 Zakharov 函数(ZF10/ZF20, $n_v = 10 / n_v = 20$)^[8]

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_v} x_i^2 + \left(\sum_{i=1}^{n_v} 0.5 i x_i \right)^2 + \left(\sum_{i=1}^{n_v} 0.5 i x_i \right)^4 \quad (16)$$

$$x_i \in [-5, 10] \quad i = 1, 2, \dots, n_v$$

10 维、20 维 Griewank 函数(GR10/GR20, $n_v = 10 / n_v = 20$)^[8]

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_v} \frac{x_i^2}{4000} - \prod_{i=1}^{n_v} \cos \left(\frac{x_i}{\sqrt{i}} \right) + 1 \quad (17)$$

$$x_i \in [-600, 600] \quad i = 1, 2, \dots, n_v$$

3.2.2 机翼重量优化问题(WW10)

10 维机翼重量优化算例^[20]中, 机翼重量的经验

求解公式如下

$$W = 0.036x_1^{0.0758}x_2^{0.0035}\left(\frac{x_3}{\cos^2 x_4}\right)^{0.6}x_5^{0.006}x_6^{0.04} \cdot \left(\frac{100x_7}{\cos x_4}\right)^{-0.3}(x_8x_9)^{0.49} + x_1x_{10} \quad (18)$$

式中, $x_1, x_2, \dots, x_{10}$ 对应的物理含义及取值范围如表 3 所示。表 3 中的基准值来自塞斯纳 C172 “天鹰” 小型飞机, 相应的各设计变量取值在基准量上下浮动适当范围作为设计空间上下界。

表 3 10 维机翼重量优化问题参数表

设计变量	基准值	下界	上界
翼面积 x_1/ft^2	174	150	200
机翼携带燃油重量 x_2/lb	252	220	300
展弦比 x_3	7.52	6	10
后掠角 $x_4/(\circ)$	0	-10	10
巡航动压 $x_5/(\text{lb}/\text{ft}^2)$	34	16	45
跟梢比 x_6	0.672	0.5	1
翼型相对厚度 x_7	0.12	0.08	0.18
极限过载 x_8	3.8	2.5	6
全机设计重量 x_9/lb	2 000	1 700	2 500
单位面积涂料重量 $x_{10}/(\text{lb}/\text{ft}^2)$	0.064	0.025	0.08

3.2.3 翼型气动优化问题(AS10)

选用文献[21]中的 10 维翼型气动优化问题进一步检验 RMPS-SDS 的工程实用性。

选用 Hicks-Henne 形函数^[22]描述翼型的几何外形。采用 C-H 型结构化网格, 为保证计算精度, 在翼面附近加大网格密度。采用 Fluent 作为翼型流场解算器, 以 N-S 方程为主控方程, 湍流模型为 Spalart-Allmaras (S-A) 模型。使用实验值校验 CFD 模型的分析精度, $Ma = 0.63$, 攻角 $\alpha = 2^\circ$ 时 NACA0012 翼型压力系数分布的风洞实验值与

计算值如图 4 所示, 结果验证了 CFD 模型的合理性。

图 4 NACA0012 压力分布实验值与计算值对比

以 NACA0012 为基准翼型, 优化翼型在 $Ma = 0.63$, 攻角 $\alpha = 2^\circ$ 工况下的升阻比, 约束条件为翼型的最大相对厚度不超过基准翼型的 80%。优化模型如下

$$\begin{aligned} \max \quad & f(\mathbf{x}) = Cl/Cd \\ \text{s.t.} \quad & t_{\max} \geq 0.8 \cdot t_{\max}^0 \\ & x_i \in [-0.01, 0.01], \quad i = 1, 2, \dots, 10 \end{aligned} \quad (19)$$

其中 Cd 和 Cl 分别表示翼型的阻力系数和升力系数, $t_{\max}$ 表示翼型的最大相对厚度, $t_{\max}^0$ 表示 NACA0012 翼型的最大相对厚度。10 个设计变量分别描述沿弦线均匀分布的 5 个控制点处翼型上下表面的形变量。

3.3 优化结果

MPS, RMPS-SDS, GA 三种算法对上述测试问题的优化结果如表 4 所示, MPS 对 R10/R20、SUR10/

表 4 MPS, RMPS-SDS, GA 的测试问题优化结果

测试函数	理论最优解	MPS			RMPS-SDS			GA		
		调用次数	最优解	最优解	调用次数	最优解	最优解	调用次数	最优解	最优解
		均值	均值	标准差	均值	均值	标准差	均值	均值	标准差
HN	-3.322	245	-2.49	0.40	236	-3.32	0.056	300	-2.36	0.36
F16	25.875	1 054	37.87	6.93	1 049	25.875	9.54×10^{-4}	1 100	28.96	0.65
R10	0	4 902	229.5	177.8	5 005	9.864	1.49	5 000	18.12	24.28
R20	0	4 991	3.315×10^4	3.49×10^4	5 016	39.50	4.34	5 000	176.70	76.13
SUR10	0	4 921	20.11	15.1	5 006	1.89	1.03	5 000	2.23	1.20
SUR20	0	5 000	6 765	6 476	5 015	21.04	8.20	5 000	185.52	64.65
ZF10	0	4 994	2.73×10^6	1.65×10^6	5 006	0.14	0.043	5 000	1.84	1.64
ZF20	0	5 000	2.36×10^{11}	2.31×10^{11}	5 009	21.04	15.15	5 000	46.50	40.27
GR10	0	157	91.54	32.66	77	5.44×10^{-3}	0.054	200	0.72	0.17
GR20	0	392	274.33	34.96	385	1.04×10^{-6}	5.29×10^{-7}	400	0.76	0.12
WW10	N/A	377	152.04	7.96	376	123.29	6.24×10^{-2}	400	145.95	9.11
AS10	N/A	107	46.287 7	1.952 8	107	49.065 3	0.648 0	110	46.036 5	3.141 1

SUR20、ZF10/ZF20 等算例的优化结果引自文献[8]。其中, AS10 问题使得目标函数最大, 其余问题均使得目标函数最小。

对于中维问题 $HN(n_v = 6)$, RMPS-SDS 能在很少的目标函数调用次数下找到理论全局最优解 -3.32 , 而 MPS 和 GA 优化结果偏离理论全局最优解较远, 且鲁棒性较差。RMPS-SDS 在 F16 问题上表现出色, 调用目标函数 1049 次左右即可收敛到理论全局最优解 25.875。由图 5 可以看出, RMPS-SDS 有效缓解了 MPS 中的“平台期”现象。特别是第 15 次迭代后, 每一次迭代都能使目标函数值有效下降。

图 5 RMPS-SDS 与 MPS 求解 F16 问题的目标函数迭代过程对比

Rosenbrock 函数的全局最优点位于一个“香蕉形山谷”内, MPS 在处理这类问题时能力很差, 20 维问题求出的最优解达 10^4 量级, 相比之下 RMPS-SDS 的结果明显改善, 且优于 GA 得到的结果。同样, RMPS-SDS 在处理 SUR 问题时得到的最优解远远小于 MPS 得到的结果, 且与 GA 相比优势明显, 特别是 20 维 SUR 问题。ZF 函数只有一个局部最优点作为全局最优点, 除全局最优点附近外梯度都极大, 优化结果表明 MPS 未能找到全局最优点附近区域, 而 RMPS-SDS 能得到很好的优化结果。GR 函数有非常多的局部最优点, 这导致 MPS 难以给出令人满意的结果。对于 GR10 问题, RMPS-SDS 能在极少的目标函数调用次数下收敛到 1×10^{-3} 量级, 同时具有较高的鲁棒性。对于 GR20 问题, RMPS-SDS 优化结果与 MPS 和 GA 相比, 在最优性和鲁棒性上都至少有 4~5 个数量级的优势。

对于工程设计问题 WW10, RMPS-SDS 平均调用目标函数 376 次, 得到优化后的机翼重量均值为 123.29 lb, 标准差仅 6.24×10^{-2} , 而 MPS 和 GA 分别调用目标函数 377 和 400 次, 得到优化后的机翼重

量均值分别为 152.04 lb 和 145.95 lb, 标准差比 RMPS-SDS 结果高两个数量级。RMPS-SDS 同样在结果最优性和鲁棒性上超过 MPS 和 GA。

对于工程设计问题 AS10, 三种算法所得优化翼型与初始翼型的对比如表 5 所示。由表中数据可知, RMPS-SDS、MPS、GA 三种算法所得优化翼型最大相对厚度均满足约束, 且升阻比相对初始翼型分别提升 45.24%、37.02%、36.27%, 其中 RMPS-SDS 优化翼型的升阻比提升最为显著, 同时约束条件接近主动约束。根据表 4 数据, RMPS-SDS 优化结果的标准差仅为 0.648 0, 小于 MPS 和 GA 优化结果的标准差。因此, RMPS-SDS 在最优性和鲁棒性上具有较明显的优势, 表明 RMPS-SDS 具有良好的工程实用性。

表 5 翼型气动优化问题优化结果对比

参数	初始翼型	RMPS-SDS 优化翼型	MPS 优化翼型	GA 优化翼型
Cl^*	0.225 4	0.465 1	0.463 9	0.452 3
Cl^*/Cd	33.782 6	49.065 3	46.287 7	46.036 5
t_{max}^*	0.120 0	0.099 6	0.106 2	0.126 4

4 结论

本文提出的算法通过引入重点设计空间方法, 提高了 MPS 算法处理高维问题时的效率。根据本文提出的样本点分配策略, 每次迭代的新增序列样本点被分为全局探索样本点和局部搜索样本点, 在重点设计空间内生成的局部搜索样本点有针对性地提高了 MPS 算法的局部搜索性能, 有利于求解高维优化问题。数值测试算例与工程设计问题优化结果表明, RMPS-SDS 与经典的 MPS 和 GA 相比, 在求解的最优性和鲁棒性方面具有明显的优势。

未来将进一步探索更加高效的样本点自适应分配策略, 并将本文提出的算法应用到更多复杂系统工程设计中。

参 考 文 献

- [1] SIMPSON T W, BOOKE A J, GHOSH D, et al. Approximation methods in multidisciplinary analysis and optimization: a panel discussion[J]. Structural and Multidisciplinary Optimization, 2004, 27(5): 302-313.
- [2] WANG G G, SHAN S. Review of metamodeling techniques in support of engineering design optimization[J]. Journal of Mechanical Design, 2007, 129(4): 370-380.
- [3] MYERS R H, MONTGOMERY D C, ANDERSON-

- COOK C M. Response surface methodology: process and product optimization using designed experiments[D]. New Jersey: John Wiley & Sons, 2016.
- [4] BUHMANN M D. Radial basis functions: theory and implementations[D]. Cambridge: Cambridge University Press, 2003.
- [5] SIMPSON T W, MAUERY T M, KORTE J J, et al. Kriging models for global approximation in simulation-based multidisciplinary design optimization[J]. AIAA Journal, 2001, 39(12): 2233-2241.
- [6] 龙腾, 刘建, WANG G G, 等. 基于计算试验设计与代理模型的飞行器近似优化策略探讨[J]. 机械工程学报, 2016, 52(14): 79-105.
- LONG Teng, LIU Jian, WANG G G, et al. Discuss on approximate optimization strategies using design of computer experiments and metamodels for flight vehicle design[J]. Journal of Mechanical Engineering, 2016, 52(14): 79-105.
- [7] 龙腾, 郭晓松, 彭磊, 等. 基于信赖域的动态径向基函数代理模型优化策略[J]. 机械工程学报, 2014, 50(7): 184-190.
- LONG Teng, GUO Xiaosong, PENG Lei, et al. Optimization strategy using dynamic radial basis function metamodel based on trust region[J]. Journal of Mechanical Engineering, 2014, 50(7): 184-190.
- [8] CHENG G H, YOUNIS A, HAJIKOLAEI K H, et al. Trust region based mode pursuing sampling method for global optimization of high dimensional design problems[J]. Journal of Mechanical Design, 2015, 137(2): 021407.
- [9] WANG G G, DONG Z, AITCHISON P. Adaptive response surface method - a global optimization scheme for approximation-based design problems[J]. Engineering Optimization, 2001, 33(6): 707-733.
- [10] PENG Lei, LIU Li, LONG Teng. Study of sequential radial basis function for computation-intensive design optimization problem[C]// 12th AIAA Aviation Technology, Integration and Operations (ATIO) Conference, 11st September, 2012, Indianapolis, Indiana. Reston, Virginia: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2012: 5689.
- [11] PENG Lei, LIU Li, LONG Teng, et al. An efficient truss structure optimization framework based on CAD/CAE integration and sequential radial basis function metamodel [J]. Structural and Multidisciplinary Optimization, 2014, 50(2): 329-346.
- [12] LONG Teng, WU Di, GUO Xiaosong, et al. Efficient adaptive response surface method using intelligent space exploration strategy[J]. Structural and Multidisciplinary Optimization, 2015, 51(6): 1335-1362.
- [13] JONES D R, SCHONLAU M, WELCH W J. Efficient global optimization of expensive black-box functions[J]. Journal of Global Optimization, 1998, 13: 455-492.
- [14] WANG L, SHAN S, WANG G G. Mode-pursuing sampling method for global optimization on expensive black-box functions[J]. Engineering Optimization, 2004, 36(4): 419-438.
- [15] LI Yulin, LIU Li, LONG Teng, et al. Metamodel-based global optimization using fuzzy clustering for design space reduction[J]. Chinese Journal of Mechanical Engineering, 2013, 26(5): 928-939.
- [16] DUAN X, WANG G G, KANG X, et al. Performance study of mode-pursuing sampling method[J]. Engineering Optimization, 2009, 41(1): 1-21.
- [17] BRANIN F H, HOO S K. A method for finding multiple extrema of a function of n variables[J]. Numerical Methods, 1972: 231-237.
- [18] QUEIPO N V, HAFTKA R T, SHYY W, et al. Surrogate-based analysis and optimization[J]. Progress in Aerospace Sciences, 2005, 41(1): 1-28.
- [19] SCHITTOKOWSKI K. More test examples for nonlinear programming codes[D]. New York: Springer Science & Business Media, 2012.
- [20] FORRESTER A, SOBSTER A, KEANE A. Engineering design via surrogate modelling: a practical guide[D]. Chichester: John Wiley & Sons, 2008.
- [21] 龙腾, 刘莉, 孟令涛, 等. 基于代理模型的翼型多目标集成优化设计[J]. 系统仿真学报, 2010, 22(07): 1604-1608.
- LONG Teng, LIU Li, MENG Lingtao, et al. Multi-objective integrated optimization of airfoil based on surrogate model[J]. Journal of System Integration, 2010, 22(07): 1604-1608.
- [22] KHURANA M, WINARTO H, SINHA A. Airfoil geometry parameterization through shape optimizer and computational fluid dynamics[C]// 46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 10th January, 2008, Reno, Nevada. Reston, Virginia: American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2008: 295.

作者简介: 武宇飞, 男, 1996 年出生, 博士研究生。主要研究方向为飞行器总体设计、多学科优化理论与应用。

Email: wuyufei@bit.edu.cn

龙腾(通信作者), 男, 1982 年出生, 博士, 教授, 博士研究生导师。主要研究方向为飞行器总体设计、多学科优化理论与应用、飞行器协同控制与决策。

Email: tenglong@bit.edu.cn; bitryu@gmail.com

史人赫, 男, 1990 年出生, 博士研究生。主要研究方向为飞行器总体设计、多学科优化理论与应用。

Email: shirenhe@bit.edu.cn

WANG G Gary, 男, 1971 年出生, 博士, 教授, 博士研究生导师。主要研究方向为复杂系统设计优化、工程设计优化。

E-mail: gary_wang@sfu.ca