梯度增强的 Kriging 模型与 Kriging 模型在优化设计中的比较研究

刘俊, 宋文萍, 韩忠华, 王乐

(西北工业大学 翼型叶栅空气动力学国家级重点实验室, 陕西 西安 710072)

摘 要:在许多工程优化设计问题中,由于需要采用费时的数值模拟方法获得目标函数和约束函数值,出现了优化时间过长、优化难度大的问题。为了提高设计效率,缩短优化设计周期,代理模型方法受到人们的欢迎。近些年来,为了进一步提高设计效率,人们在传统代理模型基础上又发展了一些更高效、预测精度更高的新型代理模型,如变可信度模型、梯度增强的代理模型等。为了研究新型代理模型在优化设计中的优化效率和优化效果,首先结合代理模型、多点加点准则及多种传统优化算法,发展了一套适用于代理模型、梯度增强的代理模型的通用优化算法框架,基于该框架,采用典型的数值算例对当前应用较为广泛的 Kriging 模型和近些年来发展的梯度增强的 Kriging 模型进行了对比研究。结果显示,在假定目标函数的梯度与目标函数计算量相同的情况下,采用梯度增强的 Kriging 模型得到的优化结果在绝大多数情况下都优于采用 Kriging 模型得到的结果。最后,应用翼型设计算例对两种代理模型进行了对比,其中目标函数的梯度采用与目标函数本身计算量基本一致的 Adjoint 方法获得;结果显示,梯度增强的 Kriging 模型表现优于 Kriging 模型。

关 键 词:优化设计;代理模型;Kriging 模型;梯度增强的 Kriging 模型;气动优化设计
中图分类号:V211.3 **文献标志码**:A **文章编号**:1000-2758(2015)05-0819-08

在工程优化设计领域,目标函数的获得往往十分耗时,发展高效的优化方法(即减少目标函数的计算次数)是缩短设计周期的关键。此外,为了提高设计效果,优化方法应尽可能地具有好的全局性,即应尽可能地找到全局最优解。

基于代理模型的优化方法被认为是一类能够实现全局优化的高效优化方法。Kriging 模型具有较好的预测非线性、多峰值的能力,且能预测出未知点的误差,因而成为最受欢迎的代理模型之一,并被越来越多地应用于多学科优化设计中[1-3]。尽管如此,Kriging 模型的效率和精度有时仍然不能满足工程实际的需求,这是由于在很多实际问题中,建立一个具有合理精度的近似模型仍然需要大量的高精度数值模拟,而这一问题将随着设计变量的个数和范围的增加变得更加突出。为此,近些年来,人们正寻求比传统代理模型更为高效的新型代理模型。

提高代理模型效率的一种方法是使用大量低可信度样本数据来辅助高可信度样本数据来建立一种用于预测高可信度分析程序输出结果的变可信度模型[4-7],如 Cokriging 模型。该方法的思想是在设计空间内同时采用高可信度分析程序(如 Navier-Stokes 方程程序)和低可信度程序(如 Euler 方程程序)进行抽样,通过大量的低可信度样本数据获得设计空间内响应值的全局趋势,通过少量高可信度样本数据来校正预测值。另一种提高 Kriging 模型效率的方法是在 Kriging 模型中引入梯度信息,即在建立代理模型时不仅利用样本点处的函数值,同时利用样本点处的梯度值。引入梯度的 Kriging 模型被称为梯度增强的 Kriging 模型(gradient-enhanced Kriging,GEK)。Liu 等[8]提出了一种间接 GEK 模型。Chung 等[9]提出了一种直接 GEK 模型。Laurenceau 等[10]比较了 Kriging、直接 GEK、间接

收稿日期:2015-03-15 **基金项目**:国家高技术发展计划 863 项目(2012AA051301)与国家自然科学基金(11272265)资助
作者简介:刘俊(1986—),西北工业大学博士研究生,主要从事飞行器的气动优化设计研究。

GEK 模型在气动问题中的预测精度,发现在相同样本点数下 2 种 GEK 的精度都高于 Kriging 模型。Han 等[1]发展了一种更一般化的 GEK 模型,允许梯度信息在任意位置引入,且允许在某些样本点处不使用梯度信息。

目前,对于 Kriging 模型及基于该模型的优化方法已得到大量研究,对于 GEK 模型本身的研究也不少见[9-12],而鲜见对 GEK 模型和 Kriging 模型在应用于优化设计时的优化效率和优化效果的比较仔细的对比研究。为了探讨 GEK 模型在优化设计中的效率及效果,本文首先在 Han 等[11]发展的 GEK 模型基础上,结合多种加点准则[13]及多种传统优化算法,发展了一套基于代理模型的高效优化设计框架;其次,在统一的优化框架下,采用典型数值算例将 GEK 模型和 Kriging 模型进行了对比研究,最后采用工程中的气动设计问题将二者进行了对比。结果显示,对于大多数问题,使用 GEK 时收敛更快且优化结果更好。

1 Kriging 模型/梯度增强的 Kriging 模型

对于 Kriging 模型的详细介绍,本文不再赘述,见相关参考文献[1,14-15]。GEK 模型是在 Kriging 模型基础上发展起来的,其思想、原理和建模方法与 Kriging 模型基本一致,只是在模型中不仅利用了样本点处的函数值,还利用了样本点处的梯度值。下面介绍本文所采用的由 Han 等[11]发展的一种直接 GEK 模型。

首先,在 Kriging 模型中,对于一个 m 维问题,假设对目标函数(或约束函数)y 抽样获得 n 个函数值,抽样位置及相应的响应值可写成

$$\boldsymbol{S}=\begin{bmatrix}x^{(1)}\\x^{(2)}\\\cdots\\x^{(n)}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_1^{(1)} & x_2^{(1)} & \cdots & x_m^{(1)}\\x_1^{(2)} & x_2^{(2)} & \cdots & x_m^{(2)}\\\cdots & \cdots & \ddots & \cdots\\x_1^{(n)} & x_2^{(n)} & \cdots & x_m^{(n)}\end{bmatrix}\in\mathbf{R}^{n\times m}$$

$$\boldsymbol{y}_S=[y^{(1)},\cdots,y^{(n)}]^{\mathrm{T}}\in\mathbf{R}^n \tag{1}$$

对于 GEK,将上述样本数据的响应值列向量加以拓展,把样本点处的梯度信息以偏导数的形式加入到响应值中。于是得到含梯度信息的样本及响应值矩阵:

$$\boldsymbol{S}=[x^{(1)},\cdots,x^{(n)},x_g^{(1)},\cdots,x_g^{(n')}]^{\mathrm{T}}\in\mathbf{R}^{(n+n')\times m}$$

$$\boldsymbol{y}_S=[y^{(1)},\cdots,y^{(n)},\partial y^{(1)},\cdots,\partial y^{(n')}]^{\mathrm{T}}\in\mathbf{R}^{n+n'} \tag{2}$$

式中,$x_g^{(j)},j\in\{1,\cdots,n'\}$ 表示第 j 个提供偏导数的样本点(每个偏导数看做一个样本点),向量 $\boldsymbol{y}_S$ 中的 $\partial y^{(j)}=\left(\dfrac{\partial y}{\partial x_k}\right)^{(j)}$ 表示第 j 个偏导数信息(对第 k 个独立变量的偏导数,$k\in\{1,\cdots,m\}$)。

1.1 GEK 预测值与均方误差

GEK 模型对未知函数的预测值定义为所有抽样函数值和所有抽样偏导数值的加权,即

$$\hat{y}(x)=\sum_{i=1}^{n}w^{(i)}y^{(i)}+\sum_{j=1}^{n'}\lambda^{(j)}\partial y^{(j)},x\in\mathbf{R}^m \tag{3}$$

式中,$w^{(i)}$ 代表第 i 个函数值的加权系数,$\lambda^{(j)}$ 代表第 j 个偏导数信息的加权系数。与 Kriging 模型类似,引入静态随机过程假设:

$$Y(x)=\beta_0+Z(x) \tag{4}$$

式中,β_0 是未知的常数,$Z(\cdot)$ 为均值为 0 的静态随机过程,且协方差满足关系式

$$\begin{aligned}&\operatorname{cov}[Z(x^{(i)}),Z(x^{(j)})]=\sigma^2R(x^{(i)},x^{(j)}),\\&\operatorname{cov}\left[Z(x^{(i)}),\frac{\partial Z(x^{(j)})}{\partial x_k}\right]=\sigma^2\frac{\partial R(x^{(i)},x^{(j)})}{\partial x_k^{(j)}},\\&\operatorname{cov}\left[\frac{\partial Z(x^{(i)})}{\partial x_k},Z(x^{(j)})\right]=\sigma^2\frac{\partial R(x^{(i)},x^{(j)})}{\partial x_k^{(i)}},\\&\operatorname{cov}\left[\frac{\partial Z(x^{(i)})}{\partial x_l},\frac{\partial Z(x^{(j)})}{\partial x_k}\right]=\sigma^2\frac{\partial^2R(x^{(i)},x^{(j)})}{\partial x_l^{(i)}\partial x_k^{(j)}}\end{aligned} \tag{5}$$

式中,σ^2 是随机过程 $Z(\cdot)$ 的方差,R 是仅与空间距离有关的“相关函数”,$\dfrac{\partial R(x^{(i)},x^{(j)})}{\partial x_k^{(i)}}$ 和 $\dfrac{\partial R(x^{(i)},x^{(j)})}{\partial x_k^{(j)}}$ 分别为相关函数相对于 $x^{(i)}$ 和 $x^{(j)}$ 处第 k 个分量的偏导数。

与 Kriging 模型推导过程类似,可得到 GEK 模型的预测值:

$$\hat{\boldsymbol{y}}(x)=\beta_0+\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}(x)\boldsymbol{R}^{-1}(\boldsymbol{y}_S-\beta_0\boldsymbol{F}) \tag{6}$$

式中,$\boldsymbol{R}$ 为样本点相关矩阵,$\boldsymbol{r}$ 为样本点与未知点 x 的相关向量:

$\boldsymbol{F}=(\underbrace{1,..,1}_{n},\underbrace{0,\cdots,0}_{n'})^{\mathrm{T}},\beta_0=(\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{F})^{-1}\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{y}_S$。

均方误差 MSE 由下式计算:

$$\begin{aligned}MSE\{\hat{y}(x)\}&=\sigma^2\left\{1.0-\begin{bmatrix}\boldsymbol{r}\\1\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}\boldsymbol{R} & \boldsymbol{F}\\\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}} & 0\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{r}\\1\end{bmatrix}\right\}\\&=\sigma^2\{1.0-\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{r}+(\boldsymbol{r}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{F}-1)^2/(\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{F})\}\end{aligned} \tag{7}$$

1.2　相关函数模型

相关矩阵 $\boldsymbol{R}$ 和相关向量 $\boldsymbol{r}$ 的建立需要计算相关函数及其一阶导数、二阶导数值。此处考虑以下形式的相关模型:

$$\boldsymbol{R}(x^{(i)},x^{(j)}) = \prod_{k=1}^{m} R_k(\theta_k, x^{(i)} - x^{(j)}) \tag{8}$$

本文采用与文献[11]类似的 3 次样条相关函数:

$$R_k = \begin{cases} 1 - 15\xi_k^2 + 30\xi_k^3 & \text{for} \quad 0 \leqslant \xi_k \leqslant 0.2 \\ 1.25(1-\xi_k)^3 & \text{for} \quad 0.2 < \xi_k < 1 \\ 0 & \text{for} \quad \xi_k \geqslant 1 \end{cases}$$

$$\text{where } \xi_k = \theta_k \mid x_k^{(i)} - x_k^{(j)} \mid \tag{9}$$

1.3　模型参数的获得

由(8)式可知,GEK 模型中存在超参数 θ,与 Kriging 模型相同,θ 值采用最大似然估计法求解下列优化问题获得:

$$MLE = \max_{\theta}\left(-\frac{1}{2}[(n+n')\ln(\hat{\sigma}^2) + \ln(\mid \boldsymbol{R} \mid)]\right) \tag{10}$$

2　多点加点准则及其约束处理

基于代理模型的优化方法的一个关键技术是加点准则。由于建立一个较精确的全局近似模型需要大量的样本点,特别是设计变量较多时。因此,为了减少总的样本点数,首先使用较少的样本点建立初始代理模型,再寻找一定准则下的最优点并将其作为新的样本点来更新代理模型重新优化。加点准则的使用直接决定了优化的成败及优化效率。本文发展一种多点加点准则:同时采用局部收敛性好的目标函数最小值准则和全局收敛性好的 EI 最大准则,并分别将其推广到含约束的形式。

2.1　目标函数值最小准则及其约束处理

该准则认为代理模型足够精确,直接寻找代理模型上目标函数的最小值,即建立代理模型后,求解下列子优化问题:

$$\begin{aligned} &\text{minimize:} \quad \hat{y}(x) \\ &\text{s.t.} \quad \hat{g}_i(x) > 0, \quad i = 1,\cdots,N_G \end{aligned} \tag{11}$$

式中,N_G 是约束个数。本文使用遗传算法(GA)和梯度优化相结合的方法求解最小化问题。

该准则没有考虑模型的误差,新加的样本点主要集中在当前真实最优解附近,因而它是一种局部加点准则。本文称之为 minimizing the constrained prediction, 简称 CMP。

2.2　EI 最大值准则及其约束处理(CEI)

设样本集中的最优目标函数值为 $y_{\min}$,在 x 处目标函数相对的改进量为 $I = y_{\min} - Y(x) > 0$,于是 I 的期望值可由下式计算:

$$\mathrm{E}[I(x)] = \begin{cases} (y_{\min} - \hat{y})\boldsymbol{\Phi}\left(\dfrac{y_{\min}-\hat{y}}{s}\right) + s\varphi\left(\dfrac{y_{\min}-\hat{y}}{s}\right) & \text{if } s > 0 \\ 0 & \text{if } s = 0 \end{cases} \tag{12}$$

式中,φ 表示标准正态分布概率密度函数,$\boldsymbol{\Phi}$ 表示标准正态分布累积函数。

当存在约束 $g(x) > 0$ 时,约束函数也建立代理模型,并也假定 $G(x)$ 服从正态分布,$G(x) \in N[\hat{g}(x), \hat{s}_g^2(x)]$。于是 $G(x)$ 满足约束的概率如下:

$$P[G > 0] = 1 - \boldsymbol{\Phi}\left(-\frac{\hat{g}(x)}{s_g(x)}\right) \tag{13}$$

满足约束的 EI 值(CEI)如下:

$$\begin{aligned} E_c[I(x)] &= \mathrm{E}[I(x) \cap G > 0] \\ &= \mathrm{E}[I(x)] \cdot P[G > 0] \end{aligned} \tag{14}$$

若存在多个约束,则将(12)式中乘以每一个约束函数满足约束的概率。

该准则以当前真实最优解为参照,同时考虑了代理模型的误差,因而是一种全局加点准则。

上述 2 种加点准则的结合兼顾了优化的局部收敛性和全局收敛性,因而可以更好地适用局部优化问题和全局优化问题。

3　基于代理模型的优化设计方法

本文结合代理模型、试验设计方法(本文采用 LHS)、多点加点准则、遗传算法、梯度优化算法等发展了 1 套基于 GEK 模型的优化设计方法。该方法的流程如下:

1) 使用试验设计在设计空间内生成一些初始样本点。

2) 调用真实分析模型,获得每个样本点的真实目标函数值和约束函数,对于 GEK 模型,还需计算二者的梯度值。

3) 针对目标函数及每一个约束函数,分别建立目标函数和约束函数的代理模型。

4) 分别使用 CEI 和 CMP 进行子优化,获得代理模型上的 2 个最优解。

5) 检查 2 个新的最优点是否重合或与已有的

样本点出现重合,若重合,剔除新出现的重叠点。

6) 调用真实函数校验两种加点准则所得的最优点的真实目标函数值和约束函数,对于 GEK 模型,还需计算二者的梯度。

7) 检验优化是否达到终止标准,若是,停止优化,否则将上步中所得最优点作为新样本点加入样本点集,回到步骤 3)。

4 算例测试

在本文优化算例中,为了与 Kriging 模型进行对比,假设计算 1 次目标函数的梯度所需的计算量等同于 1 次目标函数的计算量(类似在气动优化设计中,若使用 Adjoint 方法[12]计算梯度,其计算量大致等于 1 次流场求解的计算量。由于初始样本点的生成具有随机性,且在子优化过程中使用了具有随机性的遗传算法,因此,本文基于代理模型的优化算法也会存在随机性。因此本文对所有算例重复优化 30 次来进行研究。

4.1 无约束算例(局部优化)

该算例是求解 Rosenbrock 函数的最小值。优化模型如下:

$$\text{minimize}:\ f(x) = \sum_{i=1}^{n_v-1}\left[100\times(x_{i+1}-x_i^2)^2+(1-x_i)^2\right]$$
$$x_i\in[-2,2],\quad i=1,2 \tag{15}$$

其真实最优解为 $x^*=(1.0,\cdots,1.0)$,$f(x^*)=0$。图 1 给出了 Rosenbrock 函数的云图,图中的"+"为最优点。

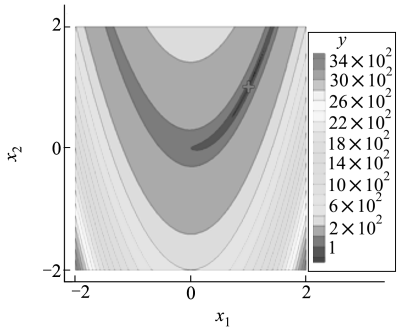


图 1 Rosenbrock 函数云图

分别使用 Kriging 模型和 GEK 模型进行优化,在优化过程中,使用 LHS 方法生成 4 个初始样本点。使用 GEK 模型进行优化时,最大样本点数取 100,加上 100 次梯度所需的计算量,总计 200 个计算量。在使用 Kriging 模型进行优化时,最大样本点数取 200。图 2 给出了使用 Kriging 模型和 GEK 模型运行 30 次得到的平均收敛曲线的比较。可以看出,在相同的样本点数情况下,使用 GEK 模型优化的结果明显优于 Kriging 模型优化的结果。然而,计算梯度需要额外的计算量,在相同计算量情况下,使用 GEK 模型优化的结果好于 Kriging 模型优化的结果。表 1 给出了使用 GEK 模型、Kriging 模型优化结果的比较。作为参照,表中还给出了直接使用 GA 优化得到的结果。从表 1 还可以看出使用 2 种代理模型方法的优化结果都明显优于 GA 所得的结果,尽管 GA 调用了 10 000 次目标函数。(表中"计算量"一列中"f"表示真实目标函数计算,"g"表示真实目标函数的梯度计算作为参照。)

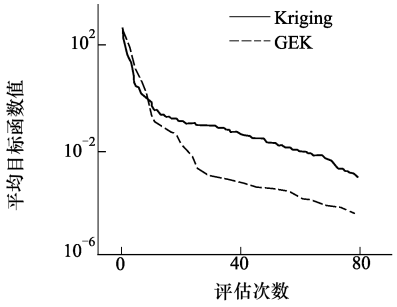


图 2 使用 Kriging 和 GEK 优化 Rosenbrock 函数的目标函数平均收敛曲线对比

表 1 GEK、Kriging 优化 Rosenbrock 函数的结果比较(30 次)

方法	最好值	平均值	标准差	计算量
真实值	0	/	/	/
GEK	$1.429\,3\times10^{-7}$	5.1020×10^{-5}	$9.706\,1\times10^{-5}$	200(100f+100g)
Kriging	$1.655\,2\times10^{-7}$	9.2790×10^{-4}	$4.324\,4\times10^{-3}$	200
GA	$8.230\,8\times10^{-5}$	$4.552\,9\times10^{-2}$	$5.842\,9\times10^{-2}$	10 000

4.2 无约束算例(全局优化)

本算例是一个全局优化算例,目标是求解 Rastrigin 函数的最小值,优化模型如下:

$$\text{minimize}:\ f(x) = \left(10\times n_v+\sum_{i=1}^{n_v}\left[x_i^2-10\times\cos(2\pi x_i)\right]\right)$$
$$x_i\in[-5.12,5.12],\quad i=1,\cdots,n_v \tag{16}$$

函数的真实最优解为 $x^*=(0,\cdots,0)$,$f(x^*)=0$。图

3 给出了 Rastrigin 函数图,可以看出,该函数是一个复杂多极值函数。

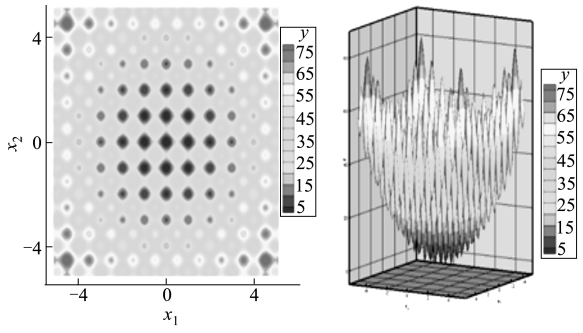


图 3　Rastrigin 函数

使用 LHS 方法获得 10 个初始样本点。使用 GEK 模型进行优化时,最大样本点数取 150;使用 Kriging 模型进行优化时,最大样本点数取 300。图 4 给出了使用 Kriging 模型和 GEK 模型运行 30 次得到的平均收敛曲线。可以看出,基于 Kriging 模型的优化方法和基于 GEK 模型的优化方法都表现很好。然而,GEK 模型优化的收敛精度要高于 Kriging 模型优化的收敛精度。表 2 给出了使用本文 GEK 方法、基于 Kriging 模型的优化方法优化结果的比较。该表也反映了图 4 所显示的结果。作为参考,表中也给出了直接使用 GA 优化得到的结果。

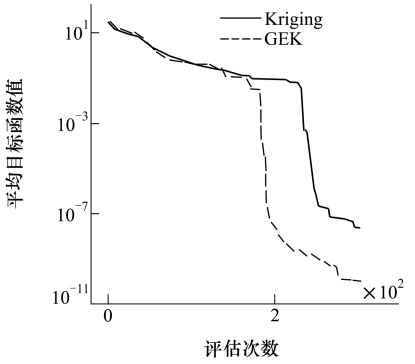


图 4　使用 Kriging 和 GEK 优化 Rastrigin 函数的目标函数平均收敛曲线对比

表 2　GEK、Kriging 优化 Rastrigin 函数的结果比较(30 次)

方法	最好值	平均值	标准差	计算量
真实值	0	/	/	/
GEK	1.579 2×10^{-12}	1.008 8×10^{-10}	1.697 8×10^{-10}	300(150f+150g)
Kriging	4.502 5×10^{-11}	2.440 9×10^{-8}	7.944 2×10^{-8}	300
GA	0	3.552 7×10^{-16}	1.945 9×10^{-15}	30 000

4.3　约束优化算例

本算例是一个压力容器设计问题。该优化问题的数学模型如下所示:

$$\begin{aligned}
&\text{minimize}: f(x) = 0.6224x_1x_3x_4 + 1.7781x_2x_3^2 + \\
&\quad 3.1661x_1^2x_4 + 19.84x_1^2x_3 \\
&\text{s.t. } g_1 = -x_1 + 0.0193x_3 \leqslant 0 \\
&\quad g_2 = -x_2 + 0.00954x_3 \leqslant 0 \\
&\quad g_3 = -\pi x_3^2x_4^2 - \frac{4}{3}\pi x_3^3 + 1\,296\,000 \leqslant 0 \\
&\quad g_4 = x_4 - 240 \leqslant 0 \\
&\quad 0.062\,5 \leqslant x_1, x_2 \leqslant 6.187\,5, \\
&\quad 10.0 \leqslant x_3, x_4 \leqslant 200.0
\end{aligned} \tag{17}$$

图 5 给出了 2 种代理模型方法重复优化的平均收敛曲线的对比。表 3 给出了 3 种方法分别优化 30 次所得最好最优值、平均最优值、最优值的标准差,以及计算量的比较。与上例类似,GEK 模型几乎每次都精确地收敛到相同的值,30 次重复优化最优值的平均值和标准差都小于 Kriging,这说明 GEK 模型效果好于 Kriging 且表现更稳定。该表也给出了直接使用 GA 优化得到的结果,可以看出,使用基于 GEK 和 Kriging 的优化方法所得的优化结果都明显优于 GA,而计算量却远小于 GA。

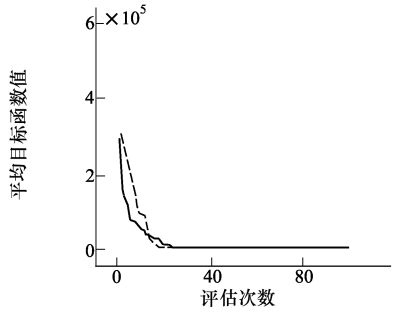


图 5　使用 Kriging 和 GEK 优化 pressure vessel design 的目标函数平均收敛曲线对比

表 3　GEK、Kriging、GA 优化 pressure vessel design 的结果比较(30 次)

方法	最好值	平均值	标准差	计算量
真实值	未知	/	/	/
GEK	5 885.333	5 885.336	0.005	100(50f+50g)
Kriging	5 885.789	5 902.444	19.731	100
GA	5 910.793	6 671.307	623.203	40 000

4.4　翼型设计算例

为了比较 2 种代理模型应用于工程优化设计的

的优化效率和效果,以翼型压力反设计进行测试。

设计状态为 $Ma=0.73$, $Re=6.5\times10^5$, $\alpha=2.0°$。首先给定 RAE2822 翼型在该设计状态的压力分布,以该压力分布作为目标压力分布,将反设计问题转化为优化问题求解,优化问题的数学表达式如下:

$$\text{minimize}:\quad Obj.=\int_B\left(\frac{1}{2}(p-p_d)^2\right)\mathrm{d}s \tag{18}$$

式中, p 为计算压力, p_d 为目标压力, B 表示沿物面的积分。

翼型的几何参数化采用"CST"参数化方法[17],18 个设计变量。流场求解采用课题组发展的求解器 PMNS2D;计算网格采用 C 型结构化网格。目标函数的梯度使用 Adjoint 方法计算。因此,通过求解一次 RANS 方程和一次与之计算量相当的 Adjoint 方程即可得到目标函数及其梯度值。

分别使用 GEK 模型、Kriging 模型进行翼型的反设计,重复运行 30 次。作为参考,这里还给出了使用基于 Adjoint 的梯度优化算法所得的结果,其中梯度优化算法采用 BFGS 拟牛顿法,初始翼型为 NACA0012 翼型。图 6 给出了基于代理模型的优化方法的平均收敛曲线及 Adjoint 方法收敛曲线的对比。从图 6 可以看出,使用 Kriging 时花费 300 个样本点已基本收敛,而 GEK 方法仅花费 50 个样本点(100 个计算量)目标函数就已收敛,优化结果也好于使用 Kriging 模型。

图 7 给出了分别使用 GEK、Kriging 所得的某次反设计结果对应的翼型几何形状及压力分布与目标翼型几何形状及压力分布的对比。可以看出,使用 2 种模型反设计所得的翼型的几何形状及压力分布与目标翼型的几何形状及压力分布都吻合得很好,但是仔细比较,GEK 表现比 Kriging 更好,这可在图中圆圈部分可以看出。

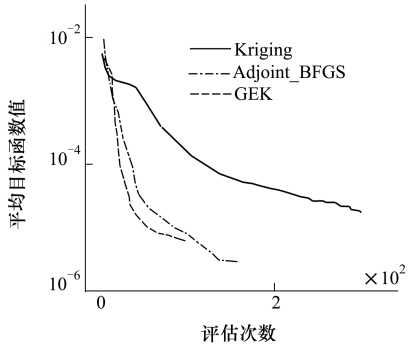


图 6 基于 GEK 方法和 Kriging 方法的优化方法的翼型反设计平均收敛曲线及 Adjoint 翼型反设计收敛曲线对比(一次 Adjoint 方程计算等同于一次流场计算)

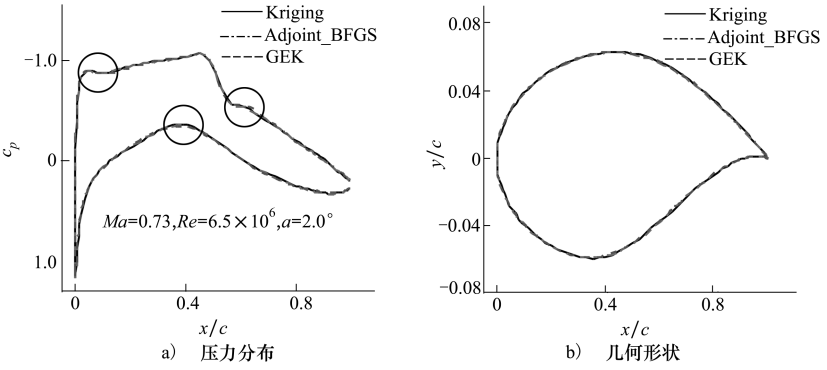


图 7 使用 GEK 和 Kriging 模型反设计前后翼型的压力分布及几何形状与目标翼型的对比

5 结

在气动设计领域,由于当前已具备高效计算梯度的技术——Adjoint 方法,因此,将目标函数与其梯度相结合建立代理模型来进行优化设计,可能有着很大的潜力。为了研究梯度的引入对优化设计的影响,本文首先将 Kriging 模型、梯度增强的 Kriging 模型、多点加点准则、多种传统优化算法相结合,发展了一套基于代理模型的高效、通用优化设计框架。其中,本文发展了一种多点加点准则,并将加点准则推广到含约束的形式。再次,基于相同的优化设计框架,对使用梯度增强的 Kriging 模型和使用 Kriging 模型的优化结果进行了比较。在假设梯度的计算花费与目标函数的计算花费相同的情况下,对于绝大多数问题,在总的计算量一致的前提下,使用 GEK 时收敛更快且优化结果更好。此外,还使用工程实际中的翼型压力反设计对 Kriging 和 GEK 的效果进行了对比,结果显示,当使用 GEK 模型时,优化结果和优化效率都高于使用 Kriging 模型。

参考文献:

[1] Hoyle N, Bressloff N W, Keane A J. Design Optimization of a Two-Dimensional Subsonic Engine Air Intake[J]. AIAA Journal, 2006, 44(11): 2672-2681

[2] Ahmed Mym, Qin N. Surrogate-Based Multi-Objective Aerodynamic Design Optimization of Hypersonic Spiked Bodies[J]. AIAA Journal, 2012, 50(4): 797-810

[3] Yim J, Lee B J, Kim C. Exploiting Multi-Stage Shape Optimization Strategy of Multi-Body Geometries Using Kriging-Based Model and Adjoint Method[J]. Computers & Fluids, 2012, 68: 71-87

[4] Kennedy M C, O'Hagan A. Predicting the Output from a Complex Computer Code When Fast Approximations Are Available[J]. Biometrika, 2000, 87(1): 1-13

[5] Forrester A I J, Soberster A, Keane A J. Multi-Fidelity Optimization via Surrogate Modeling[J]. Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2007, 463: 3251-3269

[6] Han Z H, Zimmermann R, Goertz S. An Alternative CoKriging Model for Variable-Fidelity Surrogate Modeling[J]. AIAA Journal, 2012, 50(5): 1205-1210

[7] Han Z H, Goertz S. A Hierarchical Kriging Model for Variable-Fidelity Surrogate Modeling[J]. AIAA Journal, 2012, 50(9): 1885-1896

[8] Liu W, Batill S M. Gradient-Enhanced Response Surface Approximations Using Kriging Models[R]. AIAA-2002-5456

[9] Chung H S, Alonso J J. Using Gradients to Construct Cokriging Approximation Models for High-Dimensional Design Optimization Problems[R]. AIAA-2002-0317

[10] Laurenceau J, Sagaut P. Building Efficient Response Surfaces of Aerodynamic Functions with Kriging and CoKriging[J]. AIAA Journal, 2008, 46(2): 498-507

[11] Han Z H, Goertz S, Zimmermann R. Improving Variable-Fidelity Surrogate Modeling via Gradient-Enhanced Kriging and a Generalized Hybrid Bridge Function[J]. Aerospace Science and Technology, 2013, 25(1): 177-189

[12] Jameson A. Aerodynamic Design via Control Theory[J]. Journal of Scientific Computation, 1988, 3(3): 233-260

[13] Jones D R. A Taxonomy of Global Optimization Methods Based on Response Surfaces[J]. Journal of Global Optimization, 2001, 21: 345-383

[14] Han Z H, Zhang K S, Song W P, et al. Optimization of Active Flow Control Over an Airfoil Using a Surrogate-Management Framework[J]. Journal of Aircraft, 2010, 47(2): 603-612

[15] Han Z H, Zhang K S, Liu J, et al. Surrogate-Based Aerodynamic Shape Optimization with Application to Wind Turbine Airfoils [R]. AIAA-2013-1108

[16] 许瑞飞,宋文萍, 韩忠华. 改进 Kriging 模型在翼型气动优化设计中的应用研究[J]. 西北工业大学学报, 2010,28(4): 503-510

Xu R F, Song W P, Han Z H. Application of Improved Kriging-Model-Based Optimization Method in Airfoil Aerodynamic Design [J]. Journal of Northwestern Polytechnical University, 2010, 28(4): 503-510 (in Chinese)

[17] 卜月鹏,宋文萍,韩忠华,许建华. 基于 CST 参数化方法的翼型气动优化设计[J]. 西北工业大学学报,2013,31(5): 829-836

Bu Yuepeng, Song Wenping, Han Zhonghua, et al. Aerodynamic Optimization Design of Airfoil Based on CST Parameterization Method[J]. Journal of Northwestern Polytechnical University, 2013, 31(5): 829-836(in Chinses)

Comparative Study of GEK (Gradient-Enhanced Kriging) and Kriging When Applied to Design Optimization

Liu Jun, Song Wenping, Han Zhonghua, Wang Le

(National Key Laboratory of Science and Technology on Aerodynamic Design and Research, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: In many engineering optimization design problems, the objective function (s) as well as the constraint function (s) are really computationally expensive. To reduce the computational time and shorten the design process, surrogate models are often used. In recent years, to further improve the design efficiency, a variety of new surrogate models are developed as extensions from the traditional models and verified to have higher efficiency for prediction, such as the variable-fidelity models and gradient-enhanced models. To investigate the design optimization efficiency when these new surrogate models are used, a universal surrogate-based optimization framework, which combines the surrogate models, multi sample point infill criteria, and multi-type traditional optimization algorithms, is developed first. Then, several typical analytical optimization problems are employed to compare the optimization efficiency when the widely used Kriging and a newly developed GEK are used respectively. The results and their analysis show preliminarily that, for most cases, GEK get better optimal solution with the same computational expense. Finally, an engineering problem, the airfoil inverse design is introduced for comparison; the gradients of the objective functions used to construct the GEK are obtained by the efficient adjoint method. The results and their analysis also show preliminarily that, when using the GEK, not only the efficiency, but also the optimal solution can be improved as compared with the Kriging model.

Key words: aerodynamic drag, aerodynamics, airfoils, angle of attack, computational efficiency, convergence of numerical methods, design, drag coefficient, efficiency, flowcharting, force cashing, genetic algorithms, inverse problems, Mach number, matrix algebra, maximum likelihood estimation, mean square error, optimization, parameterization, Reynolds number; aerodynamic optimization design, expected improvement, GEK (gradient-enhance Kriging), infill criteria, Kriging model

US News and World Report 把北大、清华、复旦列入 2016 年世界高校最强的前 96 名

中国日报 Thursday, Cotober 8th, 2015 刊载了 US News and World Report 2014 年开始列出 world's top 750 universities overall 的名次。2016 年世界最强高校的前 10 名, 8 个在美国(第 1 名 Harvard, 第 2 名 MIT, 第 3 名 UC Berkeley, 第 4 名 Stanford, 第 7 名 CIT, 第 8 名 UCLA, 第 9 名 Columbia, 第 10 名 Chicago) 2 个在英国(第 5 名 Oxford, 第 6 名 Cambridge)。

中国三校列入 2016 年世界最强高校的前 96 名: 北京大学 41 名, 清华大学 59 名, 复旦大学 96 名。

在工科科研方面 2016 年 rankings 把清华大学列为世界最强高校。

胡沛泉

2015 年 10 月