

文章编号: 1001-2486(2011)05-0030-06

基于能量函数的插值代理模型推广能力评价准则*

朱雄峰, 罗文彩, 魏月兴

(国防科技大学 航天与材料工程学院, 湖南 长沙 410073)

摘要:本文分析了插值型代理模型的特性,提出了影响插值代理模型的推广能力的重要因素是代理模型的振荡特性,分析表明:振荡剧烈的代理模型,其推广能力就弱。为了评价代理模型的推广能力,本文提出基于能量函数方法的评价方法。能量函数方法是通过计算代理模型的一阶和二阶导数,得出代理模型的振荡情况来进行评价。能量函数越高,代理模型的振荡越剧烈,因而其推广能力越差。测试函数表明,能量函数方法在评价代理模型推广能力上是有效的。

关键词:代理模型;推广能力;能量函数;评价准则

中图分类号:TP391.9 **文献标识码:**A

Energy Function Based Evaluation Method of the Generalization Ability of Interpolated-based Surrogate Model

ZHU Xiong-feng, LUO Wen-cai, WEI Yue-xing

(College of Aerospace and Material Engineering, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: The characteristics of interpolated-based surrogate model were analyzed. The oscillation characteristics of interpolated-based surrogate model, an important factor that affect the generalization capacity was put forward. Analysis shows that: when the oscillation of surrogate model is violent, its generalization ability is weak. An evaluation method based on energy function was put forward to evaluate the generalization ability of surrogate model. By calculating the surrogate model's first and second derivatives, Energy Function Method (EFM) can obtain the oscillation characteristics of surrogate model. The higher the Energy Function, the more serious the oscillation of surrogate model. Thus its generalization ability is worse. Test functions were made, and the results show that the Energy Function Method is efficient in evaluating the generalization ability of the surrogate model.

Key words: surrogate model; generalization ability; energy function; evaluation method

在飞行器多学科设计优化(Multidisciplinary Design Optimization, MDO)过程中,由于存在设计变量数量巨大,各学科之间信息传递复杂、分析过程存在噪声等情况,使得优化过程变得复杂而漫长,引入近似技术成为一项迫不及待的任务。代理模型(即近似模型)代替仿真程序执行的实质是将目标函数与约束近似用数学模型表示,在设计空间中搜索,得到近似问题的最优解,然后通过最优解处的实际仿真分析修正近似模型,再进行搜索,直至收敛。代理模型的推广(generalization)能力,也称为模型泛化能力,是指采用某种近似方法,对现有样本点构造代理模型,该代理模型对未在样本集中的样本点做出正确预测的能力。本文所研究的代理模型是插值型代理模型(如无特别说明,下文所述代理模型都指插

值型代理模型),常用的插值型代理模型有:RBF径向基插值方法、Kriging方法、移动最小二乘法等^[1-3],插值型代理模型的特点是它能无误差地贯穿所有样本点。传统的评价方法往往需要增加样本点对模型进行验证,或者使用交叉验证的方法^[4],但这些方法增加了试验成本,而且只是从零阶预测误差的角度进行评价,而对一阶、二阶精度以及模型本身的特点没有描述,无法对模型的正确性有充分的评价。本文提出的能量函数方法能够基于现有样本点,利用模型的一阶和二阶导数信息,对代理模型的推广能力进行评价。

1 插值型代理模型的分析

对基于小样本模型的推广能力,统计学习理论提出了推广能力的界的概念,即:经验风险 $R_{emp}(w)$

* 收稿日期:2011-03-28

基金项目:国家自然科学基金资助项目(50975280);新世纪优秀人才支持计划资助项目(NCET-08-0149)

作者简介:朱雄峰(1985—),男,博士生。

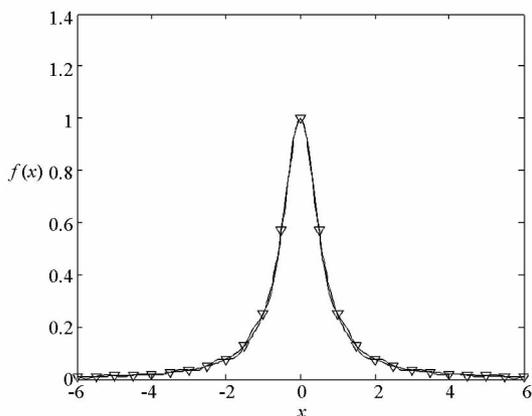
和实际风险 $R(w)$ 之间以至少 $1 - \eta$ 的概率满足如下关系式:

$$R(w) \leq R_{emp}(w) + \varphi(h/n) \quad (1)$$

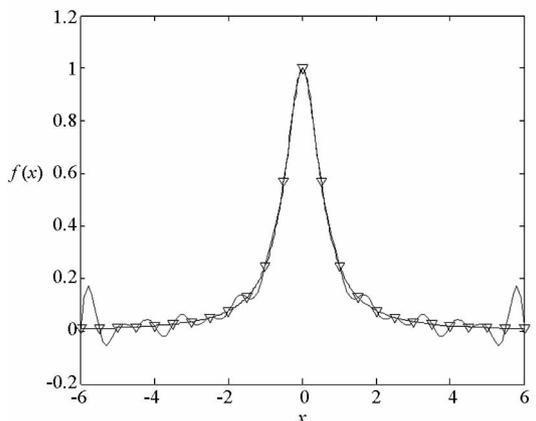
式中, h 是函数集的 VC 维, n 是样本数。

统计学习理论说明了学习机器的实际风险由两部分组成:一是经验风险即训练误差,二是置信范围,它和学习机器的 VC 维及训练样本数有关。它表明学习机器的 VC 维越高(学习机器的复杂性越高),则置信范围越大,导致真实风险与经验风险的差别越大,机器学习不但要使经验风险最小,还要使 VC 维尽量小,以缩小置信范围,才能得到较小的实际风险,即对未知样本点有较好的推广性。

统计学习理论的推广性的界理论对插值型模型的推广能力同样具有指导意义:插值型代理模型的经验风险是 0,显然只通过最小化经验风险来实现代理模型的推广能力是没有意义的,要最小化实际风险必须要尽量缩小代理模型的函数集的 VC 维。然而遗憾的是,对大多数函数集而言,其 VC 维是无法计算的^[5-6]。



(a) 未发生龙格现象插值图形



(b) 发生龙格现象插值图形

图1 插值问题中的龙格现象

Fig.1 Runge phenomenon of interpolated problem
统计学习理论指出,可以通过减小插值代理

模型函数集的复杂度,得到更小的 VC 维度,进而获得最小的实际风险。插值代理模型复杂度的一种极端表现是:高次函数插值(如四次以上样条插值,相比常用的三次样条插值其函数复杂度要高)容易出现龙格现象(Runge Phenomenon)。图1是两类插值方法对同一组样本点插值的效果,真实函数为 $\frac{1}{1+3x^2}$ 。

图1(a)没有发生龙格现象,而图1(b)发生了龙格现象,显然发生龙格现象时,代理模型的推广能力较弱,因此,可以通过评价插值函数的振荡特性间接地评价插值函数集的复杂度。定性的分析可以得出振荡剧烈的插值代理模型,其推广能力较弱;为了定量地描述函数的振荡特性,本文提出了插值函数的能量函数概念。

2 一维能量函数

2.1 一维能量函数的推导

为了定量描述一维插值问题的振荡特性,下面作如下定义:

定义1 一维能量函数(One-dimensional Energy Function)为插值代理模型函数曲线 f 贯穿所有一维样本点所产生的弯曲势能 $v_\xi(f)$ 。

假设代理模型函数曲线处于理想状态下,大范围内变形都符合胡克定律,根据力学理论

$$\begin{aligned} dv_\xi &= \frac{M(x)}{2} d\theta \\ d\theta &= \frac{dl}{\rho} \\ \frac{1}{\rho} &= \frac{M(x)}{EI} \end{aligned} \quad (2)$$

其中, dv_ξ 为能量微元, $M(x)$ 为弯矩, $d\theta$ 为弯曲角度变形微元, dl 为曲线长度微元, ρ 为曲率半径, EI 为弯曲刚度。

由以上三式可以得出

$$dv_\xi = \frac{M(x)}{2} d\theta = \frac{M(x)^2}{2EI} dl \quad (3)$$

由于

$$dl = \sqrt{1 + f'^2} dx \quad (4)$$

$$M(x) = \frac{EI}{\rho} \quad (5)$$

可以得出

$$v_\xi = \frac{EI}{2} \int_0^l \left(\frac{1}{\rho}\right)^2 dl \quad (6)$$

进一步:

$$v_\xi = \frac{EI}{2} \int_0^x \left[\frac{f''}{(1 + f'^2)^{\frac{3}{2}}} \right]^2 (1 + f'^2)^{\frac{1}{2}} dx$$

$$= \frac{EI}{2} \int_0^x \frac{f'^2}{(1+f'^2)^{\frac{5}{2}}} dx \quad (7)$$

由以上推导可以看出,从物理意义上:弯曲的能量实际上是曲率倒数的平方在全曲线范围内的积分。这里能量函数用于评价代理模型的振荡情况,并且能量函数是一个标量,为此对能量函数归一化为

$$v_\xi = \int_0^x \frac{f'^2}{(1+f'^2)^{\frac{5}{2}}} dx \quad (8)$$

以上是一维插值问题的能量函数形式,显然能量函数大的插值方法,其函数形式振荡更剧烈,因此其推广能力更差。

由于现有的插值型代理模型往往不能给出解析表达式,通常只能给出数值解。计算上式的一阶和二阶导数采用如下方法:

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

$$f''(x) = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{\Delta x^2} \quad (9)$$

2.2 一维能量函数测试

下面采用径向基 RBF 模型和 Kriging 模型,对一维能量函数评价推广能力的有效性进行验证。

(1) 径向基模型 (Radial Basis Function, RBF), 是采用一系列径向基函数的线性组合来近似的模型^[7]。其表达式如下:

$$\hat{y} = \sum_{i=1}^{n_s} \beta_i \varphi(\|X - X_i\|) = \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\Phi} \quad (10)$$

其中, $\boldsymbol{\beta} = [\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{n_s}]^T$ 是权系数向量,可以由如下公式确定:

$$\boldsymbol{\beta} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{y} \quad (11)$$

矩阵 \mathbf{A} 可以由以下确定:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \varphi(\|x_1 - x_1\|) & \cdots & \varphi(\|x_1 - x_{n_s}\|) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi(\|x_{n_s} - x_1\|) & \cdots & \varphi(\|x_{n_s} - x_{n_s}\|) \end{pmatrix} \quad (12)$$

这里把 $\|x - x_i\|$ 表示成欧氏距离 r , $\varphi(\|x - x_i\|)$ 是径向基函数,常采用高斯径向基函数 $\varphi = \exp(-cr^2)$ 、MQ 型径向基函数 $\varphi(r) = \sqrt{(r^2 + c^2)}$ 等,其中 c 是常数。

(2) Kriging 模型

Kriging 模型由全局模型和局部偏差模型构成^[7]:

$$y = f(x) + z(x) \quad (13)$$

$z(x)$ 的协方差矩阵表明其局部偏离的程度,形式

如下:

$$\text{cov}[Z(x_i), Z(x_j)] = \sigma^2 R([R(x_i, x_j)]) \quad (14)$$

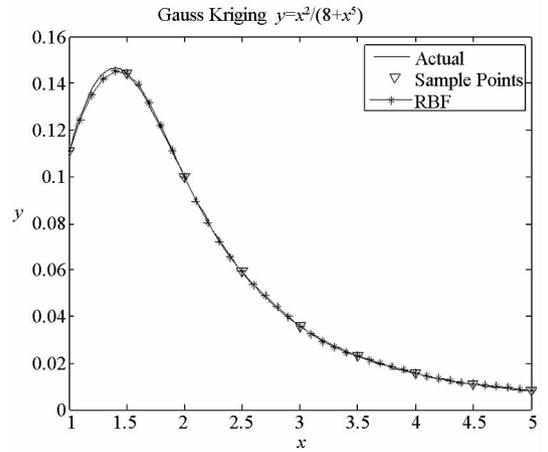
$R(x_i, x_j)$ 表示任意两个样本点 x_i, x_j 之间的相关函数,这里常采用高斯相关函数:

$$R(x_i, x_j) = \prod_{k=1}^{n_{dv}} \exp(-\theta_k |x_k^i - x_k^j|^2) \quad (15)$$

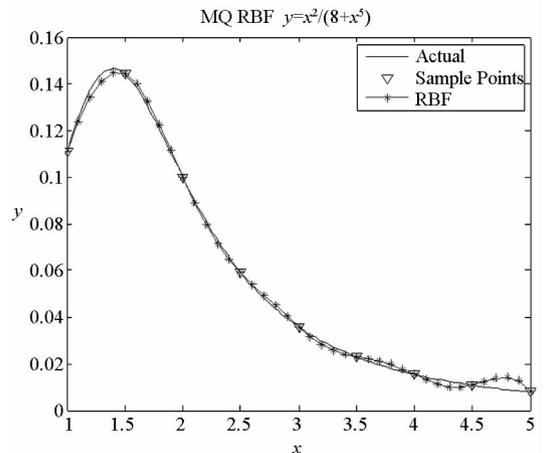
相关函数确定后就可以建立 $y(x)$ 的近似响应 $\hat{y}(x)$ 关于观测点 x 的表达式。形式如下:

$$\hat{y}(x) = \hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{r}^T(x) \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{f}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \quad (16)$$

以上 RBF 模型和 Kriging 模型,对于不同的插值基函数和相关函数,插值效果有较大的差异,如图 2 所示。常用的 RBF 基函数和 Kriging 相关函数如表 1 所示。



(a) Gauss Kriging 插值图形



(b) MQ RBF 插值图形

图 2 一维函数插值效果

Fig. 2 Function test results of one-dimensional surrogate models

表 1 常用的 RBF 基函数和 Kriging 相关函数

Tab.1 RBF basis functions and KM correlation functions

RBF 基函数		Kriging 相关函数		
高斯函数	MQ 型函数	高斯函数	倒数平方函数	三次样条函数
$\varphi(r) = e^{-cr^2}$	$\varphi(r) = \sqrt{(r^2 + c^2)}$	$\varphi = \exp(-cr^2)$	$\varphi = \frac{1}{c+r^2}$	$\varphi(r) = (r+c)^3$

测试函数 1: $f(x) = \frac{x^2}{8+x^5}, x \in [1, 5]$, 均匀采样 80 个点作为样本点。分别采用高斯 RBF 模型、MQ 型 RBF 模型和高斯型 Kriging 模型对该测试函数作近似。

为了验证上述各种代理模型的推广能力, 这里采用增加验证样本点方法。由统计学理论可知, 所增加的验证样本点越多, 验证样本点方法对插值方法推广能力的评价的可信度越高。这里为验证能量函数的有效性, 采样足够多 40 个验证样本点, 采用误差函数为平均绝对值误差 Ave_er 、均方根误差 $RMSE$ 、误差复相关系数 R^2 , 其表达式如右:

$$Ave_er = \frac{\sum_{i=1}^{N_v} |f_i - \bar{f}_i|}{N_v} \quad (17)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N_v} (f_i - \bar{f}_i)^2}{N_v}} \quad (18)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N_v} (\hat{f}_i - \bar{f}_i)^2}{\sum_{i=1}^{N_v} (f_i - \bar{f}_i)^2} \quad (19)$$

同时分别计算各种代理模型的能量函数, 能量函数和验证样本点误差结果, 如表 2 所示。

表 2 增加验证样本点方法测试误差

Tab.2 The error evaluates functions and the energy functions of one-dimensional surrogate models

函数	代理模型	Energy	Aveer	RMSE	R^2
Fun1	高斯 RBF	0.08647	5.9092e-004	8.3816e-004	0.9996
	MQ 型 RBF	0.10425	0.0011	0.0014	0.9990
	高斯 Kriging	0.0635	4.6677e-004	7.1493e-004	0.9998

从表 2 可以看出: 无论是评价绝对值误差、均方根误差, 还是误差复相关系数, 高斯型 Kriging 模型均较优, 说明高斯型 Kriging 模型的推广能力较好, 这从图 2 的插值效果图也可以得出相应的结论。从能量函数也可以看出: 高斯型 Kriging 能量相对更小, 这表明一维能量函数评价插值方法的推广能力具有有效性。另外从表 2 中可以看出, 能量函数评价准则不同于 R^2 等误差评价函数, 单一的能量函数没有确定的意义; 能量函数只有在比较的过程中才有意义, 在比较过程中能量函数越小, 则推广能力越强。

3 能量函数的推广

3.1 高维能量函数的推导

从一维能量函数归一化后的表达式 $v_\xi = \int_0^l (\frac{1}{\rho})^2 dl$ 可知, 能量函数的本质是曲率的曲线积分。为此下面作以下推广。

定义 2 高维问题的能量函数 (High-dimensional Energy Function) 为插值代理模型的

曲率平方对高维曲面的积分。

$$v_\xi = \int_{\sigma} \left(\frac{1}{\rho}\right)^2 d\sigma = \int_{\sigma} \left[\frac{\sum_{n \in N} f''_{nn} + \sum_{n, m \in N, n \neq m} 2f''_{nm}}{(1 + \sum_{n \in N} f'^2_n)^{\frac{3}{2}}} \right]^2 d\sigma \quad (20)$$

其中, σ 为高维曲面, n 为变量, N 为变量数量。以二维情况为例:

$$v_\xi = \int_0^s \left(\frac{1}{\rho}\right)^2 ds = \iint_s \left[\frac{f''}{(1 + f'^2)^{\frac{3}{2}}} \right]^2 (1 + f'^2)^{\frac{1}{2}} dx dy \quad (21)$$

进一步可以化为

$$v_\xi = \iint_s \left[\frac{f''_{xx} + f''_{yy} + 2f''_{xy}}{(1 + f'^2_x + f'^2_y)^{\frac{3}{2}}} \right]^2 (1 + f'^2_x + f'^2_y)^{\frac{1}{2}} dx dy = \iint_s \frac{(f''_{xx} + f''_{yy} + 2f''_{xy})^2}{(1 + f'^2_x + f'^2_y)^{\frac{5}{2}}} dx dy \quad (22)$$

该二维问题的数值计算有一阶偏导数、二阶偏导数、二阶交叉偏导数等, 其中一阶和二阶偏导数的数值计算与一维情况相同。下面介绍二阶交叉偏导数的数值计算过程:

$$\begin{aligned}
 f''_{xy}(x,y) &= \frac{\partial f'_x(x,y)}{\partial x} = \frac{f'_x(x,y+dy) - f'_x(x,y)}{dy} \\
 &= \frac{\partial f'_y(x,y)}{\partial x} = \frac{f'_y(x+dx,y) - f'_y(x,y)}{dx}
 \end{aligned}
 \tag{23}$$

为了验证能量函数对评价高维问题的推广能力的有效性,下面以二维能量函数为例,采用二维测试函数进行测试。

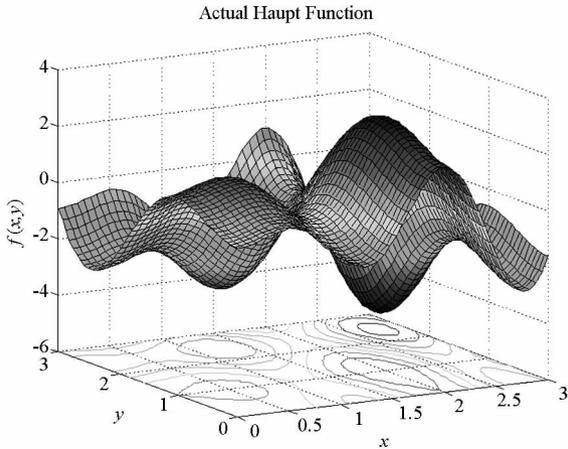
3.2 二维能量函数测试

测试函数 2: Haupt 函数, Haupt 函数属于高度非线性函数,且有多个极点,其函数形式如下:

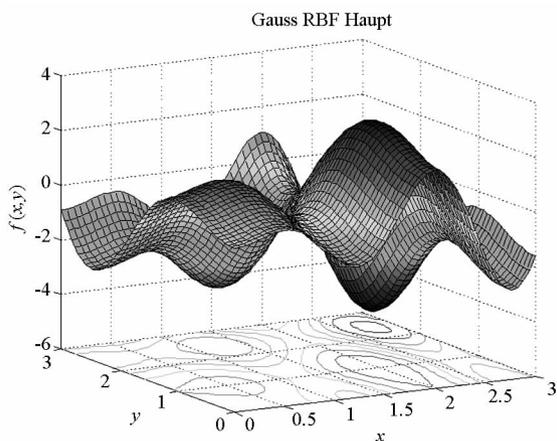
$$\begin{aligned}
 y(x_1, x_2) &= x_1 \sin(4x_1) + 1.1x_2 \sin(2x_2), \\
 x_1, x_2 &\in [0, 3]
 \end{aligned}
 \tag{24}$$

其函数图像如图 3(a) 所示。

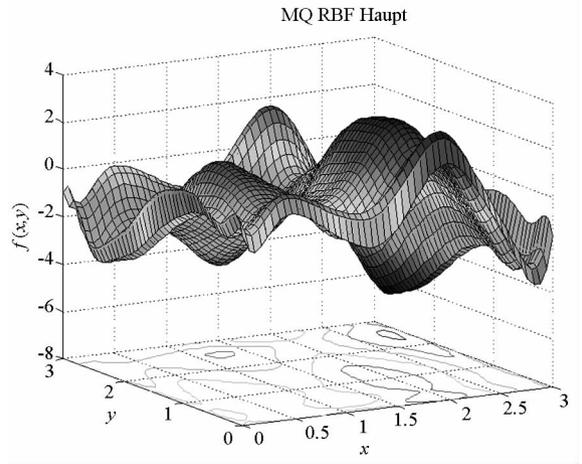
下面分别采用上一节中的基于不同插值基函数的 RBF 模型和不同相关函数的 Kriging 模型,均匀采样 $10 \times 10 = 100$ 个样本点,得到插值效果如图 3(b) ~ 图 3(d) 所示。



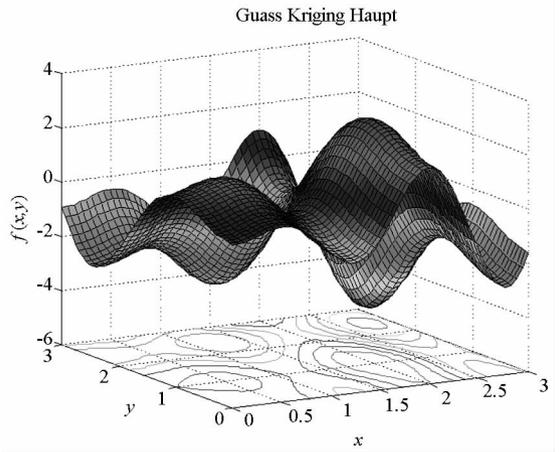
(a) Haupt 函数真实图形



(b) Haupt 函数 Gauss RBF 插值图形



(c) Haupt 函数 MQ RBF 插值图形



(d) Haupt 函数 Gauss Kriging 插值图形

图 3 二维函数插值效果图

Fig.3 Function test results of two-dimensional surrogate models

分别计算以上各种插值函数的能量函数。为了验证各种代理模型的推广能力,下面同样采用增加验证样本点方法对插值效果进行校验。为了使验证的可信度更高,这里采样大量验证样本点:均匀采样 50×50 个验证样本点,结果如表 3 所示。

从表 3 可以看出,采用高斯型 Kriging 模型,无论是均方根误差、最大值误差,还是误差复相关系数,都较优。从能量函数也可以看出:高斯型 Kriging 能量相对更小。再从两个插值基函数所得的插值效果图与原函数图形相比,也可以看出采用高斯型 Kriging 模型对原函数的近似效果较好。为此可以得出:二维能量函数评价二维插值问题的推广能力的方法也具有有效性。

表 3 验证样本点方法的测试误差和能量函数

Tab.3 The error evaluates functions and the energy functions of two-dimensional surrogate models

函数	代理模型	Energy	Ave_er	RMSE	R ²
Fun2	高斯 RBF	104. 6829	0. 0061	0. 0085	1. 0000
	MQ 型 RBF	221. 5430	0. 3367	0. 5189	0. 9173
	高斯 Kriging	103. 7707	0. 0020	0. 0039	1. 0000
	倒数平方 Kriging	116. 7325	0. 0078	0. 0137	0. 9999

4 结束语

本文从统计学习理论的推广能力的界理论,分析了影响插值型代理模型的推广能力的主要因素,通过评价函数的振荡剧烈特性来评价插值型代理模型的推广能力。从一维物理问题的能量归一化得到一维问题的能量函数形式,再基于对该能量函数的特性分析,对其作高维推广,分别就一维和二维问题的能量函数采用测试函数进行测试,并采样足够样本点验证能量函数的有效性。测试结果表明,能量函数在评价插值代理模型的推广能力上是有效的。采用能量函数方法测试插值问题的推广能力,其最大的优点在于不需要增加验证样本点,只需要基于现有样本点构造插值代理模型,并计算能量函数即可。这种方法对于采样代价相当巨大的高精度学科分析模型,具有显著的优势。

参考文献:

[1] Forrester A I J, Keane A J. Recent Advances in Surrogate-based Optimization [J]. Progress in Aerospace Sciences, 2009, 45 (1): 50 - 79.

[2] Paiva R M, Carvalho A R D, Crawford C, et al. Comparison of Surrogate Models in a Multidisciplinary Optimization Framework for Wing Design [J]. AIAA Journal, 2010, 48 (5): 995 - 1006.

[3] Corman J A, German B J. A Comparison of Metamodeling Techniques for Engine Cycle Design Data [C]//AIAA, Fort Worth, Texas, 2010.

[4] Fang H, Wang Q, Horstemeyer M F. Model Accuracy Evaluation of Compactly Supported RBFs [C]//47th AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Con, Newport, Rhode Island, 2006.

[5] Vapnik V N. The Nature of Statistical Learning Theory [M]. New York: Springer-Verlag, 1995: 69 - 85.

[6] Vapnik V N. Statistical Learning Theory [M]. New York: Wiley Press, 1998: 19 - 55.

[7] Long T, Liu L, Deng Q. A Comparison of Surrogate Modeling Techniques Used in Multidisciplinary Design Optimization [C]//The 8th World Congress on Structural and Multidisciplinary Optimization. Lisbon, Portugal, 2009.

[8] 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.

[9] Viana F A C, Picheny V, Haftka R T. Using Cross Validation to Design Conservative Surrogates [J]. AIAA Journal, 2010, 48 (10): 2286 - 2298.