

控制与决策

Control and Decision

基于贝叶斯支持向量机的多响应序贯自适应采样方法

王彦琳, 程志君, 王子辰

引用本文:

王彦琳, 程志君, 王子辰. 基于贝叶斯支持向量机的多响应序贯自适应采样方法[J]. 控制与决策, 2025, 40(3): 927-936.

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2024.0563>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于弱关联的自适应高维多目标进化算法

A weak association-based adaptive evolutionary algorithm for manyobjective optimization
控制与决策. 2021, 36(8): 1804-1814 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.1723>

混合柯西变异和均匀分布的蝗虫优化算法

Hybrid Cauchy mutation and uniform distribution of grasshopper optimization algorithm
控制与决策. 2021, 36(7): 1558-1568 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.1609>

基于数据驱动的浓密-压滤过程协调优化控制

Data driven coordinated optimization control of thickening-filter process
控制与决策. 2021, 36(5): 1095-1100 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2019.1151>

基于高斯混合模型聚类的非均匀采样系统的多模型切换辨识

[Multi-model switching identification for non-uniformly sampled systems based on Gaussian mixture model clustering](https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2020.0671)
控制与决策. 2021, 36(12): 2946-2954 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2020.0671>

基于改进蚁群算法的多值属性系统故障诊断策略

Fault diagnosis strategy of multi-valued attribute system based on improved ant colony algorithm
控制与决策. 2021, 36(11): 2722-2728 <https://doi.org/10.13195/j.kzyjc.2020.0529>

基于贝叶斯支持向量机的多响应序贯自适应采样方法

王彦琳, 程志君[†], 王子辰

(国防科技大学 系统工程学院, 长沙 410073)

摘要: 为了解决多响应建模中样本点选取问题, 支撑高效准确地建立多个代理模型, 提出一种基于贝叶斯支持向量机的修正多响应期望改进 (MR-MEIGF) 采样准则. 首先, 通过贝叶斯支持向量机模型计算候选点的梯度, 构建邻域, 得到基于邻域梯度投影的局部开发准则; 然后, 将模型得到的样本点预测方差作为全局探索准则, 将两者结合得到单个响应的混合采样准则; 接着, 通过局部指标量化每个响应的重要度, 进一步得到兼顾多个响应模型精度的 MR-MEIGF 采样准则, 从而实现多个响应的综合优化; 最后, 根据 MR-MEIGF 准则在候选池中选择新添加样本点, 使用 3 个二维算例以及 3 个六维算例分别组合为多响应问题, 与序贯空间填充方法、一次性空间填充方法以及其他多响应自适应采样方法进行对比, 验证所提出采样方法的有效性, 并在六维算例上将贝叶斯支持向量机模型与 Kriging 模型进行性能比较.

关键词: 代理模型; 多响应; 贝叶斯支持向量机; 试验设计; 采样准则; 自适应

中图分类号: TB114 文献标志码: A

DOI: 10.13195/j.kzyjc.2024.0563

引用格式: 王彦琳, 程志君, 王子辰. 基于贝叶斯支持向量机的多响应序贯自适应采样方法 [J]. 控制与决策, 2025, 40(3): 927-936.

A multi-response sequential adaptive sampling method based on Bayesian support vector machine

WANG Yan-lin, CHENG Zhi-jun[†], WANG Zi-chen

(College of Systems Engineering, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: To solve the sampling problem in multi-response modeling and support the efficient and accurate establishment of multiple agent models, a Bayesian support vector machine-based modified multi-response modified expected improvement for global fit (MR-MEIGF) sampling criterion is proposed. First, the gradient of candidate samples is calculated by the Bayesian support vector machine model, and the neighborhood is constructed to obtain the local exploitation criterion based on the projection of the gradient of the neighborhood. The predicted variance of the sample points obtained by the model is used as the global exploration criterion, and the two are combined to obtain the hybrid sampling criterion for individual responses. And then, through the local index, the importance of each response is quantified, and the MR-MEIGF sampling criterion that takes into account the accuracy of multiple response models is further obtained so as to realize the comprehensive optimization of multiple responses. Based on the MR-MEIGF criterion, the newly added sample points are selected in the candidate pool. Three 2-dimensional and three 6-dimensional cases are combined to form a multi-response problem, and compared with the sequential space-filling method, the traditional one-time space-filling method as well as other multi-response adaptive sampling methods, to validate the effectiveness of the proposed sampling method, and compare the performance of the Bayesian support vector machine model with the Kriging model on the 6-dimensional case.

Keywords: surrogate models; multiple responses; Bayesian support vector machine; design of experiments; sampling criteria; adaptive

0 引言

代理模型可构建黑盒模型输入与输出间的映射关系, 且不受限于黑盒内部结构和原理^[1], 在工程优

化设计中可替代复杂且费时的仿真模型, 降低计算开销, 在空气动力学^[2]、地球科学^[3]等领域得到了广泛应用. 在构建代理模型的过程中, 由于实验成本的

收稿日期: 2024-05-12; 录用日期: 2024-09-14.

基金项目: 国家自然科学基金项目 (72171231).

责任编辑: 李登峰.

[†]通信作者. E-mail: chengzhijun@nudt.edu.cn.

限制,为了在有限样本量的限制下提升模型精度,研究者一般使用序贯自适应采样方法,根据采样准则和上一步样本点信息,迭代添加新的样本点^[4].采样准则一般包括局部开发准则和全局探索准则.

局部开发准则包括基于梯度的准则、基于委员会查询(QBC)的准则和基于交叉验证的准则^[5].在梯度快速变化的区域,其代理模型常常是不准确的^[6].Crombecq等^[7]提出了基于梯度信息的局部非线性度表征方法.基于委员会查询的准则首先被用于机器学习中的分类问题^[5],这种方法通过创建一个拥有多个模型的委员会进行预测,委员会分歧最大之处是采样时需要重点关注的.交叉验证中的留一交叉验证(LOOCV)误差也可作为局部开发的量化表征^[8].而全局探索通常由距离准则^[3,9]或几何信息,如Voronoi^[5]描述,旨在描述样本点的分布密度情况,该准则不依赖模型.此外,很大一部分全局探索基于Kriging模型的预测方差展开^[5].

通过将局部开发准则与全局探索准则相结合,可得到混合采样准则.Crombecq等^[7]提出了基于点密度和局部非线性度的自适应采样方案,使用Voronoi区域作为全局度量,并利用梯度信息计算样本点非线性;Lämmle等^[10]提出了一种基于Kriging模型的样本预测方差和基于泰勒展开的非线性度的序贯自适应采样方法;Garbo等^[9]则提出了一种与模型无关的最近邻自适应采样方法,利用样本点的距离信息进行全局探索,使用Pareto前沿对全局和局部准则进行综合.

上述序贯自适应采样方法均是针对单个响应的问题设计的,但是在工程应用中,单个复杂系统中往往同时存在多个响应.如在高炉炼铁过程中,需要对硅含量和铁水温度进行建模,以此衡量铁水质量的优劣^[11],精馏塔模型中精馏塔塔顶和塔釜的甲醇浓度均作为建模的对象^[12].在多响应自适应采样问题中,不同响应的局部开发和全局探索需求可能存在冲突,采样准则需要重点关注的采样区域也会不同,需要进行综合优化,现有单响应自适应采样方法不适用于解决此类复杂问题.因此,为了权衡多个响应模型的需求,Liu等^[13]使用留一交叉验证误差计算得到的多个响应的不同权重,对原有的基于LOOCV和Voronoi的单响应序贯实验设计方法进行了改进;Zhai等^[14]使用熵法和TOPSIS排序方法对权重进行分配,解决了多响应条件下的指标计算问题;Ma等^[15]采用对多个指标求平均的方式,对多个响应的采样准则进行综合.上述方法虽然在一定程度上兼顾了多个响应模型的精度,但是,基于LOOCV的权重确

定方法计算开销过大,熵权法等则不考虑模型特性,无法在加点过程中根据模型情况对权重进行自适应调整.

综上,为了解决多响应建模中的样本点选取问题,本文提出一种基于贝叶斯支持向量机的修正多响应期望改进(MR-MEIGF)采样准则.具体而言,使用预测方差作为全局指标,使用候选样本点相对于邻居样本的梯度投影作为局部指标,并通过确定响应重要度来权衡多个响应的需求.

1 贝叶斯支持向量机模型以及多响应自适应采样框架

Kriging模型由于其方差预测的特性,在自适应采样中得到了广泛应用.支持向量机模型基于结构风险最小化原则进行模型构建,可控制模型复杂度,有效防止过拟合,在处理复杂高维度问题上具有优势^[16].因此,一些学者尝试使得支持向量机在进行预测时得到预测方差,即贝叶斯支持向量机^[17].

1.1 贝叶斯支持向量机

为了建立贝叶斯支持向量机模型,响应与因子间的映射关系^[17]可表示为

$$y_j = \tilde{g}(\mathbf{x}_j) + \delta_j, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (1)$$

其中: $\mathbf{x}_j \in \mathcal{R}^d$; $y_j \in \mathcal{R}$; N 为训练集样本点个数; $\delta_j \in \mathcal{R}$ 为独立同分布的随机误差; $\tilde{g}(\mathbf{x}_j)$ 为支持向量机回归模型,是一个0均值高斯随机过程.在高斯过程的假设条件下,可得到输出 $\mathbf{G} = \{\tilde{g}(\mathbf{x}_1), \tilde{g}(\mathbf{x}_2), \dots, \tilde{g}(\mathbf{x}_N)\}^T$ 的先验.

根据噪声的分布假设得到给定训练集样本时样本输出的似然函数,进而得到输出 \mathbf{G} 的后验.最大化后验分布可得到目标函数为

$$\min_{\mathbf{G}} \sum_{j=1}^N Cl(y_j - \tilde{g}(\mathbf{x}_j)) + \frac{1}{2} \mathbf{G}^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{G}. \quad (2)$$

代入平方损失函数 $l(\delta) = \frac{1}{2} \delta^2$, 根据极大似然估计求解,得到预测的均值和方差分别为

$$\mu(\mathbf{x}) = \mathbf{k}(\mathbf{x}, \mathbf{X}) \mathbf{k}(\mathbf{X}, \mathbf{X})^{-1} \hat{\mathbf{G}} = \mathbf{k}(\mathbf{x}, \mathbf{X}) (\mathbf{K} + \mathbf{I}/C)^{-1} \mathbf{Y}, \quad (3)$$

$$\Sigma^2(\mathbf{x}) = \mathbf{k}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - \mathbf{k}(\mathbf{x}, \mathbf{X}) \mathbf{k}(\mathbf{X}, \mathbf{X})^{-1} \mathbf{k}(\mathbf{X}, \mathbf{x}), \quad (4)$$

其中需要优化的参数仅包括 θ 和 C , 具体公式推导以及计算方法见文献[17].

1.2 多响应序贯自适应采样框架

序贯自适应采样通常需要兼顾局部开发和全局探索,这是两种相互冲突的准则,但是,对于响应模型的构建均是不可或缺的.而在多响应序贯自适应

采样中, 由于存在多个响应, 多个响应的全局和局部采样需求可能存在冲突, 需要同时考虑多个响应的采样需求, 以保证多个响应模型的精度.

图1为 $G_1(x)$ 和 $G_2(x)$ 两个响应模型. 如图1所示: 提供3个点作为候选样本点, 假设3个点的全局准则量化相同, 即仅需要考虑局部开发准则. 此时, 若仅考虑响应 $G_1(x)$ 的模型精度, 则样本点选择在蓝

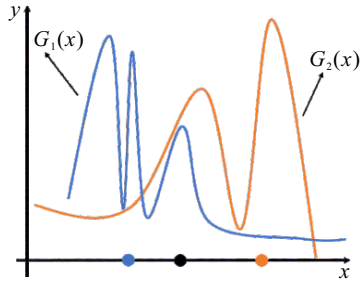


图1 具有两个响应的情景

色圆点位置更合适, 其附近响应变化更显著; 而若仅考虑函数 $G_2(x)$ 的模型精度, 则样本点选择在黄色圆点位置更合适; 若同时考虑两个响应的模型精度, 则样本点可能会选择在黑色圆点处, 综合而言, 其附近两个响应的变化均较为显著.

为了权衡单个响应的局部开发和全局探索, 并同时兼顾多个响应的精度, 针对同时对多个响应进行建模时的样本点选取问题, 本文提出了基于贝叶斯支持向量机的多响应序贯自适应采样框架. 该方法使用贝叶斯支持向量机对每个响应单独建立响应模型. 其中: 初始样本点为 $\mathbf{x}_{initial}$, 样本池为 \mathbf{S} , 每次迭代时添加的样本点为 \mathbf{x}_{new} , 最终得到的样本点集合为 \mathbf{X} . 对样本池中的每个样本点计算 MR-MEIGF 准则值, 根据每轮排序结果选择新样本. 具体流程如图2所示.

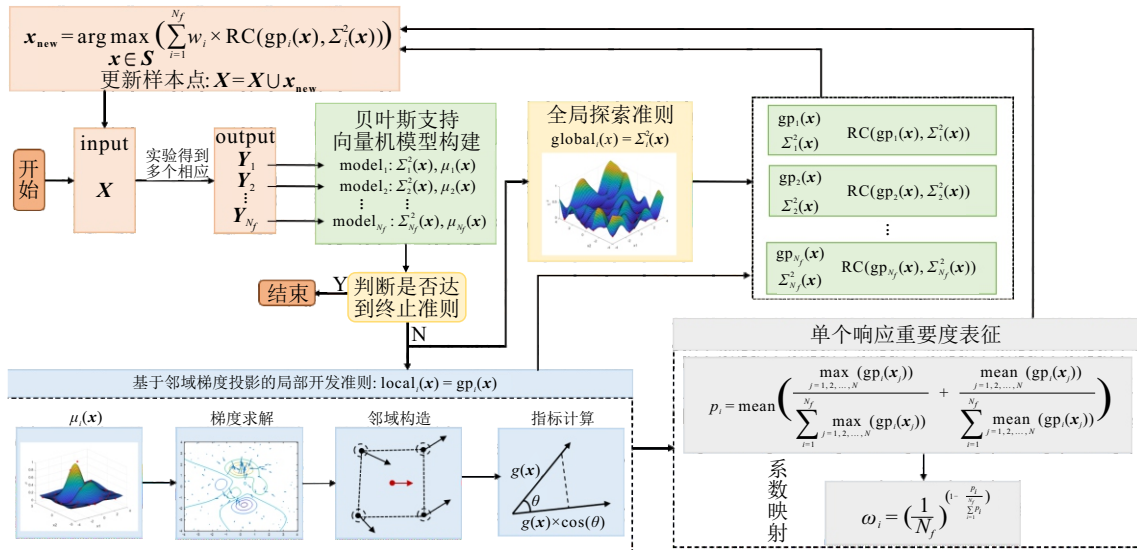


图2 多响应采样准则计算框架

step 1: 使用实验设计方法产生初始样本点 $\mathbf{x}_{initial}$. 本文使用拉丁超立方设计生成初始样本点, 初始样本点个数为5倍的样本空间维度^[18].

step 2: 通过仿真得到当前实验方案 \mathbf{X} 的多个响应值 $[\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2, \dots, \mathbf{Y}_{N_f}]$.

step 3: 使用贝叶斯支持向量机对 N_f 个响应单独建立响应模型 $model_i (i = 1, 2, \dots, N_f)$. 根据响应模型, 可得到候选样本点针对第 i 个响应的预测均值 μ_i 以及方差 Σ_i^2 .

step 4: 判断是否达到终止准则. 若达到终止准则, 则停止采样; 否则, 进入 step 5.

step 5: 基于邻域梯度投影的局部开发准则计算. 梯度投影的计算包括梯度求解、邻域构造以及指标计算3个部分.

step 6: 单个响应混合指标计算. 使用模型构建

得到样本池 \mathbf{S} 中样本点的方差, 结合 step 5 中得到的局部开发准则, 得到综合局部开发和全局探索的混合指标 $RC(gp_i(\mathbf{x}), \Sigma_i^2(\mathbf{x}))$, 其中 RC 表示一种全局和局部的综合方法, 包括乘法和加法两种.

step 7: 计算单个响应的重要度 ω_i . 结合局部指标的最大值和均值得到重要度系数, 进一步得到响应重要度.

step 8: 根据 MR-MEIGF 采样准则得到综合得分函数, 根据综合得分排序选择新样本点 \mathbf{x}_{new} .

2 多响应序贯自适应采样方法

2.1 基于邻域梯度投影的局部开发准则

邻域包含多个邻居, 为了更好地衡量局部变化情况, 有效指导局部开发, 邻域的选择需要兼顾信息性和多样性, 一方面, 邻域需要反映样本点周围的局部特征, 因此不能离样本点过远; 另一方面, 邻域需

要保证充分体现样本点周围的特征,因此需要均匀分布在样本点周围.邻域的构造参考文献 [19] 完成.

在得到样本点 \mathbf{x} 的邻居集合 $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{2d}\}$ 的基础上,将样本点梯度向量与邻域梯度向量相结合,得到局部开发准则为

$$\begin{aligned} gp(\mathbf{x}) = & \left\| \mathbf{g}(\mathbf{x}) \cdot \left(1 - \sum_{k=1}^{2d} \cos(\theta(\mathbf{x}_k)) \right) \right\| = \\ & \left\| \mathbf{g}(\mathbf{x}) - \sum_{k=1}^{2d} \frac{\langle \mathbf{g}(\mathbf{x}_k), \mathbf{g}(\mathbf{x}) \rangle}{\langle \mathbf{g}(\mathbf{x}_k), \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) \rangle} \mathbf{g}(\mathbf{x}_k) \right\|. \end{aligned} \quad (5)$$

其中: \mathbf{x} 为样本池中的样本点; $\theta(\mathbf{x}_k)$ 为当前样本点 \mathbf{x} 的梯度与邻居 \mathbf{x}_k 梯度间的夹角; \mathbf{x}_k 为当前样本点的第 k 个邻居; d 为样本维度, $2d$ 即为邻居个数. 指标值的大小与 $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ 和 θ_k 的大小有关. $\|\mathbf{g}(\mathbf{x})\|$ 越大, 指标值越大, 且由于 θ_k 的范围为 $[0, \pi]$, 夹角越大, $\cos(\theta_k)$ 值越小, 投影指标值越大. 换言之, 若在一个区域中, 梯度本身较大, 且梯度方向相较于周围邻居梯度方向快速变化, 表示局部区域的变化越大, 越难以拟合.

对于贝叶斯支持向量机这种已知表达式的模型, 梯度可通过有限差分的方法近似得到. 对于该模型, 通过对预测均值进行微分得到梯度表达式为

$$\begin{aligned} g(\mathbf{x}) = & \frac{\partial k(\mathbf{x}, \mathbf{X})(\mathbf{K} + \mathbf{I}/C)^{-1} \mathbf{Y}}{\partial \mathbf{x}} = \\ & \frac{\partial k(\mathbf{x}, \mathbf{X})}{\partial \mathbf{x}} (\mathbf{K} + \mathbf{I}/C)^{-1} \mathbf{Y}. \end{aligned} \quad (6)$$

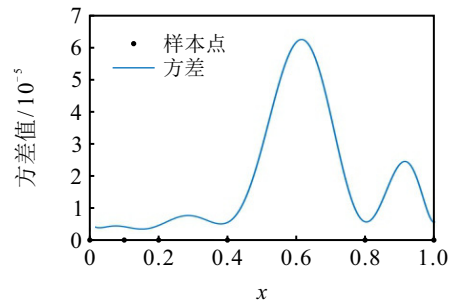
其中: $\frac{\partial k(\mathbf{x}, \mathbf{X})}{\partial \mathbf{x}}$ 为相关向量的梯度矩阵, 即

$$\begin{aligned} \frac{\partial k(\mathbf{x}, \mathbf{X})}{\partial \mathbf{x}} = & \begin{bmatrix} \frac{\partial \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1; \theta)}{\partial x_1} & \frac{\partial \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2; \theta)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1; \theta)}{\partial x_2} & \frac{\partial \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2; \theta)}{\partial x_2} \\ \vdots & \vdots \\ \frac{\partial \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1; \theta)}{\partial x_d} & \frac{\partial \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2; \theta)}{\partial x_d} \end{bmatrix} \rightarrow \\ & \left[\begin{array}{c} \dots \\ \frac{\partial \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_N; \theta)}{\partial x_1} \\ \dots \\ \frac{\partial \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_N; \theta)}{\partial x_2} \\ \dots \\ \vdots \\ \dots \\ \frac{\partial \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_N; \theta)}{\partial x_d} \end{array} \right]^T, \end{aligned} \quad (7)$$

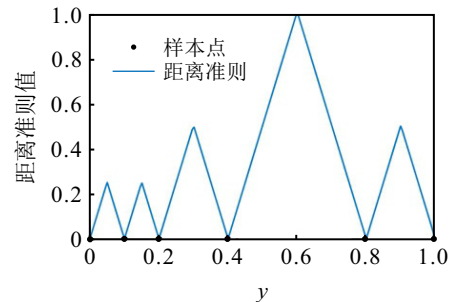
这里 $\varphi(\mathbf{x})$ 为可分离的高斯核函数.

2.2 基于预测方差的全局探索准则

对于全局探索, 常使用的是基于距离的准则. 如图 3 所示: 以函数 $x^2 \times \sin(|x|)$ 为例, 在区间 $[0, 1]$ 上随机选择 6 个样本点作为训练集, 分别使用贝叶斯支持向量机计算测试集方差以及 Maxmin 距离准则计算指标值. 由图 3 可见: 距离准则较好地刻画了空间中样本点的密度, 确保样本点可添加至样本较为稀疏的区域, 而方差 $\Sigma^2(\mathbf{x})$ 为距离与自相关核函数的结合, 与距离准则有较大相关性, 也较好地反映了样本点的空间分布特征.



(a) 方差结果



(b) 距离准则

图3 全局探索准则

从 $\Sigma^2(\mathbf{x})$ 的表达式可以看出, 其大小主要与

$\mathbf{k}(\mathbf{x}, \mathbf{X})$ 有关. 而 $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \prod_{j=1}^d \exp(-\theta_j(x_j - x'_j)^2)$, 即协方差大小与距离有关, 距离越近, 协方差越大. 假设当前样本点为 \mathbf{x} , 若当前样本点距训练集中样本 \mathbf{X}_i 较近, 则对应 $\mathbf{k}(\mathbf{x}, \mathbf{X}_i)$ 较大. $\mathbf{k}(\mathbf{X}, \mathbf{X})^{-1}$ 则为训练集的自相关协方差的逆矩阵, 是一个 $N \times N$ 大小的矩阵, 其系数值大小同样与距离相关, 若 \mathbf{X}_i 与其他样本点较远, 则此时对应协方差值较小, 逆矩阵对应值较大. 综上, 当训练集中存在距其他样本点较远的点时, 距该样本点较近的点的方差较大.

2.3 基于响应重要度表征的 MR-MEIGF 采样准则

2.3.1 响应重要度表征

对于存在多个响应的自适应采样, 由于是对每个响应单独构建贝叶斯支持向量机模型, 每个响应的拟合难易程度不同, 需要构建重要度指标, 对不同响应的拟合难易程度进行衡量. 对于数值的统计方

式, 包括中位数、平均值、最大值、最小值, 不同的统计指标从不同方面反映数值的特征. 鉴于此, 本文对指标最大值和平均值进行综合来确定响应的重要度. 假设根据模型计算得到的已有样本点的局部指标可表示为 $\{gp_i(x_j) | i = 1, 2, \dots, N_f, j = 1, 2, \dots, NS\}$. 其中: N_f 为响应个数, NS 为 S 中样本点个数, 则响应重要度系数的计算方式为

$$p_i = \frac{1}{2} \left(\frac{\max_{j=1,2,\dots,NS} (gp_i(x_j))}{\sum_{i=1}^{N_f} \max_{j=1,2,\dots,NS} (gp_i(x_j))} + \frac{\text{mean}_{j=1,2,\dots,NS} (gp_i(x_j))}{\sum_{i=1}^{N_f} \text{mean}_{j=1,2,\dots,NS} (gp_i(x_j))} \right). \quad (8)$$

这里: $\max_{j=1,2,\dots,NS} (gp_i(x_j))$ 为针对第 i 个响应的指标的最大值, $\text{mean}_{j=1,2,\dots,NS} (gp_i(x_j))$ 则为针对第 i 个响应的指标的均值. 为了缩小不同响应间的重要度差异, 防止仅关注单一响应的情况出现, 定制一种系数映射机制. 将原有系数映射至指数空间, 以保证重要度的连续性和趋势不变性, 映射关系式为

$$\omega_i = \left(\frac{1}{N_f} \right)^{\left(\frac{1 - \frac{p_i}{\sum_{i=1}^{N_f} p_i}}{N_f} \right)}. \quad (9)$$

其中: N_f 为响应个数; ω_i 为响应重要度, 需进行归一化.

2.3.2 MR-MEIGF 采样准则

Lam 等^[20] 使用改进的 EI (expected improvement) 准则, 用于全局模型的构建, 得到了用于全局拟合的期望改进 (EIGF) 准则. 本文对 EIGF 准则进行改进, 使其可以对多个响应进行组合优化. 修正多响应期望改进 (MR-MEIGF) 采样准则的表达式为

$$\text{MR-MEIGF}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N_f} (w_i \times \text{MEIGF}_i(\mathbf{x})), \quad (10)$$

$$\mathbf{x}_{\text{new}} = \arg \max_{\mathbf{x} \in S} (\text{MR-MEIGF}(\mathbf{x})). \quad (11)$$

其中: w_i 为响应的重要度表征; $\text{MEIGF}(\mathbf{x})$ 为针对单响应问题的修正期望改进 (MEIGF) 采样准则, 有

$$\text{MEIGF}(\mathbf{x}) = \text{RC}(\text{gp}(\mathbf{x}), \Sigma^2(\mathbf{x})). \quad (12)$$

这里: $\text{gp}(\mathbf{x})$ 和 $\Sigma^2(\mathbf{x})$ 分别为局部开发准则和全局探索准则; RC 表征局部指标和全局指标的综合方式, 包括乘法和加法两种. 对应的 MR-MEIGF(\mathbf{x}) 可分别表示为

$$\sum_{i=1}^{N_f} \omega_i \left(\frac{\Sigma_i^2(\mathbf{x})}{\max(\Sigma_i^2(\mathbf{x}))} \times \frac{\text{gp}_i(\mathbf{x})}{\max(\text{gp}_i(\mathbf{x}))} \right), \quad (13)$$

$$\sum_{i=1}^{N_f} \omega_i \left(\frac{\Sigma_i^2(\mathbf{x})}{\max(\Sigma_i^2(\mathbf{x}))} + \frac{\text{gp}_i(\mathbf{x})}{\max(\text{gp}_i(\mathbf{x}))} \right). \quad (14)$$

其中: ω_i 为第 i 个响应的重要度, $\Sigma_i^2(\mathbf{x})$ 和 $\text{gp}_i(\mathbf{x})$ 分别为样本对应第 i 个响应的方差和梯度投影. 根据排序结果从候选样本池中选择新添加的样本点.

3 算例分析

为了验证所提出方法的有效性, 同时对基于乘法的准则和基于加法的准则的适用性进一步讨论, 本文采用 3 个二维函数和 3 个六维函数共组合为 6 个多响应问题对所提出方法进行验证. 针对这 6 个多响应问题, 选择一次性空间填充方法、序贯空间填充方法以及多响应自适应采样方法 mCV-Voronoi^[13] 进行对比来验证所提出自适应采样方法的有效性. 其中: 一次性空间填充方法选择拉丁超立方设计 (LHS), 使用 Matlab 中的 lhsdesign 函数生成; 序贯空间填充方法根据 Maxmin 距离准则进行样本点的序贯添加. 在六维算例中, 使用与贝叶斯支持向量机类似的 Kriging, 在不同实验设计条件下进行精度对比.

3.1 实验设置

设置收敛准则为误差指标阈值, 统计不同采样方法达到相同阈值所需的样本点个数. 设备配置为 12th Gen Intel (R) Core (TM), i5-1240 P, 内存为 16 GB. 均选择 50 000 个样本点作为测试集. 生成的候选池随机样本点个数为样本维度的 2 000 倍. 为了排除随机性的影响, 对所有方法均进行 20 次重复实验. 进行模型构建的贝叶斯支持向量机的初始参数值 C 和 θ 分别为 100 和 1, 寻优范围分别为 $[1, 10^6]$, $[10^{-3}, 10^3]$, 核函数为高斯核函数. Kriging 模型选择高斯核函数和 0 阶多项式展开, 核函数参数 θ 初始值为 1, 寻优范围为 $[10^{-3}, 10^3]$, 测试函数选择 3 个具有不同特征的二维函数以及 3 个六维函数. 具体函数信息如表 1 所示.

表1 测试函数信息

函数编号	函数名称	维度	范围
F1	Peaks ^[17]	2	[-4, 4]
F2	Beale	2	[-4, 4]
F3	Shubert ^[6]	2	[-2, 2]
F4	Hartman ^[18]	6	[0, 1]
F5	Ackley ^[10]	6	[-2, 2]
F6	Griewank ^[9]	6	[0, 4]

本文使用误差指标为正规化均方根误差 (NRMSE), 计算方式为

$$\text{NRMSE} = \frac{\sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\tilde{y}_j - y_j)^2}}{\max(\mathbf{y}) - \min(\mathbf{y})}. \quad (15)$$

其中: n 为测试集个数, y_j 为测试集的真实响应, \tilde{y}_j 为

预测结果. NRMSE 指标值越小, 模型精度越高, 后文中的 NRMSE 为多个响应指标的均值.

3.2 二维多响应算例

对二维多响应问题进行研究, 表 2 为二维多响应数值算例结果. 表 2 中: 每行为使用对应采样方法, 达到相同精度所需要的样本点数, 每组的最佳结果用粗体表示.

表2 二维多响应数值算例结果

函数编号	NRMSE	MR-MEIGF(\times)	MR-MEIGF(+)	mCV-Voronoi	序贯空间填充	LHS
F1 + F2 + F3	0.05	62	69	67	63	73
	0.04	82	85	81	91	90
	0.03	92	92	99	117	117
	0.02	114	117	124	138	>150
F1 + F3	0.05	50	51	51	99	89
	0.04	56	81	59	120	109
	0.03	70	102	73	135	138
	0.02	94	136	110	147	>150
F2 + F3	0.05	60	59	54	80	78
	0.04	74	79	74	117	99
	0.03	91	101	93	134	128
	0.02	108	118	135	146	>150

由表 2 可见: 3 种自适应采样方法优于其他空间填充方法, 且在大多数情况下, 本文采用的两种不同自适应采样方法表现出优于 mCV-Voronoi 的性质. 对于两种序贯自适应采样方法, 整体而言, 基于乘法准则的序贯自适应采样方法优势更明显.

在三响应问题中, 所提出序贯自适应采样方法同样具有优势. 而针对两种不同的序贯自适应方法, 可以看到在采样初期, 3 种自适应采样方法采样结果大致相当, 但是在采样后期, MR-MEIGF 方法得到的模型精度提升更快, 可在更少样本点的条件下达到指标阈值. 对应时间结果如表 3 所示, 单位为 s. 其中: 一次性空间填充方法 LHS 可直接生成, 不存在

表3 二维多响应数值算例时间结果

函数编号	NRMSE	MR-MEIGF(\times)	MR-MEIGF(+)	mCV-Voronoi
F1 + F2 + F3	0.05	56.58	67.02	75.71
	0.04	91.71	97.34	112.89
	0.03	111.81	111.81	192.25
	0.02	171.19	186.43	379.88
F1 + F3	0.05	28.54	29.44	38.33
	0.04	34.24	67.22	50.31
	0.03	50.75	118.99	76.74
	0.02	93.94	252.48	189.55
F2 + F3	0.05	38.63	37.40	42.50
	0.04	56.71	64.02	78.88
	0.03	84.89	116.23	128.89
	0.02	138.43	177.39	307.47

时间消耗. 根据表 3 的时间结果可以看出, mCV-Voronoi 在时间消耗上均高于所提出方法, 这是由于 mCV-Voronoi 需要计算每个样本的留一交叉验证误差, 其开销随着样本点的增长迅速增长.

为了更加直观地对比加点效果, 图 4 给出了使用 5 种采样方法针对 F1 + F2 + F3 组合问题的采样结果. 子图分别为 3 个函数在原始等高线上的加点情况. 由等高线可以看出: F1 函数在靠近 0 的区域具有非线性; F2 函数在 4 个角点处响应变化较快; F3 函数在全局具有非线性, 但是在因子取值较小时变化更明显.

由图 4 可见, 基于乘法和基于加法的序贯自适应采样方法均可以识别变化显著的区域. 相较于基于乘法的序贯自适应采样方法, 基于加法的采样方法空间填充性更好, 其优势在于局部和全局指标可互为补充. 而基于乘法的序贯自适应采样方法对局部区域的开发能力更强, 对于精度提升效果更为显著, 捕捉局部变化显著区域的能力更强. 对于 3 个函数, 基于乘法的自适应采样方法均在其变化显著区域进行了采样, 在 F1 函数对应的中心区域, F2 函数对应的 4 个角点区域以及 F3 函数对应的左下角区域, 基于乘法的自适应采样方法均进行了采样. mCV-Voronoi 虽然也可以识别 F1 和 F2 剧烈变化的区域, 但是对于函数 F3, 其空间填充性较弱.

进一步地, 为了验证序贯自适应方法的特性, 使用空间填充指标计算不同采样方法对剧烈变化区域的空间填充性. 自适应采样方法表现优于空间填充方法, 是因为其可以在变化剧烈区域进行更加有效的空间填充, 理论上而言, 其在这种区域的空间填充性应优于空间填充方法. 由于函数已知, 具体计算时可提取出剧烈变化区域的样本点, 计算其空间填充指标最小覆盖半径, 提取出的样本点分布如图 5 所示.

最小覆盖半径是确定一个最小 r 使得所有覆盖球的大小可将整个实验空间覆盖^[21]. 显然, r 越小, 实验方案的各点在空间各处分布越均匀, 方案 ξ_n 覆盖性越好. 定义 $\xi_n = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n]$ 覆盖样本空间 \mathcal{X} 的最小半径为

$$\min r = \inf\{r > 0 : \mathcal{X} \subset \bigcup_{i=1}^n B(\mathbf{x}_i, r)\}. \quad (16)$$

MR-MEIGF(\times), MR-MEIGF(+), mCV-Voronoi, 序贯空间填充以及 LHS 分别用 M1 ~ M5 表示, 空间填充指标计算结果如表 4 所示. 由表 4 可见: 对于 F1 函数和 F2 函数的最小覆盖半径, 均是基于乘法的 MR-MEIGF 效果更佳, mCV-Voronoi 方法在 F3 函

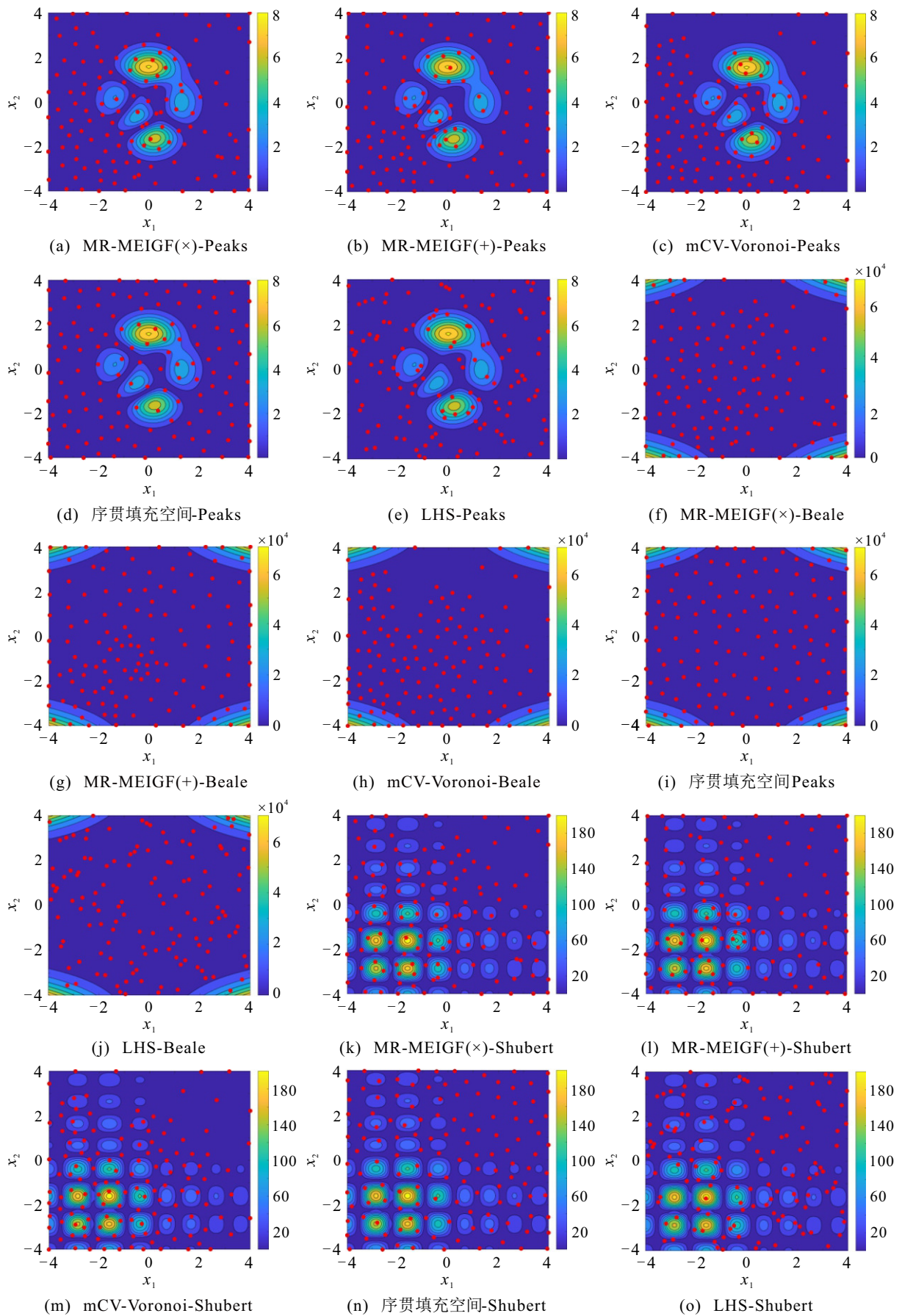


图4 各实验设计方法加点结果

数中效果更好. 综合而言, 5 种方法得到的样本点在 3 0.370 7 以及 0.409 7, 即基于乘法的采样准则效果最
 个函数上的指标均值分别为 0.340 4、0.383 7、0.396 1、 好. 由图 5 可见: mCV-Voronoi 方法对 F3 函数的局

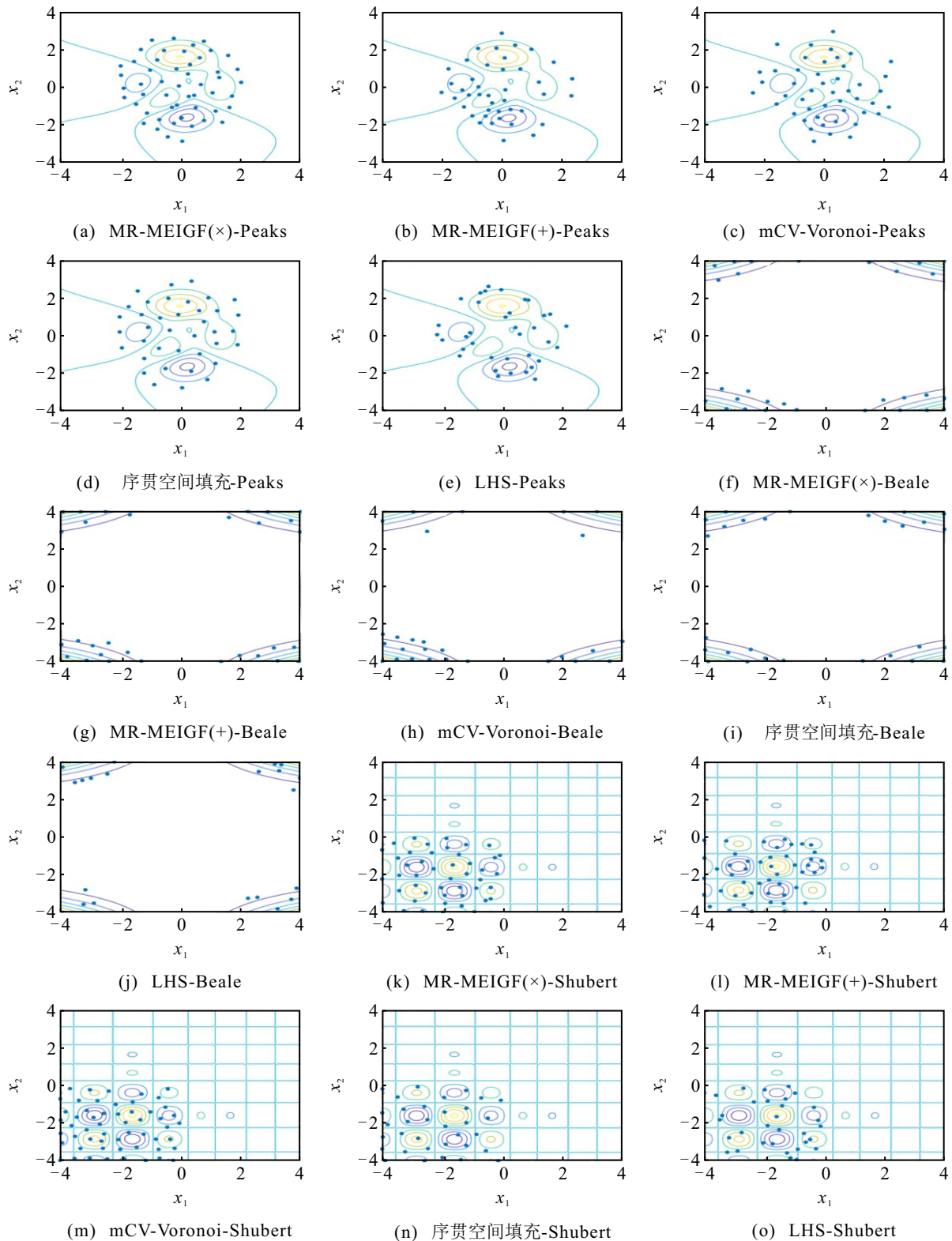


图5 函数剧烈变化区域填充效果

部开发效果最好,但是其权衡效果较弱;对于函数 F1 和 F2 的局部开发效果较差.

3.3 六维多响应算例以及与 Kriging 模型的性能对比

为了验证所提出方法在更高维问题中的有效性,使用 3 个六维函数构造多响应问题对所提出方法进行验证.构造 2 个二响应问题和 1 个三响应问题,并

在相同实验设计条件下,将贝叶斯支持向量机模型与 Kriging 模型进行性能对比.

针对六维多响应问题的误差指标计算结果如表 5 所示:粗体标记的为最优结果,分别针对贝叶斯支持向量机模型 (BSVR) 和 Kriging 模型分别标记一个最优结果.对结果进行分析,可得到如下结论.

1) 序贯自适应采样方法与其他方法的对比.与

表4 最小覆盖半径指标计算结果

函数名称	F1					F2					F3				
	M1	M2	M3	M4	M5	M1	M2	M3	M4	M5	M1	M2	M3	M4	M5
采样方法	M1	M2	M3	M4	M5	M1	M2	M3	M4	M5	M1	M2	M3	M4	M5
最小覆盖半径	0.258 4	0.329 7	0.380 9	0.271 7	0.324 2	0.564 1	0.611 1	0.647 4	0.640 4	0.643 5	0.198 7	0.210 2	0.160 0	0.200 1	0.261 3

表5 六维多响应问题中不同实验设计方式下 SVR 模型与 Kriging 模型的性能对比

函数编号	NRMSE	MR-MEIGF(×)		MR-MEIGF(+)		mCV-Voronoi		Adaptive space sampling		LHS	
		BSVR	Kriging	BSVR	Kriging	BSVR	Kriging	BSVR	Kriging	BSVR	Kriging
F4 + F5 + F6	0.07	23	51	19	60	67	50	54	84	39	64
	0.06	61	78	65	94	134	75	122	123	110	104
	0.05	134	134	162	164	250	166	261	265	215	175
F4 + F5	0.08	88	75	87	75	128	91	93	97	47	73
	0.07	121	141	136	147	170	150	239	164	132	231
	0.06	189	>300	278	>300	246	>300	>300	>300	240	>300
F4 + F6	0.07	13	25	26	40	41	36	54	80	27	39
	0.06	42	44	67	76	77	77	101	116	70	68
	0.05	75	86	122	141	147	112	158	164	133	118

二维算例类似, 在高维问题中, 序贯自适应采样方法相较于序贯空间填充方法以及一次性实验设计方法具有明显优势。

2) 所提出方法与 mCV-Voronoi 对比. 在 F1 + F2 + F3 的组合中, mCV-Voronoi 在采样初期具有一定优势, 但是在其他多响应组合中, mCV-Voronoi 则精度较低。

3) 序贯自适应采样方法中两种不同准则性能对比. 现有算例上均为基于乘法的采样准则占优. 综合而言, 基于乘法的采样准则具有更大优势。

4) 序贯空间填充方法与一次性实验设计方法 LHS 对比. 两者在不同的问题中具有优势. 但是在大多数情况下, 序贯空间填充相比于 LHS 仍然处于劣势, 其原因可能是在高维问题中序贯空间填充方法的填充性仍然存在不足。

5) 两种建模方法性能对比. 在不同实验设计条件下, 贝叶斯支持向量机的总体性能优于 Kriging 模型, 这种优势随着样本点的增加逐渐显著。

4 结论

本文针对多响应建模中的样本点选取问题, 提出了一种基于贝叶斯最小二乘支持向量机的多响应序贯自适应采样框架, 并基于此改进了局部不确定性表征方法, 提出了 MR-MEIGF 采样准则. 为了验证所提出方法的有效性, 使用 3 个二维测试函数和 3 个六维测试函数进行方法对比验证. 在所提出多响应序贯自适应采样方法中, 对于局部和全局指标的组合形式有加法和乘法两种, 两种组合方式具有不同的特性, 本文在算例中对这两种组合方式进行了讨论. 函数算例结果表明, 所提出多响应序贯自适应

采样方法相较于一次性采样方法、序贯空间填充方法以及另一种多响应自适应采样方法具有明显优势, 整体而言, 基于乘法的 MR-MEIGF 准则性能更优. 进一步地, 使用定量的空间填充指标, 比较 5 种采样方法在响应剧烈变化区域的空间填充性能, 进一步印证了自适应采样方法的优势。

参考文献 (References)

- [1] 李瑶, 王春露, 左兴权, 等. 基于代理模型的 XAI 可解释性量化评估方法[J]. 控制与决策, 2024, 39(2): 680-688. (Li Y, Wang C L, Zuo X Q, et al. Quantitative evaluation method for interpretability of XAI based on surrogate model[J]. Control and Decision, 2024, 39(2): 680-688.)
- [2] Shang X B, Zhang Z, Fang H, et al. Ensemble learning of multi-kernel Kriging surrogate models using regional discrepancy and space-filling criteria-based hybrid sampling method[J]. *Advanced Engineering Informatics*, 2023, 58: 102186.
- [3] Mo S X, Lu D, Shi X Q, et al. A Taylor expansion-based adaptive design strategy for global surrogate modeling with applications in groundwater modeling[J]. *Water Resources Research*, 2017, 53(12): 10802-10823.
- [4] 苗致远, 霍鑫, 马杰, 等. 基于随机克里金模型的元建模序贯试验设计[J]. 控制与决策, 2024, 39(10): 3405-3412. (Miao Z Y, Huo X, Ma J, et al. Sequential experimental design for metamodeling based on stochastic Kriging[J]. Control and Decision, 2024, 39(10): 3405-3412.)
- [5] Liu H T, Ong Y S, Cai J F. A survey of adaptive sampling for global metamodeling in support of simulation-based complex engineering design[J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2018, 57(1): 393-416.
- [6] Chen X Q, Zhang Y, Zhou W E, et al. An effective gradient and geometry enhanced sequential sampling

- approach for Kriging modeling[J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2021, 64(6): 3423-3438.
- [7] Crombecq K, Gorissen D, Deschrijver D, et al. A novel hybrid sequential design strategy for global surrogate modeling of computer experiments[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2011, 33(4): 1948-1974.
- [8] Kapusuzoglu B, Mahadevan S, Matsumoto S, et al. Adaptive surrogate modeling for high-dimensional spatio-temporal output[J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2022, 65(10): 300.
- [9] Garbo A, German B J. A model-independent adaptive sequential sampling technique based on response nonlinearity estimation[J]. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2020, 61(3): 1051-1069.
- [10] Lämmlle S, Bogoclu C, Cremanns K, et al. Gradient and uncertainty enhanced sequential sampling for global fit[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2023, 415: 116226.
- [11] 戴鹏, 周平, 梁延灼, 等. 基于多输出最小二乘支持向量回归建模的自适应非线性预测控制及应用[J]. *控制理论与应用*, 2019, 36(1): 43-52.
(Dai P, Zhou P, Liang Y Z, et al. Multi-output least squares support vector regression modeling based adaptive nonlinear predictive control and its application[J]. *Control Theory & Applications*, 2019, 36(1): 43-52.)
- [12] 冯泽, 陈红, 王广军. 基于分散模糊推理的多输入多输出系统预测控制[J]. *控制与决策*, 2024, 39(4): 1273-1280.
(Feng Z, Chen H, Wang G J. Predictive control of multiple-input multiple-output systems based on decentralized fuzzy inference[J]. *Control and Decision*, 2024, 39(4): 1273-1280.)
- [13] Liu H T, Xu S L, Wang X F, et al. A multi-response adaptive sampling approach for global metamodeling[J]. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers — Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, 2018, 232(1): 3-16.
- [14] Zhai Z M, Li H Y, Wang X G. An adaptive sampling method for Kriging surrogate model with multiple outputs[J]. *Engineering with Computers*, 2022, 38(1): 277-295.
- [15] Ma Y Z, Zhu Y C, Li H S, et al. Adaptive Kriging-based failure probability estimation for multiple responses[J]. *Reliability Engineering & System Safety*, 2022, 228: 108771.
- [16] 林成龙, 马义中, 肖甜丽, 等. 数据驱动的贝叶斯 SVR 自适应建模及昂贵约束多目标代理优化[J]. *控制与决策*, 2023, 38(10): 2977-2986.
(Lin C L, Ma Y Z, Xiao T L, et al. Data-driven Bayesian SVR adaptive modeling and expensive constrained multi-objective surrogate-based optimization[J]. *Control and Decision*, 2023, 38(10): 2977-2986.)
- [17] Cheng K, Lu Z Z. Active learning Bayesian support vector regression model for global approximation[J]. *Information Sciences*, 2021, 544: 549-563.
- [18] Xu S L, Liu H T, Wang X F, et al. A robust error-pursuing sequential sampling approach for global metamodeling based on voronoi diagram and cross validation[J]. *Journal of Mechanical Design*, 2014, 136(7): 071009.
- [19] Crombecq K. Surrogate modelling of computer experiments with sequential experimental design[D]. Ghent: Ghent University, 2011.
- [20] Lam C Q, Notz W I. Sequential adaptive designs in computer experiments for response surface model fit[J]. *Statistics and Applications*, 2008, 6(1): 207-233.
- [21] Wang Z C, Pan Z Q, Cheng Z J, et al. Research on evaluation indices and calculation method of experimental design[J]. *Quality and Reliability Engineering International*, 2023, 39(5): 1909-1934.

作者简介

王彦琳 (2001-), 女, 硕士生, 主要研究方向为系统试验与评估, E-mail: wangyanlin@nudt.edu.cn;

程志君 (1978-), 女, 教授, 博士, 主要研究方向为系统试验与评估、装备系统工程, E-mail: chengzhijun@nudt.edu.cn;

王子辰 (2000-), 男, 博士生, 主要研究方向为系统试验与评估, E-mail: wangzichen18@nudt.edu.cn.