

# 集成深度特征多保真高斯过程回归方法及其装备优化设计应用

王语晨<sup>1</sup>, 杨宝庆<sup>1,2</sup>, 马杰<sup>1,2†</sup>, 张世轩<sup>1</sup>, 郑小鹏<sup>3</sup>, 刘闻<sup>3</sup>

- 哈尔滨工业大学 控制与仿真中心, 哈尔滨 150080;
- 复杂系统控制与智能协同全国重点实验室, 北京 100076;
- 中国运载火箭技术研究院 研究发展中心, 北京 100076)

**摘要:** 多保真高斯过程回归在应用于复杂工程系统分析时, 处理高维输入易因维度灾难导致模型精度下降. 现有缓解策略存在优化不稳定、特征表示不佳等局限性. 针对这一问题, 提出一种集成深度特征多保真高斯过程回归方法. 利用集成深度神经网络将高维输入自适应地映射至低维潜在特征空间, 提升表示的鲁棒性. 采用梯度隔离与两阶段训练策略, 将基于低保真数据的特征提取器预训练过程同后续基于固定特征的多保真高斯过程回归模型构建过程解耦, 规避深度融合模型端到端优化带来的不稳定性, 确保训练过程稳健高效. 最后通过高维测试函数的仿真验证所提出方法的有效性, 使用装备射程优化案例研究展示其解决实际工程问题的应用潜力.

**关键词:** 集成学习; 特征提取; 维度灾难; 多保真高斯过程回归; 装备优化设计

中图分类号: V214

文献标志码: A

DOI: 10.13195/j.kzyjc.2025.0443

**引用格式:** 王语晨, 杨宝庆, 马杰, 等. 集成深度特征多保真高斯过程回归方法及其装备优化设计应用 [J]. 控制与决策.

## An integrated deep feature multi-fidelity Gaussian process regression method and its application in equipment optimization design

WANG Yu-chen<sup>1</sup>, YANG Bao-qing<sup>1,2</sup>, MA Jie<sup>1,2†</sup>, ZHANG Shi-xuan<sup>1</sup>, ZHENG Xiao-peng<sup>3</sup>, LIU Wen<sup>3</sup>

(1. Control and Simulation Center, Harbin Institute of Technology, Harbin 150080, China; 2. National Key Laboratory of Complex System Control and Intelligent Agent Cooperation, Beijing 100076, China; 3. Research and Development Center, China Academy of Launch Vehicle Technology, Beijing 100076, China)

**Abstract:** When applied to complex engineering system analysis, multi-fidelity Gaussian process regression tends to suffer reduced model accuracy when handling high-dimensional inputs due to the curse of dimensionality. Existing mitigation strategies exhibit limitations such as optimization instability and inadequate feature representation. Targeting this problem, an ensemble deep feature multi-fidelity Gaussian process regression method is proposed. It utilizes an ensemble of deep neural networks to adaptively map high-dimensional inputs to a robust, low-dimensional latent feature space, enhancing representation robustness. A gradient isolation and two-stage training strategy is employed, decoupling the feature extractor pre-training process based on low-fidelity data from the subsequent multi-fidelity Gaussian process regression model construction based on fixed features, circumventing the instability associated with end-to-end optimization in deep fusion models and ensuring robust and efficient training. Finally, the effectiveness of the method is validated through simulations on standard high-dimensional test functions, and its potential for solving practical engineering problems is demonstrated using a case study on equipment range optimization.

**Keywords:** ensemble learning; feature extraction; curse of dimensionality; multi-fidelity Gaussian process regression; equipment optimization design

## 0 引言

复杂工程系统的性能分析通常依赖高精度仿真试验获取物理洞察, 但其高昂计算成本限制了参数空间探索与状态寻优的效率<sup>[1-2]</sup>. 多保真代理模型技

术通过融合不同精度数据构建低成本数学近似, 已成为解决该问题的关键手段. 多保真高斯过程回归 (Multi-Fidelity Gaussian Process Regression, MF-GPR) 以其非参数贝叶斯特性, 能够灵活捕捉复杂输

收稿日期: 2025-04-25; 录用日期: 2025-09-22.

基金项目: 装备重大基础研究项目 (909010111-301).

†通信作者. E-mail: mj\_csc@163.com.

入输出关系并量化预测不确定性,对于高效试验设计及性能分析具有重要意义,使其成为工程领域常用的多保真代理模型方法<sup>[3]</sup>.然而以装备为代表的复杂系统普遍具有多变量输入特征,导致标准 MF-GPR 在构建模型时,因高维空间中距离度量的失效而难以准确衡量数据点间的相似性,从而面临显著的“维度灾难”挑战.因此,如何在高维输入下构建能够准确捕捉复杂系统性能特征的 MF-GPR 代理模型,已成为复杂工程系统的性能分析过程中一个重要的研究方向.

为应对维度灾难对 MF-GPR 建模的严峻制约,一种解决思路是降低输入空间有效维数,包括显式降维技术与基于核函数的隐式特征处理.显式降维技术通过线性变换等方式识别并保留数据方差最大的方向,以此降低输入维度后再进行 MF-GPR 建模<sup>[4]</sup>,代表性方法为主成分分析法<sup>[5]</sup>.该思路的主要局限性在于其无监督特性,降维过程主要基于输入数据的方差,未直接考虑输入与输出变量间的关系,可能丢失对预测目标重要但方差较小的特征<sup>[6]</sup>.基于核函数的隐式特征处理策略在 MF-GPR 模型内部进行隐式特征处理,典型代表是采用具有自动相关性确定 (Automatic Relevance Determination, ARD) 特性的核函数<sup>[7]</sup>.ARD 核为每个输入维度学习独立长度尺度参数,通过最大化数据边缘似然函数自动评估各维度相关性<sup>[6]</sup>.理论上,不相关维度被赋予较大长度尺度以降低其协方差影响<sup>[7]</sup>.尽管此数据驱动的相关性评估有其优势,但在高维场景下面临显著挑战:优化难度与成本随维度线性增长的超参数数量而剧增<sup>[8]</sup>;有限数据量下长度尺度估计的可靠性降低<sup>[9]</sup>,且其本质上的特征加权并未摆脱对高维失效距离度量的依赖,难以有效捕捉复杂的变量交互.这些降维与特征加权方法虽能在特定条件下缓解部分维度灾难影响,但线性假设、忽略监督信息、优化困难及对距离度量的根本依赖等局限性,限制了处理更复杂高维问题的效能.

鉴于线性方法与简单特征加权的局限,另一种解决思路是学习非线性特征表示,以更有效发掘高维数据蕴含的低维流形结构.例如流形学习方法中的 ISOMAP 与局部线性嵌入以及自编码器,能够捕捉数据中复杂的非线性模式.采用深度神经网络 (Deep Neural Network, DNN) 学习非线性特征表示已成为应对维度灾难的主流思路.其中,深度核学习 (Deep Kernel Learning, DKL) 与深度高斯过程 (Deep Gaussian Process, DGP) 等方法通过将 DNN 与 GPR 进行端到端 (End-to-End) 的深度融合,展现了强大

的非线性建模潜力<sup>[10-12]</sup>,并且在解决具体工程挑战方面已取得显著进展.例如, Gladstone 等成功利用多保真变分自编码器学习稳健的低维设计空间,有效解决了复杂的高维拓扑优化问题<sup>[13]</sup>. Papanikolaou 等采用深度自编码器与高斯过程回归相结合的两阶段策略,为具有高维输出的复杂非线性力学系统构建了高效的概率代理模型<sup>[14]</sup>.这些研究成果凸显了深度融合模型在处理高维非线性工程问题上的巨大价值.然而,这种联合优化范式在应用于多保真建模,特别是处理工程领域常见的高保真数据稀疏问题时,面临着固有的理论与实践瓶颈<sup>[15]</sup>.其一, DNN 的训练通常依赖基于类似均方差这样的点态误差的监督信号,而 GPR 超参数则依据基于数据整体协方差结构的边缘似然函数进行推断,两种性质迥异的优化目标在单一框架内难以稳定协调<sup>[16]</sup>.其二,高保真数据的稀疏性使得本已高度非凸的联合损失曲面更易出现劣质局部最优与鞍点,导致训练过程对初始化极其敏感且难以稳定收敛至高质量解<sup>[17-20]</sup>.这一优化不稳定性问题,已成为制约此类先进模型在实际高维复杂工程问题中广泛应用的关键障碍<sup>[21]</sup>.

现有方法虽在缓解维度灾难方面取得进展,但处理高维、强非线性、多保真融合的复杂工程问题时,仍存特征表示鲁棒性差、训练不稳定、多源数据利用不充分、协同优化困难等挑战.针对这些挑战,本文提出一种集成深度特征多保真高斯过程回归 (Ensemble Deep Feature MF-GPR, EDF-MFGPR) 方法.该方法的核心架构创新在于引入严格的梯度隔离与两阶段训练策略,将仅依赖低成本、数据量相对充足的低保真数据的特征预训练过程,同后续基于固定特征空间的多保真 GPR 建模过程彻底分离.此解耦框架旨在从根本上规避端到端联合优化的不稳定性,确保训练过程的稳健与高效.同时,通过集成学习提升特征表示的鲁棒性与泛化性.该方法旨在结合深度学习的强大特征提取优势与 MF-GPR 的概率性预测及多保真融合能力,为解决高维复杂工程问题提供一个稳定、精确且实用的建模新范式.方法的有效性由测试函数验证,其在实际工程问题中的应用价值由装备射程优化案例展示.

## 1 基础理论与问题描述

### 1.1 多保真高斯过程回归

代理模型是用于近似复杂工程系统输入输出行为并替代高成本仿真或试验的数学模型.在处理这类复杂系统的仿真或试验数据时,一个常见的特点是存在不同保真度的数据源.设高保真目标函数为

$f_h(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ , 低保真目标函数为  $f_l(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ , 其中  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$  代表  $d$  维输入向量. Kennedy 与 O'Hagan 提出的自回归框架为融合高低保真数据提供了一种常用的统计模型, 即 KOH 模型<sup>[22]</sup>, 其核心假设为高保真函数与低保真函数之间存在如下线性回归关系:

$$f_h(\mathbf{x}) = \rho f_l(\mathbf{x}) + \delta(\mathbf{x}). \quad (1)$$

其中,  $\rho \in \mathbb{R}$  为标量尺度因子, 用于调整低保真函数对高保真函数的贡献,  $\delta(\mathbf{x})$  代表两个保真度模型之间的非线性差异模型.

KOH 模型假设低保真函数  $f_l(\mathbf{x})$  和差异函数  $\delta(\mathbf{x})$  均遵循独立的高斯过程先验分布:

$$f_l(\mathbf{x}) \sim \mathcal{GP}(m_l(\mathbf{x}), k_l(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \theta_l)), \quad (2)$$

$$\delta(\mathbf{x}) \sim \mathcal{GP}(m_\delta(\mathbf{x}), k_\delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \theta_\delta)). \quad (3)$$

其中,  $\mathcal{GP}(\cdot, \cdot)$  为高斯过程,  $m_l(\mathbf{x}), m_\delta(\mathbf{x})$  为低保真模型与差异模型的先验均值, 通常设置为  $\mathbf{0}$ ,  $k_l$  与  $k_\delta$  分别代表低保真模型与差异模型的核函数(协方差函数), 用于刻画相应函数在输入空间中的相关性结构, 而  $\theta_l$  与  $\theta_\delta$  是各自对应的超参数集合.  $\mathbf{x}$  与  $\mathbf{x}'$  代表输入空间  $\mathbb{R}^d$  中的任意两个输入向量点.

核函数的选择对 GPR 模型的性能至关重要. 常用的核函数包括带有 ARD 特性的平方指数核和 Matérn 类核, 其数学形式定义如下:

$$\begin{cases} k_{\text{SE}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma_f^2 \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^d \left(\frac{x_i - x'_i}{l_i}\right)^2\right) \\ k_{\text{Matern}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma_f^2 \left(1 + \sqrt{5}r + \frac{5}{3}r^2\right) \exp(-\sqrt{5}r) \end{cases}. \quad (4)$$

其中,  $\sigma_f^2$  为信号方差, 代表函数值的整体变化幅度;  $l_i$  为第  $i$  维输入  $x_i$  对应的长度尺度参数, 用于度量该维度上函数变化的快慢或相关性距离;  $r = \sqrt{\sum_{i=1}^d \left(\frac{x_i - x'_i}{l_i}\right)^2}$  定义了考虑各维度不同长度尺度的加权欧氏距离. 这两种常用的核函数形式均显式地依赖于输入点  $\mathbf{x}$  与  $\mathbf{x}'$  之间的(加权)欧氏距离  $r$ .

## 1.2 维度灾难问题

MF-GPR 依赖核函数  $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  度量输入点  $\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathbb{R}^d$  间的相似性. 对于式(4)所示的基于欧氏距离的常用核函数, 当输入维度  $d$  趋于无穷大时, 其行为发生退化:

$$\lim_{d \rightarrow \infty} k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \begin{cases} \sigma_f^2 & \text{if } \mathbf{x} = \mathbf{x}' \\ 0 & \text{if } \mathbf{x} \neq \mathbf{x}' \end{cases} \quad (5)$$

对于任意固定的  $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}'$ , 核函数值趋于零; 而当  $\mathbf{x} = \mathbf{x}'$  时, 核函数值等于信号方差  $\sigma_f^2$ . 图1以  $d=2$  表示低维输入情况和  $d=3$  表示高维输入情况为例,

进行维度效应的可视化解释. 高维极限下, 核函数无法捕捉除相同点外的任何空间相关性, 导致由核函数值构成的核矩阵  $\mathbf{K}$  趋近于对角元素均为  $\sigma_f^2$  的对角矩阵, 核函数丧失了对数据点之间除"相同"或"不同"之外的渐进相似性的表达能力. 即使在有限但足够高的维度  $d$  下,  $\mathbf{K}$  的条件数  $\kappa(\mathbf{K}) = \|\mathbf{K}\| \cdot \|\mathbf{K}^{-1}\|$  也可能因非对角元素普遍较小而增大, 影响数值稳定性和超参数优化的可靠性. 输入空间体积  $V \propto L^d$  指数增长导致的样本稀疏性问题, 使得有限数据  $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^N$  不足以约束高维空间中的函数  $f(\mathbf{x})$ . 这些因素共同构成了维度灾难对 MF-GPR 建模的制约.

设  $n_h, n_l$  分别为高低保真数据样本量, 给定低保真数据集  $\mathcal{D}_l = \{(\mathbf{x}_i^l, y_i^l)\}_{i=1}^{n_l} \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$  与高保真数据集  $\mathcal{D}_h = \{(\mathbf{x}_i^h, y_i^h)\}_{i=1}^{n_h} \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$ . 本文旨在构建基于  $\mathcal{D}_l \cup \mathcal{D}_h$  的代理模型  $\hat{f}_h(\mathbf{x})$ , 以最小化其在输入域  $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^d$  上相对于真实高保真函数  $f_h(\mathbf{x})$  的期望均方误差. 该问题形式化表述为:

$$\begin{aligned} \min_{\hat{f}_h} \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p(\mathbf{x})} [(f_h(\mathbf{x}) - \hat{f}_h(\mathbf{x}; \mathcal{D}_l, \mathcal{D}_h))^2] \\ \text{s.t. } d \gg 1, n_h \ll n_l. \end{aligned} \quad (6)$$

该问题的求解必须有效克服式(5)所揭示的标准核函数在高维下的局限性以及高维空间中的数据稀疏性问题.

## 2 基于集成深度特征的 MF-GPR 方法

解决维度灾难问题的核心思路在于, 避免直接在高维原始输入空间  $\mathbb{R}^d$  定义核函数, 转而寻求将高维输入  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$  有效映射至低维潜在特征空间  $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m$  的策略, 其中潜在维度  $m$  远小于原始维度  $d$ . 该映射应能提取与目标函数相关的关键信息, 并在潜在特征空间  $\mathbb{R}^m$  中形成更有利于标准核函数捕捉数据结构的几何表示.

### 2.1 集成深度特征提取与融合

DNN 具备从数据中自动学习具有层次化结构的特征的能力. 构建包含  $L$  层的前馈网络的 DNN 作为特征提取器  $f_\phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^m$ . 对于网络内部第  $l$  层 ( $l = 1, \dots, L$ ), 其从前一层激活值  $\mathbf{h}_{l-1}$  到当前层激活值  $\mathbf{h}_l$  的计算过程包含一个仿射变换和一个非线性激活函数  $\sigma_l$ :

$$\mathbf{h}_0 = \mathbf{x}, \quad (7)$$

$$\mathbf{a}_l = \mathbf{W}_l \mathbf{h}_{l-1} + \mathbf{b}_l \in \mathbb{R}^{d_l}, \quad (8)$$

$$\mathbf{h}_l = \sigma_l(\mathbf{a}_l) \in \mathbb{R}^{d_l}. \quad (9)$$

其中,  $\mathbf{W}_l \in \mathbb{R}^{d_l \times d_{l-1}}$  为权重矩阵,  $\mathbf{b}_l \in \mathbb{R}^{d_l}$  为偏置向量,  $d_l$  为第  $l$  层神经元数量.

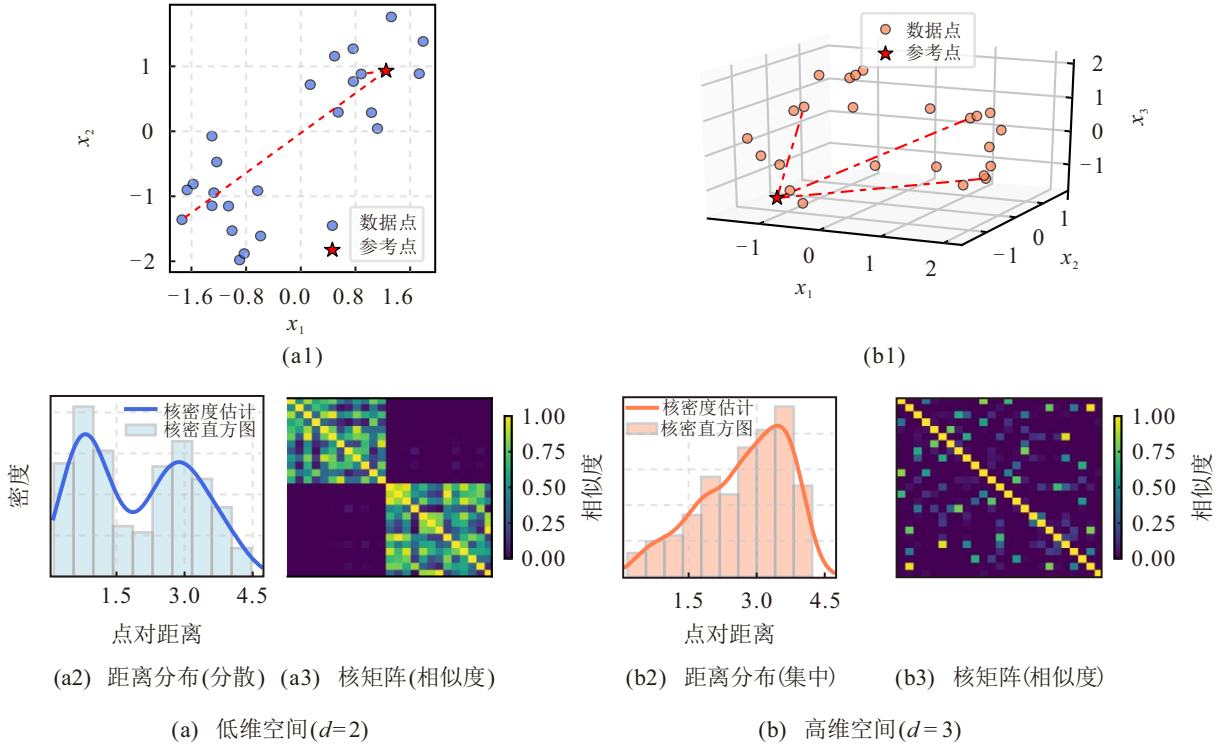


图1 高维输入下核函数失效机理示意图

为支持深度网络结构的有效优化并缓解潜在的梯度消失问题,特征提取器  $f_\phi$  内部整合残差连接结构,允许信息直接跨层传播.残差连接将层  $l$  的输出构建为输入  $\mathbf{h}_{l-1}$  与残差映射函数  $\mathcal{R}_l$  输出的组合:

$$\mathbf{h}_l = \sigma_l(\mathcal{R}_l(\mathbf{h}_{l-1}) + \mathcal{S}_l(\mathbf{h}_{l-1})). \quad (10)$$

其中,  $\mathcal{R}_l$  代表由式 (8) 和 (9) 类似结构组成的残差学习部分,  $\mathcal{S}_l$  为跳跃连接.将包含所有层残差块内部及跳跃连接的权重与偏置网络的完整参数集合记为  $\phi$ .输出的潜在特征向量  $\mathbf{z}$  依然是网络最后一层的输出,其维度为  $d_L = m$ :

$$\mathbf{z} = f_\phi(\mathbf{x}) = \mathbf{h}_L \in \mathbb{R}^m. \quad (11)$$

装备等复杂工程系统通常展现出多物理场耦合、强非线性以及高维参数空间下的复杂响应特性.依赖单个 DNN 的  $f_\phi$  进行特征提取,即使结合残差结构,也可能仅能有效学习系统行为的某一特定方面,难以保证对整个复杂系统行为的全面且鲁棒的表征.本方法采用集成学习策略,通过聚合多个独立学习的模型视角提升特征表示的稳定性和覆盖度.构建包含  $N_c$  个独立训练的 DNN 特征提取器成员的集合:

$$\mathcal{F} = \{f_{\phi_k} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^m\}_{k=1}^{N_c}. \quad (12)$$

其中,  $f_{\phi_k}$  为第  $k$  个集成成员,其拥有独立参数集  $\phi_k$ .

对于任一输入  $\mathbf{x}$ ,首先通过集成  $\mathcal{F}$  中的每个成员  $f_{\phi_k}$  计算其对应的潜在特征向量,得到特征集合:

$$\{\mathbf{z}_k | \mathbf{z}_k = f_{\phi_k}(\mathbf{x}), k = 1, \dots, N_c\}. \quad (13)$$

其中,  $\mathbf{z}_k$  为每个成员  $f_{\phi_k}$  提取的潜在特征向量.

对这些由不同网络成员独立提取的特征进行融合.定义集成融合函数  $f_{\text{ens}}(\mathbf{x})$  为各成员输出特征的算术平均,得到最终的融合潜在特征向量  $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m$ :

$$\mathbf{z} = f_{\text{ens}}(\mathbf{x}; \{\phi_k\}_{k=1}^{N_c}) \equiv \frac{1}{N_c} \sum_{k=1}^{N_c} f_{\phi_k}(\mathbf{x}). \quad (14)$$

该融合特征  $\mathbf{z}$  通过综合多个模型捕捉到的不同模式或数据视角,预期比任何单一网络的特征  $\mathbf{z}_k$  更能稳定且全面地反映复杂系统内在的数据结构,从而为 MF-GPR 建模提供更具代表性的低维输入.

## 2.2 梯度隔离与两阶段训练策略

将深度特征提取器  $f_{\phi_k}$  与式 (2) 及 (3) 定义的 MF-GPR 直接进行端到端联合优化面临固有困难.以使用平方指数核的 GPR 模型为例, GPR 模型的训练通常旨在通过调整其超参数  $\Theta_{\text{GPR}} = \{\theta, \sigma_n^2\}$  来最大化数据的对数边缘似然 (Log Marginal Likelihood, LML).给定输入特征  $\mathbf{Z} = \{\mathbf{z}_i\}_{i=1}^N$  和输出  $\mathbf{y} = \{y_i\}_{i=1}^N$ , 负 LML 的表达式为:

$$-\log p(\mathbf{y} | \mathbf{Z}, \theta, \sigma_n^2) = \frac{1}{2} \mathbf{y}^\top (\mathbf{K}_{\mathbf{Z}, \mathbf{Z}}(\theta) + \sigma_n^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{y} + \frac{1}{2} \log |\mathbf{K}_{\mathbf{Z}, \mathbf{Z}}(\theta) + \sigma_n^2 \mathbf{I}| + \frac{N}{2} \log(2\pi). \quad (15)$$

其中,  $\mathbf{K}_{\mathbf{Z}, \mathbf{Z}}(\theta)$  为核矩阵,其元素  $[\mathbf{K}_{\mathbf{Z}, \mathbf{Z}}(\theta)]_{ij} = k(\mathbf{z}_i, \mathbf{z}_j; \theta)$  依赖于潜在特征  $\mathbf{z}_i = f_\phi(\mathbf{x}_i)$  和核超参数  $\theta$ ;  $\sigma_n^2$  为观测噪声方差.联合优化需要同时调整网络

参数  $\phi = \{\phi_k\}$  与 MF-GPR 的全部超参数  $\Theta = \{\theta_l, \theta_\delta, \rho, \sigma_{n,1}^2, \sigma_{n,\delta}^2\}$ , 以最大化依赖于  $\phi$  和  $\Theta$  的联合 LML 或最小化其负值. 由于  $\mathbf{K}_{z,z}$  对  $\phi$  存在复杂非线性依赖, 加之 LML 作为关于超参数  $\Theta_{\text{GPR}}$  的函数通常具有多个局部最优解, 导致联合优化目标具有高度非凸性. 深度网络  $\phi$  的优化通常依赖基于点态误差例如均方误差  $L_{\text{pre}}$  的监督信号, 而 GPR 超参数  $\Theta$  则依据依赖数据整体协方差结构的 LML 进行推断. 这两种性质迥异的优化目标难以在单一框架内稳定协调, 在高保真数据  $n_h$  稀疏的常见工程场景下, 联合优化过程极易导致收敛困难.

为规避联合优化的不稳定性, 本文方法的核心架构设计在于采用梯度隔离的两阶段训练策略, 将特征学习与 GPR 模型训练在优化流程上实现解耦. 该策略的设计思想在于, 将复杂的联合优化问题分解为两个更简单、更稳定的子问题. 第一阶段专注于特征学习, 利用数据量相对丰富、成本低廉的低保真数据进行监督式预训练; 第二阶段则在固定的、高质量的特征空间中, 执行标准的多保真 GPR 建模.

第一阶段为集成特征提取器  $\mathcal{F}$  预训练. 此阶段目标是利用数据量相对充足且成本较低的低保真数据  $\mathcal{D}_l$  稳定地学习有效的潜在特征表示. 对于集成

$\mathcal{F}$  中的每个成员  $f_{\phi_k}$ , 引入如图 2 所示的临时的线性输出层, 其核心作用是构建回归任务, 为特征提取器  $f_{\phi_k}$  的训练提供直接的监督信号, 该输出层定义为:

$$g_{W_k, c_k}(z_k) = W_k^\top z_k + c_k. \quad (16)$$

其中,  $W_k \in \mathbb{R}^m, c_k \in \mathbb{R}$  为该层待优化参数. 为促进集成成员间的多样性, 本方法在预训练阶段采用了基于 K-Fold 交叉验证的数据划分策略. 该策略将低保真数据集  $\mathcal{D}_l$  随机划分为  $K$  个不同的子集, 并通过为每个特征提取器成员  $f_{\phi_k}$  分配一个独有的训练数据子集  $\mathcal{D}_{l,k}$ , 来确保各个成员的学习过程是建立在对原始数据不同视角之上的. 这种系统性的数据扰动使得各成员能够捕捉数据的不同模式, 从而有效避免了模型的高度同质化, 为最终提升集成模型的泛化能力奠定了基础. 该阶段的优化目标是独立最小化每个模型  $k$  在其训练数据  $\mathcal{D}_{l,k}$  上预测低保真输出  $y_{l,k,i}$  的均方误差 (Mean Squared Error, MSE) 损失  $\mathcal{L}_{\text{pre}}$ , 同时对网络参数施加 L2 正则化:

$$\begin{aligned} \min_{\phi_k, W_k, c_k} \mathcal{L}_{\text{pre}}(\phi_k, W_k, c_k) = \\ \frac{1}{N_{l,k}} \sum_{i=1}^{N_{l,k}} (y_{l,k,i} - g_{W_k, c_k}(f_{\phi_k}(\mathbf{x}_{l,k,i})))^2 + \lambda_k \|\phi_k\|_2^2. \end{aligned} \quad (17)$$

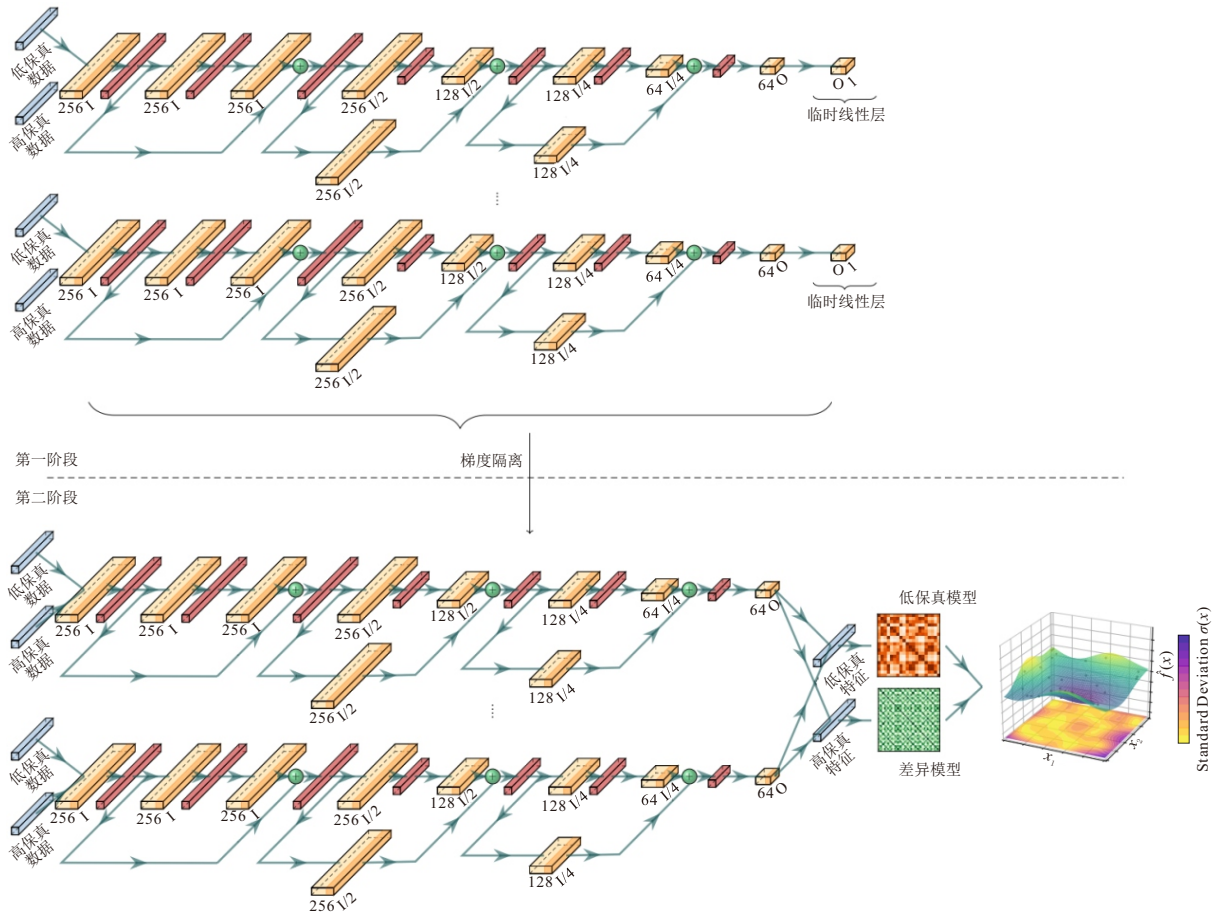


图2 基于集成深度特征的 MF-GPR 方法示意图

其中,  $(\mathbf{x}_{1,k,i}, \mathbf{y}_{1,k,i}) \in \mathcal{D}_{1,k}$ ,  $N_{1,k}$  为  $\mathcal{D}_{1,k}$  的样本量,  $\lambda_k$  为正则化系数. 此优化过程仅涉及结构相对简单的损失函数  $\mathcal{L}_{\text{pre}}$ , 有效避免了优化复杂 GPR LML 可能带来的梯度不稳定问题. 完成对所有  $k = 1, \dots, N_c$  的优化后, 临时层参数  $\{W_k^*, c_k^*\}$  被舍弃, 优化得到的特征提取器参数  $\{\phi_k^*\}_{k=1}^{N_c}$  则被固定, 在后续阶段其梯度  $\nabla_{\phi_k^*}$  视为零.

第二阶段为基于固定特征的 MF-GPR 训练. 此阶段应用第一阶段训练并固定的集成特征提取器  $\{f_{\phi_k^*}\}$  及式 (14) 定义的融合函数  $f_{\text{ens}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{N_c} \sum_{k=1}^{N_c} f_{\phi_k^*}(\mathbf{x})$ , 将全部低保真输入  $\mathbf{X}_1 = \{\mathbf{x}_i^1\}_{i=1}^{n_1}$  和高保真输入  $\mathbf{X}_h = \{\mathbf{x}_i^h\}_{i=1}^{n_h}$  变换至潜在特征空间. 具体映射过程如下:

$$\mathbf{Z}_1 = [f_{\text{ens}}(\mathbf{x}_1^1), \dots, f_{\text{ens}}(\mathbf{x}_{n_1}^1)]^\top \in \mathbb{R}^{n_1 \times m}, \quad (18)$$

$$\mathbf{Z}_h = [f_{\text{ens}}(\mathbf{x}_1^h), \dots, f_{\text{ens}}(\mathbf{x}_{n_h}^h)]^\top \in \mathbb{R}^{n_h \times m}. \quad (19)$$

其中,  $\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_h$  是通过映射获得的低、高保真固定特征矩阵.

在该  $m$  维潜在特征空间  $\mathbb{R}^m$  中应用 KOH 模型. 训练低保真 GPR 模型  $\text{GP}_1 \sim \mathcal{GP}(0, k_1(\mathbf{z}, \mathbf{z}'; \theta_1))$ , 其核超参数  $\theta_1$  与噪声方差  $\sigma_{n,1}^2$  通过最大化在  $(\mathbf{Z}_1, \mathbf{y}_1)$  上的 LML 确定:

$$\hat{\theta}_1, \hat{\sigma}_{n,1}^2 = \arg \max_{\theta_1, \sigma_{n,1}^2} \log p(\mathbf{y}_1 | \mathbf{Z}_1, \theta_1, \sigma_{n,1}^2). \quad (20)$$

基于训练完毕  $\text{GP}_1$  获得在  $\mathbf{Z}_h$  处的预测均值  $\mu_1(\mathbf{Z}_h; \hat{\theta}_1)$ . 估计尺度因子  $\rho$ , 采用最小二乘解给出:

$$\hat{\rho} = \arg \min_{\rho} \|\mathbf{y}_h - \rho \mu_1(\mathbf{Z}_h; \hat{\theta}_1)\|^2. \quad (21)$$

计算差异模型的目标残差  $\delta_h = \mathbf{y}_h - \hat{\rho} \mu_1(\mathbf{Z}_h; \hat{\theta}_1)$  并训练差异 GPR 模型  $\text{GP}_\delta \sim \mathcal{GP}(0, k_\delta(\mathbf{z}, \mathbf{z}'; \theta_\delta))$ , 其核超参数  $\theta_\delta$  与噪声方差  $\sigma_{n,\delta}^2$  通过最大化在  $(\mathbf{Z}_h, \delta_h)$  上的 LML 确定:

$$\hat{\theta}_\delta, \hat{\sigma}_{n,\delta}^2 = \arg \max_{\theta_\delta, \sigma_{n,\delta}^2} \log p(\delta_h | \mathbf{Z}_h, \theta_\delta, \sigma_{n,\delta}^2). \quad (22)$$

在第二阶段的全过程中, 所有 GPR 相关参数  $\theta_1, \theta_\delta, \rho, \sigma_{n,1}^2, \sigma_{n,\delta}^2$  均在由  $\{f_{\phi_k^*}\}$  定义的固定潜在特征空间  $\mathbb{R}^m$  上进行优化, 特征提取器参数  $\phi_k^*$  保持不变, 以确保特征学习与 GPR 建模两个子过程的优化稳定性和计算可行性. 通过估计尺度因子  $\hat{\rho}$  并基于高保真残差  $\delta_h = \mathbf{y}_h - \hat{\rho} \mu_1(\mathbf{Z}_h)$  训练差异模型  $\text{GP}_\delta$ , 模型可依据高保真信息  $\mathcal{D}_h$  有效修正保真度间差异. 此结构化适应过程在高维潜在空间  $\mathbb{R}^m$  内补偿了预训练阶段可能存在的特征次优性, 在确保优化鲁棒性的同时实现了对高保真目标的精确建模.

对于测试输入点  $\mathbf{x}_* \in \mathbb{R}^d$ , 高保真目标函数

$f_h(\mathbf{x}_*)$  的预测值及其不确定性按如下流程计算. 利用固定的集成特征映射 获取其潜在特征表示:

$$\mathbf{z}_* = f_{\text{ens}}(\mathbf{x}_*). \quad (23)$$

将  $\mathbf{z}_*$  进行与训练阶段一致的标准化处理, 得到  $\mathbf{z}_*^{\text{norm}}$ . 基于此标准化特征, 从已训练的低保真模型  $\text{GP}_1$  和差异模型  $\text{GP}_\delta$  获取其在  $\mathbf{z}_*^{\text{norm}}$  处的后验预测分布均值与方差, 分别记为:

$$\begin{aligned} \mu_1(\mathbf{z}_*^{\text{norm}}) &= \mathbb{E}[f_{1*} | \mathbf{z}_*^{\text{norm}}, \mathcal{D}_1^{\text{norm}}, \hat{\theta}_1], \\ \sigma_1^2(\mathbf{z}_*^{\text{norm}}) &= \text{Var}[f_{1*} | \mathbf{z}_*^{\text{norm}}, \mathcal{D}_1^{\text{norm}}, \hat{\theta}_1], \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \mu_\delta(\mathbf{z}_*^{\text{norm}}) &= \mathbb{E}[\delta_* | \mathbf{z}_*^{\text{norm}}, \mathcal{D}_h^{\text{norm}}, \hat{\theta}_\delta], \\ \sigma_\delta^2(\mathbf{z}_*^{\text{norm}}) &= \text{Var}[\delta_* | \mathbf{z}_*^{\text{norm}}, \mathcal{D}_h^{\text{norm}}, \hat{\theta}_\delta]. \end{aligned} \quad (25)$$

其中,  $\mathbb{E}[\cdot]$  和  $\text{Var}[\cdot]$  分别表示对相应 GPR 后验预测分布求期望和方差,  $f_{1*}$  与  $\delta_*$  代表在  $\mathbf{z}_*^{\text{norm}}$  处的潜在特征函数值,  $\mathcal{D}_1^{\text{norm}}, \mathcal{D}_h^{\text{norm}}$  与  $\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_\delta$  代表训练 GPR 时所使用的标准化数据与优化得到的超参数. 依据 KOH 自回归结构及已估计的尺度因子  $\hat{\rho}$ , 组合得到标准化空间内的高保真预测均值与方差:

$$\mu_h^{\text{norm}}(\mathbf{z}_*^{\text{norm}}) = \hat{\rho} \mu_1(\mathbf{z}_*^{\text{norm}}) + \mu_\delta(\mathbf{z}_*^{\text{norm}}), \quad (26)$$

$$\sigma_h^2(\mathbf{z}_*^{\text{norm}}) = \hat{\rho}^2 \sigma_1^2(\mathbf{z}_*^{\text{norm}}) + \sigma_\delta^2(\mathbf{z}_*^{\text{norm}}). \quad (27)$$

最终的预测均值  $\mu_h(\mathbf{x}_*)$  与预测方差  $\sigma_h^2(\mathbf{x}_*)$  通过对式 (26) 和式 (27) 的结果应用相应的反标准化变换得到, 将其映射回原始数据尺度.

基于集成深度特征 MF-GPR 方法通过集成特征学习与梯度隔离优化结构的独特结合, 实现了高维多保真建模中预测精度与训练稳定性的有效统一. 代理模型的构建及预测步骤如下:

step1: 预训练并固定集成特征提取器. 基于低保真数据  $\mathcal{D}_1$ , 训练集成特征提取器集合  $\mathcal{F} = \{f_{\phi_k}\}_{k=1}^{N_c}$ , 优化目标为最小化式 (17) 定义的 MSE 损失  $\mathcal{L}_{\text{pre}}$ . 训练完成后固定最优参数  $\{\phi_k^*\}_{k=1}^{N_c}$ , 实现梯度隔离.

step2: 数据映射与标准化. 应用式 (14) 定义的融合函数  $f_{\text{ens}}(\mathbf{x})$  将训练输入  $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_h$  映射至潜在特征空间, 获得特征矩阵  $\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_h$  (式 (18), (19)). 拟合并应用标准化器  $S_Z, S_y$  分别对特征  $\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_h$  与输出  $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_h$  进行处理, 得到  $\mathbf{Z}_1^{\text{norm}}, \mathbf{Z}_h^{\text{norm}}, \mathbf{y}_1^{\text{norm}}, \mathbf{y}_h^{\text{norm}}$ .

step3: 训练低保真 GPR 并估计尺度因子. 基于  $(\mathbf{Z}_1^{\text{norm}}, \mathbf{y}_1^{\text{norm}})$  训练低保真模型  $\text{GP}_1$ , 最大化 LML 确定超参数  $\hat{\theta}_1, \hat{\sigma}_{n,1}^2$  (式 (20)). 利用  $\text{GP}_1$  对  $\mathbf{Z}_h^{\text{norm}}$  预测得均值  $\mu_1(\mathbf{Z}_h^{\text{norm}}; \hat{\theta}_1)$ , 进而估计尺度因子  $\hat{\rho}$  (式 (21)).

step4: 训练差异 GPR. 计算标准化残差  $\delta_h^{\text{norm}} = \mathbf{y}_h^{\text{norm}} - \hat{\rho} \mu_1(\mathbf{Z}_h^{\text{norm}}; \hat{\theta}_1)$ . 基于  $(\mathbf{Z}_h^{\text{norm}}, \delta_h^{\text{norm}})$  训练差异模型  $\text{GP}_\delta$ , 最大化 LML 确定超参数  $\hat{\theta}_\delta, \hat{\sigma}_{n,\delta}^2$ . 至此模

型构建完成。

step5: 执行预测. 对于新输入  $\mathbf{x}_*$ , 通过  $f_{\text{ens}}$  映射并经  $S_z$  标准化得  $\mathbf{z}_*^{\text{norm}}$ . 应用  $\text{GP}_1, \text{GP}_\delta$  计算预测均值与方差. 依据式 (26) 与 (27) 组合预测. 最终经  $S_y^{-1}$  反标准化得预测均值  $\mu_h(\mathbf{x}_*)$  与标准差  $\sigma_h(\mathbf{x}_*)$ .

### 3 数值验证与分析

为定量评估 EDF-MFGPR 方法在高维输入问题中的性能, 并与传统方法进行比较, 本节设计基于高维测试函数的数值验证. 重点考察分析模型在不同高保真样本量及不同特征维度设置下的预测精度.

选用 50 维 Ackley 函数作为基准测试函数, 以模拟复杂工程问题中常见的高维、强非线性特性. 该函数的高保真形式  $f_h(\mathbf{x})$  与低保真形式  $f_l(\mathbf{x})$  定义如下:

$$f_h(\mathbf{x}) = -20 \exp(-0.2 \sqrt{\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d x_i^2}) - 0.8 \exp\left(\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \cos(\pi x_i)\right) + 20, \quad (28)$$

$$f_l(\mathbf{x}) = -18 \exp(-0.2 \sqrt{\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d (0.9x_i)^2}) - 0.4 \exp\left(\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \cos(\pi(0.9x_i))\right) + 20. \quad (29)$$

其中,  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{50}, x_i \in [-32.768, 32.768]$  为输入向量.

采用拉丁超立方采样方法在输入域内生成样本点. 低保真训练集  $\mathcal{D}_l$  样本量固定为  $n_l = 40 \times d$ . 高保真训练集  $\mathcal{D}_h$  样本量分别设置为  $n_h = 2.5 \times d$  和  $n_h = 5 \times d$ . 测试集  $\mathcal{D}_{\text{test}}$  含  $N_{\text{test}} = 100$  个由 (28) 生成的独立样本点作为真值, 以衡量预测准确性.

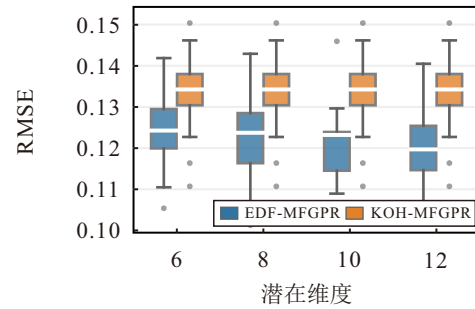
将本文提出的 EDF-MFGPR 方法与 KOH 模型进行比较. KOH 模型采用带 ARD 功能的 Matérn 5/2 核函数. EDF-MFGPR 方法采用第 3 节所述的集成深度特征提取器, 集成深度特征提取器集成规模设置为  $N_e = 10$ , 使用梯度隔离训练策略, 其中每个特征提取器网络包含一个将输入映射至 256 维的初始全连接层, 三个残差块结构其隐藏维度依次为 256, 128, 64, 以及一个最终输出  $m$  维潜在特征的全连接层, 应用 dropout 正则化以提升泛化能力; 残差映射  $\mathcal{R}_i$  由两个全连接层构成, 跳跃连接  $S_i$  则依据维度匹配情况选用恒等映射或可学习的全连接层. 考察的特征空间维度  $m$  包括  $\{6, 8, 10, 12\}$ . 模型性能评价指标选用均方根误差 (Root Mean Squared Error, RMSE), 其计算公式为:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N_{\text{test}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{test}}} (y_i^{\text{test}} - \hat{y}_i^{\text{test}})^2}. \quad (30)$$

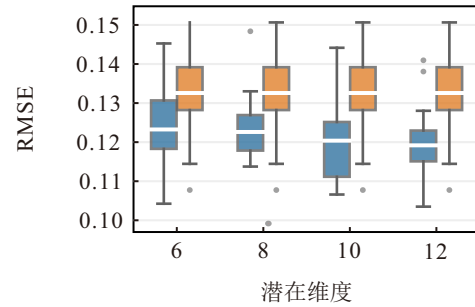
其中,  $y_i^{\text{test}}$  为测试集真实值,  $\hat{y}_i^{\text{test}}$  为模型预测值. 为保证结果的统计可靠性, 每种参数配置 ( $n_h, m$  的组合) 均独立重复运行  $N_{\text{rep}} = 20$  次, 结果由表 1 和箱线图 3 所示.

表1 不同配置下 RMSE 对比

$n_h$	方法	$m$	平均RMSE ± 标准差
125	EDF-MFGPR	6	0.1247 ± 0.0103
	EDF-MFGPR	8	0.1228 ± 0.0085
	EDF-MFGPR	10	0.1204 ± 0.0085
	EDF-MFGPR	12	0.1210 ± 0.0087
	KOH-MFGPR	N/A	0.1330 ± 0.0094
250	EDF-MFGPR	6	0.1245 ± 0.0113
	EDF-MFGPR	8	0.1228 ± 0.0097
	EDF-MFGPR	10	0.1201 ± 0.0090
	EDF-MFGPR	12	0.1199 ± 0.0097
	KOH-MFGPR	N/A	0.1325 ± 0.0108



(a)  $n_h = 125$



(b)  $n_h = 250$

图3 不同配置下 RMSE 指标箱线图

表 1 和图 3 表明, 所提出的 EDF-MFGPR 方法在所有考察的潜在维度  $m$  及两种高保真样本配置下, 其平均预测误差均低于 KOH 模型. 对两种方法在各配置下的 RMSE 结果进行了非参数的 Wilcoxon 配对检验, 检验结果显示, 所有对比组的  $p$  值均小于  $10^{-5}$ , 证明了 EDF-MFGPR 在预测精度上的提升是系统性的性能增益, 而非随机因素所致. EDF-MFGPR 的性能在所考察的潜在维度  $m$  范围内表现出良好的稳定性, 并未出现对该参数的极端敏感性.

可以确证所提方法在处理高维问题时相较于传统方法的优越性。

为进一步剖析所提 EDF-MFGPR 方法的性能来源并更全面地评估其有效性, 引入如下拓展性实验. 为评估集成学习策略的独立贡献, 构建了一个采用单一深度特征提取器的消融变体 (Deep Feature-MFGPR, DF-MFGPR). 为验证梯度隔离与两阶段训练框架的必要性, 将一个移除该机制并采用端到端联合优化方法 (End2End-EDF-MFGPR) 纳入比较. 为将所提方法与当前先进的深度融合模型进行公平对位, 引入多保真深度核学习 (Deep Kernel Learning-MFGPR, DKL-MFGPR) 作为基准. DKL-MFGPR 通过联合优化深度网络与高斯过程超参数, 代表了与本文解耦框架相异的主流技术路线.

为更全面地检验方法的性能与泛化能力, 拓展性实验在保留 50 维 Ackley 函数的基础上, 新增具有狭长弯曲最优谷底特性的对数变体 Rosenbrock 函数作为测试基准, 其高、低保真形式分别定义为:

$$f_h(\mathbf{x}) = 10 \ln \left( 1 + \frac{\sum_{j=1}^{d-1} [100(x_{j+1} - x_j^2)^2 + (1 - x_j)^2]}{1000} \right), \quad (31)$$

$$f_l(\mathbf{x}) = 0.05 \|\mathbf{x}\|_2 + 10 \ln \left( 1 + \frac{\sum_{j=1}^{d-1} [80(x_{j+1} - 0.99x_j^2)^2 + (1 - x_j)^2]}{1000} \right). \quad (32)$$

所有拓展性实验的潜在特征维度均设定为  $m = 10$ , 集成规模为  $N_e = 10$ , 数据集构建方式、样本量配置、评估指标及重复次数均与前序实验保持一致. 相同配置实验重复进行 20 次, 表 2 展示了各方法在不同配置下的预测精度及训练时间对比结果, 表中测试函数 A 为 Ackley 函数, R 为 Rosenbrock 函数.

结果显示, 在 Ackley 函数上, 所提出的 EDF-MFGPR 相较于其消融变体 DF-MFGPR 和传统基准 KOH-MFGPR, 均取得了最低的预测误差. 在更具挑战性的 Rosenbrock 函数上, 深度特征学习方法的优越性进一步凸显, 其中 EDF-MFGPR 同样展现出最优的预测精度, 而其他方法则难以构建有效的代理模型. 对方法组件的剖析可见, 集成策略相较于单一模型在两个函数上均稳定地提升了预测精度, 证实了其对于增强模型泛化能力与鲁棒性的作用. 采用端到端联合优化的 E2E-EDF-MFGPR 与 DKL-MFGPR 模型均未能完成稳定收敛. 此结果揭示了联合优化策略在处理此类高维复杂问题时所面临的收敛性挑

表2 各方法在不同测试函数与配置下的性能对比

函数	$n_h$	方法	RMSE	训练时间 (s)
A	125	EDF-MFGPR	<b>0.1204 ± 0.0085</b>	442.2 ± 245.5
		DF-MFGPR	0.1239 ± 0.0097	140.8 ± 98.5
		E2E-EDF-MFGPR	—	—
		DKL-MFGPR	—	—
		KOH-MFGPR	0.1330 ± 0.0094	205.2 ± 175.9
	250	EDF-MFGPR	<b>0.1201 ± 0.0090</b>	447.0 ± 252.2
		DF-MFGPR	0.1231 ± 0.0100	144.8 ± 102.1
		E2E-EDF-MFGPR	—	—
		DKL-MFGPR	—	—
		KOH-MFGPR	0.1325 ± 0.0108	182.2 ± 124.5
R	125	EDF-MFGPR	<b>1.6926 ± 0.1484</b>	237.1 ± 50.2
		DF-MFGPR	1.7350 ± 0.1433	120.1 ± 55.0
		E2E-EDF-MFGPR	—	—
		DKL-MFGPR	—	—
		KOH-MFGPR	—	—
	250	EDF-MFGPR	<b>1.6784 ± 0.1440</b>	238.4 ± 50.4
		DF-MFGPR	1.7035 ± 0.1288	121.0 ± 55.1
		E2E-EDF-MFGPR	—	—
		DKL-MFGPR	—	—
		KOH-MFGPR	-	-

战, 从而反向印证了本文所提解耦框架在确保训练稳健性与模型有效性方面的架构优势. 在计算效率方面, DF-MFGPR 因其简化结构而耗时最少, 本文方法 EDF-MFGPR 虽然因集成机制导致计算成本增加, 但换取了最强的预测性能, 体现了在精度与成本间的有效权衡.

#### 4 装备射程优化案例研究

本节将本文提出的 EDF-MFGPR 方法应用于装备射程优化框架, 在解决实际复杂工程问题中的应用过程. 该问题的目标是寻找装备最优设计  $\mathbf{x}^*$ , 使得装备射程  $f_h(\mathbf{x})$  达到最大值:

$$\mathbf{x}^* = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} f_h(\mathbf{x}). \quad (33)$$

其中,  $f_h(\mathbf{x})$  代表由高精度仿真试验得到的装备射程, 输入向量  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{19}$  包含影响射程的发射方位角、多级发动机比冲、推力、工作时间等 19 个关键参数,  $\mathcal{X}$  为 19 个关键参数的可行域. 高保真试验数据、低保真试验数据由装备仿真平台获得.

式 (33) 困难大, 输入空间维度  $d = 19$  导致搜索复杂性高; 高保真仿真试验成本巨大; 同时存在计算快捷但精度有限的低保真仿真模型  $f_l(\mathbf{x})$ , 能够获得低保真仿真试验数据; 且高保真试验数据样本  $\mathcal{D}_h = \{(\mathbf{x}_i^h, y_i^h)\}_{i=1}^{n_h}$  数量  $n_h$  远小于低保真试验数据样本  $\mathcal{D}_l = \{(\mathbf{x}_i^l, y_i^l)\}_{i=1}^{n_l}$ . 这些高维、多保真、小样本特性是采用基于代理模型的优化策略的动因. 采用 EDF-MFGPR 方法构建高保真目标函数的代理模型  $\hat{f}_h(\mathbf{x})$ , 旨在以较低的计算代价逼近  $f_h(\mathbf{x})$ .

利用数据集  $\mathcal{D}_l \cup \mathcal{D}_h$  训练模型. 设模型的输入维度  $d = 19$ , 特征维度  $m = 5$ , 集成规模  $N_e = 10$ . 采用两阶段梯度隔离训练策略完成模型训练. 使用高保真数据集  $\mathcal{D}_h = \{(\mathbf{x}_i^h, y_i^h)\}_{i=1}^{n_h}$  评估所构建的代理模型精度. 令  $\hat{y}_i^h = \hat{f}_h(\mathbf{x}_i^h)$  为模型对输入  $\mathbf{x}_i^h$  的预测值. 基于模型预测向量  $(\hat{y}_1^h, \dots, \hat{y}_{n_h}^h)$  与真实观测向量  $(y_1^h, \dots, y_{n_h}^h)$  计算所得均方根误差 RMSE 为 0.1175. 表明  $\hat{f}_h(\mathbf{x})$  对高保真试验数据实现了高度精确的拟合, 为后续基于该代理模型的优化探索提供了基础.

完成代理模型  $\hat{f}_h(\mathbf{x})$  构建后, 原优化问题式 (33) 转化为基于已构建代理模型的近似优化问题:

$$\mathbf{x}_{opt} = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \hat{f}_h(\mathbf{x}; \mathcal{D}_l, \mathcal{D}_h). \quad (34)$$

为求解式 (34), 本文采用迭代式随机搜索: 在 100 次迭代中, 每轮于可行域  $\mathcal{X}$  内随机生成 250 个候选点, 并由代理模型  $\hat{f}_h(\mathbf{x})$  快速评估. 其收敛曲线如图 4 所示, 最优值在初始阶段快速提升且约 80 次迭代后收敛, 表明该策略有效并找到了可靠解.

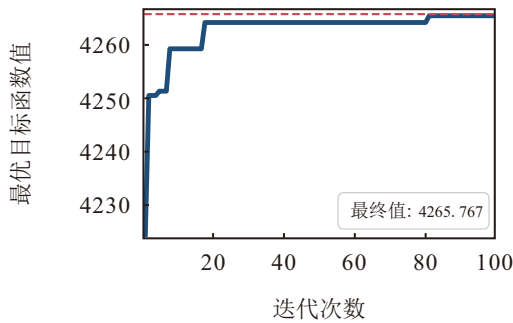


图4 寻优过程收敛图

图 5 采用平行坐标图进行了可视化对比代理模型优化得到的候选最优解  $\mathbf{x}_{opt}$  与高保真数据集最优解  $\mathbf{x}_{h,best}$  在 19 维参数空间中的差异. 图中每条垂直轴线代表一个输入参数维度, 轴线范围对应参数的归一化可行域. 红色实线连接了  $\mathbf{x}_{opt}$  在各维度上的取值, 蓝色虚线则连接了  $\mathbf{x}_{h,best}$  的对应值.

图 5 表明, 候选最优解  $\mathbf{x}_{opt}$  在参数  $x_5, x_{10}, x_{12}$  上的取值与数据集最优解  $\mathbf{x}_{h,best}$  相比发生了大幅调整, 在其他维度上的取值较为接近, 呈现出不同的变化趋势或取值水平. 表明为获得表 3 所示的射程提升, 基于代理模型的优化过程并非对  $\mathbf{x}_{h,best}$  进行简单的局部搜索, 而是通过对特定关键参数进行针对性的、有时甚至是大幅度的调整, 在高维设计空间中识别出了一个性能更优的新区域. 这突显了该方法在探索复杂设计空间以发现改进方案方面的能力.

表 3 对比了代理模型优化得到的最大预测射程与高保真数据集中观测到的最大射程. 结果显示, 优化过程识别出的候选最优解  $\mathbf{x}_{opt}$ , 其经代理模型预测

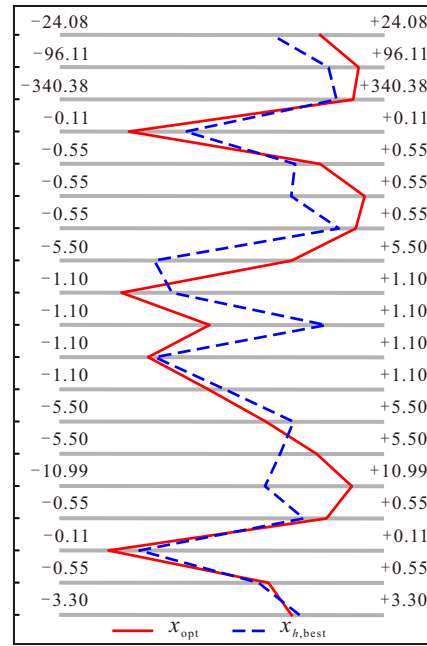


图5 候选最优解  $\mathbf{x}_{opt}$  与数据集最优参数  $\mathbf{x}_{h,best}$  对比平行坐标图

表3 优化结果与数据集最优值对比

指标	值
预测最大射程	$\hat{f}_h(\mathbf{x}_{opt}) = 4265.7669(\text{km})$
数据集最大射程	$f_h(\mathbf{x}_{h,best}) = 4224.6000(\text{km})$
相对提升量	41.1669(km)

的射程  $\hat{f}_h(\mathbf{x}_{opt})$  超越了训练数据中的最大观测值  $f_h(\mathbf{x}_{h,best})$ . 这提示所构建的代理模型能够引导优化搜索至预测性能更优的区域, 展示了该方法在探索设计空间、识别具有提升潜力的设计方案方面的效用, 对提升装备射程性能具有实际指导意义.

## 5 结论

针对高维输入下多保真高斯过程回归面临的维度灾难挑战, 以及现有改进策略在优化稳定性等方面可能存在的局限性, 本文提出了一种集成深度特征多保真高斯过程回归法. 该方法的关键特点包括运用集成深度神经网络进行旨在增强鲁棒性的自适应特征提取, 并结合梯度隔离与两阶段训练策略, 有效解耦了特征学习与高斯过程建模过程, 旨在缓解端到端优化可能带来的不稳定性. 通过对高维测试函数的数值验证以及装备射程优化案例研究, 对所提方法的有效性进行了检验. 结果表明, EDF-MFGPR 方法相较于基准方法改善了高维多保真代理模型的预测精度, 且展现出较好的稳定性和应用潜力, 为处理复杂工程系统的高维分析与优化问题提供了建模途径.

## 参考文献 (References)

[1] 乔浩, 战仁军, 林原. 面向使命任务的武器装备体系能

- 力规划方法[J]. 控制与决策, 2020, 35(8): 2042-2048.  
(Qiao H, Zhan R J, Lin Y. Mission oriented capability planning method for weapon system of systems[J]. Control and Decision, 2020, 35(8): 2042-2048.)
- [2] 陈洪转, 万良琪, 欧阳林寒, 等. 面向复杂装备精密产品质量特性的 Kriging-RBDO 可靠性优化设计[J]. 控制与决策, 2019, 34(9): 1929-1936.  
(Chen H Z, Wan L Q, Ouyang L H, et al. Precision product of complex equipment quality characteristic reliability-based design optimization using Kriging model[J]. Control and Decision, 2019, 34(9): 1929-1936.)
- [3] 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.)
- [4] Lataniotis C, Marelli S, Sudret B. Extending classical surrogate modeling to high dimensions through supervised dimensionality reduction: A data-driven approach[J]. *International Journal for Uncertainty Quantification*, 2020, 10(1): 55-82.
- [5] Laparra V, Malo J, Camps-Valls G. Dimensionality reduction via regression in hyperspectral imagery[J]. *IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing*, 2015, 9(6): 1026-1036.
- [6] 张逸, 刘必杰, 邵振国, 等. 基于高斯过程回归的谐波源不确定性通用模型[J]. 中国电机工程学报, 2022, 42(3): 992-1002.  
(Zhang Y, Liu B J, Shao Z G, et al. General and uncertain harmonic source model based on Gaussian process regression[J]. Proceedings of the CSEE, 2022, 42(3): 992-1002.)
- [7] Ferrari F, Dunson D B. Identifying main effects and interactions among exposures using Gaussian processes[J]. *The Annals of Applied Statistics*, 2020, 14(4): 1743-1758.
- [8] Kim J Y, Lee D Y, Lee J, et al. Parameter optimization of hybrid-tandem gas metal arc welding using analysis of variance-based Gaussian process regression[J]. *Metals*, 2021, 11(7): 1087.
- [9] Kontio J A J, Sillanpää M J. Scalable nonparametric prescreening method for searching higher-order genetic interactions underlying quantitative traits[J]. *Genetics*, 2019, 213(4): 1209-1224.
- [10] 金怀平, 王建军, 董守龙, 等. 基于深度学习特征提取与多目标优化集成修剪的选择性集成学习软测量方法[J]. 控制与决策, 2023, 38(3): 738-750.  
(Jin H P, Wang J J, Dong S L, et al. Selective ensemble learning for soft sensor development based on deep learning for feature extraction and multi-objective optimization for ensemble pruning[J]. Control and Decision, 2023, 38(3): 738-750.)
- [11] Noack M M, Luo H R, Risser M D. A unifying perspective on non-stationary kernels for deeper Gaussian processes[J]. *APL Machine Learning*, 2024, 2: 010902.
- [12] Chen W, Khardon R, Liu L. AK: Attentive kernel for Information gathering[C]. *Robotics: Science and Systems XVIII*. New York, 2022: 47.
- [13] Gladstone R J, Nabian M A, Keshavarzzadeh V, et al. Robust topology optimization using multi-fidelity variational autoencoders[J]. *Journal of Machine Learning for Modeling and Computing*, 2024, 5(4): 23-52.
- [14] Deshpande S, Rappel H, Hobbs M, et al. Gaussian process regression + deep neural network autoencoder for probabilistic surrogate modeling in nonlinear mechanics of solids[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2025, 437: 117790.
- [15] Yang J, Chen T, Zhu M, et al. Learning to Generalize Provably in Learning to Optimize[C]. *Proceedings of The 26<sup>th</sup> International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*. Valencia, 2023: 9807-9825.
- [16] Hernandez-Garcia A, Saxena N, Jain M, et al. Multi-fidelity active learning with GFlowNets[EB/OL]. 2023, arXiv: 2306.11715.
- [17] Wei Y, Sheth R, Khardon R. DirectLoss Minimization for Sparse Gaussian Processes[C]. *Proceedings of The 24<sup>th</sup> International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*. Online: PMLR, 2021: 2566-2574.
- [18] Chang C, Zeng T Y. A hybrid data-driven-physics-constrained Gaussian process regression framework with deep kernel for uncertainty quantification[J]. *Journal of Computational Physics*, 2023, 486: 112129.
- [19] Sabanza-Gil V, Barbano R, Pacheco Gutiérrez D, et al. Best practices for multi-fidelity Bayesian optimization in materials and molecular research[J]. *Nature Computational Science*, 2025, 5(7): 572-581.
- [20] Meng X H, Wang Z C, Fan D X, et al. A fast multi-fidelity method with uncertainty quantification for complex data correlations: Application to vortex-induced vibrations of marine risers[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2021, 386: 114212.
- [21] Gao K, Donahue C, Henderson B G, et al. Deep-learning-guided high-resolution subsurface reflectivity imaging with application to ground-penetrating radar data[J]. *Geophysical Journal International*, 2022, 233(1): 448-471.
- [22] Jung Y, Lee I. Optimal design of experiments for optimization-based model calibration using Fisher information matrix[J]. *Reliability Engineering & System Safety*, 2021, 216: 107968.

## 作者简介

王语晨 (1998-), 男, 博士生, 从事装备试验鉴定与评估, E-mail: wangyuchen@hit.stu.edu.com;

杨宝庆 (1980-), 男, 教授, 博士, 从事制导控制的研究, E-mail: ybq@hit.edu.cn;

马杰 (1972-), 女, 教授, 博士, 从事装备试验鉴定与评估, E-mail: mj\_csc@163.com;

张世轩 (1996-), 男, 博士生, 从事装备试验鉴定与评估, E-mail: 21b904030@hit.stu.edu.com;

郑小鹏 (1984-), 男, 研究员, 硕士, 从事飞行器总体设计, E-mail: zhxp1014@163.com;

刘闻 (1994-), 男, 工程师, 硕士, 从事飞行器总体设计, E-mail: mos\_liuwen@163.com.