

一种改进的 CoKriging 建模方法及其应用*

张锡, 杨希祥, 张为华, 武泽平, 赵海龙, 王鹏宇

国防科技大学空天科学学院, 湖南长沙 410073

摘要: 提出了一种改进变可信度代理模型—ICoKriging 模型。在 CoKriging 模型的基础上将 CoKriging 模型中的高精度样本与低精度样本扩展至高中低三种精度不同的样本, 经数值算例及超声速减阻问题验证, 该方法相比于 Kriging 模型和 CoKriging 模型精度更高, 更易于全局寻优。

关键词: CoKriging 模型; ICoKriging 模型; 减阻

中图分类号: V211.3 **文献标志码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2021) 04-0136-10

An improved CoKriging modeling method and its application

ZHANG Xi, YANG Xixiang, ZHANG Weihua, WU Zeping, ZHAO Hailong, WANG Pengyu

College of Aerospace Science and Engineering, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China

Abstract: An new improved variable-fidelity surrogate model (ICokriging model) was proposed. Based on the CoKriging model, we extended two different samples of the high-precision and low-precision of the CoKriging model to three different samples with high-precision, medium-precision and low-precision in the ICoKriging model. This new proposed model has higher accuracy and it is easier to find global optimization compared with the Kriging model and the CoKriging model, which was verified by numerical examples and a supersonic drag reduction problem.

Key words: CoKriging model; ICoKriging model; drag reduction

代理模型在空间科学、结构分析、多学科设计优化等诸多工程优化问题中扮演着越来越重要的作用。计算流体力学建模中耗时持久的计算可用代理模型替代, 显著提高计算效率。此外, 代理模型可集成全局寻优、数值噪声过滤、并行设计优化和数值仿真于一体, 提高工程设计效率^[1-8]。代理模型又称为响应面模型、近似模型、元模型等。在诸多代理模型中, Kriging 模型因在分析和预测多维、高度非线性问题时显示出了优良的准确性而受到越来越多学者的青睐^[9-12]。基于 Kriging 模型的改进模型也越来越多, CoKriging 模型^[13-19]、梯度增强 GEKriging 模型等^[20-23]。在提高代理模型建模效率方面, CoKriging 模型结合不同精度的样本数据提供了一种非常有吸引力的选择。本文对 CoKriging 模型进一步改进构建了 ICoKriging 模型 (improved CoKriging), 并通过数值试验和超声速优化问题检验该模型的有效性。

1 改进 CoKriging 模型

1.1 模型描述及基本假设

对一个 m 维优化问题, CoKriging 模型是仅设计高可信度和低可信度抽样。这里, 对此设计进行改进,

* 收稿日期: 2020-09-10

录用日期: 2020-09-24

网络首发日期: 2020-11-10

基金项目: 国家自然科学基金 (52005502); 国防科技大学研究项目 (ZK19-11)

作者简介: 张锡 (1991 年生), 男; 研究方向: 设计优化; E-mail: elementarydynamic@163.com

通信作者: 武泽平 (1990 年生), 男; 研究方向: 设计优化; E-mail: zeping123@nudt.edu.cn

在设计空间同时进行高可信度采样和中、低可信度采样分析。假设我们更为关注的是关于高可信度函数 $f_1: R^m \rightarrow \mathbf{R}$ 的预测值, $f_2: R^m \rightarrow \mathbf{R}$, $f_3: R^m \rightarrow \mathbf{R}$ 是用来辅助 f_1 的中、低可信度采样函数, 各采样点分别为

$$S_1 = (x_{11}, x_{12}, \dots, x_{1n_1})^T \in \mathbf{R}^{n_1 \times m}, \quad S_2 = (x_{21}, x_{22}, \dots, x_{2n_2})^T \in \mathbf{R}^{n_2 \times m}, \quad S_3 = (x_{31}, x_{32}, \dots, x_{3n_3})^T \in \mathbf{R}^{n_3 \times m}. \quad (1)$$

对应于各采样点的函数值为

$$y_1 = [y(x_{11}), y(x_{12}), \dots, y(x_{1n_1})]^T \in \mathbf{R}^{n_1}, \quad y_2 = [y(x_{21}), y(x_{22}), \dots, y(x_{2n_2})]^T \in \mathbf{R}^{n_2}, \\ y_3 = [y(x_{31}), y(x_{32}), \dots, y(x_{3n_3})]^T \in \mathbf{R}^{n_3}, \quad (2)$$

其中 n_1, n_2, n_3 是高中低可信度样本点数。 $(S_1, y_1), (S_2, y_2), (S_3, y_3)$ 是各采样空间的样本点, 我们将其重新表述为

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{11} \\ \vdots \\ x_{1n_1} \\ x_{21} \\ \vdots \\ x_{2n_2} \\ x_{31} \\ \vdots \\ x_{3n_3} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y}_s = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y(x_{11}) \\ \vdots \\ y(x_{1n_1}) \\ y(x_{21}) \\ \vdots \\ y(x_{2n_2}) \\ y(x_{31}) \\ \vdots \\ y(x_{3n_3}) \end{pmatrix} \quad (3)$$

和Kriging模型、CoKriging模型一样, ICoKriging模型中将 y_1, y_2, y_3 函数的输出值视为一个稳态随机过程, 因此我们将 y_1, y_2, y_3 替换为如下随机过程的实现, 即

$$Y_1 = \beta_1 + Z_1(x), \quad Y_2 = \beta_2 + Z_2(x), \quad Y_3 = \beta_3 + Z_3(x) \quad (4)$$

且, 满足 $E(Z_1) = E(Z_2) = E(Z_3) = 0$, 并假设对任意不同的 x 和 \tilde{x} 有

$$\begin{aligned} \text{Cov}[z_1(x_1), z_1(\tilde{x}_1)] &= \sigma_1^2 R^{11}(x_1, \tilde{x}_1) \equiv \mathbf{C}^{(11)} \in \mathbf{R}^{n_1 \times n_1}, \\ \text{Cov}[z_2(x_2), z_2(\tilde{x}_2)] &= \sigma_2^2 R^{22}(x_2, \tilde{x}_2) \equiv \mathbf{C}^{(22)} \in \mathbf{R}^{n_2 \times n_2}, \\ \text{Cov}[z_3(x_3), z_3(\tilde{x}_3)] &= \sigma_3^2 R^{33}(x_3, \tilde{x}_3) \equiv \mathbf{C}^{(33)} \in \mathbf{R}^{n_3 \times n_3}, \\ \text{Cov}[z_1(x_1), z_2(\tilde{x}_2)] &= \sigma_1 \sigma_2 R^{12}(x_1, \tilde{x}_2) \equiv \mathbf{C}^{(12)} \in \mathbf{R}^{n_1 \times n_2}, \\ \text{Cov}[z_1(x_1), z_3(\tilde{x}_3)] &= \sigma_1 \sigma_3 R^{13}(x_1, \tilde{x}_3) \equiv \mathbf{C}^{(13)} \in \mathbf{R}^{n_1 \times n_3}, \\ \text{Cov}[z_2(x_2), z_3(\tilde{x}_3)] &= \sigma_2 \sigma_3 R^{23}(x_2, \tilde{x}_3) \equiv \mathbf{C}^{(23)} \in \mathbf{R}^{n_2 \times n_3}, \\ \text{Cov}[z_1(x_1), z_1(x)] &= \sigma_1^2 R^1(x_1, x) \equiv \mathbf{C}^{(1)} \in \mathbf{R}^{n_1}, \\ \text{Cov}[z_2(x_2), z_1(x)] &= \sigma_1 \sigma_2 R^2(x_2, x) \equiv \mathbf{C}^{(2)} \in \mathbf{R}^{n_2}, \\ \text{Cov}[z_3(x_3), z_1(x)] &= \sigma_1 \sigma_3 R^3(x_3, x) \equiv \mathbf{C}^{(3)} \in \mathbf{R}^{n_3}, \end{aligned} \quad (5)$$

其中 $\sigma_1^2, \sigma_2^2, \sigma_3^2$ 是 Z_1, Z_2, Z_3 的方差, $E[Y_1(x)] = \beta_1, E[Y_2(x)] = \beta_2, E[Y_3(x)] = \beta_3$, \mathbf{R} 是实数, $R^{(ij)}$ 为点间空间距离有关的函数。当两点重合时, $R^{(ij)}$ 取值为 1; 当两点距离无穷远时, $R^{(ij)}$ 取值为 0^[13, 24]。

1.2 ICoKriging模型预测值及均方差

假设最后模型的输出可用 y_1, y_2, y_3 的线性组合近似, 于是 ICoKriging 模型在 x 对 $y_1(x)$ 的预测值可表述为

$$\widehat{y_1(x)} = \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{y}_s = \lambda_1^T \mathbf{y}_1 + \lambda_2^T \mathbf{y}_2 + \lambda_3^T \mathbf{y}_3, \quad (6)$$

其中 $\boldsymbol{\lambda}^T = (\lambda_1^T, \lambda_2^T, \lambda_3^T)$ 是赋予不同可信度的样本的权重。我们用随机变量 $\mathbf{Y}_1 = [Y_1(x_{11}), \dots, Y_1(x_{1n_1})]^T$, $\mathbf{Y}_2 = [Y_2(x_{21}), \dots, Y_2(x_{2n_2})]^T$, $\mathbf{Y}_3 = [Y_3(x_{31}), \dots, Y_3(x_{3n_3})]^T$ 替代 $\mathbf{y}_1 = [y(x_{11}), y(x_{12}), \dots, y(x_{1n_1})]^T$, $\mathbf{y}_2 = [y(x_{21}), y(x_{22}), \dots, y(x_{2n_2})]^T$ 。为估计权重系数 $\boldsymbol{\lambda}^T$, 我们使用最小均方误差

$$\text{MSE}[\widehat{y_1(x)}] = E[(\widehat{y_1(x)} - Y_1)^2] = E[(\lambda_1^T Y_1 + \lambda_2^T Y_2 + \lambda_3^T Y_3 - Y_1)^2]. \quad (7)$$

为满足估计的无偏性, 需要满足约束条件

$$E[\lambda_1^T Y_1 + \lambda_2^T Y_2 + \lambda_3^T Y_3] = E[Y_1], \quad (8)$$

即求解如下带约束的最优化问题

$$\text{Min } E[(\lambda_1^T Y_1 + \lambda_2^T Y_2 + \lambda_3^T Y_3 - Y_1)^2] \quad (9)$$

满足约束条件 $\lambda_1^T I - 1 = 0$, $\lambda_2^T I = 0$, $\lambda_3^T I = 0$. 等式约束优化问题可采用拉格朗日乘子法求解, 令

$$L(\lambda_1^T, \lambda_2^T, \lambda_3^T, \mu_1, \mu_2, \mu_3) = E[(\widehat{y_1(x)} - Y_1)^2] + \mu_1(\lambda_1^T I - 1) + \mu_2(\lambda_2^T I) + \mu_3(\lambda_3^T I), \quad (10)$$

令 $X^T = (\lambda_1^T, \lambda_2^T, \lambda_3^T)$, 则解方程组

$$\frac{\partial L}{\partial X} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \mu_1} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \mu_2} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \mu_3} = 0. \quad (11)$$

通过矩阵求导方法, 可得到如下方程组

$$\begin{pmatrix} C^{(11)} & C^{(12)} & C^{(13)} & I & 0 & 0 \\ C^{(21)} & C^{(22)} & C^{(23)} & 0 & I & 0 \\ C^{(31)} & C^{(32)} & C^{(33)} & 0 & 0 & I \\ I^T & 0^T & 0^T & 0 & 0 & 0 \\ 0^T & I^T & 0^T & 0 & 0 & 0 \\ 0^T & 0^T & I^T & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \\ \frac{\mu_1}{2} \\ \frac{\mu_2}{2} \\ \frac{\mu_3}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C^{(1)} \\ C^{(2)} \\ C^{(3)} \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

作如下变换

$$\begin{cases} \tilde{\lambda}_1 = \lambda_1 \\ \tilde{\lambda}_2 = \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \lambda_2 \\ \tilde{\lambda}_3 = \frac{\sigma_3}{\sigma_1} \lambda_3 \end{cases}, \quad \begin{cases} \tilde{\mu}_1 = \frac{\mu_1}{2\sigma_1^2} \\ \tilde{\mu}_2 = \frac{\mu_2}{2\sigma_1\sigma_2} \\ \tilde{\mu}_3 = \frac{\mu_3}{2\sigma_1\sigma_3} \end{cases}. \quad (13)$$

可得

$$\begin{pmatrix} R^{(11)} & R^{(12)} & R^{(13)} & I & 0 & 0 \\ R^{(21)} & R^{(22)} & R^{(23)} & 0 & I & 0 \\ R^{(31)} & R^{(32)} & R^{(33)} & 0 & 0 & I \\ I^T & 0^T & 0^T & 0 & 0 & 0 \\ 0^T & I^T & 0^T & 0 & 0 & 0 \\ 0^T & 0^T & I^T & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\lambda}_1 \\ \tilde{\lambda}_2 \\ \tilde{\lambda}_3 \\ \tilde{\mu}_1 \\ \tilde{\mu}_2 \\ \tilde{\mu}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R^{(1)} \\ R^{(2)} \\ R^{(3)} \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

由于 $\widehat{y_1(x)} = \lambda^T y_s = \lambda_1^T y_1 + \lambda_2^T y_2 + \lambda_3^T y_3 = (\tilde{\lambda}_1^T, \tilde{\lambda}_2^T, \tilde{\lambda}_3^T) \left(y_1, \frac{\sigma_1}{\sigma_2} y_2, \frac{\sigma_1}{\sigma_3} y_3 \right)^T$, 故

$$\widehat{y_1(x)} = \begin{pmatrix} R^{(1)} \\ R^{(2)} \\ R^{(3)} \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} R^{(11)} & R^{(12)} & R^{(13)} & I & 0 & 0 \\ R^{(21)} & R^{(22)} & R^{(23)} & 0 & I & 0 \\ R^{(31)} & R^{(32)} & R^{(33)} & 0 & 0 & I \\ I^T & 0^T & 0^T & 0 & 0 & 0 \\ 0^T & I^T & 0^T & 0 & 0 & 0 \\ 0^T & 0^T & I^T & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} y_1 \\ \frac{\sigma_1}{\sigma_2} y_2 \\ \frac{\sigma_1}{\sigma_3} y_3 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

令

$$\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} R^{(1)} \\ R^{(2)} \\ R^{(3)} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\varphi} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} R^{(11)} & R^{(12)} & R^{(13)} \\ R^{(21)} & R^{(22)} & R^{(23)} \\ R^{(31)} & R^{(32)} & R^{(33)} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{F} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{I} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{I} \end{pmatrix}, \quad \tilde{\boldsymbol{y}}_s = \begin{pmatrix} \boldsymbol{y}_1 \\ \frac{\sigma_1}{\sigma_2} \boldsymbol{y}_2 \\ \frac{\sigma_1}{\sigma_3} \boldsymbol{y}_3 \end{pmatrix}.$$

利用分块矩阵求逆方法可得

$$\widehat{\boldsymbol{y}}_1(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{\varphi}^T \tilde{\boldsymbol{\beta}} + \boldsymbol{r}^T \boldsymbol{R}^{-1} [\tilde{\boldsymbol{y}}_s - \boldsymbol{F} \tilde{\boldsymbol{\beta}}], \quad (16)$$

其中 $\tilde{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{F}^T \boldsymbol{R}^{-1} \boldsymbol{F})^{-1} \boldsymbol{F}^T \boldsymbol{R}^{-1} \tilde{\boldsymbol{y}}_s$.

由上面解出的 $\widehat{\boldsymbol{y}}_1(\boldsymbol{x})$ 和 $\text{MSE}[\widehat{\boldsymbol{y}}_1(\boldsymbol{x})] = \boldsymbol{E}[(\widehat{\boldsymbol{y}}_1(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{Y}_1)^2]$, 可得

$$\text{MSE}[\widehat{\boldsymbol{y}}_1(\boldsymbol{x})] = \sigma_1^2 \left\{ 1 - \begin{bmatrix} \boldsymbol{r} \\ \boldsymbol{\varphi} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \boldsymbol{R} & \boldsymbol{F} \\ \boldsymbol{F} & \boldsymbol{0} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \boldsymbol{r} \\ \boldsymbol{\varphi} \end{bmatrix} \right\}. \quad (17)$$

进一步展开可得

$$\text{MSE}[\widehat{\boldsymbol{y}}_1(\boldsymbol{x})] = \sigma_1^2 \left[1 - \boldsymbol{r}^T \boldsymbol{R}^{-1} \boldsymbol{r} + (\boldsymbol{r}^T \boldsymbol{R}^{-1} \boldsymbol{F} - \boldsymbol{\varphi})(\boldsymbol{F}^T \boldsymbol{R}^{-1} \boldsymbol{F})^{-1} (\boldsymbol{r}^T \boldsymbol{R}^{-1} \boldsymbol{F} - \boldsymbol{\varphi})^T \right]. \quad (18)$$

1.3 相关函数

在 ICoKriging 模型中, 需要设置相关函数 $\boldsymbol{R}^{(ij)}$ 的具体形式, 该函数反映了不同精度样本对模型输出结果的影响, 类似于 Kriging 模型中对于任意两点 $\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j$, \boldsymbol{R} 仅仅是 $\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j$ 距离的函数 $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}(\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|)$, 一般可用如下形式的函数

$$\left(\boldsymbol{R}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) \right)_{ij} = \prod_{k=1}^m R_k(\boldsymbol{\theta}_k, x_{ik} - x_{jk}), \quad x_{ik} \in \boldsymbol{x}_i, \quad x_{jk} \in \boldsymbol{x}_j. \quad (19)$$

$\boldsymbol{\theta} = [\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m]^T \in \boldsymbol{R}^m (\theta_1 > 0)$ 为待定参数, 这里相关函数的选择一般需要满足高斯假设, 即使得相关矩阵为对称正定阵, 一般可以使用如下的相关函数

$$R_k(\boldsymbol{\theta}_k, x_{ik} - x_{jk}) = \exp\left(-\theta_k |x_{ik} - x_{jk}|^{p_k}\right), \quad 1 \leq p_k \leq 2, \quad k = 1, 2, \dots, m, \quad (20)$$

p_k 决定了相关函数的光滑程度。另一种被称为三次样条相关函数的也逐渐为人们所关注。

$$R_k(\boldsymbol{\theta}_k, x_{ik} - x_{jk}) = \begin{cases} 1 - 15\varepsilon_k^2 + 30\varepsilon_k^3, & 0 < \varepsilon_k < 0.2, \\ 1.25(1 - \varepsilon_k)^3, & 0.2 < \varepsilon_k < 1, \\ 0, & \varepsilon_k > 1, \end{cases} \quad (21)$$

其中 $\varepsilon_k = \theta_k |x_{ik} - x_{jk}|, k = 1, 2, \dots, m$. 由三次样条函数生成的相关矩阵条件数相比高斯函数表现更好。

1.4 模型超参数的优化

同 Kriging 模型、CoKriging 模型一样, 建立 ICoKriging 模型之前需要对模型中的超参数 $\tilde{\boldsymbol{\beta}}, \frac{\sigma_1}{\sigma_2}, \frac{\sigma_1}{\sigma_3}, \boldsymbol{\theta}$ 进行设置, 一般使用极大似然法估计超参数。假设抽样所得样本点来自一个高斯过程, 那么相对应的似然函数为

$$L\left(\tilde{\boldsymbol{\beta}}, \frac{\sigma_1}{\sigma_2}, \frac{\sigma_1}{\sigma_3}, \boldsymbol{\theta}\right) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\sigma_1^2)^{n_1+n_2+n_3} |\boldsymbol{R}|}} \exp\left\{-\frac{1}{2} \frac{(\tilde{\boldsymbol{y}}_s - \boldsymbol{F}\tilde{\boldsymbol{\beta}})^T \boldsymbol{R}^{-1} \tilde{\boldsymbol{y}}_s - \boldsymbol{F}\tilde{\boldsymbol{\beta}}}{\sigma_1^2}\right\}. \quad (22)$$

类似于多元函数求偏导, 利用矩阵求导的方法, 令 $\frac{\partial L}{\partial \tilde{\boldsymbol{\beta}}} = 0, \frac{\partial L}{\partial(\sigma_1/\sigma_2)} = 0, \frac{\partial L}{\partial(\sigma_1/\sigma_3)} = 0$. 则有

$$\begin{aligned} \tilde{\boldsymbol{\beta}} &= (\boldsymbol{F}^T \boldsymbol{R}^{-1} \boldsymbol{F})^{-1} \boldsymbol{F}^T \boldsymbol{R}^{-1} \tilde{\boldsymbol{y}}_s, \\ \frac{\sigma_1}{\sigma_2} &= \left(\begin{bmatrix} 0 \\ \boldsymbol{y}_2 \end{bmatrix}^T \boldsymbol{R}^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ \boldsymbol{y}_2 \end{bmatrix} \right)^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ \boldsymbol{y}_2 \end{bmatrix}^T \boldsymbol{R}^{-1} \begin{bmatrix} -(\boldsymbol{y}_1 - \boldsymbol{I}\tilde{\boldsymbol{\beta}}_1) \\ -\boldsymbol{I}\tilde{\boldsymbol{\beta}}_2 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\frac{\sigma_1}{\sigma_3} = \left(\begin{bmatrix} 0 \\ \mathbf{y}_3 \end{bmatrix}^T \mathbf{R}^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ \mathbf{y}_3 \end{bmatrix} \right)^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ \mathbf{y}_3 \end{bmatrix}^T \mathbf{R}^{-1} \begin{bmatrix} -(\mathbf{y}_1 - \mathbf{I}\tilde{\boldsymbol{\beta}}_1) \\ -\mathbf{I}\tilde{\boldsymbol{\beta}}_3 \end{bmatrix}. \quad (24)$$

对 σ_1^2 的估计值为

$$\sigma_1^2 = \frac{(\tilde{\mathbf{y}}_s - \mathbf{F}\tilde{\boldsymbol{\beta}})^T \mathbf{R}^{-1} (\tilde{\mathbf{y}}_s - \mathbf{F}\tilde{\boldsymbol{\beta}})}{n_1 + n_2 + n_3}. \quad (25)$$

得到上述结果后, 再估计超参数 $\boldsymbol{\theta}(\boldsymbol{\theta}^{(11)}, \boldsymbol{\theta}^{(22)}, \boldsymbol{\theta}^{(33)}, \boldsymbol{\theta}^{(12)}, \boldsymbol{\theta}^{(13)}, \boldsymbol{\theta}^{(23)})$.

$$\boldsymbol{\theta} = \operatorname{argmax} \left[-\frac{1}{2} \left[(n_1 + n_2 + n_3) \ln(\sigma_1^2) + \ln |\mathbf{R}| \right] \right]. \quad (26)$$

$\boldsymbol{\theta}$ 没有解析解, 可通过遗传算法等进化算法求得 $\boldsymbol{\theta}$ 的解。

1.5 相关矩阵求逆

基于以上推导, 使用 python 语言实现 ICoKriging 模型程序设计, 计算机程序设计一般不存在较大困难, 比较关键的是求矩阵 \mathbf{R} 的逆矩阵, 当设计空间中的样本点较为接近时, 会导致矩阵 \mathbf{R} 奇异, 求逆矩阵失败。此外即便不存在奇异问题, 当矩阵 \mathbf{R} 的条件数很大时, 求解线性方程组的数值误差也会很大。这时比较实用的解决办法是对矩阵 \mathbf{R} 对角线上元素加上接近于零的常数, 即 $\mathbf{R} = \mathbf{R} + \delta \mathbf{I}$, 其中 \mathbf{I} 为单位矩阵, $\delta = (1000 + n) \varepsilon_m$ 。 ε_m 为双精度时的机器零, 不同的计算机 ε_m 取值不一样^[9]。其次, 维数较大时矩阵求逆较为费时, 可先采用矩阵分解方法对 \mathbf{R} 矩阵进行分解, 再对分解后的矩阵求逆。通常对矩阵进行三角分解, 包括 LR 分解或者 Cholesky 分解。因 \mathbf{R} 为对称正定矩阵, 可以使用 Cholesky 分解, 即 $\mathbf{R} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$, 其中 \mathbf{L} 为下三角矩阵。进行第 j 步分解时, \mathbf{L} 中元素 $l_{jj} = (R_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2)^{1/2}$, $j = 1, 2, \dots, n$ 。 $l_{ij} = (R_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}) / l_{jj}$, $i = j + 1, \dots, n$ 。实践证明, 上述解决奇异矩阵的方法及分解求逆法有效。

2 算例分析

2.1 数值算例

为验证 ICoKriging 模型的性能, 我们用一些函数进行测试, 并对 Kriging、CoKriging 和 ICoKriging 的插值结果进行分析比较。此处引用文献^[13]提供的经典一维测试函数 $y = (6x - 2)^2 \sin(12x - 4)$, $x \in [0, 1]$, 高、中、低三种可信度的样本分别为 $S_1 = (0.0, 0.6, 1)$, $S_2 = (0.1, 0.4, 0.5)$, $S_3 = (0.3, 0.8, 0.9)$ 。

图 1 展示了不同插值模型对样本的拟合效果以及插值结果和真实函数的比较。图 1 中实心红色方块为高精度样本 S_1 , 蓝色实心三角形为中精度样本 S_2 , 绿色实心三角形为低精度样本 S_3 。Kriging 模型仅使用三个高精度的样本 S_1 , 插值见图 1 (a); CoKriging 模型使用了 S_1, S_2 , 插值结果见图 1 (b); ICoKriging 模型则综合了 S_1, S_2, S_3 三种样本, 插值结果见图 1 (c) 部分。图 1 (d) 是三种插值模型与真实函数的比较。从图中可以看出在 $x \in [0, 0.6]$ 和 $x \in [0.6, 1]$ 上, Kriging 模型与真实函数 $y = (6x - 2)^2 \sin(12x - 4)$ 在绝对误差和变化趋势上均存在较大误差; CoKriging 模型使用 S_1, S_2 后插值结果与真实函数仍有不小误差, 加入样本 S_2 后得到改善的是在 $x \in [0, 0.6]$ 和 $x \in [0.6, 1]$ 上其变化趋势与真实函数相比基本相同, 但是绝对误差仍然较大; ICoKriging 模型综合样本 S_1, S_2, S_3 后, 插值结果与真实函数的绝对误差进一步降低, 整个设计空间上的插值结果与真实函数变化趋势基本相同。

2.2 超声速减阻问题

减阻是超音速飞行器的重要问题之一。减阻杆 (Aerospike) 和减阻盘 (Aerodisk) 搭配使用作为减阻的重要方法之一, 其减阻效果好, 目前已在一些装备中得到应用。对不同减阻杆长度和平面圆柱减阻盘半径与半球形头部 (Hemispherical Body) 的组合在超声速流场中的流动情况进行数值模拟, 分析减阻杆减阻机理以及减阻盘半径和减阻杆长度参数对减阻效果的影响。研究发现, 减阻盘半径和减阻杆长度在一定范围内的增大有利于减阻。

2.2.1 计算模型 本文选取的几何模型采用圆球头部加减阻杆的外形, 头部半径 $R = 100 \text{ mm}$ 。减阻杆的结构形式采用杆加顶端减阻盘, 主要设计参数为减阻杆杆长 d 和减阻盘的半径 r , 减阻盘厚度固定为 $t = 10 \text{ mm}$ 。由于整个几何外形为轴对称的, 因此在计算中采取了轴对称计算假设。研究表明, 对于流动

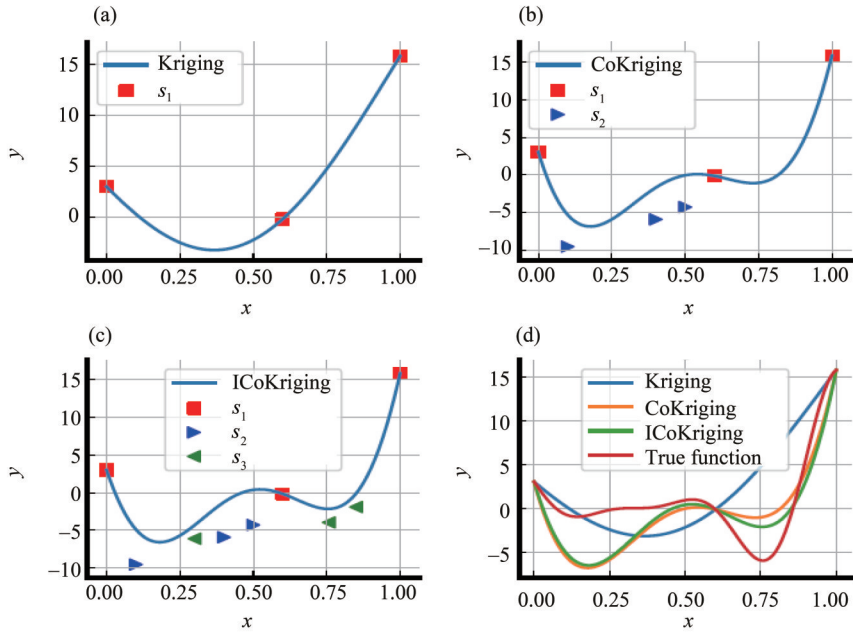


图 1 Kriging, CoKriging 和 ICoKriging 插值方法的比较

Fig. 1 Comparison of Kriging, CoKriging and ICoKriging interpolation methods

较为稳定的情况下, 虽然在再循环区出现了剪切层不对称的情况, 但整个流场体现出了明显的轴对称现象, 因此使用轴对称假设在流动稳定的情况下是可以接受的。半球形头部的纵向截面外形如图 2。圆球头部及减阻杆的网格划分如图 3。鉴于各类湍流模型对减阻杆飞行器数值计算结果影响的分析, 采用了 SST $k-w$ 湍流模型^[25], 边界条件采用压力远场条件、理想气体假设, 气体参数设置为标准大气海平面参数, 其他物理条件马赫数 $Ma = 2$, 攻角 $\alpha = 0$, 压强 $P = 101\,325\text{ Pa}$, 温度 $T = 288.15\text{ K}$ 。

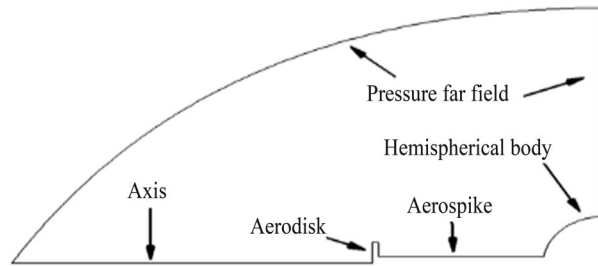


图 2 计算域和几何模型: 半球形头部

Fig. 2 Computational domain and geometric model: hemispherical head

目前, 减阻盘半径与弹头部半径比一般为 10%~60%, 减阻杆长度与弹头部半径比一般为 100%~400%, 则设计减阻盘半径 $10 \leq r \leq 60$, 减阻杆长度 $100 \leq d \leq 400$ 。解如下优化问题

$$\text{Min: } [C_d] \quad \text{s.t.} \quad 10 \leq r \leq 60, \quad 100 \leq d \leq 400, \quad (27)$$

其中 C_d 是减阻杆、减阻盘和弹身头部总的阻力系数。

流体问题的数值仿真结果受多种因素的影响, 其中网格数量是重要的影响因素之一。对文中的减阻问题, 在 80 000、120 000、240 000、360 000、700 000 网格数下计算阻力系数, 迭代收敛情况如图 4 所示。

由图 4 可见, 网格数量较小时, 计算过程可快速收敛, 但其仿真结果不太理想。随着网格数的逐渐增多, 仿真结果逐渐接近, 50 000 步以后 120 000 个以上网格数的仿真模型计算结果基本重合。为建立

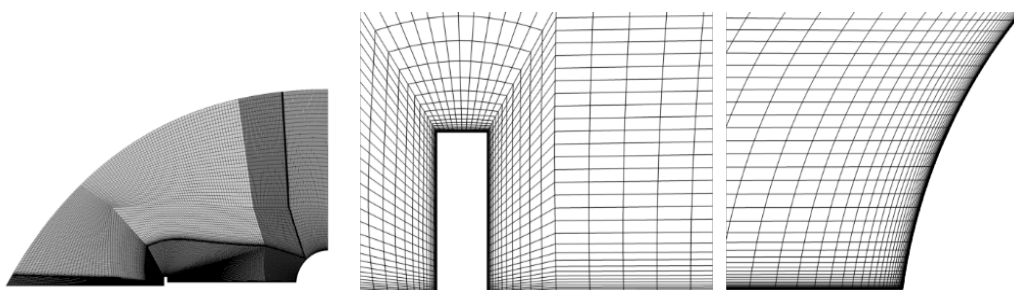


图3 流场网格划分

Fig. 3 Meshing of flow field

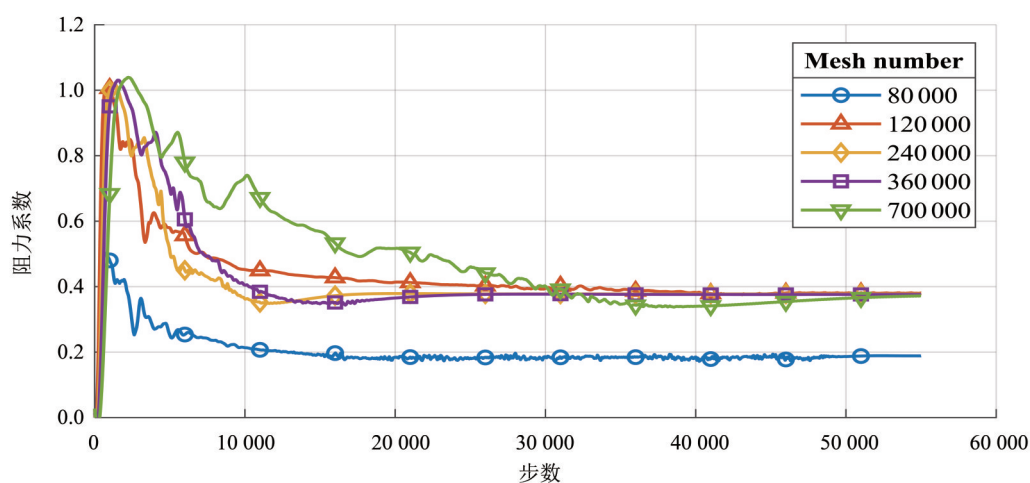


图4 不同网格数下阻力系数

Fig. 4 Drag coefficient of different grid numbers

ICoKriging 模型, 需要设计三种不同可信度的样本。划分 80 000、120 000、240 000 个网格, 使用 CFD 模型计算不同减阻杆长 d 和减阻盘半径 r 对应的阻力系数 C_d , 三种网格分别对应高精度 (S_1)、中精度 (S_2)、低精度 (S_3), 三种样本 S_1, S_2, S_3 样本量分别为 25、36、49。 S_1 的 C_d-d (固定 r)、 C_d-r (固定 d) 样本图见图 5。

2.2.2 计算结果 将减阻杆长 d 、减阻盘半径 r 、阻力系数 C_d 归一化后分别建立代理模型 ICoKriging、CoKriging、Kriging, 使用遗传算法对代理模型寻优、加点、建模、再次寻优, 直至满足收敛条件。数值

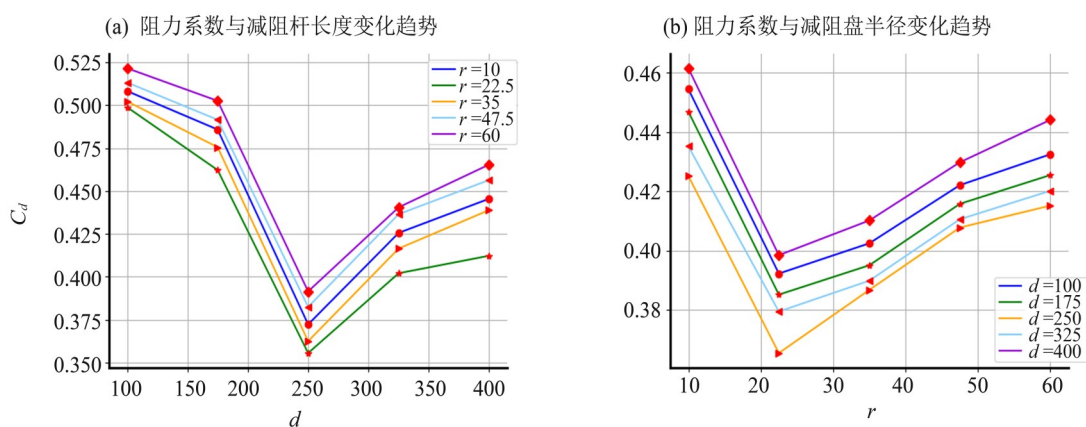


图5 阻力系数随减阻杆长度、减阻盘半径的变化趋势

Fig. 5 The relationship between drag coefficient and drag-reducing rod length, drag-reducing disk radius

计算结果见表1。

表1 基于代理模型的优化结果
Table 1 Optimization results based on Surrogate model

	阻力系数 C_d	减阻盘半径 r /mm	减阻杆长度 d /mm
Kriging 模型	0.365 1	26.559 7	257.617 2
CoKriging 模型	0.358 8	25.852 3	252.589 6
ICoKriging 模型	0.352 0	25.258 8	245.718 5

基于以上三种优化结果,重新设置杆长和半径,求解CFD模型得到头部阻力系数,发现ICoKriging模型与CFD模型求解结果最为吻合,速度分布与压力分布见图6。试验证明基于ICoKriging模型的优化结果更准确。头部阻力系数与减阻杆长、圆盘半径有如下关系:半径较小时,随着半径增加,阻力系数减少;当半径进一步增大,减阻率达到饱和,再将半径增加会导致阻力系数增加;杆长的作用效果与半径类似,在一定范围内杆长增加,阻力系数减少;当杆长达到一定值,再将减阻杆杆长增加,阻力系数会增加。

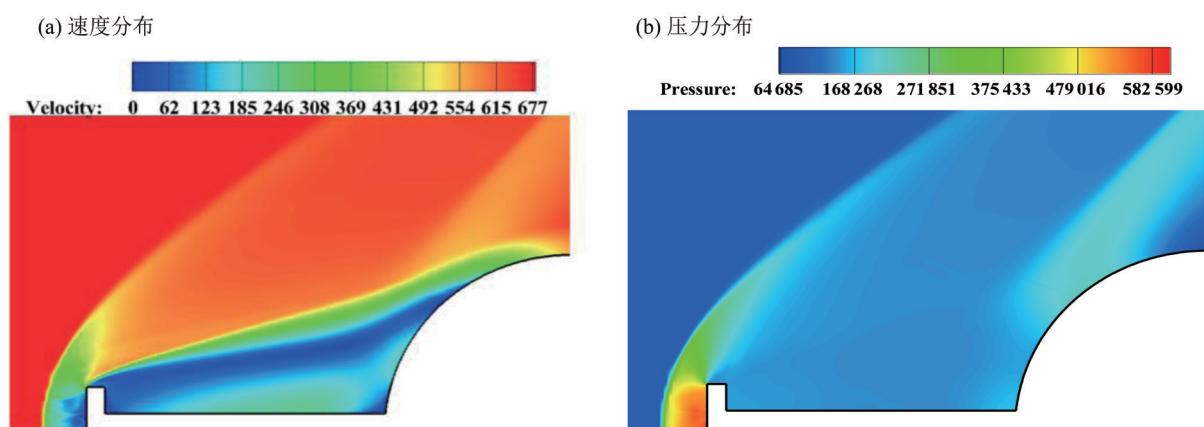


图6 速度和压力分布

Fig. 6 Speed and pressure distribution

3 结 论

本文提出了一种新的建立变可信度代理模型的方法。在CoKriging模型的基础上将CoKriging模型中的高精度样本、低精度样本扩展至高、中、低三种精度不同的样本,建立ICoKriging模型。该模型在CoKriging模型基础上重新定义了插值权重系数,并构建了新的相关矩阵。通过重定义权重系数可以减少ICoKriging模型符号表达复杂性,模型预测值在表达形式上与CoKriging保持一致,在理解上和具体实现上并无难处。同Kriging模型、CoKriging模型,建立ICoKriging前,需要求解模型超参数,这本身即是一个优化问题,文中对超参数的求解提出了简单可行的算法。最后通过解析函数和超声速飞行器头部减阻问题对Kriging、CoKriging、ICoKriging三种模型进行了比较,试验表明ICoKriging模型预测更为准确,优化能力更强,在气动数据校验和外形优化方面具有更多的应用前景。

参考文献:

- [1] 韩忠华. Kriging模型及代理优化算法研究进展[J]. 航空学报, 2016, 37(011):3197-3225.
HAN Z H. Research progress of Kriging model and Surrogate optimization algorithm [J]. Journal of Aeronautics, 2016, 37 (011):3197-3225.
- [2] HAN Z H, ZIMMERMANN R, GRTZ S. A new cokriging method for variable-fidelity surrogate modeling of aerodynamic da-

- ta[C]//48th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition. DLR, 2010.
- [3] MENEZES V, SARAVANAN S, JAGADEESH G, et al. Experimental investigations of hypersonic flow over highly blunted cones with aerospike[J]. *AIAA Journal*, 2003, 41(10):1955–1966.
- [4] FORRESTER A I J, SOBESTER A, KEANE A J. Engineering design via surrogate modelling: a practical guide[M]. DBLP, 2008.
- [5] 彭磊,刘莉,龙腾. 基于动态径向基函数代理模型的优化策略[J]. *机械工程学报*, 2011, 47(007):164–170.
PENG L, LIU L, LONG T. Optimization strategy based on Surrogate model of dynamic radial basis function[J]. *Journal of Mechanical Engineering*, 2011, 47(007):164–170.
- [6] HAN Z H, GOERTZ S. Hierarchical kriging model for variable-fidelity surrogate modeling[J]. *AIAA Journal*, 2012, 50(9):1885–1896.
- [7] HAN Z H, GOERTZ S, ZIMMERMANN R. Improving variable-fidelity surrogate modeling via gradient-enhanced kriging and a generalized hybrid bridge function[J]. *Aerospace & Technology*, 2013, 25(1):177–189.
- [8] BERTRAM A, ZIMMERMANN R. Theoretical investigations of the new Cokriging method for variable-fidelity surrogate modeling[J]. *Advances in Computational Mathematics*, 2018, 44(6):1693–1716.
- [9] 孙美建,詹浩. Kriging模型在机翼气动外形优化中的应用[J]. *空气动力学学报*, 2011(06):759–764.
SUN M J, ZHAN H. Application of Kriging model in optimization of wing aerodynamic shape[J]. *Journal of Aerodynamics*, 2011(06):759–764.
- [10] TOAL D J J, BRESSLOFF N W, KEANE A J. Kriging hyperparameter tuning strategies[J]. *AIAA Journal*, 2012, 46(5):1240–1252.
- [11] 张瑜,韩忠华,刘俊,等. 基于梯度增强分层 kriging 模型和 NS 方程的高效气动优化设计方法[C]//第九届全国流体力学学术会议论文摘要集, 2016.
ZHANG Y, HAN Z H, LIU J, et al. Efficient aerodynamic optimization design method based on gradient enhancement layered kriging model and NS equation[C]//Collection of abstracts of the 9th National Conference on Fluid Mechanics, 2016.
- [12] 韩少强,宋文萍,韩忠华. 基于梯度增强型 Kriging 模型的气动反设计方法[J]. *航空学报*, 2017, 38(007):133–147.
HAN S Q, SONG W P, HAN Z H. Aerodynamic inverse design method based on gradient enhanced Kriging model[J]. *Journal of Aeronautics*, 2017, 38(007):133–147.
- [13] 高秀鹤,曾昭发,孙思源,等. 基于阈值约束的协克里金法联合反演重力与重力梯度数据[J]. *地球物理学报*, 2019, 62(3):1037–1045.
GAO X H, ZENG Z F, SUN S Y, et al. Joint inversion of gravity and gravity gradient data based on Cokriging method with the threshold constraint[J]. *Chinese Journal of Geophysics*, 2019, 62(3):1037–1045.
- [14] YANG X, BARAJAS-SOLANO D, TARTAKOVSKY G, et al. Physics-Informed CoKriging: a gaussian-process-regression-based multifidelity method for data-model convergence[J]. *Journal of Computational Physics*, 2019, 395:410–431.
- [15] NOMIYAMA H, MURAKAMI S. Spatial distribution of volcanic ash soil layers by cokriging interpolation method in Mashiki Town, Kumamoto[M]. *Geotechnics for Sustainable Infrastructure Development*, 2020.
- [16] STEPANOV A. Use of an artificial neural network algorithm and cokriging method for reservoir porosity modeling[C]//19th SGEM International Multidisciplinary Scientific Geo Conference EXPO Proceedings, 2019.
- [17] 李育超,齐婵颖,高通锋. 基于 Kriging 代理模型的运输机机翼多学科优化设计[J]. *航空科学技术*, 2018, 29(3):20–24.
LI Y C, QI C Y, GAO T F. Multidisciplinary optimization design of transport aircraft wing based on kriging surrogate model. [J]. *Aviation Science and Technology*, 2018, 29(3):20–24.
- [18] 王洋,袁军娅,王洪兴. 基于代理模型和线性近似的快速气动热边界求解方法[J]. *导弹与航天运载技术*, 2018(4):11–17.
WANG Y, YUAN J Y, WANG H X. Fast aerodynamic thermal boundary solution method based on surrogate model and linear approximation[J]. *Missile and Space Launch Technology*, 2018(4):11–17.
- [19] 邱昇. 基于伴随方法、梯度增强 Kriging 方法的涡扇发动机进气道减噪高效优化方法[J]. *科学技术与工程*, 2018, 18(19):289–295.
QIU S. High-efficiency optimization method of turbofan engine inlet noise reduction based on adjoint method and gradient en-

- hancement Kriging method[J]. *Science Technology and Engineering*, 2018, 18(19):289-295.
- [20] 衣春轮,刘燕斌,曹瑞. 基于代理模型的高超声速飞行器外形参数优化[J]. *航空动力学报*, 2019, 34(11):2354-2365.
YI C L, LIU Y B, CAO R. Optimization of hypersonic vehicle shape parameters based on surrogate model[J]. *Aerodynamics*, 2019, 34(11):2354-2365.
- [21] 宋倩,万志强. 飞翼式客机机翼气动/结构综合优化方法研究[J]. *民用飞机设计与研究*, 2018(4):6-14.
SONG Q, WAN Z Q. Research on comprehensive optimization method of wing aerodynamics/structure of flying wing airplane [J]. *Civil Aircraft Design and Research*, 2018(4):6-14.
- [22] 樊华羽,詹浩,程诗信,等. 基于EHVI加点准则的DSI进气道气动/隐身多目标代理优化方法研究[J]. *西北工业大学学报*, 2019, 37(5):918-927.
FAN H Y, ZHAN H, CHEN S X, et al. Research on aerodynamic/stealth multi-objective surrogate optimization method of DSI inlet based on EHVI plus point criterion[J]. *Journal of Northwestern Polytechnical University*, 2019, 37(5):918-927.
- [23] 陈功,徐明兴,王文正. 基于代理模型的升力式再入飞行器质心位置优化[J]. *飞行力学*, 2019, 37(1):69-73.
CHEN G, XU M X, WANG W Z. Optimization of center of mass position of lifting re-human aircraft based on surrogate model [J]. *Flight Mechanics*. 2019, 37(1):69-73.
- [24] 吕志斌,万志强. 一种高效高精度的气动弹性结构优化方法[J]. *民用飞机设计与研究*, 2018, 131(4):21-29.
LU Z B, WAN Z Q. An efficient and high-precision aeroelastic structure optimization method [J]. *Civil Aircraft Design and Research*, 2018, 131(4):21-29.
- [25] 王家恒. 基于Kriging模型的多目标优化方法研究[D]. 大连:大连理工大学,2019.
WANG J H. Research on multi-objective optimization method based on kriging model[D]. Dalian:Dalian University of Technology,2019.

(责任编辑 王海蓉)