

Engineering Design via Surrogate Modelling
A Practical Guide

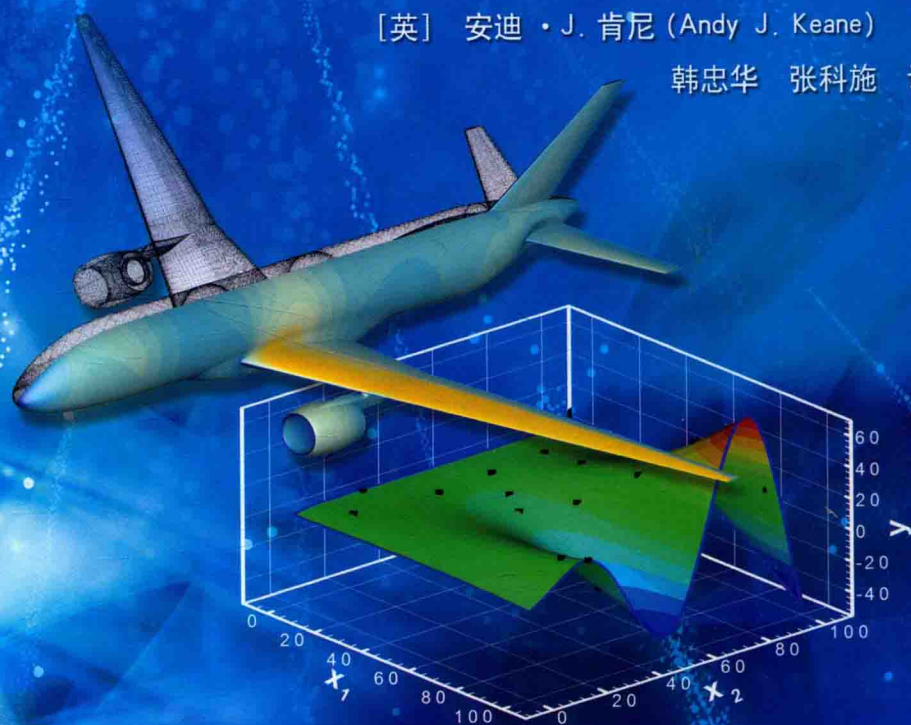
基于代理模型的工程设计： 实用指南

[英] 亚历山大·I.J. 福瑞斯特 (Alexander I.J. Forrester)

[英] 安德里斯·索比斯特 (András Sóbester) 著

[英] 安迪·J. 肯尼 (Andy J. Keane)

韩忠华 张科施 译



航空工业出版社

WILEY

高超声速技术译丛

“十二五”国家重点图书出版规划项目

基于代理模型的工程设计： 实用指南

[英] 亚历山大·I. J. 福瑞斯特 (Alexander I. J. Forrester)

[英] 安德瑞斯·索比斯特 (András Sóbester)

著

[英] 安迪·J. 肯尼 (Andy J. Keane)

韩忠华 张科施 译

航空工业出版社

北京

内 容 提 要

代理模型技术在基于高可信度数值模拟的工程优化设计中发挥着越来越重要的作用。代理模型技术不仅可以提高优化设计效率,而且可降低优化难度,有利于滤除数值噪声和实现并行优化设计。本书从实用的角度,对试验设计、代理模型建模、在代理模型基础上的设计空间探索与发掘等基础知识,以及设计空间可视化、约束处理、噪声滤除、梯度信息运用、多可信度分析和多目标优化等高级概念进行了介绍。除了为读者提供代理模型的使用经验外,本书一个重要的特点是给出了其中大部分算法的 Matlab 程序,为读者重复本书算例和解决他们所关心的特定问题提供了极大便利。

本书内容丰富,实用性强,既有完整的理论和算法,也有大量可直接参考使用的程序。作为一本实用手册,本书可供那些为解决工程问题而需要快速入门的设计人员使用,也可作为科研院所的研究人员和高等院校大学生、研究生的参考用书。

图书在版编目(CIP)数据

基于代理模型的工程设计:实用指南/(英)亚历山大·I. J. 福瑞斯特,(英)安德瑞斯·索比斯特,(英)安迪·J. 肯尼(Andy J. Keane)著;韩忠华,张科施译
--北京:航空工业出版社,2018.11

(高超声速技术译丛)

书名原文:Engineering Design via Surrogate Modelling: A Practical Guide

ISBN 978-7-5165-1595-2

I. ①基… II. ①亚… ②安… ③安… ④韩… ⑤张…
… III. ①工程设计—研究 IV. ①TB21

中国版本图书馆CIP数据核字(2018)第272068号

北京市版权局著作权合同登记

图字:01-2015-4516

Engineering Design via Surrogate Modelling: A Practical Guide © 2008 John Wiley & Sons Ltd.

All Rights Reserved. Authorised translation from the English language edition published by John Wiley & Sons Limited. Responsibility for the accuracy of the translation rests solely with China Aviation Publishing & Media Co., Ltd and is not the responsibility of John Wiley & Sons Limited. No part of this book may be reproduced in any form without the written permission of the original copyright holder, John Wiley & Sons Limited.

基于代理模型的工程设计:实用指南

Jiyu Daili Moxing de Gongcheng Sheji: Shiyong Zhinan

航空工业出版社出版发行

(北京市朝阳区北苑2号院 100012)

发行部电话:010-84936597 010-84936343

三河市华骏印务包装有限公司印刷

全国各地新华书店经售

2018年11月第1版

2018年11月第1次印刷

开本:710×1000 1/16

印张:13.5

字数:278千字

印数:1—2000

定价:98.00元

《高超声速技术译丛》编委会

顾问：(按姓氏笔画排序)

王礼恒	史新兴	包为民	乐嘉陵
冯志高	刘永才	杜善义	杨卫
李椿萱	张立同	俞鸿儒	陶文铨
黄伯云	黄瑞松		

主任委员：郑耀

副主任委员：符松 孟华

委员：(按姓氏笔画排序)

王振国	方文军	刘洪	刘卫东
关成启	杨超	李仲平	李存标
李建林	李跃明	何国强	沈清
张天序	张香文	张蒙正	张新宇
陈振乾	林均品	周毅	宗群
桂业伟	高正红	高效伟	韩杰才
程克明	樊菁		

《高超声速技术译丛》序言

飞得更快、更高、更远，是人类永恒的追求。通常人们把大气层中飞行速度达到5倍声速以上的飞行称为高超声速飞行。相关的高超声速流动的理论研究始于20世纪40年代后期，我国的著名科学家钱学森先生和郭永怀先生都是高超声速概念的最早倡导者。

早在20世纪60年代，在突破3倍声速之前，人类就已经开始研究高超声速技术。美国开展的X-43A、X-51A、X-37B和HTV-2（Hypersonic Technology Vehicle 2）“猎鹰”等飞行器的飞行试验在高超声速领域占据了领先地位，并积累了宝贵的技术和经验。受其鼓舞，更是由于其潜在的重要战略意义和极高的应用价值，使得高超声速技术成为21世纪航空航天领域的研究热点之一，得到了世界范围的广泛关注。

我国在高超声速技术领域的研究方兴未艾，相关的科研院所和高等学校取得了令人瞩目的突破和积累，但与美国等航空航天发达国家相比仍有一定差距，亟待汲取其先进的研究经验，并藉此能够系统培养相关的科研人员。《高超声速技术译丛》的出版适逢其时，译丛旨在借鉴和总结美国等航空航天领先国家的经验，使其理论化、科学化和系统化，进而结合工程实践，以形成具有中国特色的高超声速技术理论与实践相结合的知识体系。

《高超声速技术译丛》主要涵盖飞行器总体技术、推进技术、气动力与气动热、材料与结构热防护、制导与控制、数值模拟与试验测量技术等专业方向，知识领域覆盖了高超声速飞行器研发设计、制造和试验等关键技术。译丛择优选取了美国航空航天学会等国外机构出版的高超声速及相关技术的经典著作，以飨读者。

本套译丛的出版得到了国内众多方面的大力支持。丛书凝结了高超声速研究领域专家的智慧 and 成果，承担着记载与弘扬科学成就、积累与传播科技知识的使命，具有较强的系统性、完整性、实用性和技术前瞻性，既可以作为实际工作的指导用书，也可以作为相关专业人员的学习参考书。期望这套丛书能够有益于高超声速技术领域人才的培养，有益于高超声速技术的发展，有益于高超声速飞行器的研制工作。同时，希望能够吸引更多的读者来关心、支持和热爱高超声速技术，并投身其中做出贡献。

《高超声速技术译丛》编辑委员会

2012年5月

作者序

试想有一位非常有名的公众人物，因为他（她）的面孔你很熟悉，所以你很容易从他（她）的照片中一眼就认出来。但如果照片上大部分被打上了马赛克，只能看清楚眼睛的一角、面颊的一部分和嘴的一半，你还能认出来吗？这就是在电视上经常玩的一种益智竞猜游戏。令人惊讶的是，我们的参赛者（或坐在家里的观众）通常表现出了一种不可思议的“超能力”，在照片被揭开很少一部分的时候就能准确地猜出照片里的人是谁。

这个例子很好地展示了我们大脑在看到照片的很少部分时，具有潜意识地通过建立“代理模型”来填补照片空白部分的惊人能力。我们之所以能展现这种惊人技艺，其关键在于我们实际上知道关于这些被遮盖部分的很多信息。例如，我们知道这是一张人脸，知道照片图像大致是左右对称的，也知道在照片中间某个位置应该是人的鼻子，还知道这个人很有名。有了这些信息，搜索的空间就大大缩小了，识别照片中的人就变得不那么难了。

本书要讲述的“代理模型”，是指基于设计空间中能够测量函数值的那些点，对工程领域涉及的函数的形态进行的一种有根据的猜测。虽然这些孤立点没有提供太多信息，然而如果我们根据函数通常是什么形态的经验做出一些假设进而建立代理模型，那么这些点就变得非常有用。例如，工程中涉及的函数常常是连续的，我们也可以假设它们的导数也是连续的。有了这些假设后，代理模型就成为了一种非常有效的、成本低的、替代原来函数用于其他目的的工具。

毫不夸张地讲，代理模型技术的出现改变了作者对于设计的认识。经过多年的经验积累，代理模型已经成为了工程设计的一个重要元素。我们写这本书的目的就是从实用的角度出发，与广大读者分享关于代理模型的一些实际经验。在我们写本书之前，已经有不少关于代理模型建模的理论描述的文献，对这些参考文献的引用也贯穿本书全文。而本书的目的是提供一本实用手册，供那些为解决工程问题而需要快速入门的设计人员使用。当然，像任何一件利器一样，如果使用者知道代理模型的风险、缺陷、潜在虚假信息和一些限制，那么就on知道代理模型只能以科学严格的方式使用，而本书会在合适的地方指出。

为了增强本书的实用性，我们在书中还提供了相关技术的 MATLAB 程序。这些程序以数学化和尽可能简洁的形式出现在书中相应的位置，可以很好地帮助读者理解正文内容。所有程序（包括书中未列出的程序）均可以通过网址

www.wiley.com/go/forrester 下载。为了方便读者搭建自己的建模问题，我们还提供了程序模板，读者可以方便地将程序中相应部分替换为他们自己的目标函数。但需要说明的是，虽然我们提供的算例中大多数代表了实际工程问题，但本书是从容易实现的角度来设计的，其运行时间一般都不超过 1s，而对于实际工程问题，其计算量将可能会大好几个量级。

虽然我们假设本书读者已经具备一些基本的微积分、线性代数和概率论的知识，但本书内容仍然力求完整性和独立性。在认为有必要的地方，我们还是给出了所用到的数学知识的要点。因此，希望本书可以供学生、研究人员和专业工程师等使用。

在本书撰写的过程中，得到了很多同事的帮助。这里要特别感谢他们中的一些人。他们是南安普顿大学的 Prasanth Nair 和 David Toal、艾奥瓦州立大学的 Max Morris、通用汽车公司的 Donald Jones、国家航空航天局 (NASA) 的 Natalia Alexandrov、欧洲航空航天防务集团 Astruim 公司的 Tom Etheridge、克卢日-纳波卡理工大学大学的 Lucian Tudose，以及英国 BAE 系统公司的 Danie G. Krige 和 Stephen J. Leary。衷心感谢他们多次帮助校稿并提出有益的修改建议。

最后，需要说明的是，代理模型是一个非常宽泛的领域，本书难以囊括其中所有内容。本书所介绍的代理模型技术在一定程度上是限于作者的专业背景。换句话说，这些技术是我们平常使用的一些研究工具的集合，因此仅供读者参考。

亚历山大·I.J. 福瑞斯特，安德瑞斯·索比斯特，安迪·J. 肯尼
英国南安普顿大学

免责声明

本书中给出的方法、例子及软件，仅供读者参考，不以满足任何实际问题需要为目的。使用者有责任自己去验证本书中给出的结果以及相关软件的计算结果，我们对此不承担任何责任。在法律最大限度的许可范围内，John Wiley & Sons 公司和作者声明如下：(i) 不担保本书和相关软件提供的信息是完美无瑕或完全可靠的；(ii) 不担保针对任何特定目的具有适销性、质量满意度或适应度，对任何人造成人身伤害或收入损失、商业利益或合同损失、商业侵害、财务损失、信息损失、机会和信誉丢失、数据丢失或损坏不承担任何责任，也不承担读者使用本书的内容、指南、方法及思想而造成的任何间接性损失的责任（无论作为或不作为使用的结果）。

作者简介

亚历山大·I.J. 福瑞斯特博士是英国南安普顿大学工程设计讲师。他的研究主要围绕如何提高基于非常费时的数值模拟（如计算流体力学（CFD））的工程设计效率。研究成果应用于机翼空气动力学、卫星结构设计、运动设备设计、一级方程式赛车设计等。

安德瑞斯·索比斯特博士是英国南安普顿大学工程科学学院的讲师、英国工程和自然科学研究委员会/皇家工程研究院研究员。研究方向包括飞机设计、气动外形参数化与优化设计，以及针对通用用途的工程设计方法。

安迪·J. 肯尼教授是南安普顿大学计算工程学会主席。他是大学计算工程学会和设计研究团队的负责人，同时也是罗罗计算工程技术中心的主任。他的研究兴趣集中在航空航天科学领域，主要方向为基于计算方法的航空航天系统设计。他在该领域发表了200多篇论文和3本专著，其中有相当一部分是关于代理模型的。

序 言

在过去的 20 年里，工程师们通过建立有限元模型来模拟复杂产品性能的能力得到了极大提高。以汽车领域为例，我们现在可以模拟碰撞中乘客的受伤等级，在不同路面上行驶时的振动和噪声水平，以及汽车反复受坑槽路面影响的寿命。此外，反映在设计变化中的快速修改模拟模型的能力也大幅提升。正是由于这些能力的提升，最终导致我们比以往任何时候都更有可能采用优化方法来改进工程设计。

使用优化方法来解决工程设计问题的一个主要障碍是所采用的数值模拟耗费时间太长，常常需要几天或更多时间，而且对于绝大多数复杂数值模拟（特别是防撞类的模拟）而言，其梯度信息不易获得。由于这些原因，将任何优化方法直接应用于这样的数值模拟，其优化效率都将非常低。

除了单次优化效率低的问题外，还面临的一个问题是，实际工程设计问题往往需要多轮次优化。例如，一方面，如果这次优化结果不满足要求，我们就需要绘出输入/输出曲线来搞清楚为什么，或者我们可能想调整优化参数（不同的优化起始点、不同的约束等），并重复优化过程。所有这些都将是需要大量调用数值模拟，非常费时。另一方面，即使优化结果满足要求，我们可能仍然希望进一步在互相冲突的设计目标间进行全局探索以取得更好的折中，而这也需要将反复地进行数值模拟。很显然，如果进行单次（基于数值模拟的）优化设计就占用了所有的计算资源，那么我们后续将无法进行更多的分析研究，或者分析研究将超出规定的时间期限。

代理模型的基本思想，就是将资源和精力花在建立可替代费时的数值模拟的高效近似数学模型上，而不仅仅是用在解决手头的工程问题上。一旦建立了这些代理模型，那么就可以解决许多问题，例如，可以做出很多曲线，以便更好地探索多设计目标间的权衡以及获得对问题更深入的理解。然后，我们就可以再利用耗时的数值模拟程序来检查由此获得的新的想法和设计，如果必要的话再去更新代理模型并进行迭代，直到满意为止。

代理模型的基本思想听起来似乎很简单，但难点在于一些细节问题上。例如，选取设计空间中哪些样本点来建立代理模型？采用哪种代理模型方法？怎样利用代理模型来获得新的更好的设计？怎样利用代理模型来探索多设计目标之间的权衡？怎样处理数值模拟存在的数值误差？还有同样重要的是，从哪里获得相应程

序来实现上述这些事情？

作者将在本书中回答上述所有问题。这就像厨师提供给你整个晚餐的菜谱：开胃菜、沙拉、主菜、葡萄酒、甜点和咖啡，而不是你在周日食谱上看到的单一的面包卷。作者将从最基本的问题开始：首先，确定研究中需要包含的设计变量；其次，读者将学习制订试验方案来建立初始的代理模型，本书将介绍多种代理模型方法，并着重推荐和介绍 Kriging 代理模型；接下来，作者将展示如何利用 Kriging 模型来进行无约束优化、约束优化以及多目标优化。对于上述步骤中的每一步，本书都提供了 MATLAB 代码，读者可以在相关网站下载这些代码。

与其他厨师一样，作者也有自己的偏好：喜欢特定的试验设计方法和使用特定的 Kriging 模型进行优化设计等。但是，作者仍然会在其能力范围内介绍其他方法，并且提供参考文献供读者参阅。

在我看来，本书适用于两类读者：对在代理模型领域有经验的读者来说，本书展示了一些前沿代理模型技术；而对于初学者来说，本书也提供了对该领域比较完整的、自成一体的介绍。

与其他“食谱”书一样，本书对于读者来说仅仅是个开始而不是结束。我想读这本书的人可能会照搬这些食谱，可能会修改食谱来适应自己的口味，还可能会忽略一些有利于自己的食谱。但是我相信，即使在该领域最有经验的读者，也能在本书中找到可以激发他们兴趣的点子（对我而言这是毫无疑问的）。因此请允许我向即将开始阅读这本书的读者说声：祝您好胃口！

唐纳德·R. 琼斯
通用汽车有限公司

前 言

工程设计是一个基于分析的决策过程，它直接影响着所设计产品或服务的性能。为了给出合理的设计方案，工程师们通常需要进行大量的分析来给他们的决策提供足够的背景信息。即便是从事产品分析工作的专业团队，往往也需要数月的时间才能给出产品的关键设计方案。譬如说，在现代航空航天设计部门中，虽然用于支撑先进设计决策的计算能力已经达到十分惊人的地步，但是，即使拥有最新的、最先进的计算机，设计者仍然非常希望在采用一些熟悉的分析工具（如计算流体力学或计算结构力学）的基础上，获得对所涉及的问题更加深入的认识。作者正是在这样的背景下撰写了此书。

为了使设计者获得所期望的对所研究问题的更深入认识，一种有效的方法便是使用代理（或元）模型。发展代理模型的主要目的是，解决工程设计中所需的计算量过大与现有计算资源的计算能力不能满足需要的问题。此外，代理模型也可用来将不同复杂度和精度的数值模拟程序有机结合起来，或实现计算预测结果和试验数据的有效融合。代理模型的作用是充分利用已有的每一条分析数据，提升理解和协助决策，从而使这些数据发挥最大的效用。本书旨在通过航空航天研究和工业领域的一些最新成果，概述代理模型的最新应用进展情况。为此，我们将从代理模型在工程设计中的典型实例概述开始进行介绍。

在现有计算资源所能承受的范围内，分析人员通常只能通过进行有限且必要次数的分析工作来获得分析结果，而使用代理模型则是希望能获得这些设计方案之外所有可能方案的分析结果。考虑到在实际应用中，不同可信度的物理仿真程序能承受的问题复杂程度不同，因此代理模型还可作为这些程序之间的接口。同理，代理模型也能用来消除计算机预测值与试验结果之间的差异。在上述过程中，代理模型都能最大限度地利用设计人员获得的每一条可用信息，并使这些来源于分析工作或是已有数据源的数据发挥更大的作用。在此基础上，代理模型便能起到提升理解和协助决策的作用。近年来，代理模型方法在学术研究和工程应用方面都引起了广泛关注，涌现出了一大批前沿研究成果。本书的目的就在于讨论代理模型方法和这些实际应用的最新进展。我们在正文中将会逐一介绍这些方法与思路，而这里我们首先将简要介绍一下代理模型在工程中的典型应用。

代理模型最简单和最常见的用途是对于单一来源、计算费时的分析程序的结果进行扩展。在设计策略的驱动下，设计人员需要获得一定范围内所有可能输入

变量的分析结果（也许是规划好的，或是由某些优化搜索过程确定的一系列设计方案），因此需要重复多次调用高精度和高计算成本的分析程序。而代理模型的基本用途，便是作为已知数据的一种“曲线拟合器”，在代理模型建立后，可以在不调用计算费时的分析程序的情况下，对其结果进行有效预测，从而节省大量的资源。然而，这种方法是基于一个基本假设，即建立代理模型的计算量必须远小于原高精度分析程序，同时在预测未知数据点时仍能保持合理的精度。总之，有两点关键要求值得注意：①显著提高效率；②足够的精度。显然，这两个因素是互相矛盾的，因此使用者必须合理权衡。

代理模型的另外一个日渐流行的用途是作为预测程序的修正工具。在开发某些物理过程的软件程序时，为了将运行时间控制在可接受的范围内，经常不得不使用一些简化的方法。譬如说，在计算流体力学中就存在着一整套不同复杂度和精度的方法，从精度较低但计算效率高的速势方程求解器，到 Euler 方程和雷诺平均 Navier - Stokes 方程方法，再到大涡模拟方法（LES）和直接数值模拟（DNS）方法。显然，一个精度低但效率很高的分析程序与一个精度高但非常耗时的分析程序，它们的结果必然存在差异。通过用一个代理模型来表征上述差异，这样，对其训练建立的代理模型便可作为连接这两种程序的桥梁。这种方法的基本思想是，在获得与高成本程序相近的预测精度的同时，大大提高效率。这种“多可信度”或“多层”代理模型方法还可以进一步扩展应用到其他情形。例如，可用于处理多次试验的数据差异，以及试验数据与计算机数值模拟结果之间的关联性。事实上，该领域的很多早期工作就起源于长期的农业试验，而在这些试验中需对农作物的试验数据做出解释。

代理模型的第三种用途是用来处理带有噪声的数据和缺失的数据。我们都知道，物理试验的结果往往会有微小的随机误差。在使用试验数据时必须对这些误差进行处理，如通常的做法是多次试验取平均值。同时，在物理试验中也经常发生无法获得有用结果的情形。另外，也许很多人不知道，计算机程序得出的结果也会面临数值噪声问题，所不同的是这些数值噪声通常不是由随机误差引起的。在通常情况下，计算机程序的解与使用的离散方法和迭代步数相关。因此，计算“噪声”来源于与计算模型、离散和迭代方法相关的计算格式。同时，大部分数值格式都很难达到绝对可靠和稳健的程度，因此有时也会出现意想不到的求解失败。在这种情况下，代理模型可以用作光滑数据的过滤器和弥补缺失数据的填充器，从而达到剔除外界一些微小细节的影响，并揭露数据点之间内在变化趋势的目的。

最后，代理模型还可以用作一种数据挖掘的手段，使设计团队能够洞察所关心的目标函数与设计变量之间的函数关系。如果选择适当方法来处理数据，那么所建立的代理模型就可以用来识别其中影响最大的变量，以及这些变量影响目标

函数的具体行为表现。有了这样的工具和手段，工程师就能够将注意力转移到那些最重要的变量上，同时能够更深入地理解这些变量的影响。有时候，可以直接从建立代理模型的方程中获取这些信息。此外，在数据的示意图和曲线图可视化方面，代理模型相比于反复调用直接分析程序更加快速。

在上述所有应用中，建立代理模型的过程在本质上是相同的。图 P-1 给出了建立代理模型的流程图，图中每一个步骤本书都有相应的章节与之对应。

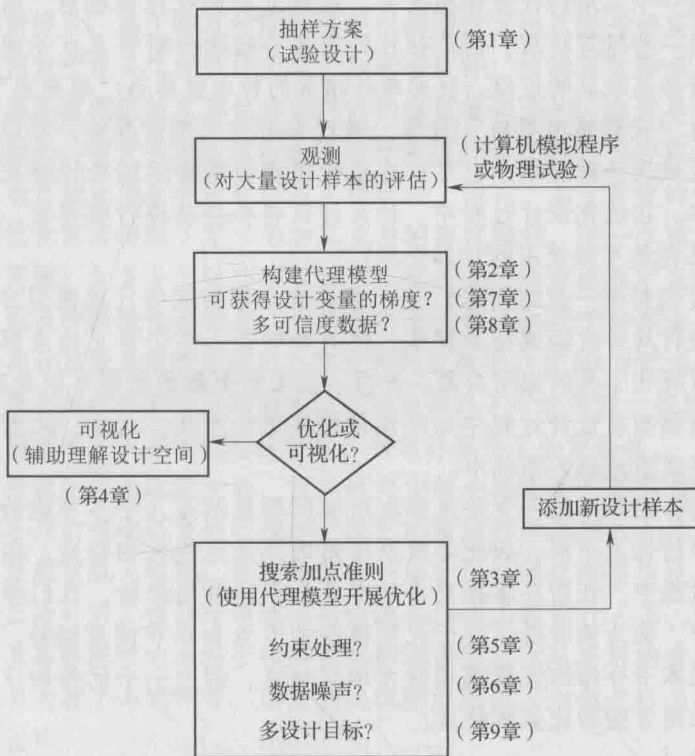


图 P-1 代理模型建模过程示意图

首先，我们需要获取包含输入变量和输出结果的一组样本数据。典型的做法是在设计空间中进行抽样，并调用高成本的数值分析程序来获得其响应值。也就是说，需要生成大量候选设计方案，并使用计算或试验手段来获得候选方案的性能数据。

接下来，我们需要选择一种合适的代理模型来拟合这些已知的样本数据，这也正是本书的核心内容。在建模过程中，需要对一些模型参数进行训练，并评估模型预估值的精度。在这方面目前已有许多相关的方法。值得一提的是，目前代理模型方法存在一个严重的问题：在处理高维度问题时，为了得到精度合理且广

泛适用的预测模型，建模所需的样本点数会随维数增加而呈指数增长，即所谓的“维数诅咒”。目前解决该问题的唯一方法是限制变量的变化范围，使代理模型在拟合区域的形态变得足够简单，以至于用十分稀疏的样本数据即可完成近似。也可以将其中一些设计变量的值固定为一个可靠且合理的值，从而减少有效设计变量的数目。随着优化设计过程的推进，这些值会随之改变（例如，在飞机设计过程中，考虑气动特性时会将结构变量固定，反之亦然）。

对于构建一个实用的代理模型而言，在建立初始代理模型后，因为难免会遗漏设计空间的一些特定性质，因此往往还需要合理选择新样本点并通过调用高成本的数值分析来获取其响应值。这些额外增加的样本被称为“填充点”，而该加点的过程被称为“代理模型更新”过程。通过采用优化搜索算法，可以在代理模型最不精确的区域选择新样本，也可以在由代理模型所揭示的设计者关心的最佳区域选择新样本。在优化设计过程中，加点过程将会持续进行很多次，直到目标函数收敛（或已耗尽可供使用的计算资源）。

在构建（包括进一步的测试）完一个具有合理精度的代理模型后，将会以某种方式对其进行局部发掘或全局探索，使其能够嵌入某个修正的求解器，或者是作为优化或可视化工具的应用对象。发掘、探索和更新的过程可以是高度耦合的，从而使得代理模型在设计过程中始终能保持实用的精度。此外，之前设计过程产生的数据也可适当地融入系统中。

事实证明，固定用某一方法来解决所有问题显然是几乎不可能的。由于不同问题数据本身的性质不同，因此导致所采用的方法也将大相径庭。在构建和使用代理模型的过程中，还需要掌握更多的专业知识和使用经验。我们希望在本书接下来的章节中，能为读者提供关于代理模型的专业知识和使用经验。同时，也提醒读者应关注本书介绍的代理模型技术的优缺点，因为一个优秀的设计者，必须十分清楚所采用方法的优点和缺点。

译者序

在航空航天工程设计领域，随着各学科数值模拟技术的快速发展和计算机运算能力的不断提升，基于高可信度数值模拟的设计方法已经开始发挥越来越重要的作用。然而对于很多工程设计问题，如气动设计、结构设计和多学科优化设计等，往往需要反复调用精度高但非常耗时的数值模拟分析，这将导致优化计算量大、设计周期长。即使采用目前最先进的计算机，如我国的“神威太湖之光”超级计算机，也可能无法在有限时间内完成设计。因此，基于昂贵的性能函数分析发展高效的优化算法得到了学术界和工业界的高度重视。另一方面，对于复杂工程优化设计问题，如复杂气动外形设计，目标函数和约束函数定义的设计空间呈非线性、多极值和强振荡的特点，如果采用遗传算法和粒子群算法为代表的全局优化算法，其计算量是很难承受的。在这样的背景下，自20世纪末开始，基于代理模型的高效全局优化算法应运而生，并迅速得到了广泛关注。经过20多年的发展，代理模型技术及其基于代理模型的工程设计取得了长足进步。

尽管代理模型技术迅猛发展，但其研究文献分布在多个学科领域，采用各个学科的形式各异的科学语言进行描述，缺乏比较通俗和通用的介绍。在工程设计领域，特别是航空航天领域，目前还没有一本专门介绍代理模型技术及使用方法的书。本书正是针对工程设计领域亟需快速入门的工程设计人员、科研院所的研究人员，以及高等院校的本科生和研究生的强烈需求，从实用的角度系统介绍了建立代理模型的若干关键环节，以及在代理模型基础上如何进行优化设计的实际经验和实用指南。

本书第1~第6章由韩忠华教授负责翻译，第7~第9章由张科施博士负责翻译。限于译者水平，难免有不妥之处，敬请广大读者批评指正。

韩忠华

2018年9月

目 录

第一部分 基础知识

第 1 章 试验设计	(3)
1.1 “维度灾难”及如何避免	(4)
1.2 物理试验与计算机试验	(4)
1.3 设计初步试验 (变量筛选)	(5)
1.3.1 估计初等效应的分布	(6)
1.4 设计抽样方案	(13)
1.4.1 分层法	(13)
1.4.2 拉丁方阵和拉丁超立方体	(15)
1.4.3 空间填充的拉丁超立方体	(17)
1.4.4 空间填充子集	(27)
1.5 关于对类似谐波响应问题的说明	(29)
1.6 对更深入阅读的提示	(29)
参考文献	(30)
第 2 章 建立代理模型	(32)
2.1 建模过程	(32)
2.1.1 第一阶段: 准备数据并选择建模方法	(32)
2.1.2 第二阶段: 参数估计与训练	(34)
2.1.3 第三阶段: 模型测试	(35)
2.2 多项式模型	(38)
2.2.1 例一: 翼型阻力	(40)
2.2.2 例二: 多峰测试算例	(42)
2.2.3 k 个变量的情况	(43)
2.3 径向基函数模型	(43)
2.3.1 拟合无噪声数据	(43)
2.3.2 带噪声数据的径向基函数模型	(47)
2.4 Kriging 模型	(47)

- 2.4.1 建立 Kriging 模型 (48)
- 2.4.2 Kriging 预测 (56)
- 2.5 支持向量回归 (61)
 - 2.5.1 支持向量预测 (62)
 - 2.5.2 核技巧 (64)
 - 2.5.3 寻找支持向量 (65)
 - 2.5.4 寻找 μ (67)
 - 2.5.5 选择 C 和 ε (68)
 - 2.5.6 计算 ε : ν -SVR 方法 (69)
- 2.6 回顾与总结 (71)
- 参考文献 (73)
- 第 3 章 代理模型的局部发掘与全局探索 (75)**
 - 3.1 搜索代理模型上的最优值 (75)
 - 3.2 加点准则 (77)
 - 3.2.1 基于预测的局部发掘 (77)
 - 3.2.2 基于误差的全局探索 (81)
 - 3.2.3 局部发掘与全局探索的结合 (82)
 - 3.2.4 条件似然方法 (89)
 - 3.2.5 其他方法 (98)
 - 3.3 管理代理优化过程 (99)
 - 3.3.1 如何选择代理模型 (99)
 - 3.3.2 如何确定初始样本与新增样本的数目 (100)
 - 3.3.3 收敛标准 (101)
 - 3.4 使用 Kriging 目标搜寻实现对隔振器几何可行性的优化 (102)
 - 参考文献 (104)

第二部分 高级概念

- 第 4 章 可视化 (107)**
 - 4.1 云图矩阵 (108)
 - 4.2 嵌套维度 (109)
 - 参考文献 (111)
- 第 5 章 约束处理 (112)**
 - 5.1 通过构造的方法使约束条件得到满足 (112)