

modeFRONTIER基础培训教程

IDA J-China 技术部

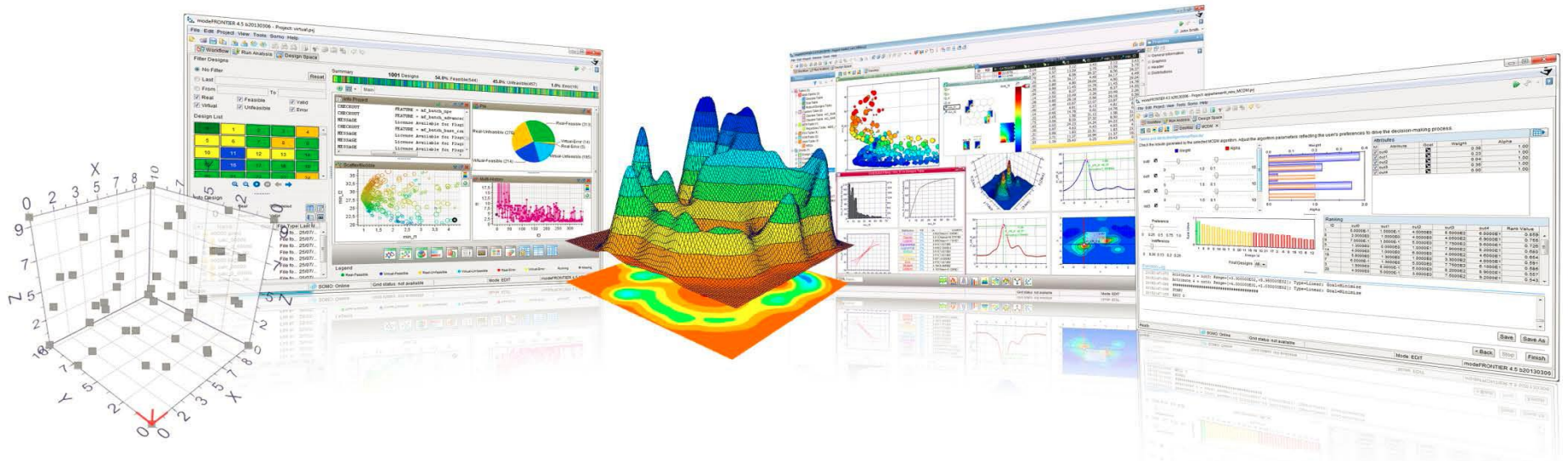
2019 年 5 月

- 所有公司名, 产品名, 服务名是 各个公司的商标或登记商标以及服务商标。
- 本资料包括保密信息。没有得到敝公司的同意, 请不要使用, 发布, 复制本资料或本电子档。

主要内容

1. modeFRONTIER介绍
2. 工作流程介绍
3. DOE及优化算法介绍
4. 优化计算
5. 基本后处理工具使用
6. 响应面介绍

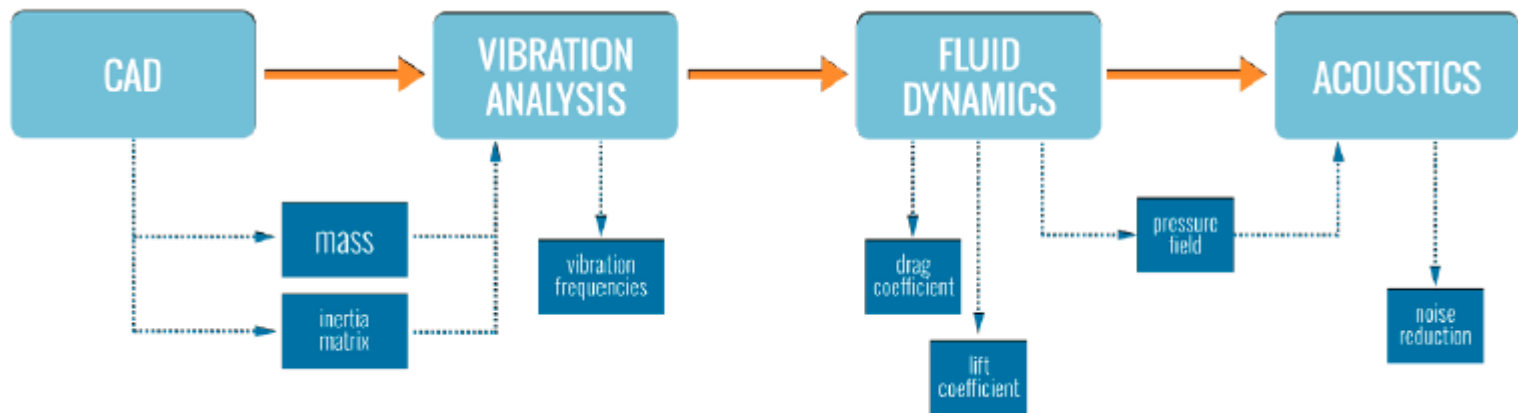
什么是modeFRONTIER?



- modeFRONTIER是一个通用的多目标及多学科优化软件，可以实现与诸多第三方仿真工具的无缝集成，来完成设计仿真流程的自动化，以及设计决策的分析

什么是modeFRONTIER?

- modeFRONTIER可以集成任意参数化软件（CAD，CAE及FEM），数据在工具间的传递及相关数值和目标的提取都可实现自动化。
- 多学科功能可以帮助用户实现探索学科之间的联系并寻找全局的最佳设计方案

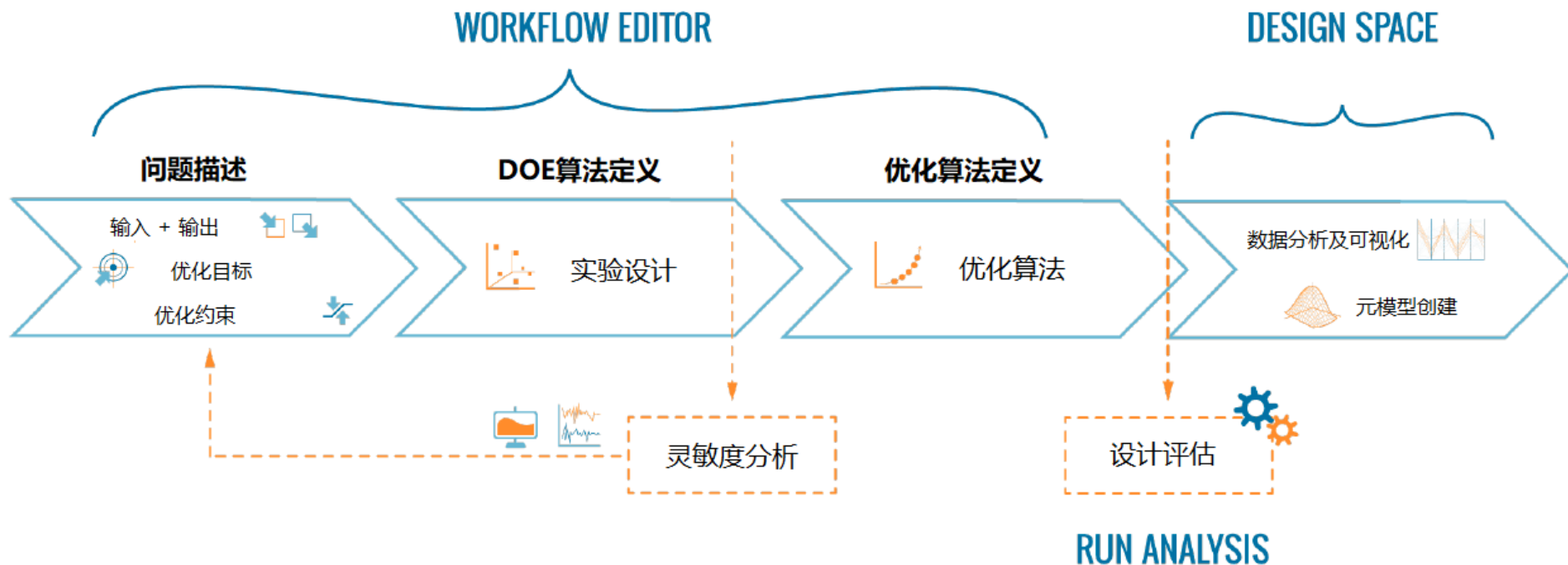


- 多目标问题通过先进的优化算法来寻找一系列帕累托设计点

modeFRONTIER如何工作?

modeFRONTIER包含三个工作环境:

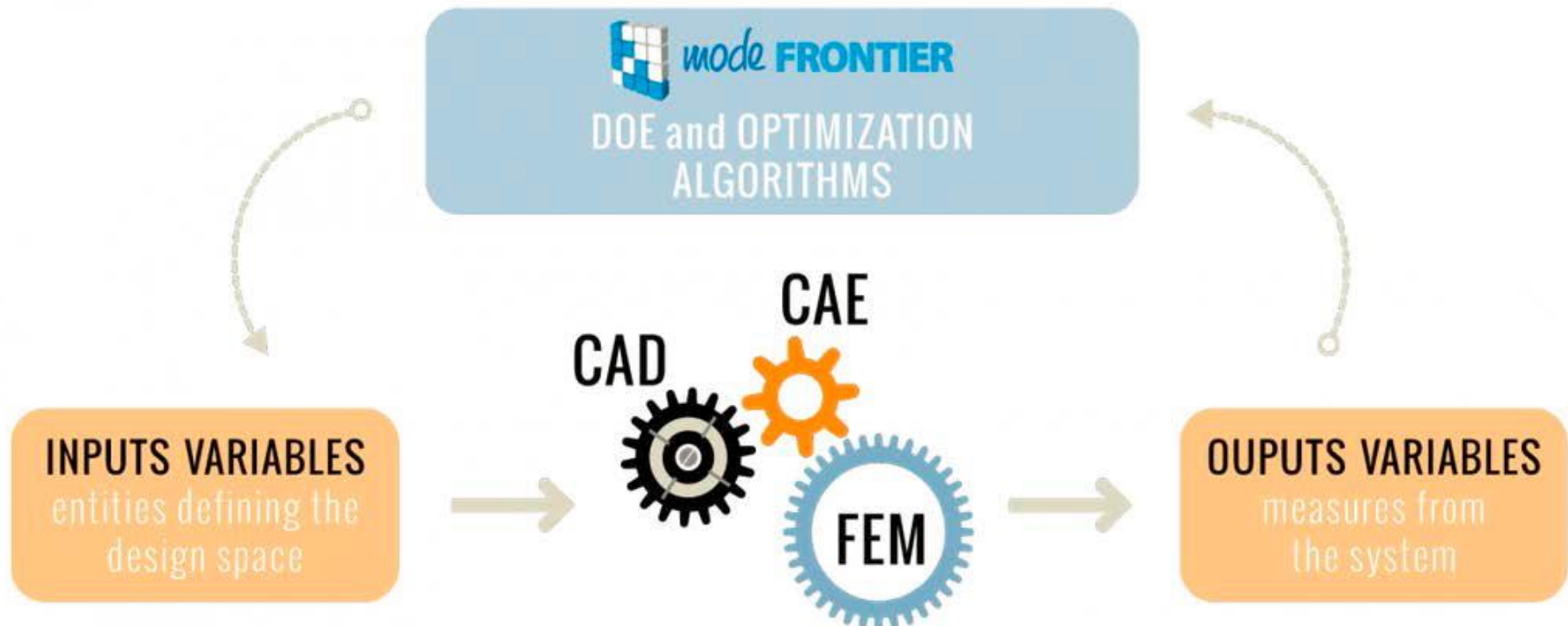
- Workflow - 工作流程编辑
- Run Analysis - 运行
- Design Space - 分析结果



工作流程编辑功能-Workflow环境

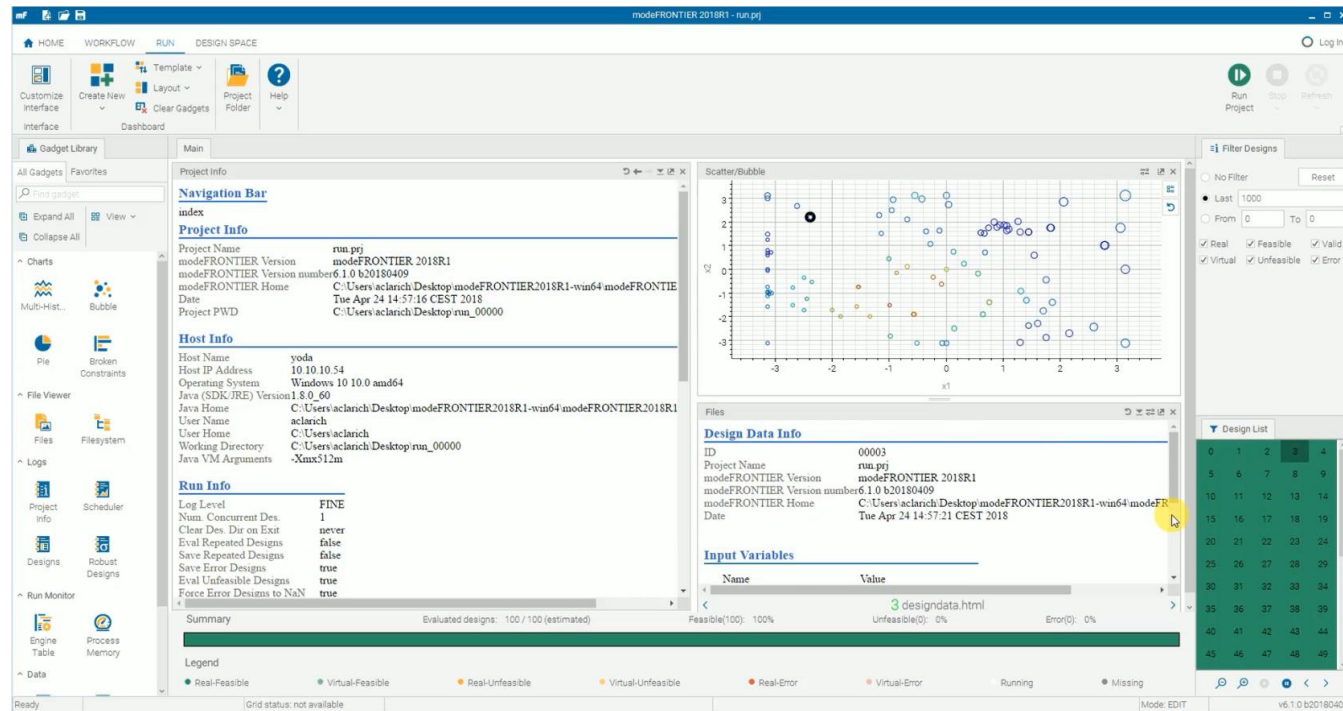
modeFRONTIER 的工作流程编辑器可以：

- 集成及管理不同软件平台的分析步骤
- 自动提交流程并驱动集成的工具进行求解，并提取更新生成的数据，同时将数据传递给下一个所用的计算工具
- 定义输入输出变量及优化的目标，以及DOE的算法，优化的算法等



优化过程监控-Run Analysis环境

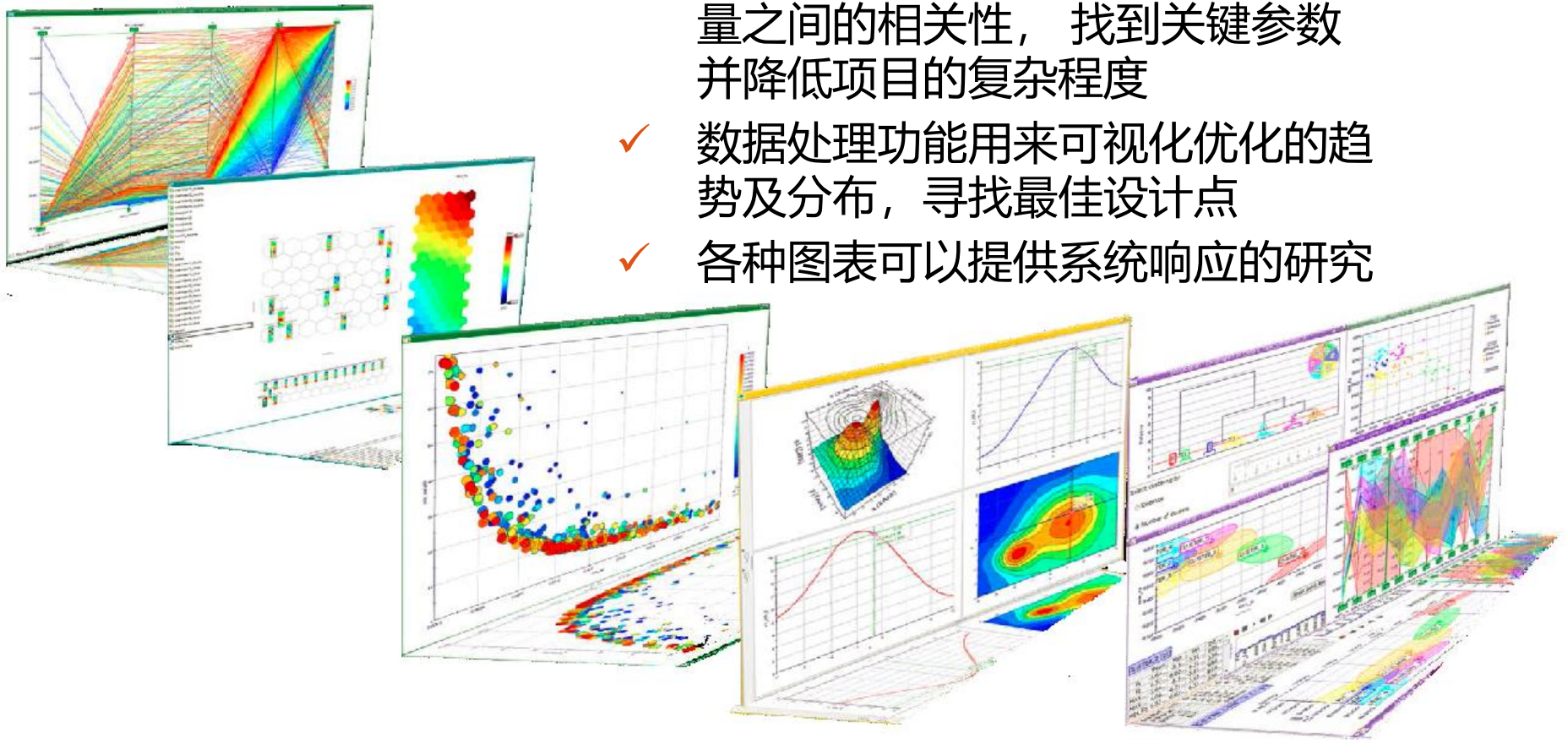
- Run Analysis环境提供对运行过程的实时监控，可以使用各种图表，log文件，流程文件来观察计算的流程。的算法，优化的算法等
- Run Analysis可以：
 - ✓ 基于用户偏好，自定义监控区域的内容
 - ✓ 动态更新所有求解的信息



结果后处理分析-Design Space环境

- Design Space 环境具备功能强大的图表生成功能，可以用来处理优化过程中生成的数量庞大的复杂数据。

- ✓ 统计分析可以用来明确输入输出变量之间的相关性，找到关键参数并降低项目的复杂程度
- ✓ 数据处理功能用来可视化优化的趋势及分布，寻找最佳设计点
- ✓ 各种图表可以提供系统响应的研究



modeFRONTIER功能概述

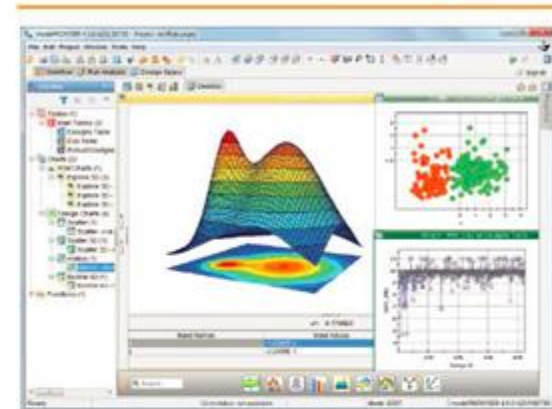
工具集成及自动化



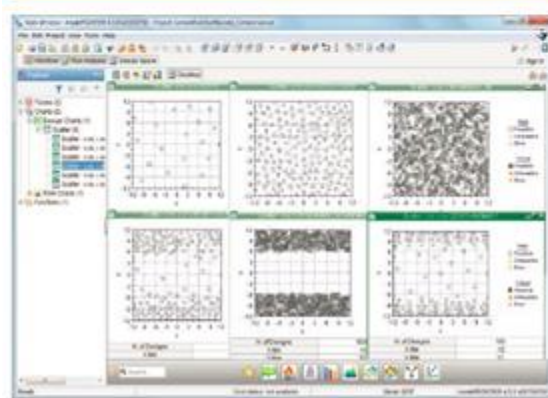
多目标优化计算



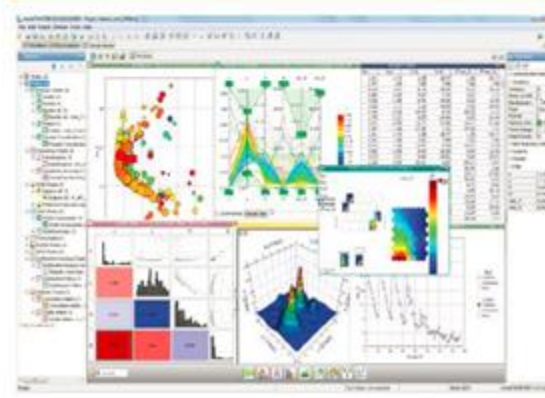
稳健性及可靠性设计



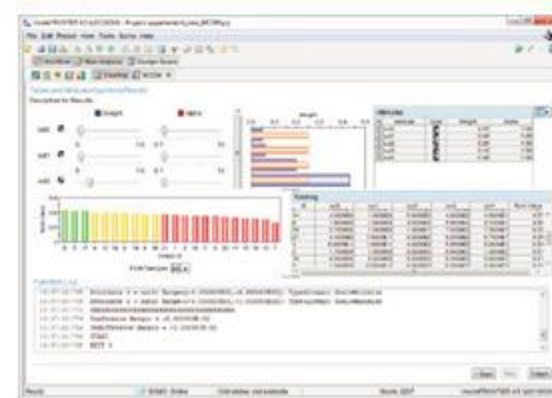
设计空间探索



数据统计及可视化



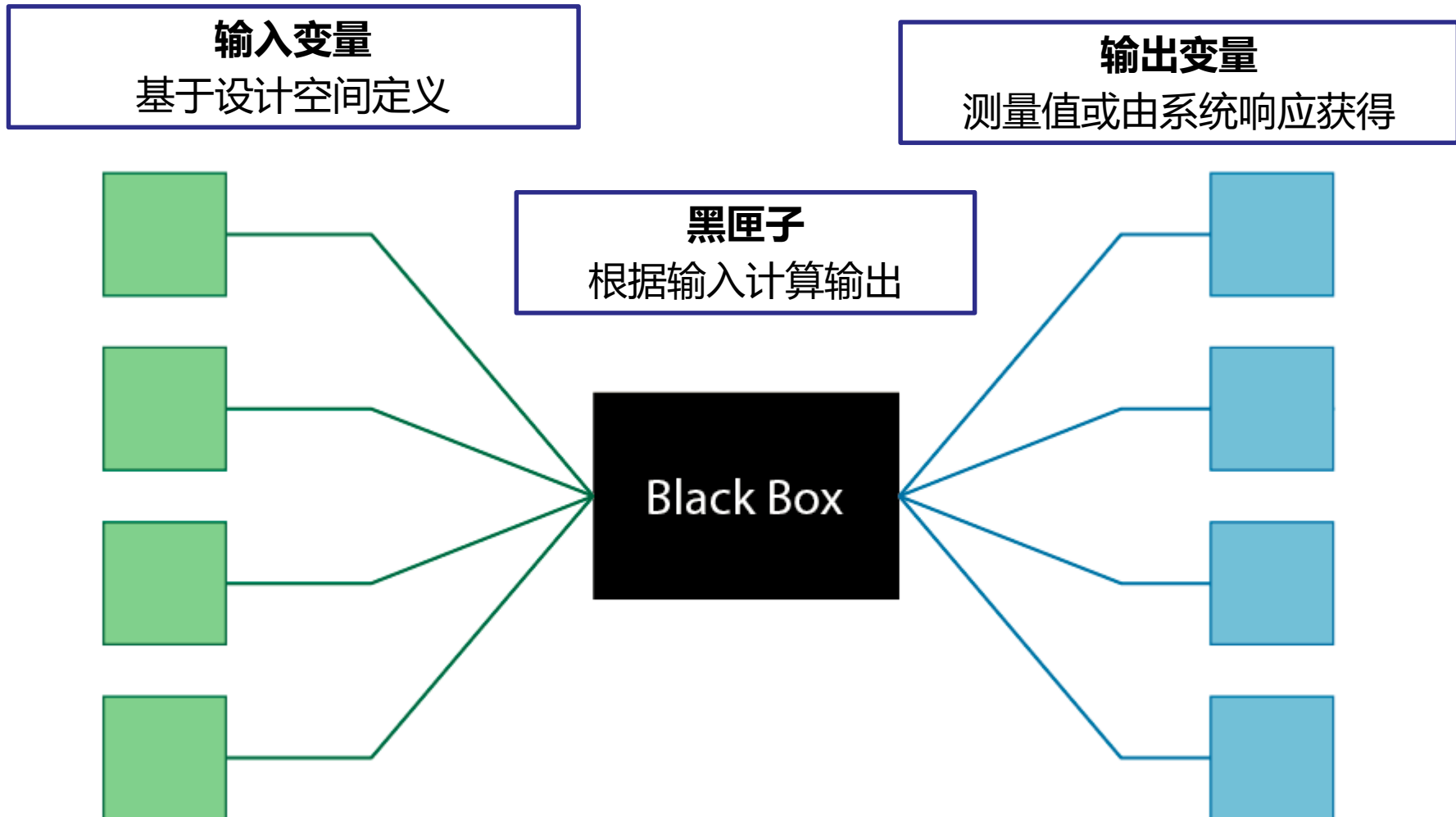
多目标分析决策



主要内容

1. modeFRONTIER介绍
2. 工作流程介绍
3. DOE及优化算法介绍
4. 优化计算
5. 基本后处理工具使用
6. 响应面介绍

modeFRONTIER基本概念



输入变量

- **输入变量**是模型的自由参数：
 - ✓ 变量的数量由设计人员决定及变更
 - ✓ 变量的选择决定了设计的偏好
- 变量可以是：
 - ✓ 离散变量—可定义的有限数目的值
 - ✓ 连续变量-- 可以取两个值之间的任意数值



输出变量

- **输出变量**是测量值或者系统的响应量，不由设计人员直接决定，只根据输入变量变化：
- 优化流程中还包括其他两种关键性的变量与**输出变量**相关：
 - ✓ **目标**: 一个设计中最重要参数，一般表示为最大化或最小化，同时说明了输入变量的关系或通过输入变量获得的结果
 - ✓ **约束**: 基于物理条件或法规等对设计的限制的参数，约束决定了一个设计点是可接受的feasible 或不可接受的unfeasible



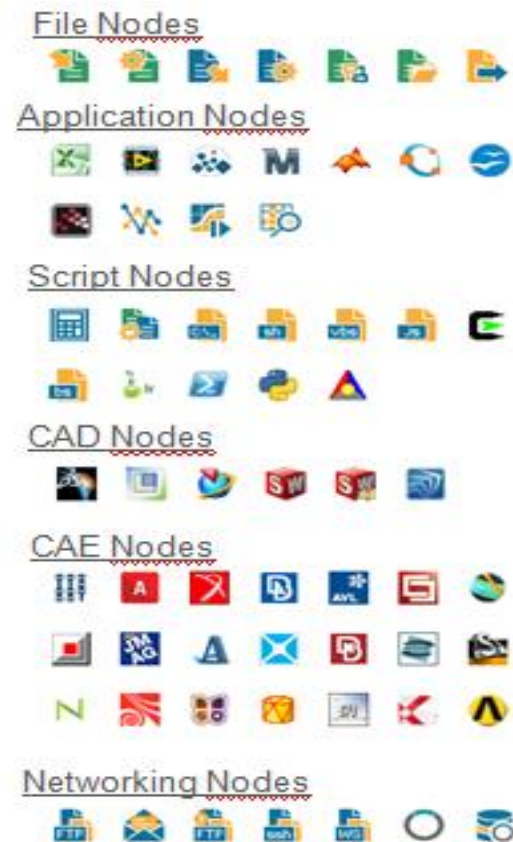
黑匣子

■ 黑匣子可以是：

- ✓ 通过数值计算解决设计问题的一系列求解器（CAD/CAE工具）
- ✓ 实验数据

- modeFRONTIER的工作流程编辑器可以集成及管理实际的逻辑步骤,具备丰富的直接接口

- 通过脚本实现其他工具的间接集成



工作流程编辑器

The screenshot displays the modeFRONTIER 2018R1 workflow editor. The interface includes a top menu bar (HOME, WORKFLOW, RUN, DESIGN SPACE), a toolbar with various workflow building tools, and a central workspace for defining the workflow. Annotations in yellow boxes with red arrows point to specific features:

- 节点** (Node): Points to a node in the workflow diagram.
- 连线** (Connection): Points to a line connecting nodes in the workflow diagram.
- 节点库** (Node Library): Points to the library of available nodes on the left side.
- 变量参数汇总区** (Variable Parameter Summary Area): Points to a table at the bottom right listing variables and their parameters.
- 对象属性设置** (Object Property Setting): Points to the 'Node Graphic Properties' panel on the bottom left.
- 工作流程树, 显示所有流程相关节点** (Workflow Tree, Display all workflow-related nodes): Points to the 'Workflow Tree' panel on the top left.
- 流程定义区** (Workflow Definition Area): Points to the central workspace where the workflow is defined.

Workflow Tree (Left Panel):

- Workflow
 - Data Nodes
 - a
 - b
 - c
 - def
 - stress
 - weight
 - Goal Nodes
 - const_stress
 - const_weight
 - min_def
 - min_weight
 - Logic Nodes
 - Script Nodes

Node Graphic Properties (Bottom Left Panel):

Id: Calculator16
Name: compute_outputs
Background: #FFFFFF00
Foreground: #000000FF
Display Label: ☒
Label Position: Top Left
Label Orientation: Left to Right
Orientation: Left to Right
Icon Size: 24
Border Width: 0
Frame Width: 2
Frame Height: 2
Collapse All Con...: ☐

Variable Parameter Summary Table (Bottom Right):

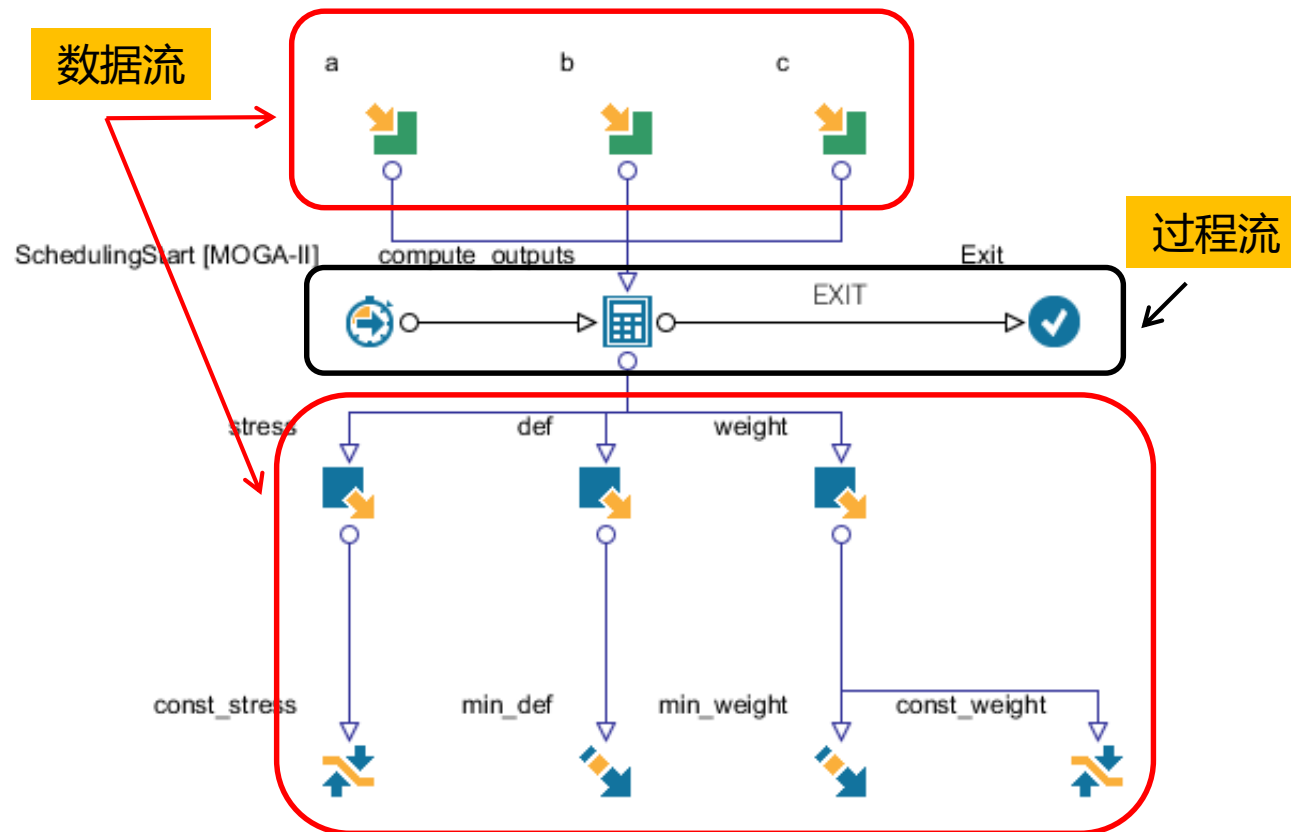
	Name	Type	Default Value	Expression	Lower Bound	Upper Bound	Central Value	Delta Value	Base	Step	Arrangement
1	a	Variable	0.0		0.001	0.01	0.0055	0.00450000...	0	0.0	Ordered
2	b	Variable	0.0		0.05	0.15	0.1	0.04999999...	0	0.0	Ordered
3	c	Variable	0.0		0.05	0.25	0.15	0.1	0	0.0	Ordered

工作流程

- 工作流程由**过程流** (Process Flow) 和**数据流** (Data Flow) 组成

✓ 过程流由一系列的
应用程序和逻辑
节点组成

✓ 数据流由一系列的
变量参数和文件
节点组成



流程节点

- **输入变量节点**: 定义了待优化的模型, 数值基于类型 (连续, 离散, 分类) 等在一定范围内波动。
- **应用程序节点**: 可以运行的软件的求解器或程序脚本多
- **输出变量节点**: 基于模型的响应, 通过求解工具计算得出
- **目标节点**: 输出参数的函数, 期望获得的结果
- **约束节点**: 输入和输出的限制条件
- **逻辑节点**: 说明一个流程的起始和结束, DOE算法和优化算法也在这里定义

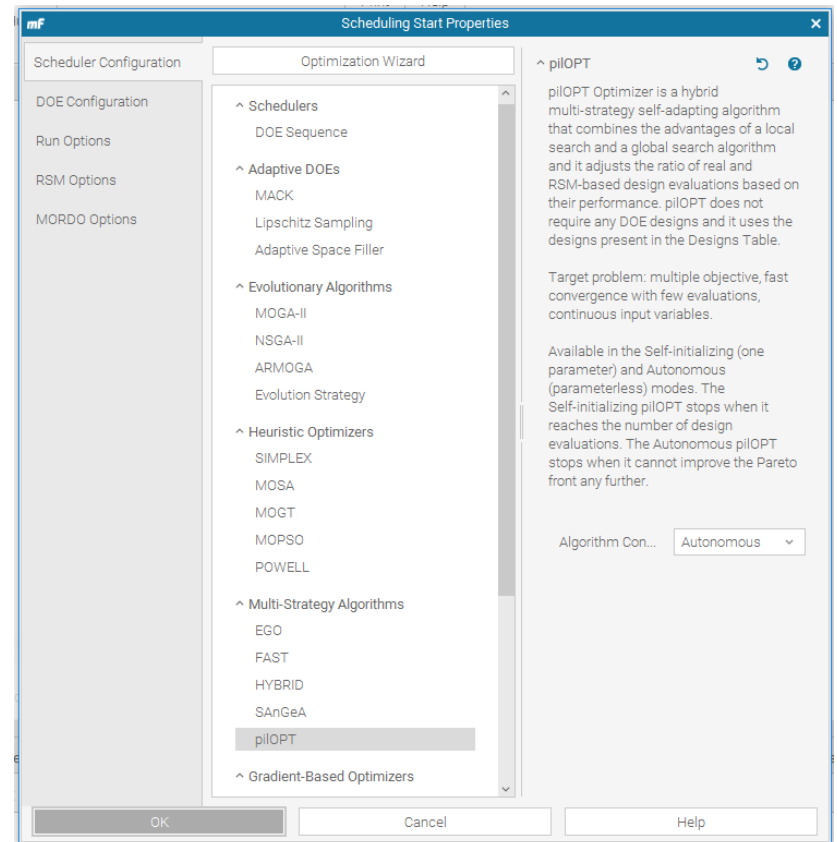


DOE与优化算法配置

- **流程启动节点 (Scheduling Start Node)** 由两个部分组成，分别为试验设计定义和任务定义：

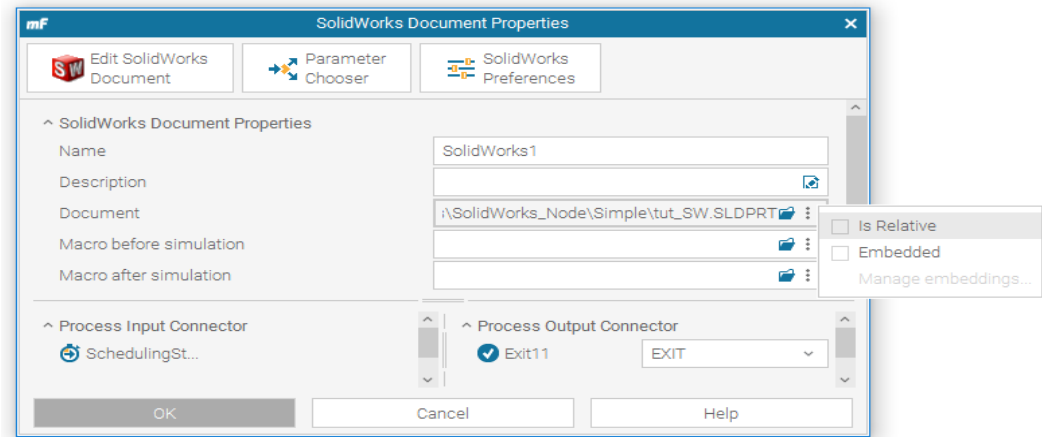
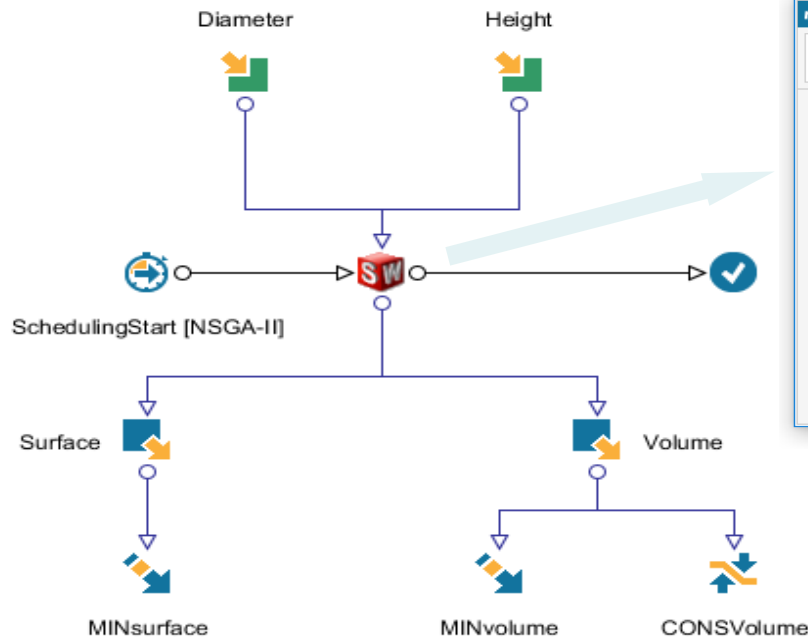


- ✓ **试验设计 (DOE) 选项：**通过不同的算法，为设计空间生成初始的设计点，来探索设计空间的特征
- ✓ **任务选项：**选择合适的优化计算策略



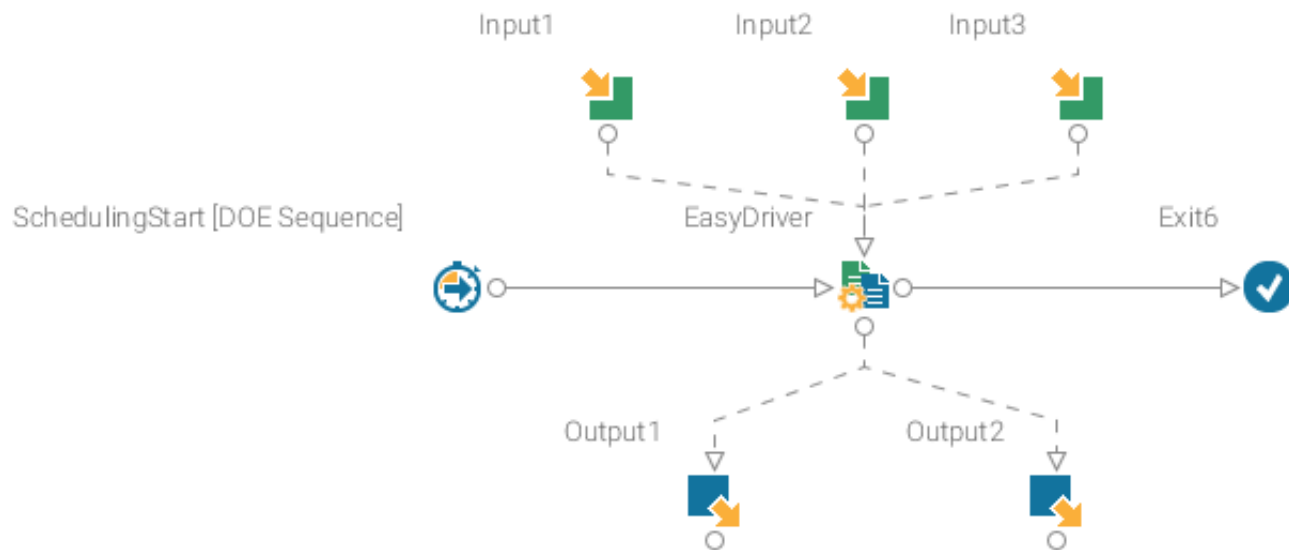
直接接口连接

- 输入和输出参数可通过参数选择连接到导入的CAD/CAE模型中，连接的方式包括：
 - ✓ 根据目标CAD/CAE节点中的参数，自动创建相应的输入和输出参数，并自动连接对应节点
 - ✓ 将目标CAD/CAE节点连接到已有的输入和输出节点



间接接口应用-Easy Driver节点

- 当需要集成的软件在modeFRONTIER中没有相应的直接接口，可以通过调用脚本创建用户自定义的流程节点来实现流程运行



Easy Driver节点

■ 输入模板:

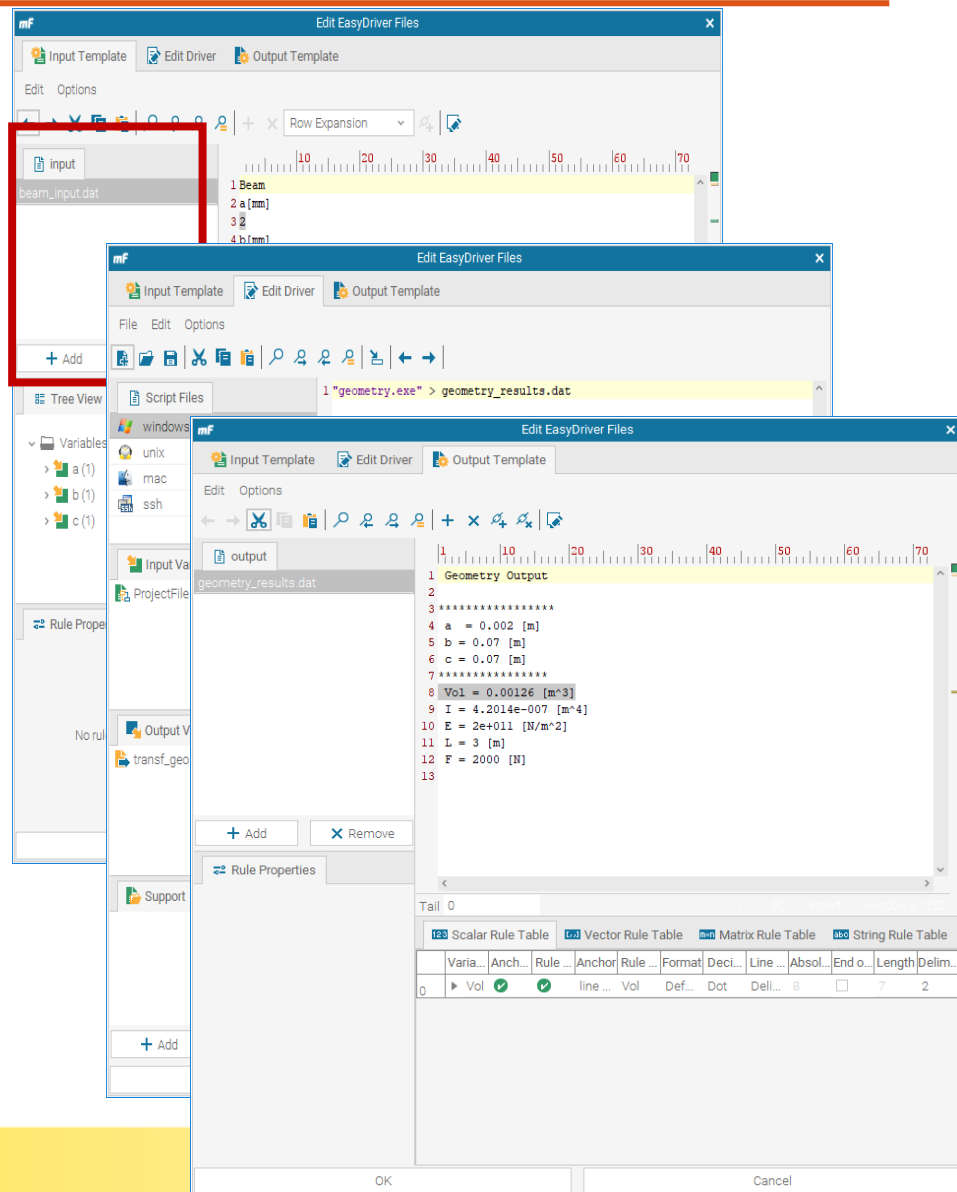
- ✓ 添加任意输入文件
- ✓ 定义输入变量需要关联的数值

■ 求解器命令模板:

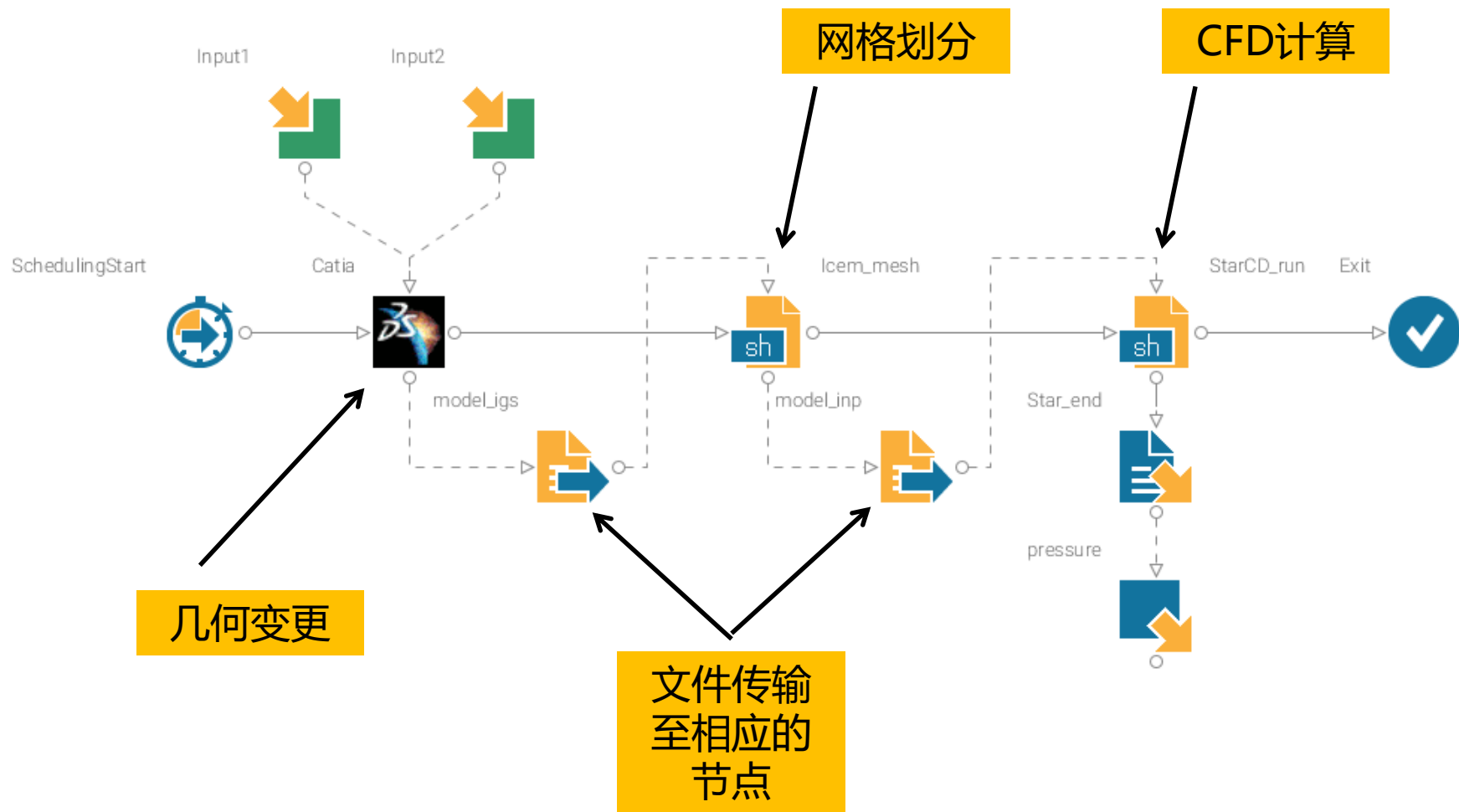
- ✓ 定义驱动求解器运行的命令

■ 输出模板:

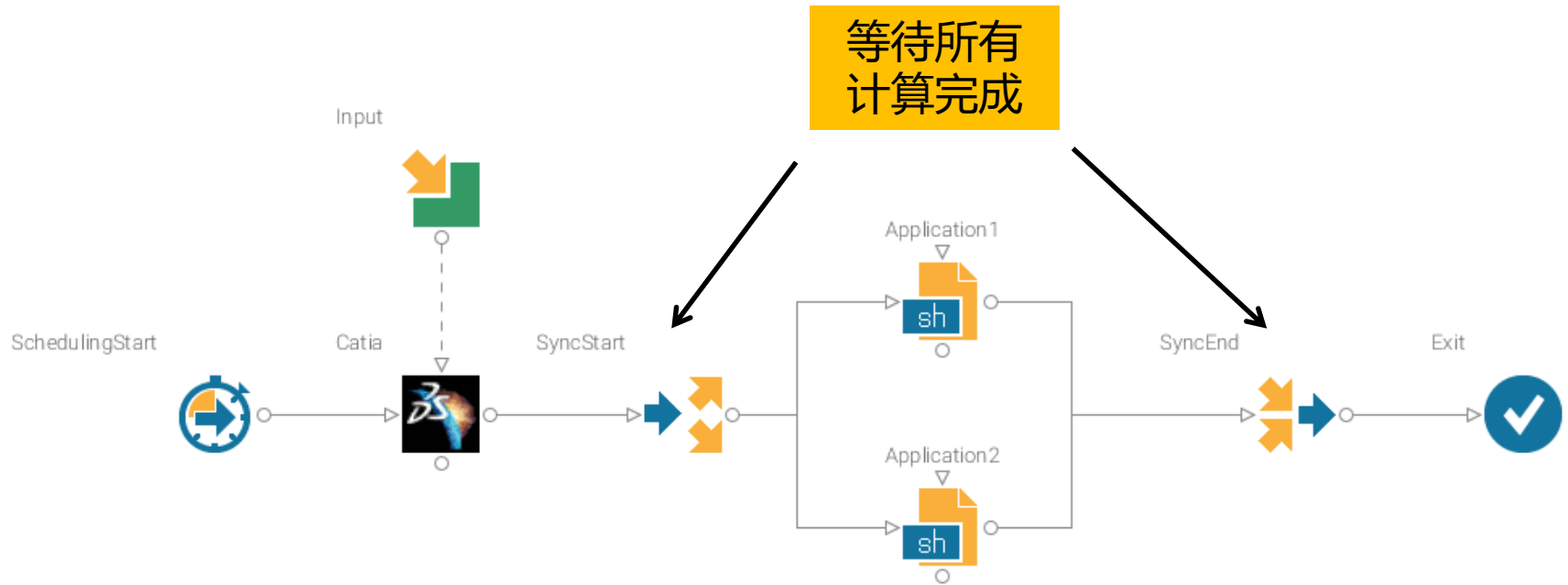
- ✓ 添加任意输出文件
- ✓ 定义输出变量需要提取的数值



多节点应用-文件传输节点



多应用流程-并行（parallel）计算节点



Synchronizer Start Properties

^ Synchronizer Start Properties

Synchronizer Start Name: SyncStart

Description:

^ Process Input Connector

Catia EXIT

^ Process Output Connector

Application1

Application2

OK Cancel Help

Synchronizer End Properties

^ Synchronizer End Properties

Synchronizer End Name: SyncEnd

Description:

^ Process Input Connector

Application1 =0

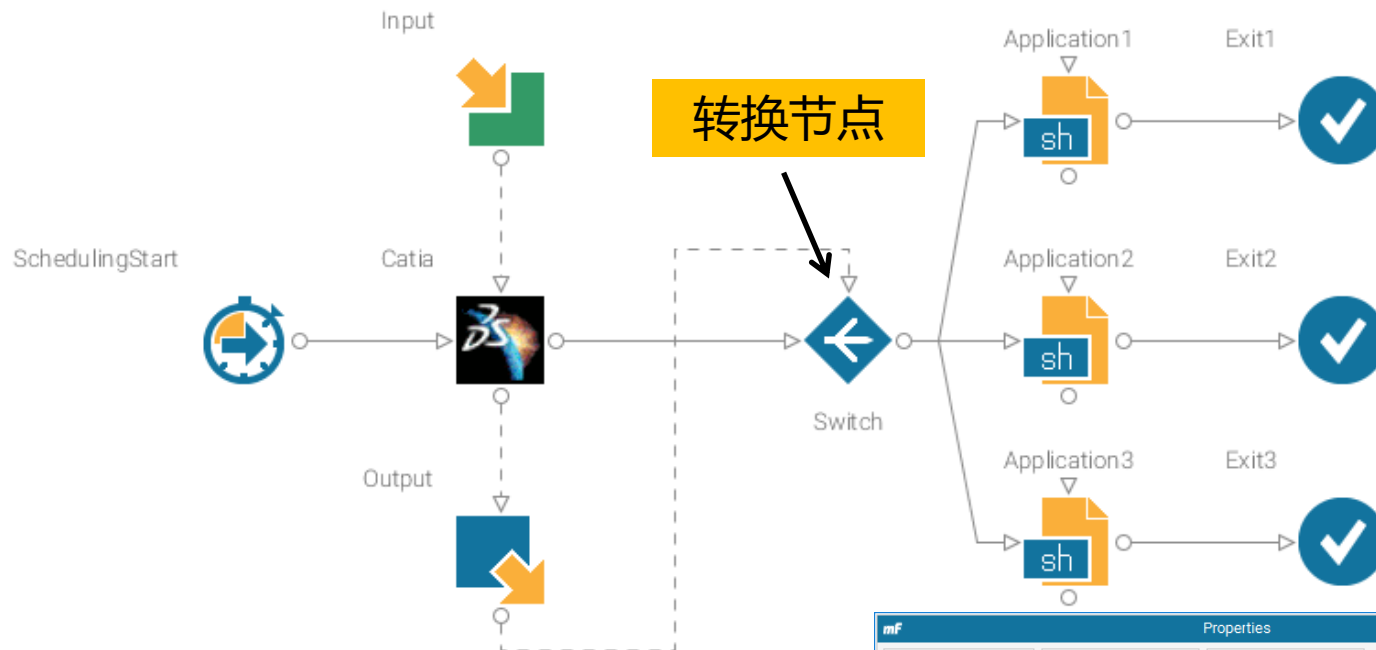
Application2 =0

^ Process Output Connector

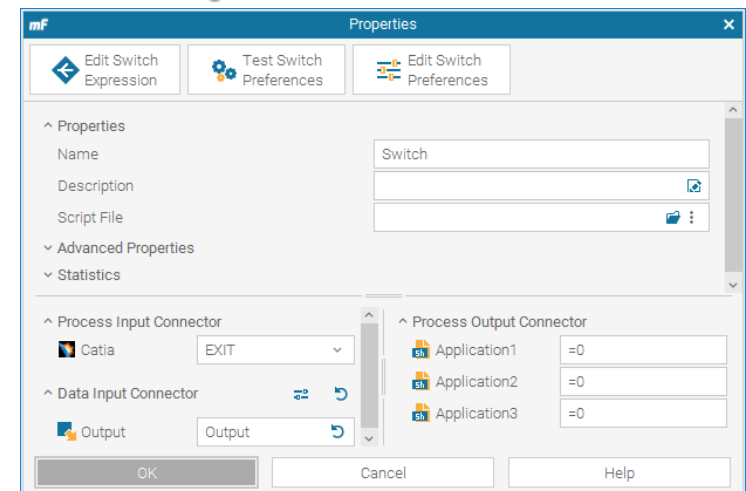
Exit

OK Cancel Help

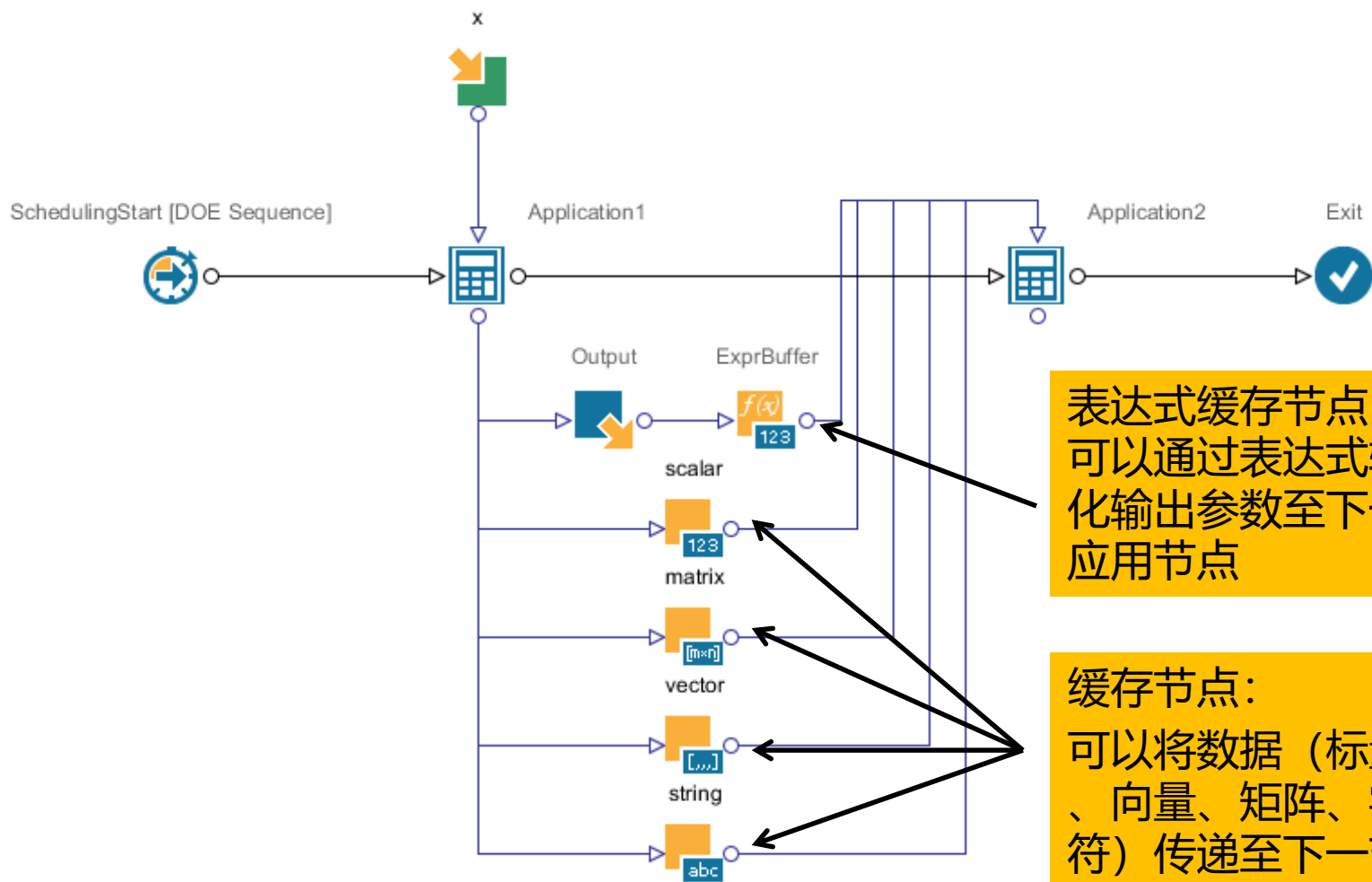
多应用流程-转换 (Switch) 节点



转换节点设置



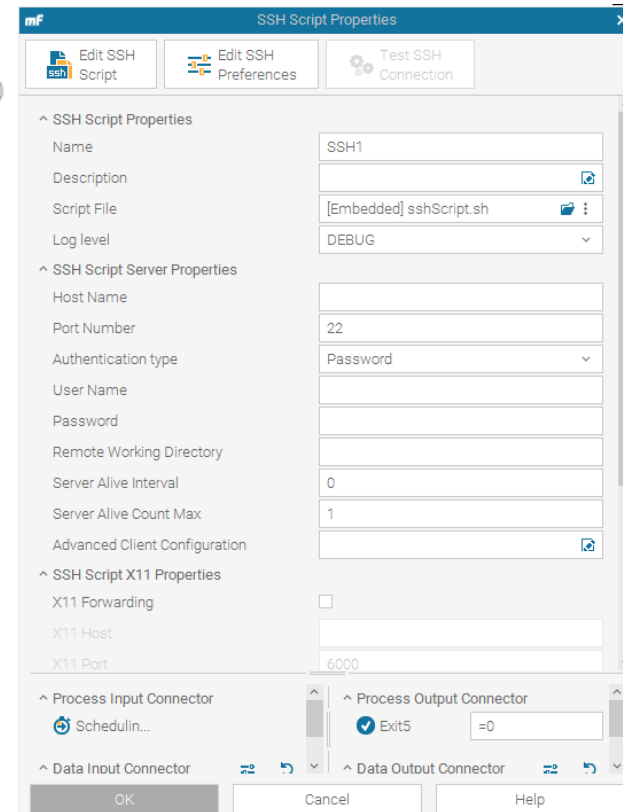
多应用流程-缓存 (buffer) 节点



表达式缓存节点:
可以通过表达式转化
输出参数至下一
应用节点

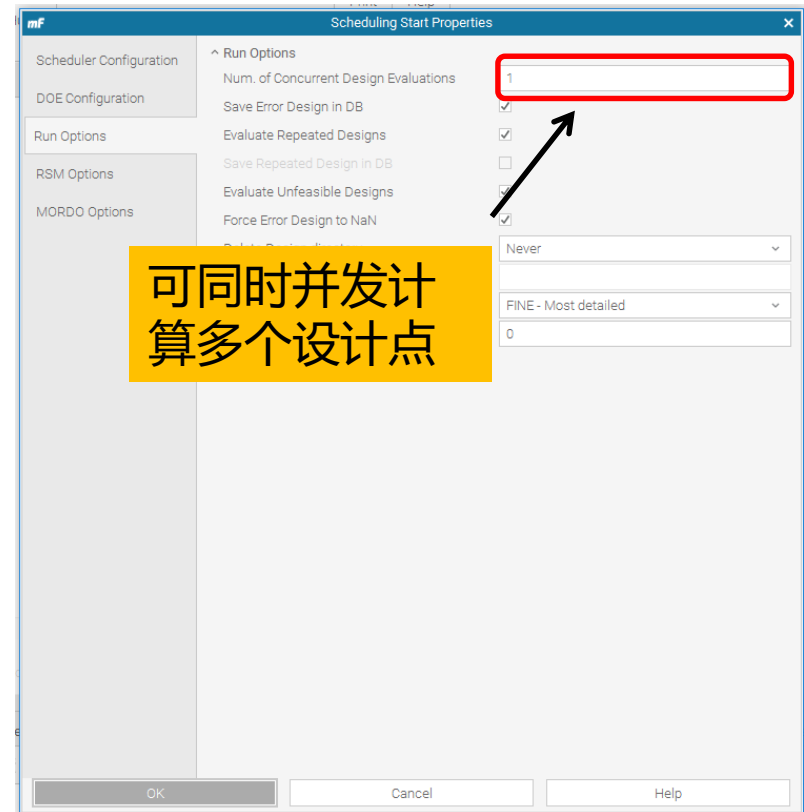
缓存节点:
可以将数据 (标量
、向量、矩阵、字
符) 传递至下一节
点

远程(SSH)节点



运行选项- 并发设计计算

- 开始任务节点可以作初始的与计算相关的选项设置



主要内容

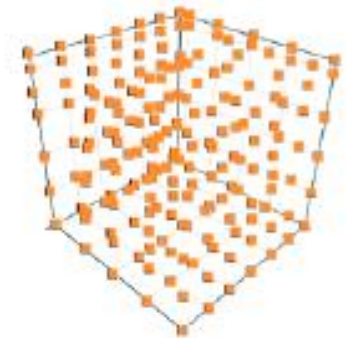
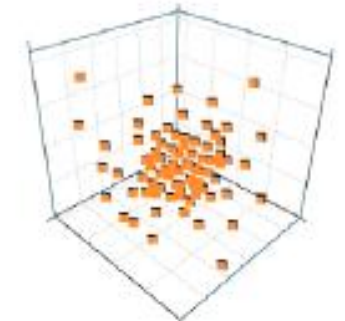
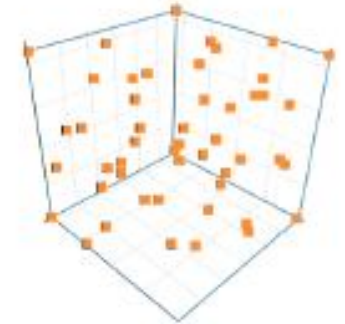
1. modeFRONTIER介绍
2. 工作流程介绍
3. DOE及优化算法介绍
4. 优化计算
5. 基本后处理工具使用
6. 响应面介绍

实验设计 (DOE) 定义

优化过程中一个主要的步骤是确定设计空间的初始样本

DOE可以帮助我们回答如下问题:

- 最重要的设计变量有那些?
- 设计空间 (参数数目及参数范围) 能否减少?
- 变量之间是如何联系的?
- 当前的项目合适的约束和目标应该取多少?



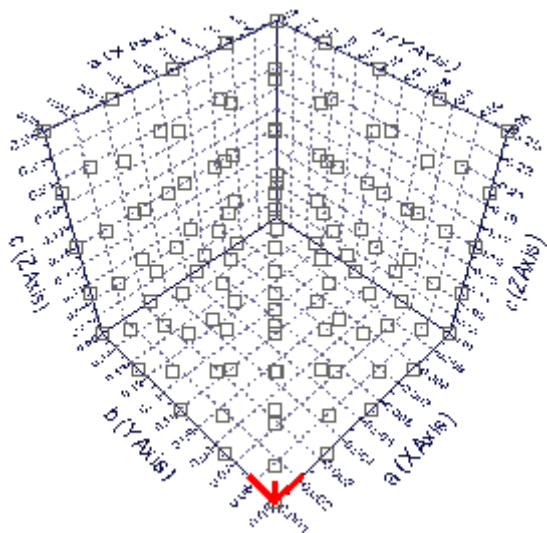
如何选择合适的DOE方法及样本个数？

- 统计分析所需DOE：参数间的相关性越低越好，推荐算法 **Factorial DOEs, ULH, Latin Square**
- 响应面生成所需DOE：初次生成样本的均匀性越高越好，样本数目越多，响应面的精度越高。推荐算法 **ULH, Latin Square**
- 优化计算所需DOE：不同的优化算法需要不同的DOE样本数目，而稳健性分析对DOE质量的要求不高。推荐算法： **ULH, Random, Sobol** (not for Simplex optimizer)
- 通用的样本数目公式：
 - ✓ $N = 2 \times \text{输入变量的个数} \times \text{优化目标的个数}$
 - ✓ 同时需要考虑计算资源的条件（CPU等）

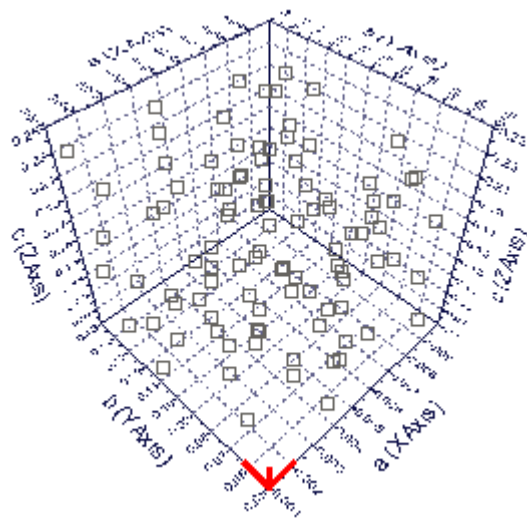
DOE可视化-3D散点图

- 在Design Space环境下可以通过图表来显示不同算法生成的设计样本

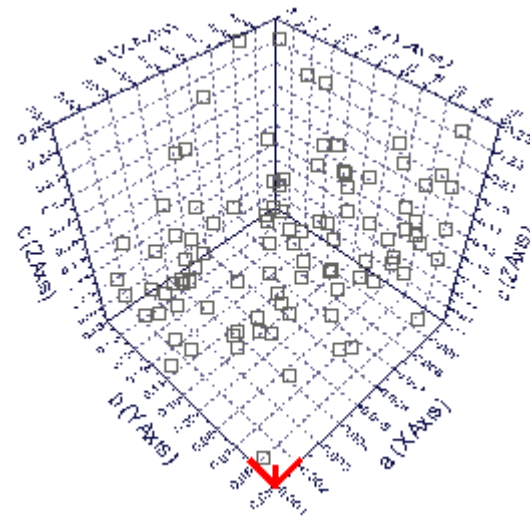
例如：3D散点图



全因子法
Full Factorial

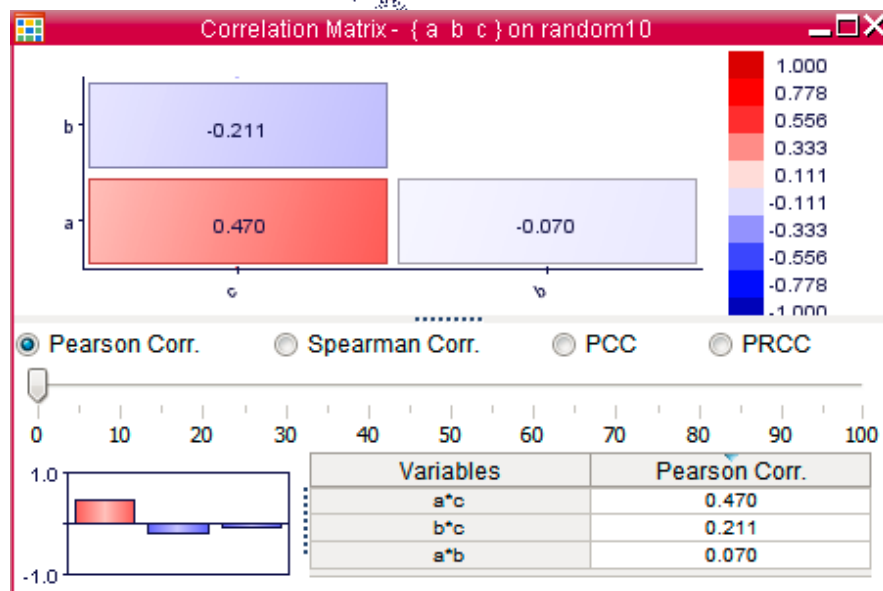
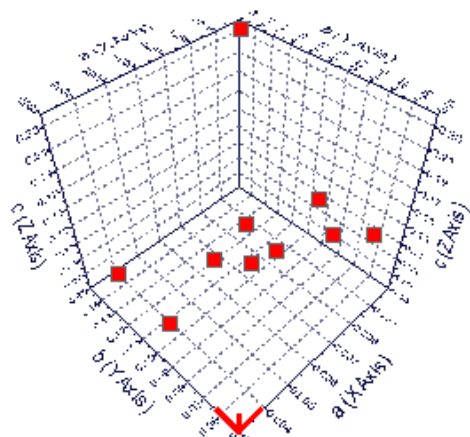


均匀拉丁超立方方法
ULH

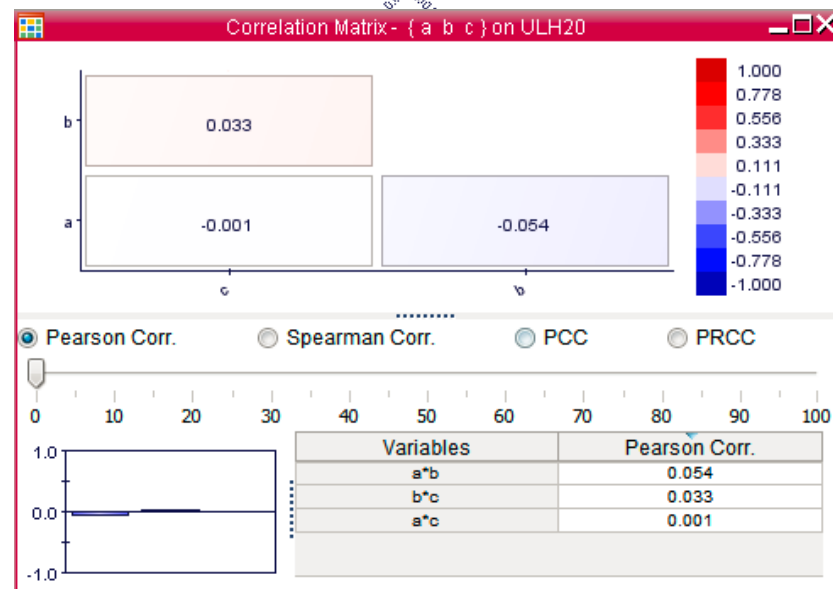
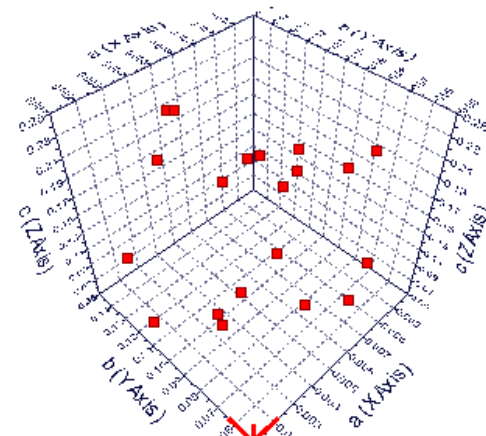


随机方法
Random

DOE可视化-相关矩阵图



变量相关-质量差

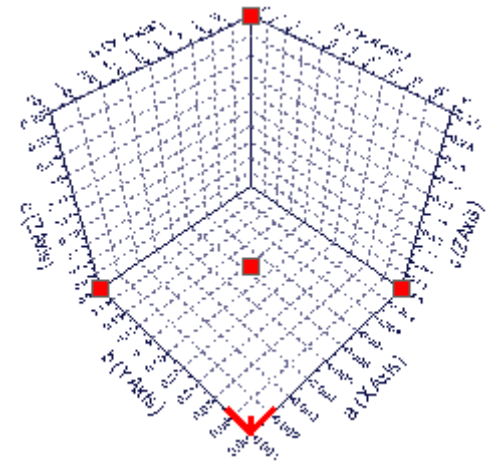
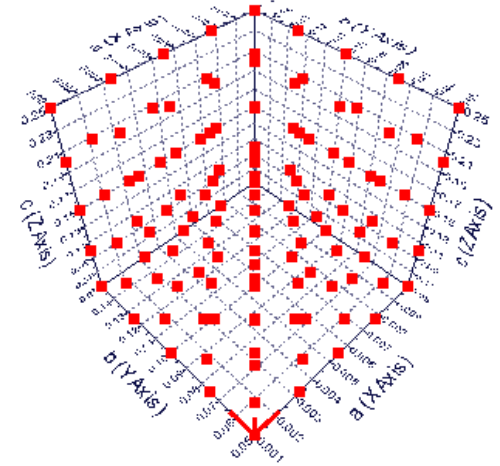


变量不相关-质量好

DOE算法

因子实验设计法 (Factorial DOE)

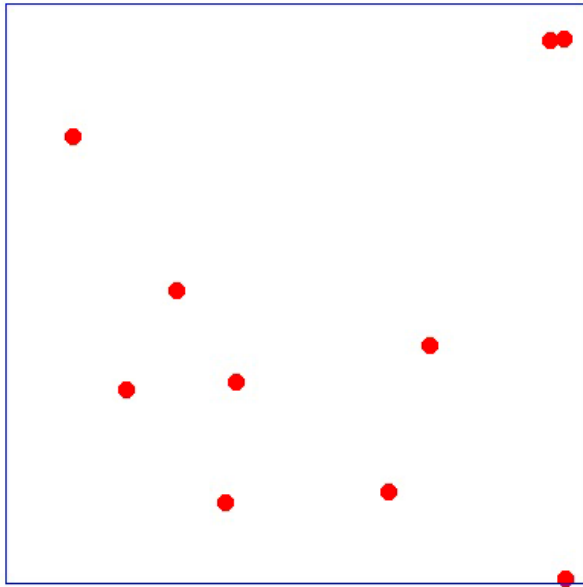
- 全因子实验设计：考虑实验因子水平的所有可能的组合并获得响应，研究其响应可了解关于主效应(main effect)和交互效应(interaction effect)的详细信息。
 - ✓ 适用于统计分析
 - ✓ 当变量多时，计算规模庞大
- 部分因子实验设计：考虑所有实验因子水平的子集的组合的效应。评估数目的最大值为水平数为2的全因子设计。
 - ✓ 适用于统计分析
 - ✓ 不适用与优化计算及响应面生成



DOE算法

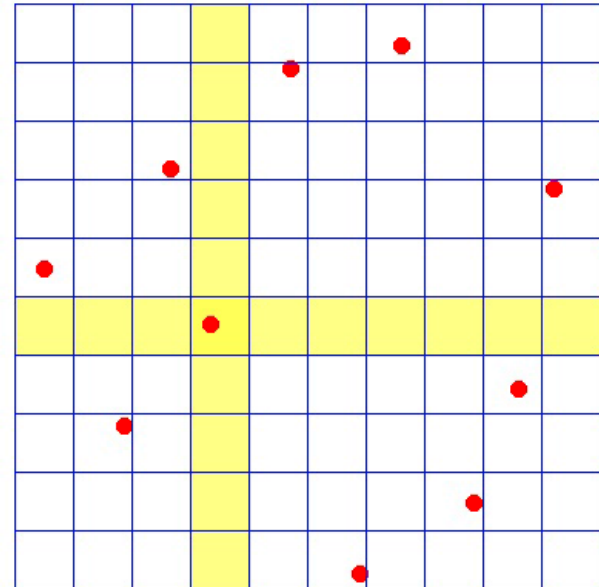
均匀拉丁超立方方法 (Uniform Latin Hypercube)

- 随机空间填充的实验设计方法，优于蒙特卡洛抽样方法
- 生成随机样本的同时，考虑分布的均匀性
- 在可用较少的样本数量，保证输入变量相关性的最小化
- 适用与优化计算与响应面生成



蒙特卡洛随机

$n = 10$

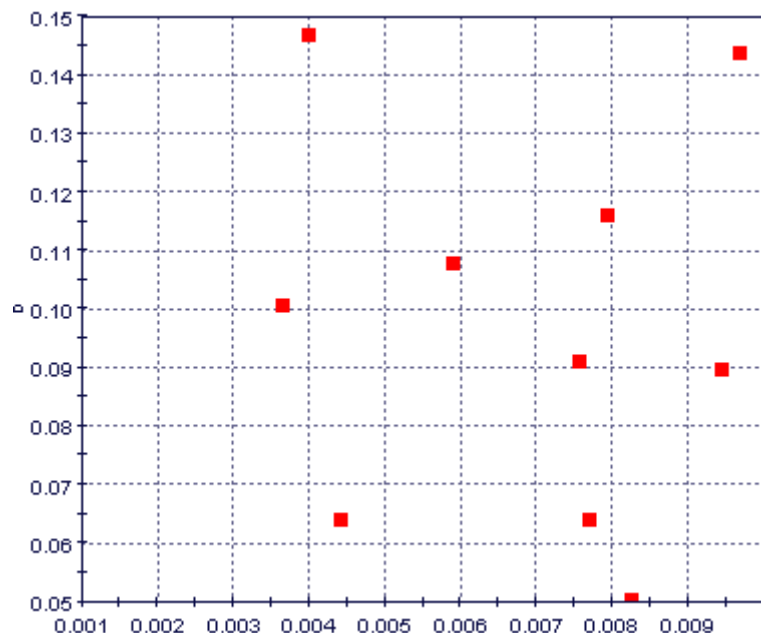


均匀拉丁超立方

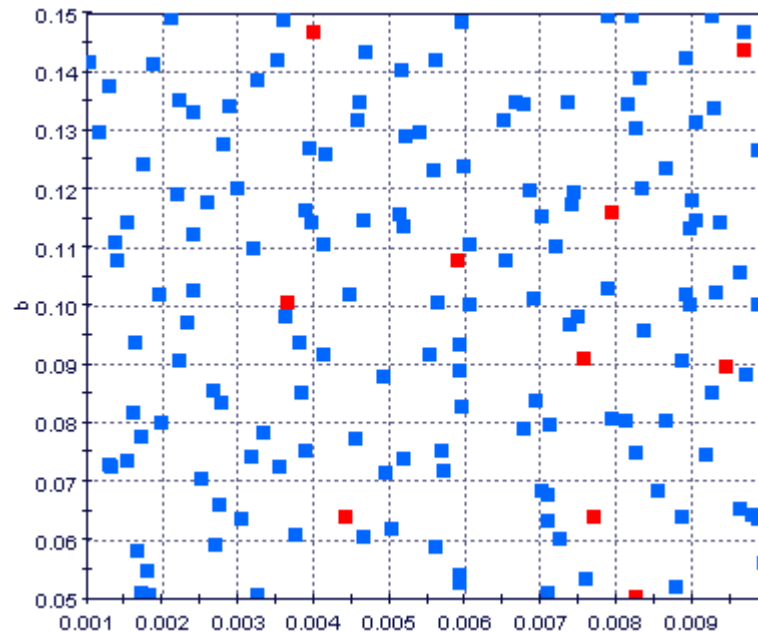
DOE算法

增量空间填充 (Incremental Space Filler)

- 为改进样本空间质量，基于已有的设计点来增加新的设计点
- 适用与优化计算与响应面生成
- 可保证空间填充的均匀性
- 可排除不可行的设计 (unfeasible designs)



初始DOE



使用ISF方法增加点

DOE算法

D-Optimal

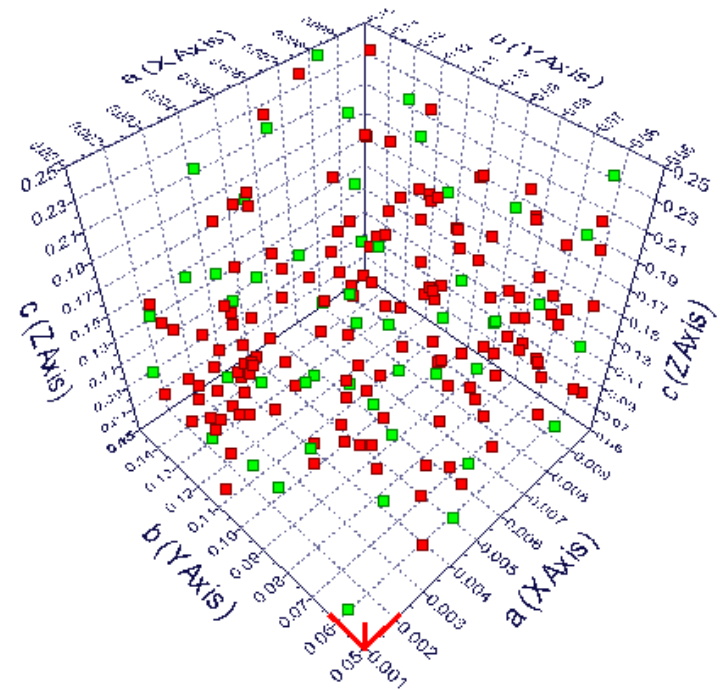
基于 D-Optimality 准则, 该方法通过使用遗传算法来标记一系列的初始样本点, 来降低初始样本参数的相关度

- ✓ 当因子实验法不可用时, 可采用此方法
- ✓ 适用于统计分析, 最小化相关性

Uniform Reducer

通过最大化设计点之间的最小距离, 在设计空间均匀的增加设计点

- ✓ 适用于响应面生成
- ✓ 可用来减少不满足要求的设计点



主要内容

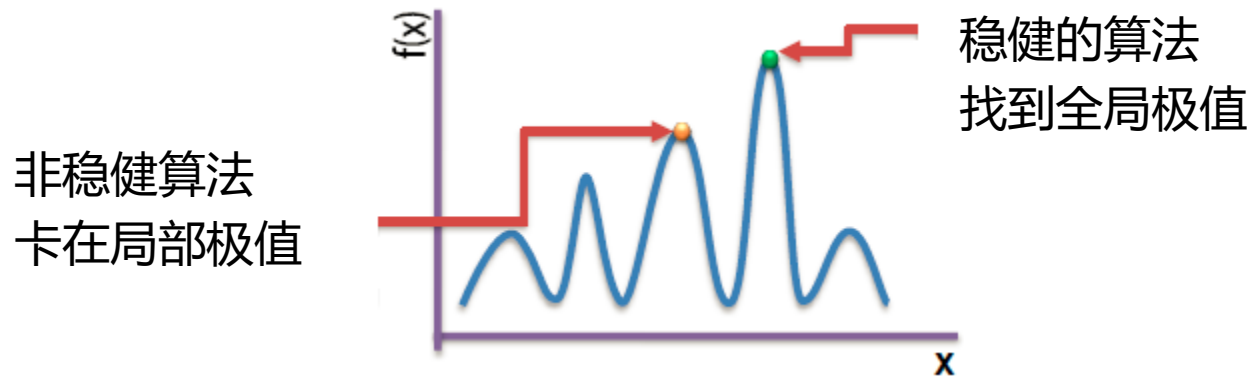
1. modeFRONTIER介绍
2. 工作流程介绍
3. DOE及优化算法介绍
4. 优化计算
5. 基本后处理工具使用
6. 响应面介绍

优化算法分类

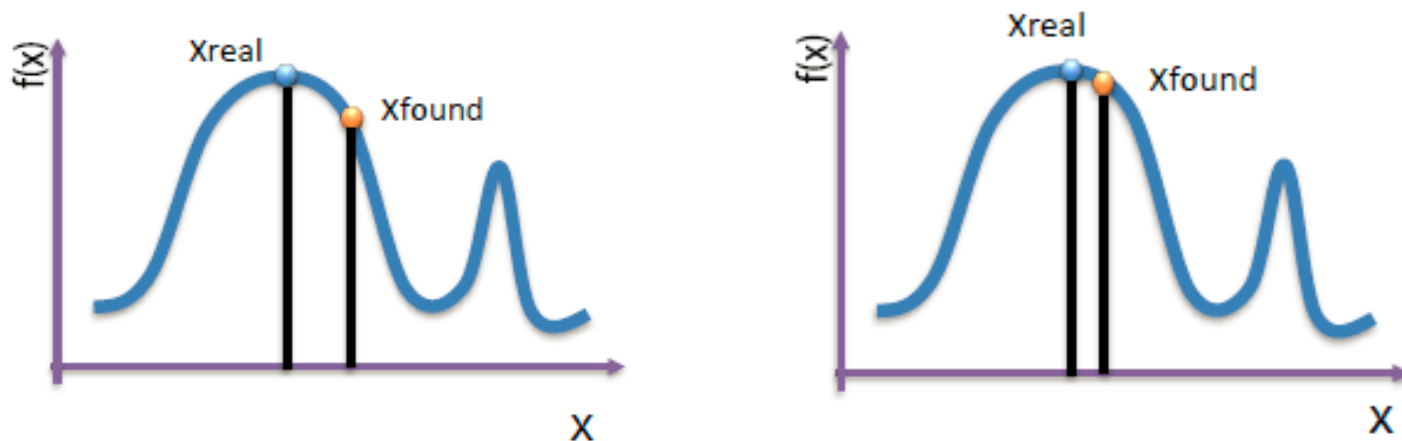
梯度算法		全局搜索		
单目标	多目标	单目标	多目标	
			计算速度	稳健性
B-BFGS NLPQLP MIPSQP AfilterSQP Levenberg-Marquardt	NBI-BLPQLP NBI-AFSQP	SIMPLEX	MOGT FAST PILOPT	MOGA-II NSGA-II ARMOGA MOPSO ES MOSA HYBRID SAnGeA

稳健性VS精度

- 优化算法的稳健性反应为避免卡在局部解而成功收敛的能力。



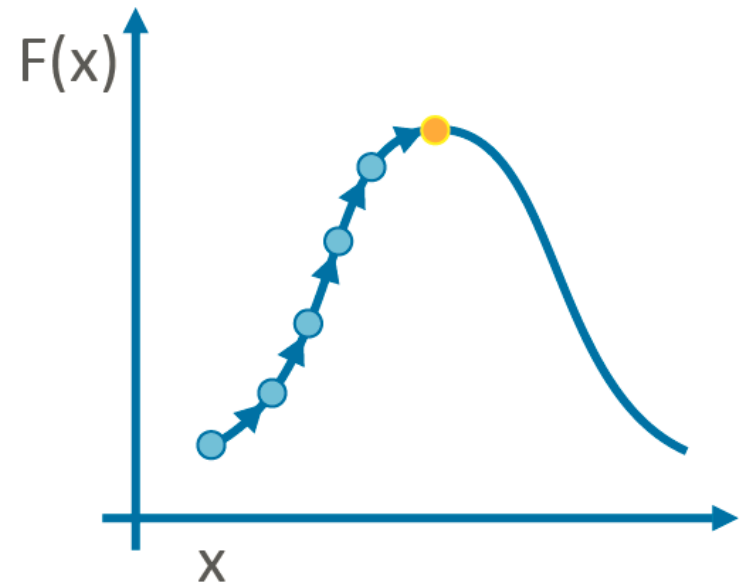
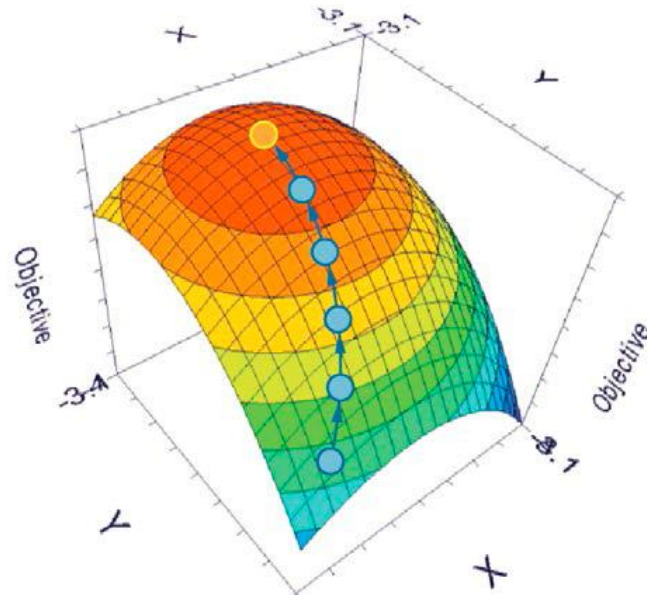
- 算法的精度表现为找到目标函数极值的能力



梯度算法VS全局搜索算法

梯度算法：常规的迭代确定方法，沿方程的梯度方向计算新的设计点。

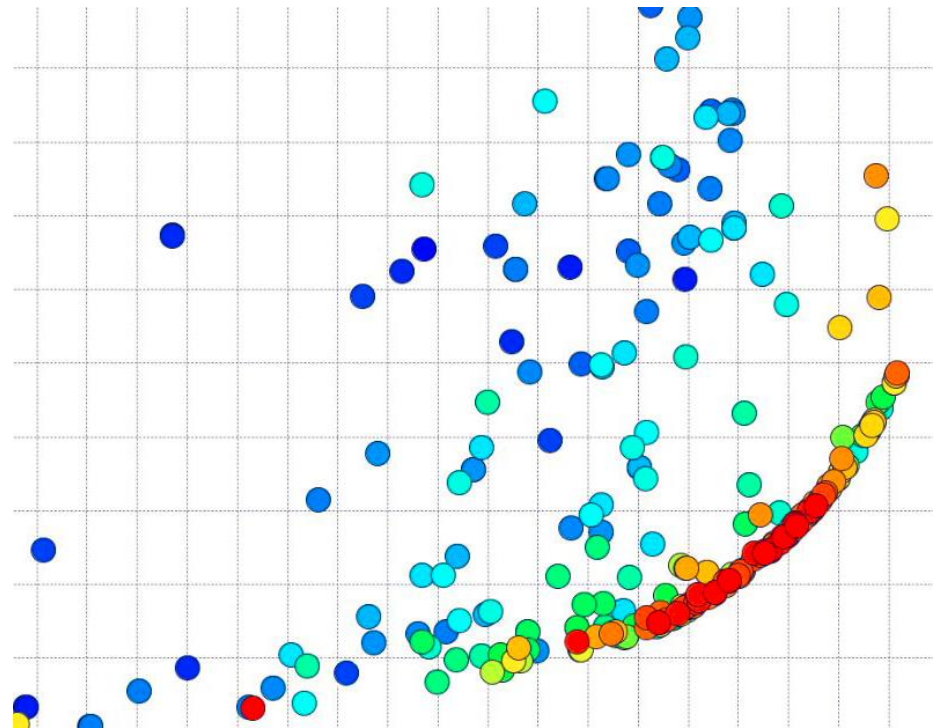
- 适用于任意维度的局部寻优
- 精度高且收敛迅速，但稳健性差
- 可能卡在局部最优
- 不适用与低阶的离散变量计算



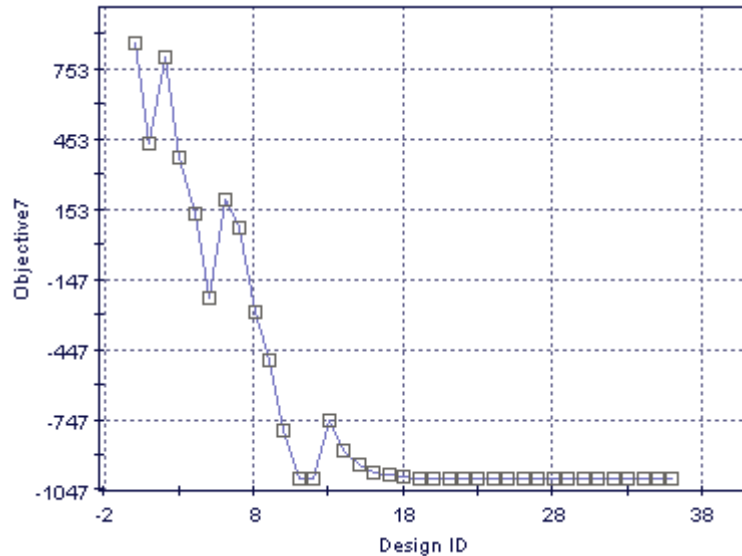
梯度算法VS全局搜索算法

全局搜索算法：启发式随机方法，包含遗传及进化等算法。通过在搜索阶段引入随机性来保证搜索的过程对模型误差不敏感，同时跳出局部最优范围而获得全局最优解。

- 良好的全局搜索能力
- 适用与任何维度的问题
- 高稳定性但是收敛效率差
- 可处理离散变量问题



单目标与多目标

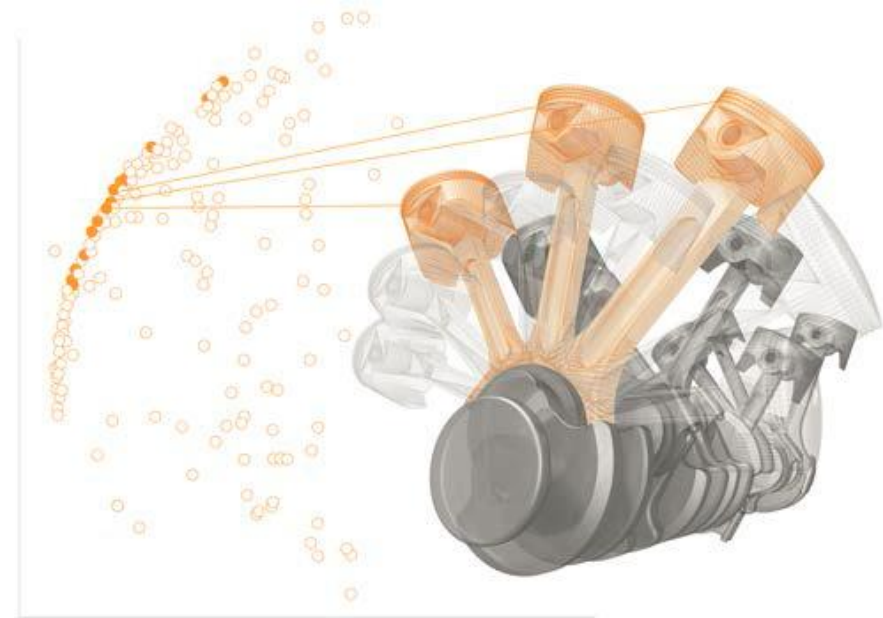


多目标优化

- 基于输入变量定义多个优化准则，在优化准则**互斥**的情况下，不存在唯一解。解的集合被称为帕累托前沿（Pareto Frontier）

单目标优化

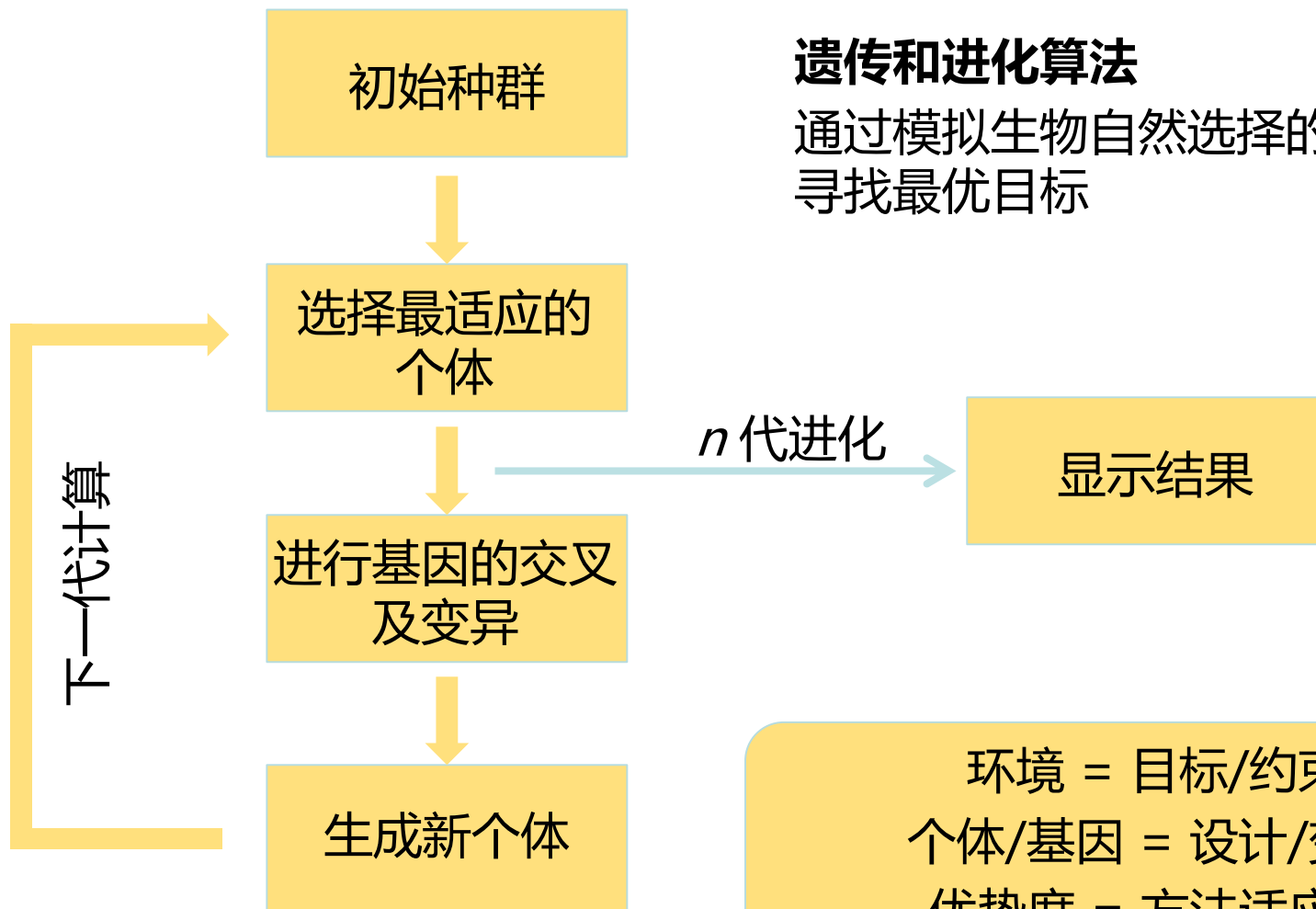
- 单一目标结果，以目标结果无法继续改进为收敛标准（最大或最小）



遗传算法

遗传和进化算法

通过模拟生物自然选择的进化过程来寻找最优目标



环境 = 目标/约束
个体/基因 = 设计/变量
优势度 = 方法适应性

MOGA-II与NSGA-II

- MOGA-II与NSGA-II为用于单目标和多目标计算的基因算法。稳健性高，也是常用的优化算法。

- 最大DOE数目= $2*n*o$

- 最小DOE数目= $2*n$

- n 为输入变量的个数

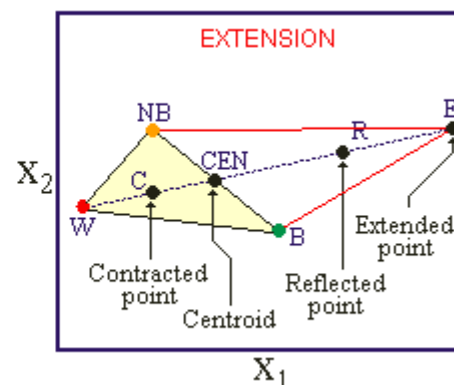
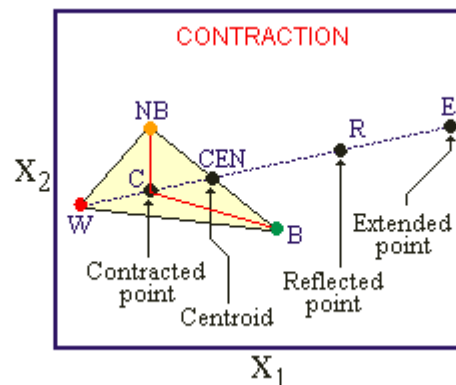
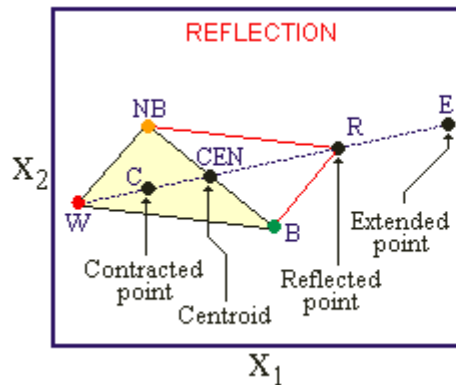
- o 为优化目标的个数

- Generation数目：
对应大多数工程问题，至少迭代10次，一般选20~30次。

MOGA-II	NSGA-II
✓ 通过惩罚函数处理约束	✓ 通过Pareto等级处理约束
✓ 处理离散变量问题表现良好	✓ 处理连续变量问题表现良好

SIMPLEX算法

- 单目标优化算法，可解决高度非线性问题
- 不需要考虑函数的偏导数，因此比其他基于梯度的算法具有更强的稳健性
- 算法遵从连续变量的边界约束，利用惩罚函数来处理约束条件
- 只考虑 $N+1$ 个设计点作为初始设计点（ n 为设计变量个数）



- W为最差设计点
- B为最优设计点
- NB为次优设计点

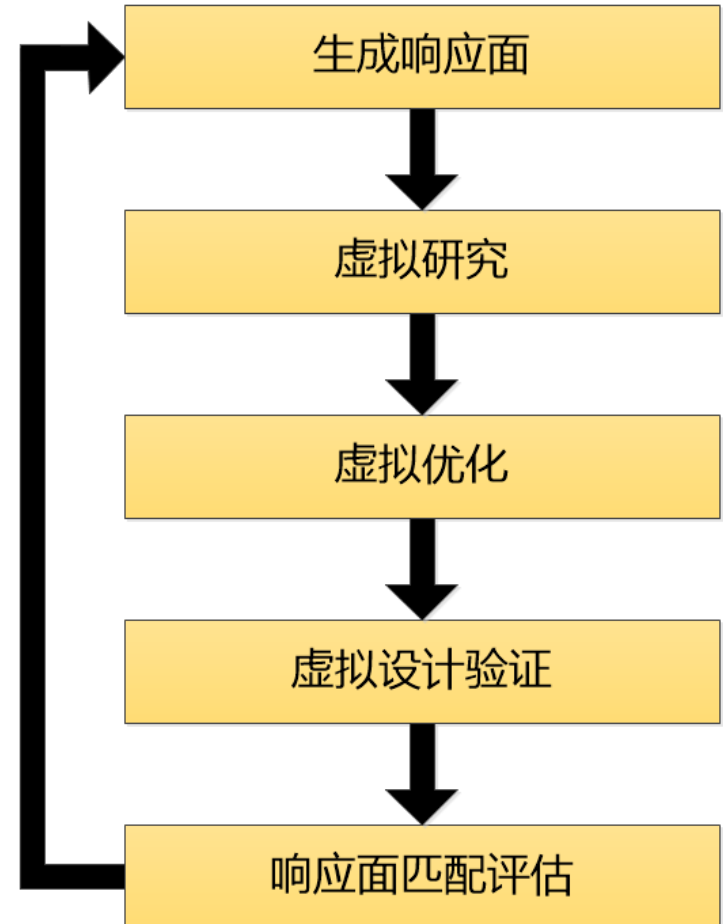
多目标博弈算法 (MOGT)

- 启发式多目标算法，为是Game Theory (J.Nash) + Simplex法的集成，基于运动员竞争理论，将多个目标视为运动中的竞争对手。
- 该算法将优化问题的目标和变量在运动员中进行解耦，进而采用一种单目标优化算法（比如Simplex），在每一轮运动中强制优化各自的目标函数（即现固定其他几个，对某一运动员进行优化）
- 可用于 MOGAs / MOSA优化的预寻优
- Nash算法适用于强约束和非线性问题，与其它多目标优化方法相比可用很少的时间找到一系列好的不支配解（Nash均衡）。通过用得到的优解作为下一步搜索的初始解，故加速了pareto前沿的搜索。

FAST

FAST算法通过内部适应响应面模型来加速优化的流程

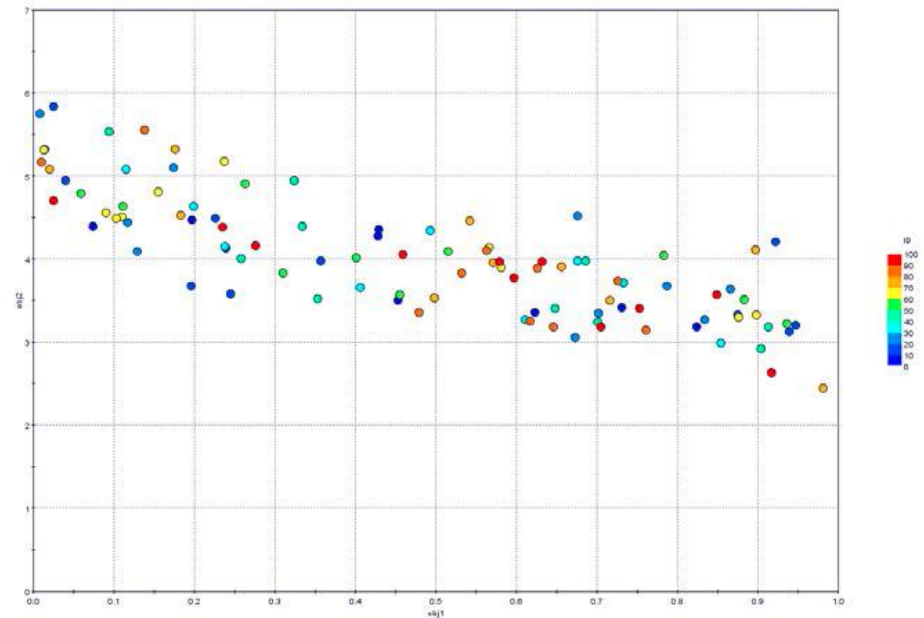
- 优势及不足：
- ✓ 与遗传算法相比，计算速度快
- ✓ 可自动选择精度最高的响应面
- ✓ 响应面可基于实际设计更新
- ✓ 自动添加实验设计点来提高精度
- ✓ 当变量数目大于10时，响应面的精度会下降
- ✓ 处理高度非线性问题时，稳定性差



pilOPT

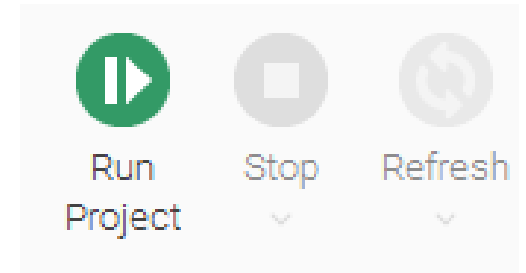
- 结合了局部与全局搜索算法特点的自适应混合算法，在实际设计和响应面优化中搜索帕累托前沿。

- 特点：
 - ✓ 从2014版本开始，引入该算法
 - ✓ 基于单参数开始计算
 - ✓ 处理复杂输出函数问题依然有效
 - ✓ 可动态调整实际设计与虚拟设计评估的比例来实时优化计算资源



求解计算

- 优化运行之前，首先保证logic log窗口中，没有错误提示。
- 点击求解图表运行，程序首先会提示保存文件，可覆盖同名文件，也可使用不同文件名，程序会自动建立相关的.prj文件和目录，并以数字编号。



以下图标在运行时可以点击

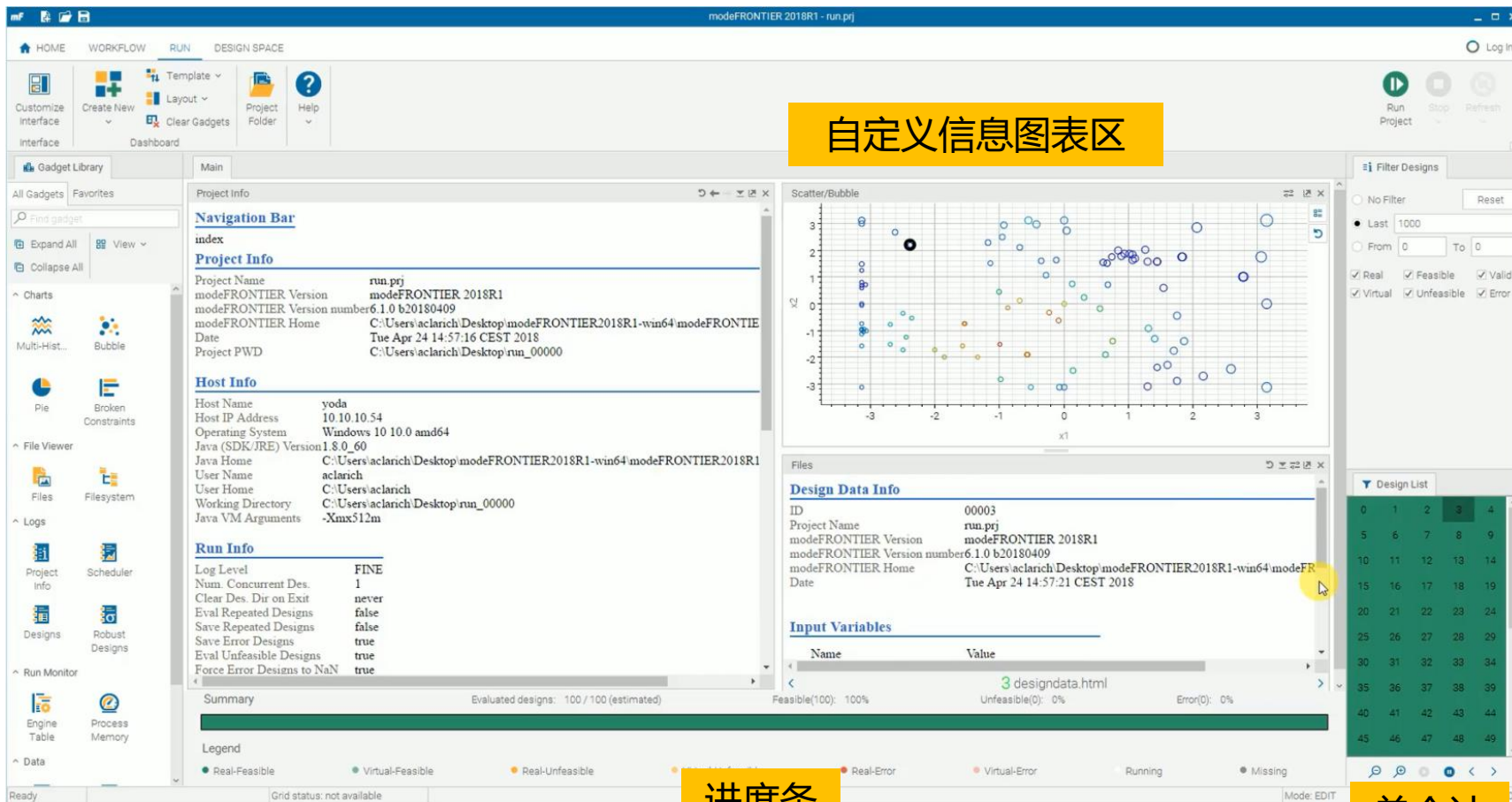


刷新运行交互界面，定义刷新的频率



终止运行，任何计算未完成的设计点会以错误颜色标记

进程监控



自定义信息图表区

进度条

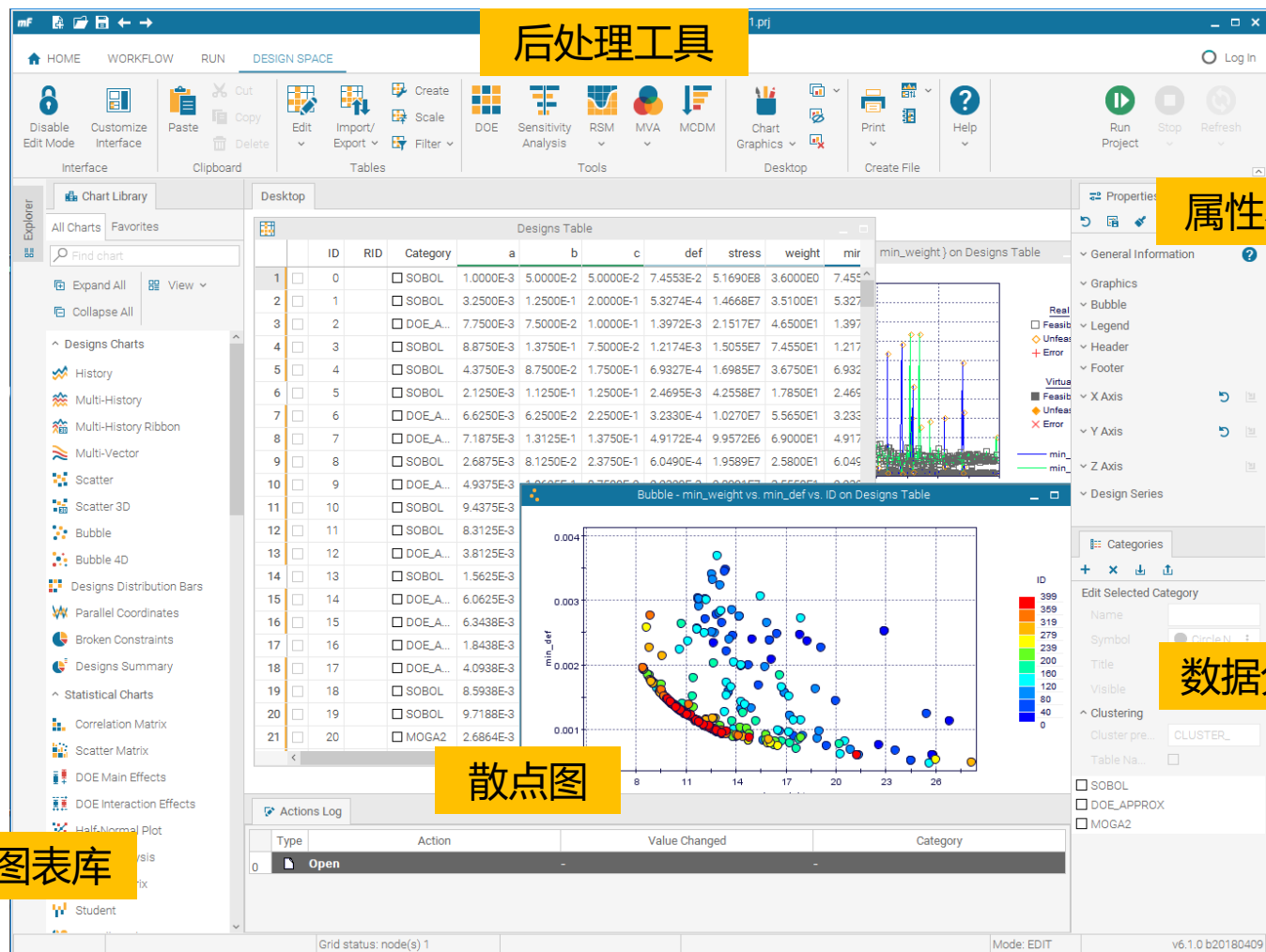
工具栏

单个计算细节

主要内容

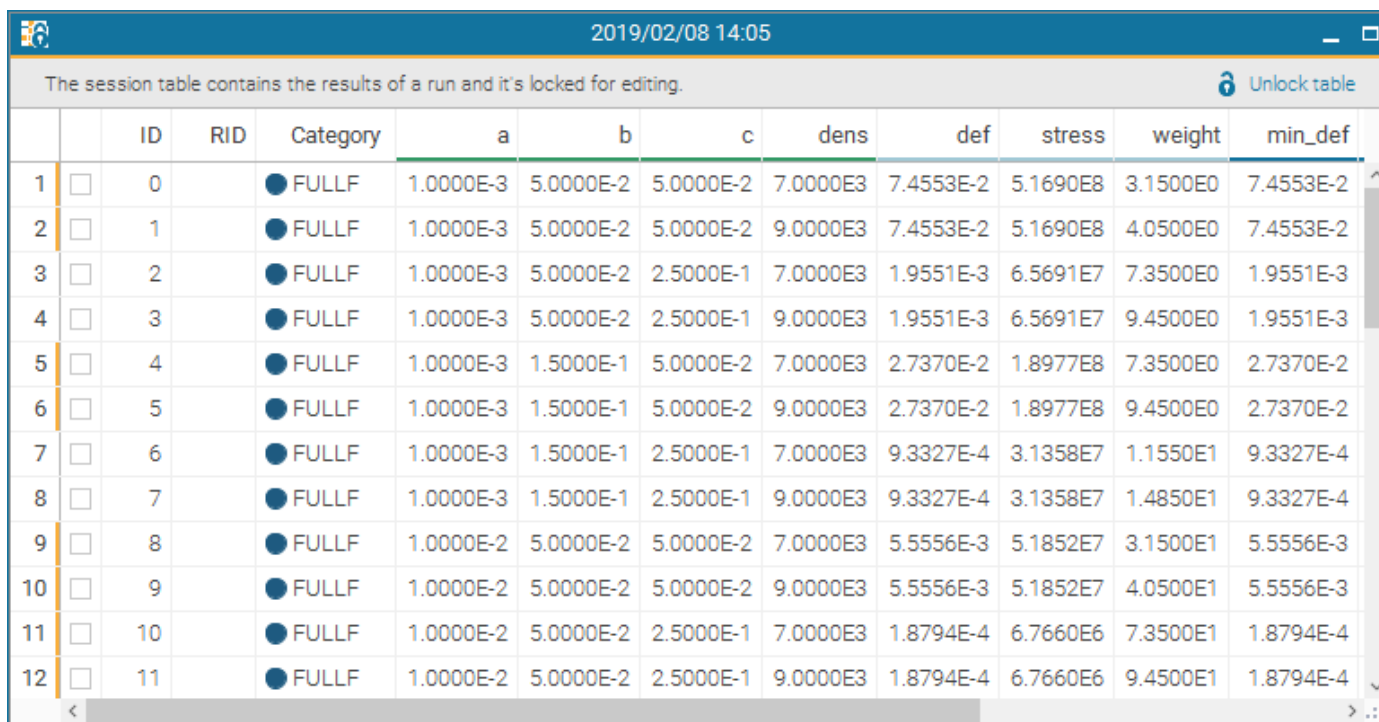
1. modeFRONTIER介绍
2. 工作流程介绍
3. DOE及优化算法介绍
4. 优化计算
5. 基本后处理工具使用
6. 响应面介绍

后处理界面



后处理表格

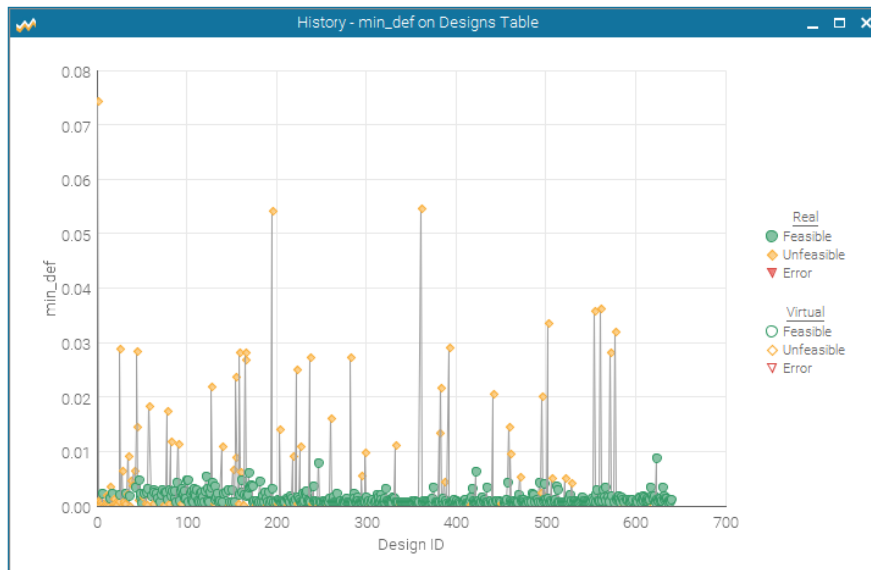
- Design Space中的数据是基于表格存在的，一旦表格移除，所对应的图示也会移除。
- 如果图表最小化后，将会在桌面消失，此时可以从项目树中显示及重新打开；如果一个图表被关闭掉，那么该图表会被彻底删除



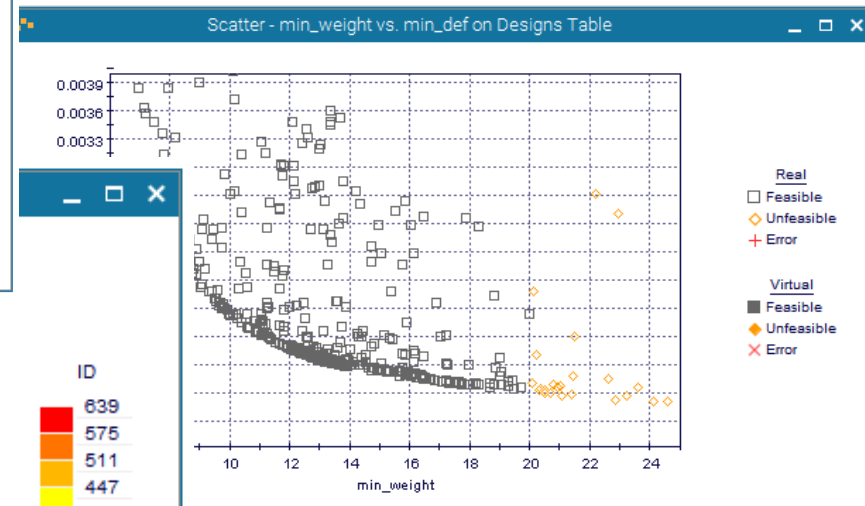
		ID	RID	Category	a	b	c	dens	def	stress	weight	min_def
1	☐	0		FULLF	1.0000E-3	5.0000E-2	5.0000E-2	7.0000E3	7.4553E-2	5.1690E8	3.1500E0	7.4553E-2
2	☐	1		FULLF	1.0000E-3	5.0000E-2	5.0000E-2	9.0000E3	7.4553E-2	5.1690E8	4.0500E0	7.4553E-2
3	☐	2		FULLF	1.0000E-3	5.0000E-2	2.5000E-1	7.0000E3	1.9551E-3	6.5691E7	7.3500E0	1.9551E-3
4	☐	3		FULLF	1.0000E-3	5.0000E-2	2.5000E-1	9.0000E3	1.9551E-3	6.5691E7	9.4500E0	1.9551E-3
5	☐	4		FULLF	1.0000E-3	1.5000E-1	5.0000E-2	7.0000E3	2.7370E-2	1.8977E8	7.3500E0	2.7370E-2
6	☐	5		FULLF	1.0000E-3	1.5000E-1	5.0000E-2	9.0000E3	2.7370E-2	1.8977E8	9.4500E0	2.7370E-2
7	☐	6		FULLF	1.0000E-3	1.5000E-1	2.5000E-1	7.0000E3	9.3327E-4	3.1358E7	1.1550E1	9.3327E-4
8	☐	7		FULLF	1.0000E-3	1.5000E-1	2.5000E-1	9.0000E3	9.3327E-4	3.1358E7	1.4850E1	9.3327E-4
9	☐	8		FULLF	1.0000E-2	5.0000E-2	5.0000E-2	7.0000E3	5.5556E-3	5.1852E7	3.1500E1	5.5556E-3
10	☐	9		FULLF	1.0000E-2	5.0000E-2	5.0000E-2	9.0000E3	5.5556E-3	5.1852E7	4.0500E1	5.5556E-3
11	☐	10		FULLF	1.0000E-2	5.0000E-2	2.5000E-1	7.0000E3	1.8794E-4	6.7660E6	7.3500E1	1.8794E-4
12	☐	11		FULLF	1.0000E-2	5.0000E-2	2.5000E-1	9.0000E3	1.8794E-4	6.7660E6	9.4500E1	1.8794E-4

Session Table
是主要的数据存储表格，包含所有的通过优化生成的变量和设计点。默认情况下，不可编辑修改

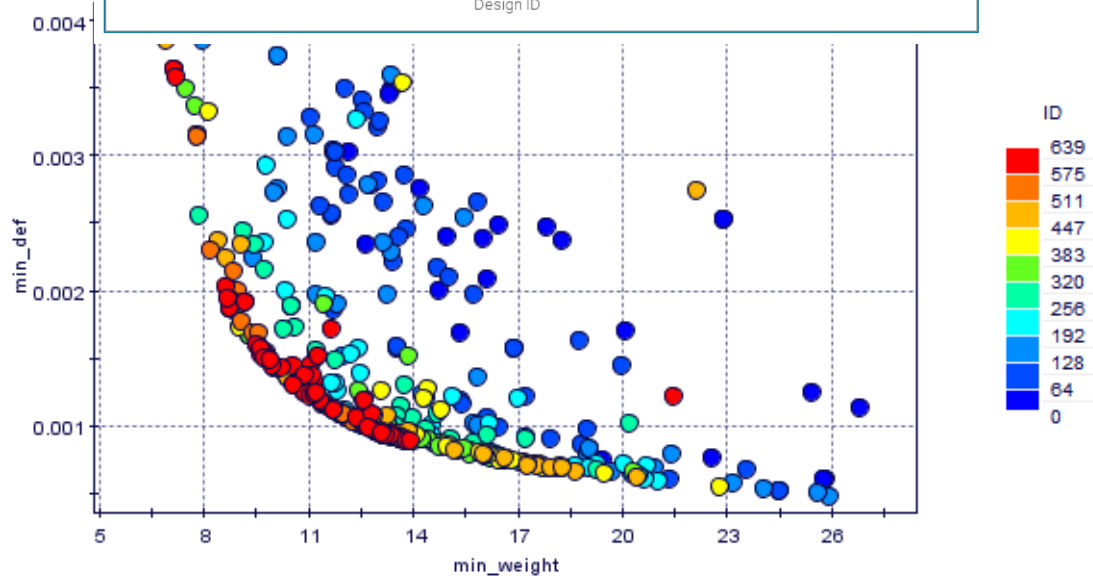
历史、散点及气泡图



历史流程图



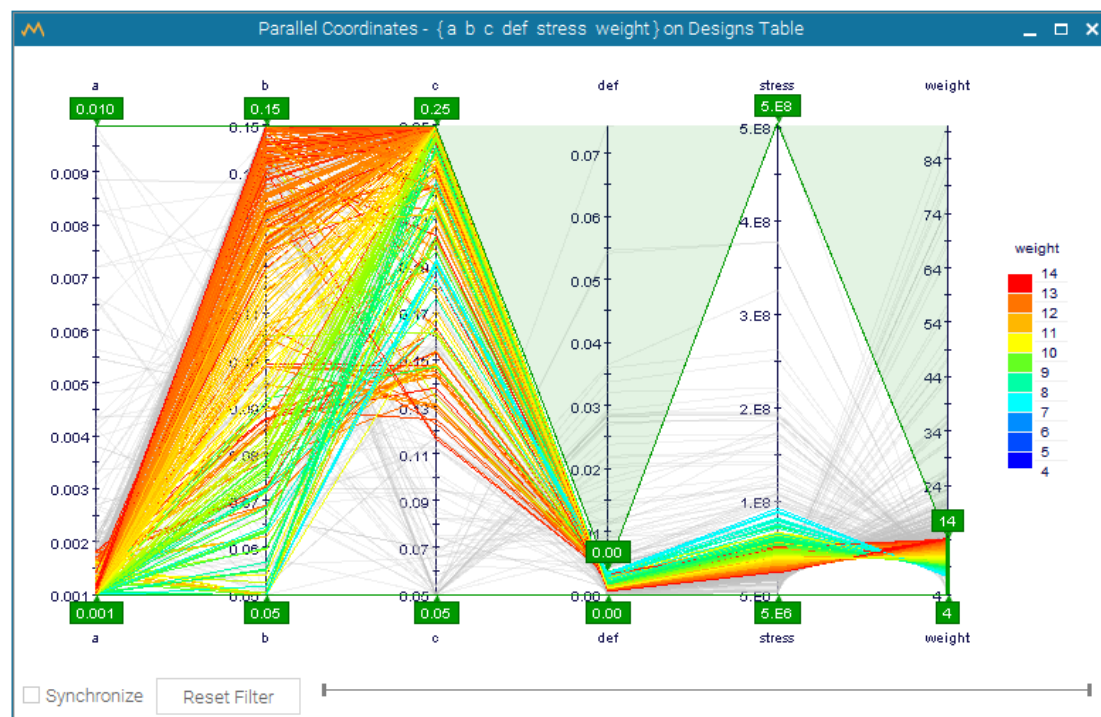
散点图



气泡散点图

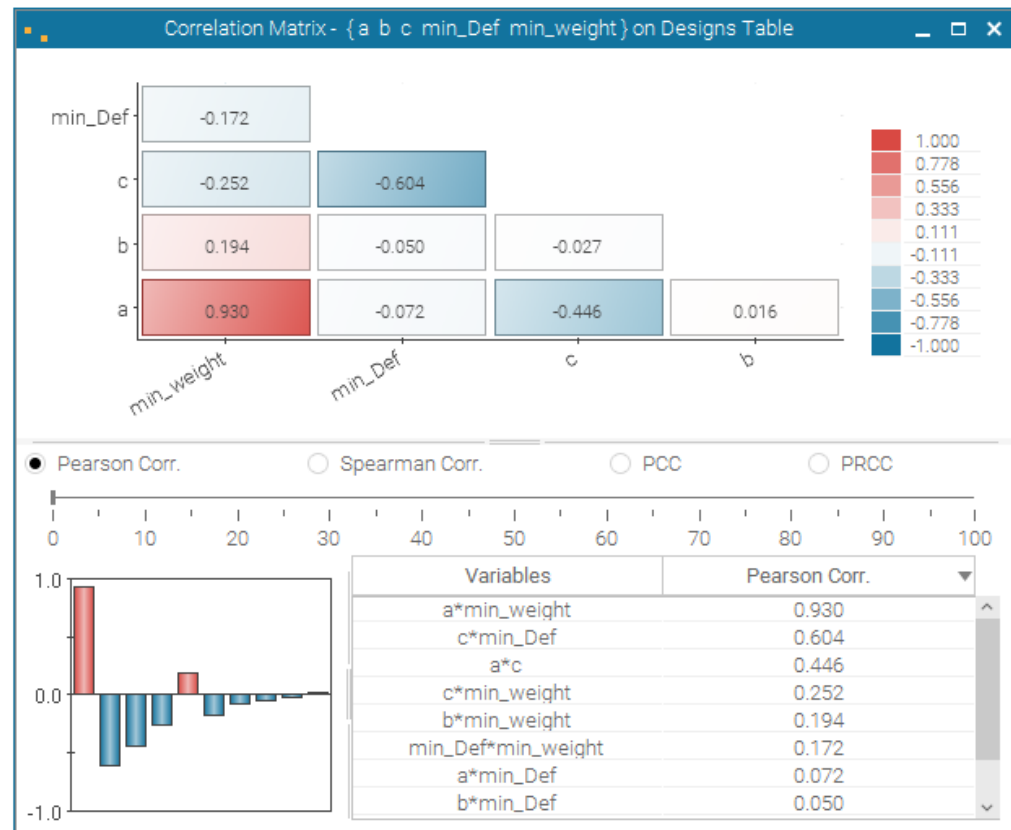
平行折线图

- 可同时观察所有变量
- 基于需要可过滤掉不需要的设计
- 对于研究参数行为及相关性非常有帮助
- 过滤功能可动态作用于其他图表



相关矩阵图

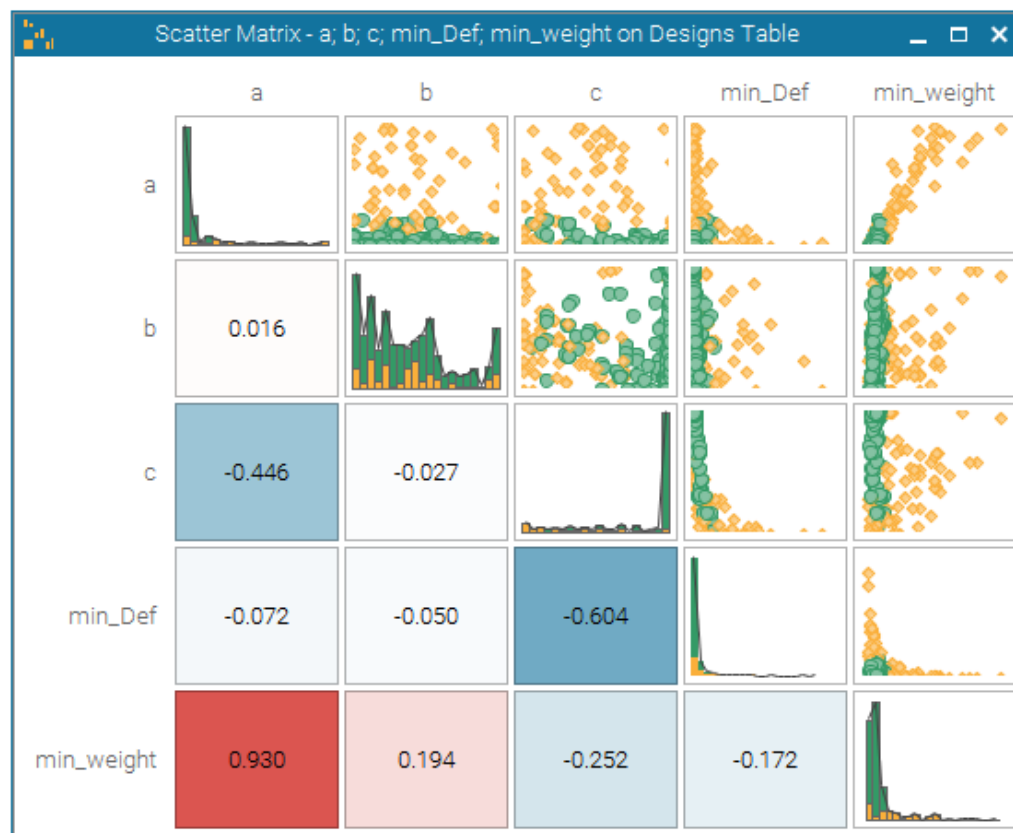
- **相关矩阵图**可以显示所对应变量之间的相关系数
- **相关性**为所选参数间的线性关联，在-1到1之间分布



散点矩阵图

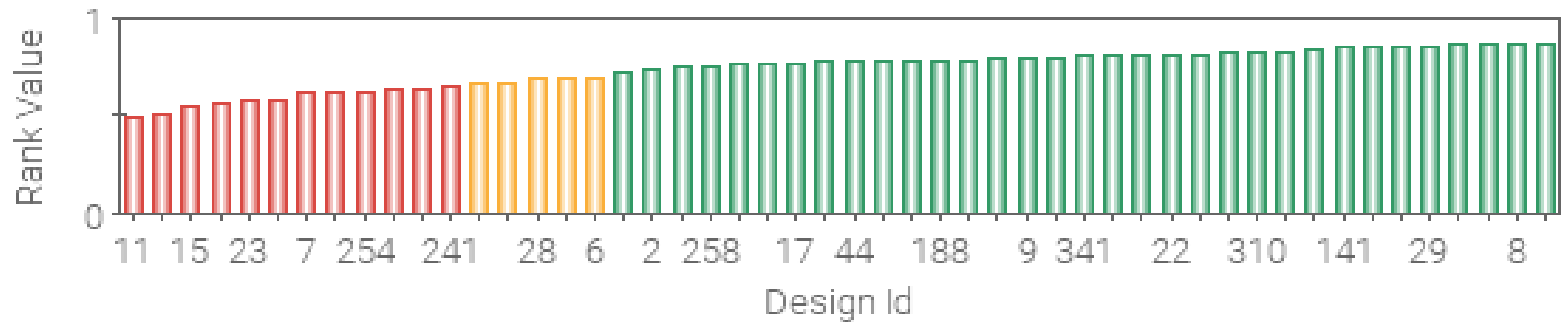
■ 散点矩阵图为以下三种图的结合：

- ✓ 相关矩阵图
- ✓ 散点图
- ✓ 概率密度函数图



多准则决策工具

- **多准则决策工具 (MCDM)**：针对多目标优化问题在多个备选设计点中，通过一定算法选择最优的设计点。
- 决策工具需要设定对结果的偏好，通过对应的算法来帮助软件确定合适的设计点。



主要内容

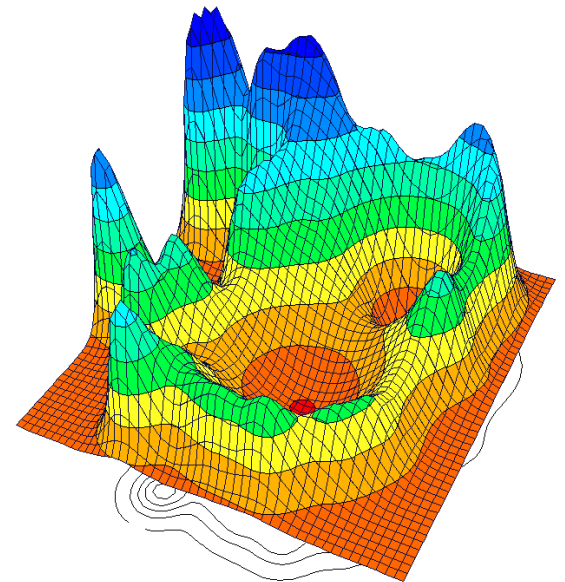
1. modeFRONTIER介绍
2. 工作流程介绍
3. DOE及优化算法介绍
4. 优化计算
5. 基本后处理工具使用
6. 响应面介绍

响应面方法

- **响应面模型** (RSMs) 或元模型：是一种统计工具及数值模型，通过插值点拟合输入量与输出量的函数关系。
- 基于响应面的虚拟优化：在处理复杂或大规模计算时，可以快速帮助设计人员获得优化结果

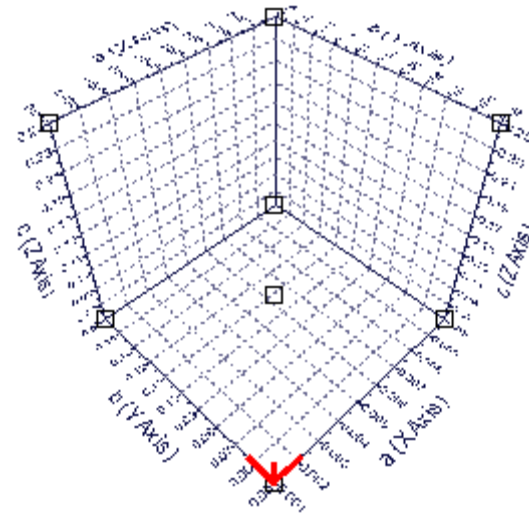
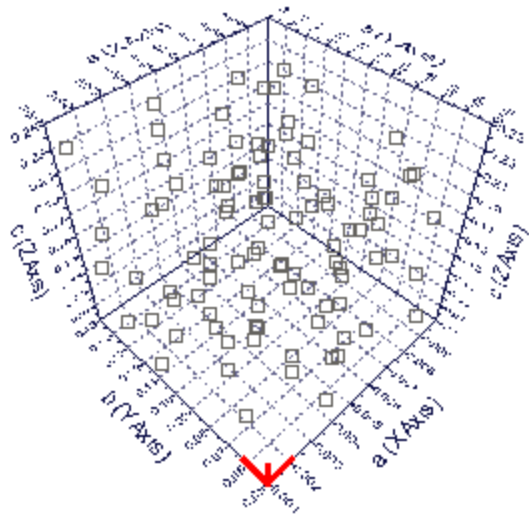
主要优势

- ✓ 基于虚拟模型快速评估大量设计点
- ✓ 优化效率高
- ✓ 占用计算资源低



如何生成高质量的响应面

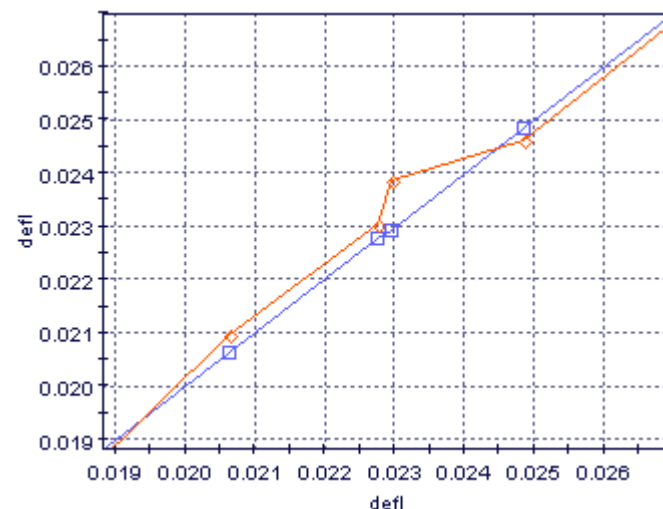
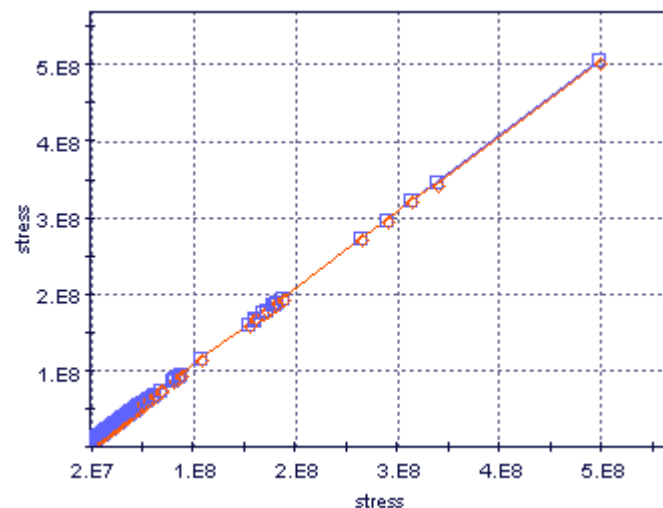
- 一般来说，初始的设计点越多，响应面生成的越精确
- DOE样本空间的均匀性越高越好（建议使用均匀拉丁超立方 Uniform Latin Hypercube 算法），水平数低的全因子算法尽量避免使用。



响应面算法种类

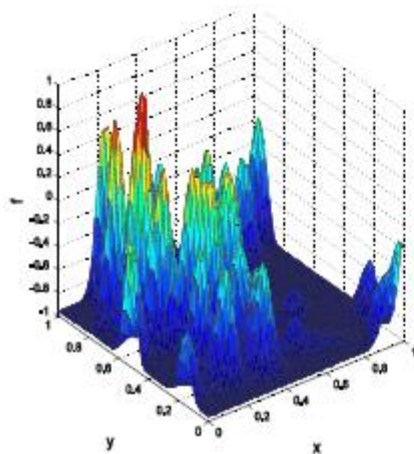
响应面种类：

- **插值型**：响应面严格通过已有的设计点，未知系数通过当前情况生成的方程式来确认（Shepard-K-nearest, Kriging, Radial Basis Functions）
- **近似型**：响应面近似通过已有的设计点，未知系数通过最小化已有设计点的外推误差来确认（Polynomial SVD, Gaussian Processes, Neural Networks, Evolutionary Design）

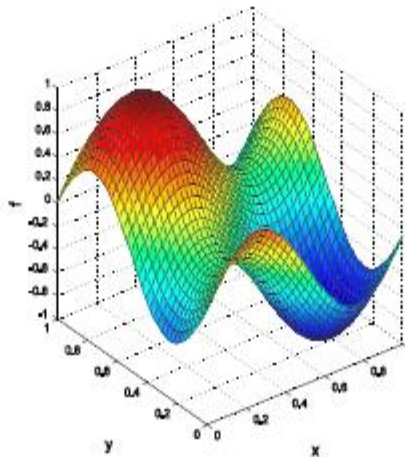


拟合不足与拟合过度

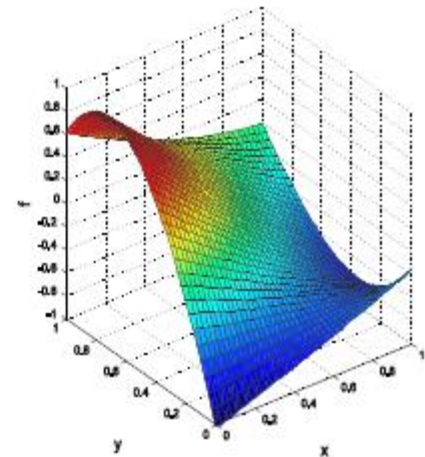
- 当拟合后的模型过于简单而导致误差增加的情况称为**拟合不足**，而当拟合后的模型过于复杂而导致误差增加的情况称为**拟合过度**
- 对于拟合点较少且有干扰的模型，需要关注拟合过度的问题，而对于大数据且干扰少的模型，需要关注拟合不足的问题



拟合过度



拟合正常



拟合不足

响应面算法介绍

多项式奇异值分解法 (Polynomial SVD)

- 基于奇异值分解的多变量多项式插值，通过最小化预测最小化误差来提高精度
- 响应面近似拟合类型
- 当函数简单平滑时效果较好

神经网络法 (Neural Networks)

- 响应面近似拟合类型
- 通过反向传播来最小化预测误差
- 无线性和正态的限制假设
- 自动的网格规模策略来避免拟合过度
- 适用容易
- 当数据量大时（大于1000）速度较慢

响应面算法介绍

克里金法 (Kriging)

- 可最小化真实解与预测值间的标准化误差
- 在处理高度非线性问题时依然可以保证精度
- 收敛速度快
- 可通过近似模型处理噪音干扰问题，也可通过插值模型处理无噪音问题
- 通过自动变差函数计算效率不一定能保证，这时可通过手动调整配置参数，但需要一定的经验

径向基函数法 (Radial Basis Function)

- 径向函数的线性组合，以每个生成点作为中心点
- 通过计算插值方程获得未知的系数
- 响应面插值拟合类型
- 收敛速度快，处理小规模问题时非常有效
- 如果响应有噪音干扰，生成的响应面可能会过于平滑，导致精度不足

响应面算法选择

- 对于线性问题且噪音干扰较少（方程中的峰值较少），可以使用简单的响应面算法，如**Polynomial SVD** 或者**Gaussian Processes**
- 一般来说，先选择简单的元模型拟合方法（低阶多项式），可以使用**Kriging**和**NN**处理复杂响应的问题
- **NN**、**RBF**与**Kriging**的效率较高，可处理大多数问题

modeFRONTIER 中的响应面处理

- modeFRONTIER采用向导程序来引导使用者一步步完成响应面的生，在配置过程中，使用者需要选择对应的数据，输入和输出变量以及响应面的算法。

- ✓ 响应面需要从已有的数据中生成
- ✓ 经过校验，从不同算法找出最优的响应面模型，用来计算。计算过程被称之为虚拟优化
- ✓ 从虚拟优化获得的结果需要实际的计算来检验

1

SELECT
TRAINING
TABLE

2

DEFINE
VALIDATION
TABLE

3

SELECT
VARIABLES

4

CREATE AND
CONFIGURE RSM
MODELS

Tables

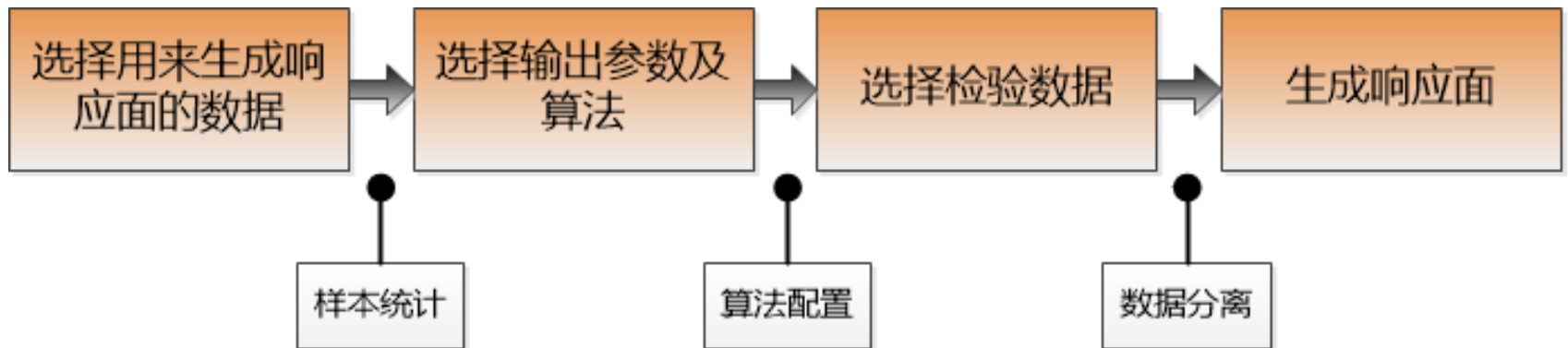
	Name	Total	Virtual	Error
1	Designs Table	400	0	0

Preview: Designs Table

		ID	Category	a	b	c	def	stress	weight	min.
1	☐	0	SOBOL	1.0000E-3	5.0000E-2	5.0000E-2	7.4553E-2	5.1690E8	3.6000E0	7.455
2	☐	1	SOBOL	3.2500E-3	1.2500E-1	2.0000E-1	5.3274E-4	1.4668E7	3.5100E1	5.327
3	☐	2	DOE_A...	7.7500E-3	7.5000E-2	1.0000E-1	1.3972E-3	2.1517E7	4.6500E1	1.397
4	☐	3	SOBOL	8.8750E-3	1.3750E-1	7.5000E-2	1.2174E-3	1.5055E7	7.4550E1	1.217
5	☐	4	SOBOL	4.3750E-3	8.7500E-2	1.7500E-1	6.9327E-4	1.6985E7	3.6750E1	6.932
6	☐	5	SOBOL	2.1250E-3	1.1250E-1	1.2500E-1	2.4695E-3	4.2558E7	1.7850E1	2.469
7	☐	6	DOE_A...	6.6250E-3	6.2500E-2	2.2500E-1	3.2330E-4	1.0270E7	5.5650E1	3.233
8	☐	7	DOE_A...	7.1875E-3	1.3125E-1	1.3750E-1	4.9172E-4	9.9572E6	6.9000E1	4.917
9	☐	8	SOBOL	2.6875E-3	8.1250E-2	2.3750E-1	6.0490E-4	1.9589E7	2.5800E1	6.049
10	☐	9	DOE_A...	4.9375E-3	1.0625E-1	8.7500E-2	2.2329E-3	2.8991E7	3.5550E1	2.232
11	☐	10	SOBOL	9.4375E-3	5.6250E-2	1.8750E-1	3.6322E-4	9.9945E6	6.7950E1	3.632

响应面生成流程

1. 选择需要生成响应面的数据，激活响应面检验功能
2. 执行样本统计分析（可选步骤）
3. 选择需要生成响应面的输出变量，及与之对应的输入变量和算法。
添加新的函数
4. 将数据表格分离，一部分数据用来做响应面的校验。同样的数据不能既用来生成响应面又用来做校核
5. 生成响应面
6. 检查验证表格，检验响应面的精度



选择最佳的响应面

- 通过以下的参数来判断同一参数所生成响应面的精度：
 - ✓ Mean Absolute Error
 - ✓ Mean Relative Error
 - ✓ Mean Normalized Error
 - ✓ R-Squared (R^2 为1时最佳)
 - ✓ AIC (赤池信息量准则) –只适用于采用同一算法生成的模型间对比，数值越低为精度越高

RSM Validation - def					
Name	Mean Absolute Error	Mean Relative Error	Mean Normalized Error	R-squared	AIC
def_KR_0	2.21E-4	3.22E-1	7.88E-3	9.62E-1	-5.42E2
def_NN_0	6.58E-4	1.28E0	2.35E-2	4.03E-1	-5.57E2
def_RBF_0	7.11E-5	4.28E-2	2.53E-3	9.96E-1	-7.23E2

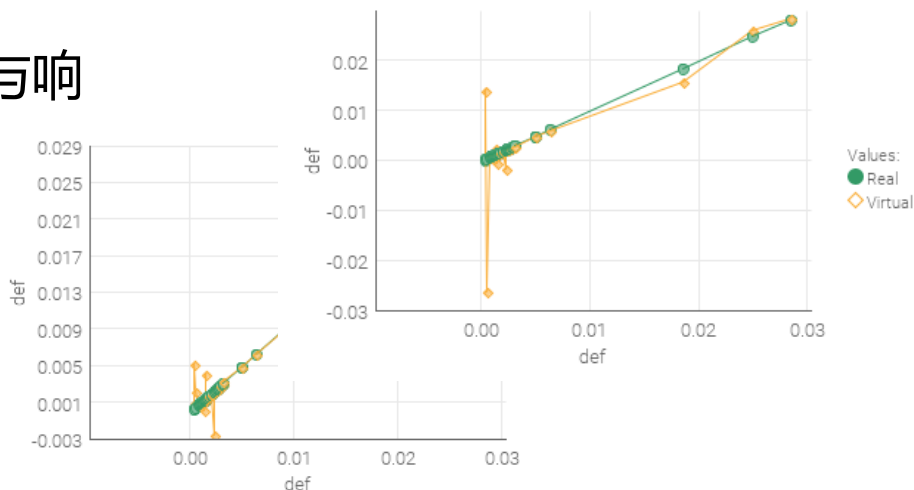
- 绿色越深说明拟合的效果好，反之红色说明结果差

选择最佳的响应面

- **响应面距离图：**显示实际设计点与响应面预测值之间的距离

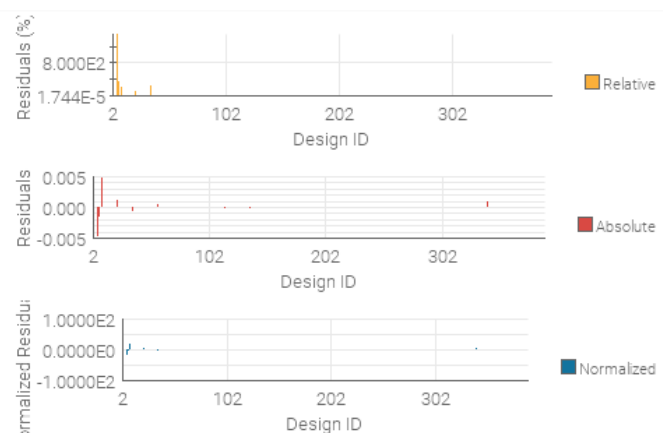
注意：

不要使用生成响应面的同一数据表来生成响应面距离图，这样显示的所有误差都为0



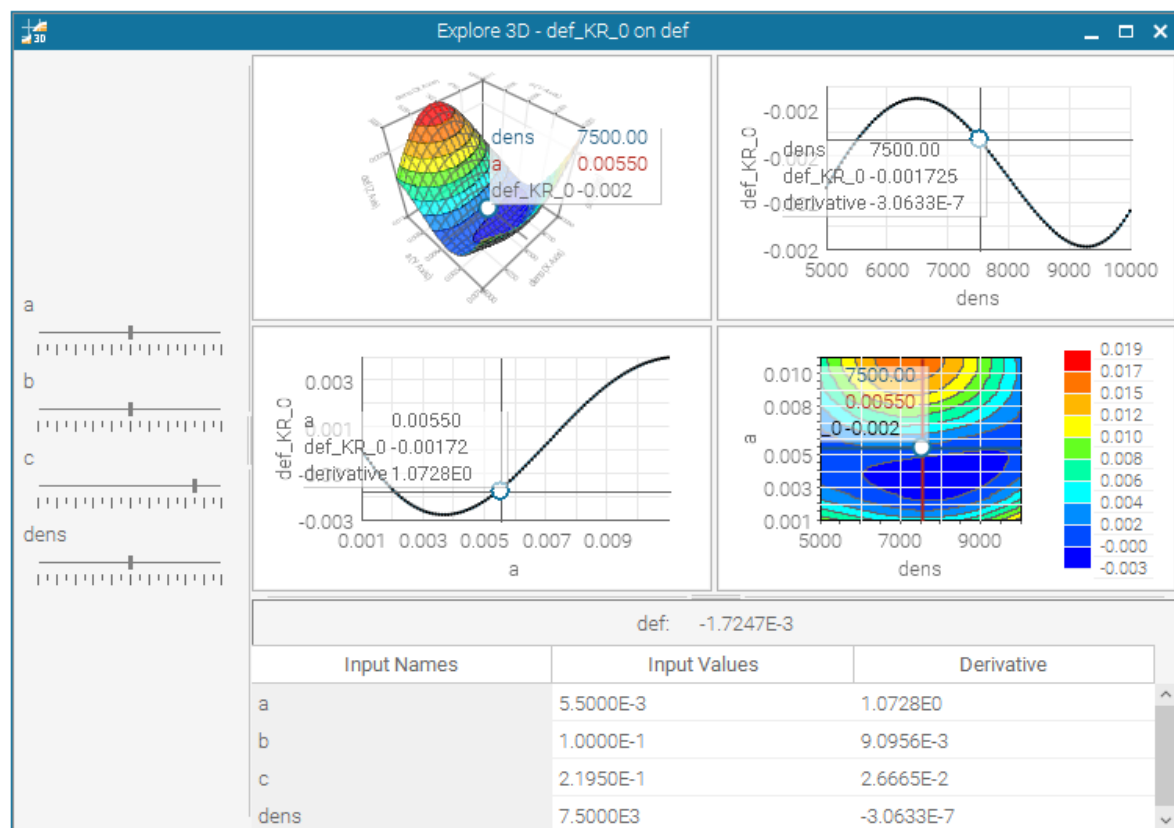
- **响应面残差图：**显示实际设计点与响应预测值之间的残差

- ✓ absolute residual: 实际差值
- ✓ relative residual: 实际差值比率(%)
- ✓ normalized residual: 实际差值在输出范围的比率 (%)



响应面3D图

- 输出变量的响应面可以显示为三维图，二维曲线图及轮廓图等
- 左侧的滑条可以拖动来改变显示结果，虚拟设计点的值可以通过探针在图上观察

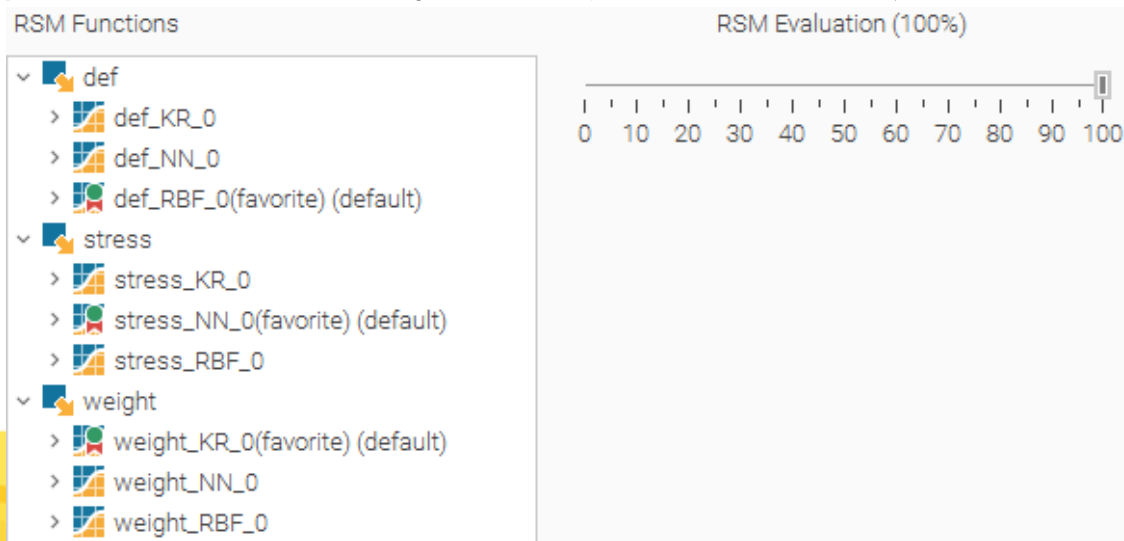


通过响应面进行虚拟优化

- 最佳的响应面可以标记为**Favorite**，后期可用来做虚拟优化

RSM Validation - def					
Name	Mean Absolute Error	Mean Relative Error	Mean Normalized Error	R-squared	AIC
def_KR_0	2.21E-4	3.22E-1	7.88E-3	9.62E-1	-5.42E2
def_NN_0	6.58E-4	1.28E0	2.35E-2	4.03E-1	-5.57E2
def_RBF_0	7.11E-5	4.28E-2	2.53E-3	9.96E-1	-7.23E2

- 响应面可替代实际求解器进行计算，速度很快
- 拖动**RSM Options**右侧的滑条到100%，此时所有的优化计算都通过响应面完成





艾迪捷信息科技有限公司

中国. 北京. 朝阳区光华路甲14号1幢诺安基金大厦1601室

Email: support@idaj.cn

Tel: 86-010-65881497, 65881498