##### Adaptive in situ model refinement for surrogate-augmented population-based optimization

##### 自适应原位模型优化用于替代增量种群优化

###### Abstract

1. 优化过程中使用填充点的原位模型优化来处理与替代模型的低保真度相关的欺骗问题。原位模型优化缺乏模型细化方法，它们都与代理模型的选择无关，并且提供了一种系统方法来保持动态搜索的保真度，尤其是在基于人口的启发式优化过程中。本文提出了一种自适应模型优化（AMR）方法来填补这一重要空白。**即解决（原位模型优化缺乏模型细化方法）的问题。**
2. **解决问题的方法：**新的假设检验概念解决了何时优化替代模型的问题，该概念比较模型误差的分布和函数改进在迭代中的分布。
3. 分别通过概率交叉验证方法以及利用诸如粒子群优化等基于种群的算法利用唯一的概率改进信息来计算这些分布。
4. AMR方法可确定细化所需的一批填充点的大小。
5. AMR能够**保持**SBO流程的**计算效率**，**同时提供**比标准SBO方法所提供的解**更高保真度的解**。

###### Introduction

1. **模型管理策略的优点**：优化复杂系统通常涉及计算量大的仿真,以评估系统行为并估计偏好数量。尽管有效的替代计算方法通常可用于系统或功能评估，但它们往往**会损害其估计的保真度**。这些低保真度模型通常会在优化过程中误导搜索过程，从而导致解不够理想甚至不可行。可变保真度优化方法试图解决这些问题，并在计算效率和所获得的最优解的保真度之间进行较好的折衷，即快速得出可靠的最优解的能力。在这些方法中，模型管理策略将具有**不同保真度和计算成本**的模型自适应地集成到优化过程中。
2. **介绍SBO：基于代理的优化（SBO）**是设计优化和最佳规划中**可变逼真度概念的最重要实现之一**。替代模型或元模型是由数据驱动的模型，使用一组精心设计的（高保真度模拟）实验进行训练，并且一旦进行训练就可以廉价实施。 SBO通常使用一个或多个替代模型来代替基于物理的模型，或者在基于物理的模型之外使用一个或多个替代模型来在优化过程中执行目标和/或约束函数评估。插值类型（例：径向基函数）和回归类型（例：二次响应面）替代建模方法都在设计优化中很受欢迎。 SBO中优化搜索过程的可靠性取决于模型不确定性和迭代过程中功能改进之间的相互作用。
3. **提出的SBO方法目的**：旨在解决**与表征相关**的挑战，从而**通过适应情况**的优化来调节这种相互作用。具体地，这以在**不损害计算效率的情况下保持搜索过程的可靠性**的方式来实现。为此，**我们采用与模型类型独立的方法**，该方法还利用了基于总体的优化算法的关键特征，即分布式信息处理和处理非凸函数的能力。

###### Variable-fidelityoptimization可变保真度优化

1. 优化过程中集成低保真度模型的**不同模型管理方法**：

**信任域策略：**根据目标函数中**实际改进与预测改进（由低保真度模型给出）的比率，自适应地改变信任区半径参数**。一些信任域策略还寻求低保真模型中的**函数及其梯度值**与高保真模型中估计的函数之间**的一致性**。但这些技术可能无法直接应用于梯度评估成本很高或零阶算法的优化问题。

**基于代理的优化**：在优化过程中，通过添加填充点来提高替代模型的准确性和鲁棒性，在填充点中需要对高保真模型或实验进行其他评估。

1. 在寻求在**优化过程中优化替代模型的SBO方法**中，通常在以下位置添加填充点：（i）最佳地点可能位于的区域（局部开发）（ii）预测模型引起的不确定性较高的区域（iii）整个设计空间（全局探索）。可以按单个或批量的方式添加填充点。确定填充点的位置的各种标准，包括（i）基于索引的标准（例如（（积分和最大）均方误差（MSE）和最大熵标准））和（ii）基于距离的标准（例如，欧几里得距离，马氏距离和加权距离标准）。贝叶斯优化的变量（在SBO型模型管理策略中具有突出的特征，其中包括有效的全局优化（EGO）是设计优化领域中最受欢迎的BO变体之一。这些BO变量通常使用诸如“预期的改进”或“改进的可能性”之类的标准，BO过程中在本地训练高斯过程模型评估这些标准。**将这些方法的功能转换为基于其他代理模型（而不是GP）的SBO充满挑战**。但是，通过**启发式方法**已朝着这个方向迈出了重要的一步，例如将不确定性度量从一种替代模型导入另一种替代模型。更普遍适用的（W.R.T.模型类型）SBO方法，其中许多方法都使用径向基函数作为代理模型。
2. SBO中使用的主要替代建模方法包括多项式响应面，Kriging，最小二乘移动。径向基函数（RBF），支持向量回归（SVR），人工神经网络和混合动力替代模型。 RBF已在各种SBO实现中得到广泛使用，包括无约束的局部优化，多目标优化，高维优化以及处理计算量大的约束。用神经网络执行SBO的著名例子包括Kourakos和Mantoglou的工作。这些现有SBO技术（尤其是提供模型优化并在实现中与模型无关的技术）的主要缺陷可以归纳如下：缺乏协调的方法来告知**何时**优化（在优化迭代期间）以及在优化过程中要添加**多少**填充点，鉴于代理模型执行的功能评估的不确定性，优化过程中观察到的改进保持可靠。在这种情况下，我们假设基于总体的优化算法可以唯一地提供有关迭代之间改进程度的统计信息。相反，与基于种群的（基于流行病学）优化算法一起使用的现有模型管理策略主要集中在确定应使用高保真模型（基于个体的进化控制）评估种群的哪些成员，或者应该对优化进行哪些迭代/生成使用整个种群的高保真评估（又名基于世代的进化控制）。探索了不同的基于个体的进化框架，例如：（i）最佳策略（Jin 2005），其中每一代的最佳个体被选为受控个体； （ii）预选法，其中将最佳个体的后代选为对照个体；（iii）聚类技术，其中，k-均值聚类技术用于寻找根据与最佳个体的距离来确定“受控个体集群”。请注意，鉴于基于种群的算法所隐含的有关功能改进的统计信息，它们提供了建立可靠性标准的机会，以确定“何时精炼”和“具有多少个填充点”；现有的以个体为基础的SBO实施基本上没有利用这一机会。此外，成功制定此类可靠性标准还取决于我们捕获由用于优化的替代模型引起的不确定性的能力。不幸的是，除了高斯过程的变体以外，几乎没有替代模型类型直接提供诱发不确定性的度量。在本文中，我们旨在通过开发和测试新的自适应模型细化标准来解决这些差距，该标准利用了（1）基于总体算法提供的上述机会，以及（2）相对较新的方法来量化替代引起的不确定性楷模。

###### Surrogate-based optimization with adaptive refinement基于代理的优化与自适应细化

1. 本文目的是开发一种新的基于代理的优化方法，该方法具有一种原位自适应模型细化方法，旨在降低优化的计算成本，同时以可接受的保真度收敛至最优/最优值。所提出的SBO方法被设计为具有以下特征：

1.与SBO中使用的替代模型（径向基函数，神经网络，高斯过程等）的类型无关。

2.通过预测何时需要使用填充点完善替代模型（用于功能评估），并在优化迭代之间执行（“就地”），有效地保留了优化搜索过程的可靠性。

3.一旦触发细化事件，就确定填充点的最佳批次大小；这种自适应方法被认为比一次性顺序方法和批处理大小是用户定义的参数的方法更具计算效率。

本文第二个目标是通过将新的SBO方法应用于基准函数并与标准SBO和直接的高保真度优化进行比较来分析我们的新SBO方法的性能，并通过将其应用于实际的最佳规划来证明我们方法的有效性建筑能源领域的问题。

本文提供了独特的方法扩展和实验研究。这些扩展包括：（i）升级后的公式，可以有效地计算每次精炼事件期间要添加的填充点的数量以及这些填充点的位置； （ii）对新的SBO方法进行全面的参数分析； （iii）新的基准比较和全新的实际应用示例。

###### 2使用AMR进行可变保真度优化

1. 在SBO流程中过早执行模型优化（即提高模型保真度）可能在计算上很昂贵，同时又浪费了资源来探索设计域的不良区域。另一方面，太晚完善替代模型可能会在早期误导搜索过程，即导致以下情况：全局（甚至更具吸引力的局部）最优值不在候选解总体覆盖的区域范围内以后的迭代。因此，AMR方法力求在“ SBO搜索过程的有效性”与其“计算效率”之间实现理想的平衡。该方法自动确定优化的原地时间（在优化迭代之间）以及要添加的填充点的数量和位置（自适应）。图1提供了AMR方法的流程图，并假设在基于总体的优化过程中实施。如图1所示，AMR方法可分为以下五个主要步骤：

步骤1：使用标准实验设计方法（拉丁超立方体采样（LHS），在设计空间中生成一组初始采样点。使用最大化准则。使用高保真模型在这些样本点上评估相关的目标函数。然后，使用此初始样本点集构建初始替代模型。

步骤2：然后使用此替代模型生成初始种群进行优化（迭代t = 1）。

步骤3：在基于总体的优化过程的每次迭代（t），均使用当前的替代模型评估总体中候选者的函数值，然后执行优化算法特定的步骤来更新总体，在迭代增加之前，即t = t +1。在本文中，选择粒子群优化（PSO）作为优化算法。

步骤4：此处使用标准停止标准，即与设置的公差值相比，全局最佳变化，或最大允许迭代或功能评估。如果满足任何终止标准，则将当前最优值（在PSO情况下为最佳全局解决方案）确定为最终最优值，并终止优化过程。否则，我们转到步骤5。

步骤5：评估AMR指标，该指标用作决定是否完善替代模型的标准。如果满足AMR度量标准，则将调用模型优化步骤，然后转到步骤5。否则，我们直接返回步骤3。

步骤6：通过一系列子步骤来优化代理模型，如右图所示。图1。这些子步骤执行以下操作：估计所需的填充点数；生成，评估并使用这些填充点完善模型；并评估精炼模型的保真度。然后，我们回到步骤3。

1. 实际上，不需要在每次迭代时都应用AMR指标（步骤5）；用户可以指定以规定的迭代间隔应用它。在图1的流程图中，为简单起见，该度量被示为在每次迭代中都适用。在以下小节中，我们将介绍AMR的新颖组件：AMR指标和随后的模型优化策略。随后，我们概述了用于AMR的模型误差测量技术和混合离散PSO算法，这些技术用于实现AMR方法并研究其性能。
   1. AMR度量

假设可以以误差分布PSM的形式评估与替代模型相关的不确定性。在此假设下，使用当前代理模型（在SBO过程中）评估的函数值可以与相应的高保真函数评估相关联，例如：

