arXiv:2603.02485v1 [stat.ME] 3 Mar 2026

面向高保真与低保真系统的决策分析框架及其在制造过程中的应用

Fan Zhang[1],Qiong Zhang[*2]、Madhura Limaye[3,6], Dhanashree Shinde[4,5],Gang Li[6],Sai Aditya Pradeep[4], 和Srikanth Pilla[4,5,7,8,9]

[1]博伊西州立大学数学系[2]克莱姆森大学数学与统计科学学院[3]橡树岭国家实验室制造科学部[4]特拉华大学复合材料中心

[5]特拉华大学材料科学与工程系[6]克莱姆森大学机械工程系[7]特拉华大学机械工程系

[8]特拉华大学化学与生物分子工程系,

特拉华州

[9]特拉华大学计算机与信息科学系

[*]通讯作者：qiongz@clemson.edu

摘要： 复杂制造过程的优化通常需要在数据准确性与获取成本之间进行权衡。高保真数据准确，但数量有限；低保真数据丰富，却往往存在偏差。平衡这两类数据源对于高效的制造优化至关重要。为应对这一挑战，我们基于肯尼迪–奥哈根（KOH）框架中的多保真高斯过程（GP）建模，开发了一种决策分析框架。我们提出了一种基于多保真高斯过程的系统性贝叶斯校准方法，可明确量化模型偏差；并提出一种算法，将校准参数的后验抽样与预测抽样相结合，以表征最优输入设置的分布及其相关不确定性。这些要素被整合到一个用于优化制造过程的五阶段实践工作流程中。通过一个说明性示例，以及复合材料固化周期优化和注塑成型过程控制这两个实际应用，我们展示了该框架如何整合来自高保真和低保真数据源的信息，从而支持参数不确定性下的决策。

K关键词： 多保真度建模、高斯过程、贝叶斯校准 .

1. 引言

1.1 背景与动机

计算机模拟在现代制造业中不可或缺，因为它使工程师能够高效地探索复杂的物理现象，并找到最优的工艺参数设置，而这些设置若通过实验测试，成本高昂，甚至无法实现。然而，依赖单一数据源往往会陷入两难：高保真数据无论来自物理实验还是复杂模拟，虽然准确，却获取成本高昂，因此可用于优化的数据有限。相反，计算效率高的低保真模型虽然数量充足，却往往依赖简化假设，因而准确性受限。因此，制造工艺优化的一项关键挑战是如何结合这些数据源，以

支持高效且稳健的决策。我们通过两项制造应用来说明这一挑战：复合材料固化优化和注塑成型过程控制。在这两项应用中，将高保真实验测量值与低保真仿真数据相结合，可以实现更高效、更实用的决策。

示例1. 复合材料固化仿真。

在复合材料制造中，L形层压板的固化仿真采用多阶段过程。该问题涉及通过选择各阶段适当的保温时间和温度来优化固化周期。目标是在满足固化度（DoC）约束的同时，找到使翘曲或变形最小化的最佳固化周期参数（保温时间 t_1, t_2 和温度 T_1, T_2）。在此示例中，第一阶段 DoC 仿真的数据作为变形分析的低保真数据。高保真数据来自完整的应力-变形仿真（第二阶段），该仿真纳入 DoC 结果并捕捉实际变形行为，但计算成本更高。

例2. 注塑成型过程。

注塑成型是一种广泛应用的制造工艺，用于生产塑料零件：在受控条件下，将熔融聚合物注入模腔。此问题的核心是控制工艺参数，以尽量减少零件缺陷，尤其是模塑部件不同壁面上的翘曲。目标是找出最优注塑成型设置，将零件四个壁面上的总体翘曲降至最低。在此示例中，低保真数据由计算流体力学或过程仿真软件生成的仿真输出构成，用于根据材料属性和工艺条件预测翘曲。这些仿真运行速度快，可在许多不同的参数设置下进行。高保真数据则是实体注塑试验中测得的翘曲实验测量值，能够准确反映真实的制造工艺，但由于实体实验所需的成本和时间较高，其数量有限。

1.2 相关文献

计算机模拟是研究复杂物理系统的重要工具，使工程师能够以相较于实体实验低得多的成本探索设计空间并优化工艺（Forrester 等人，2007）。然而，使用计算机模型面临的一项根本挑战是，模型不可避免地包含简化、假设和抽象。因此，即使采用最优参数设置，模型预测与实际物理行为之间通常仍存在系统性差异，这种差异称为模型偏差。识别并量化这种差异，对于实现真实的不确定性量化并获得可靠的预测至关重要（Gramacy，2020）。为此，贝叶斯统计框架为计算机模型校准提供了一种有原则的方法（Higdon 等人，2004）。通过将校准参数和模型偏差等未知量视为具有先验概率分布的随机变量，贝叶斯方法将先验信息与仿真输出相结合，从而得到不确定性的后验分布。

实施贝叶斯校准通常需要高效的代理模型。高斯过程（GP）回归，亦称克里金法，被广泛用于这一目的，因为它将仿真器输出视为高斯过程的实现，并提供固有的不确定性量化。虽然传统的高斯过程代理模型假设数据来自单一保真度级别，但对于数据源在成本与精度上存在差异的复杂问题，这一假设往往效率不高（Forrester 等人，2007）。因此，人们发展了多保真度方法，以在保持精度的同时降低计算成本。早期方法使用线性回归来建模不同保真度之间的关系（Craig 等人，1997；Kennedy 和 O’Hagan，2002），而更灵活的扩展则借助自回归结构在高斯过程内部刻画这些关系（Le Gratiet 和 Garnier，2014；Gramacy，2020）。其中最突出的是 Kennedy 和 O’Hagan（KOH）框架（Kennedy 和 O’Hagan，2002）。该框架显式地建模真实物理过程（高保真度）与计算机模拟（低保真度）之间的差异，从而使我们能够同时估计参数并校正模型误差。

尽管 KOH框架得到广泛应用，但在实施过程中仍面临若干挑战。

首先，参数可辨识性是一个常见挑战，因为通常难以区分校准参数与模型差异（Tuo andWu,2015; Plumlee, 2017）。其次，对于复杂的计算机模型，计算成本仍然是一个瓶颈。近期的进展通过引入改进的高斯过程方法（例如深度高斯过程或弹性高斯过程），提高了灵活性和可扩展性，从而应对这一问题（Marmin and Filippone, 2022; Francom et al., 2025）。

先前的研究主要侧重于提高模型校准和预测的准确性。然而，参数不确定性对优化过程的影响往往被忽视。在响应面方法（Myers 等人，2016）等传统方法中，通常从拟合模型中得出单一最优设置。这种确定性方法未能考虑模型参数中固有的不确定性。为解决这一局限，决策不确定性的概念最近被引入制造优化，例如 Li 等人（2026）。与仅提供点估计的传统方法不同，该方法利用贝叶斯推断生成最优设置的分布。这对于在考虑模型不确定性的情况下理解推荐参数的可靠性至关重要。

1.3 我们的贡献

本文提出了一个基于多保真高斯过程模型的决策分析框架，该模型整合高保真度与低保真度数据源。我们的贡献包括：构建一个通过高斯过程结构将低保真仿真数据与高保真度实验观测值相结合的代理模型，扩展KOH框架以纳入决策分析能力，并将该代理模型整合到一个通过实际应用加以验证的五阶段决策工作流中。

本文其余部分安排如下。第2节概述了用于解决一般校准类决策问题的五阶段工作流程，详细介绍了优化问题和多保真数据结构（图1）。第3节构建贝叶斯校准框架，涵盖联合高斯过程建模方法和参数

估计方法。第4节介绍用于在不确定性下识别最优输入设置的决策分析算法。第5节使用合成数据集验证该框架。最后，第6节和第7节通过两个真实世界的工程应用展示完整的工作流程。

2. 问题概述

我们考虑如下形式的优化问题

$$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}} G(\mathbf{y}(\mathbf{x})), \tag{2.1}$$

其中，$\mathbf{y}(\mathbf{x}) = (y_1(\mathbf{x}) \ldots, y_p(\mathbf{x}))^\top \in \mathbb{R}^p$ 是一个输出向量，$\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_d)^\top$ 表示可行域 $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d$ 中一个 d 维的输入向量，而 $G : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}$ 是一个定义在输出$\mathbf{y}(\mathbf{x})$上的目标函数。目标函数的具体形式 $G(\cdot)$因不同问题而异。

我们将两个示例的系统输出和目标函数定义如下。在示例1中，系统输出是一个标量变形 $y(\mathbf{x})$，目标函数就是变形本身：

$$G(y(\mathbf{x})) = y(\mathbf{x}).$$

在例2中，系统生成一个四维输出向量 $\mathbf{y}(\mathbf{x}) = (y_1(\mathbf{x}) \ldots, y_4(\mathbf{x}))^\top$，表示四面墙的位移。目标函数旨在减小总体位移：

$$G(\mathbf{y}(\mathbf{x})) = \sum_{k=1}^{4} y_k^2(\mathbf{x}).$$

对于这两个示例，获取高保真数据在计算或实验方面的成本都很高。为在预算约束下减少决策不确定性，我们整合来自替代来源的低保真数据。具体而言，在示例1中，低保真数据源自高效的DoC模型，而高保真数据则来自计算成本高昂的

完整应力-变形仿真。在例2中，低保真数据由翘曲仿真的预测值构成，而高保真数据则通过实体注塑试验获得。

令$\mathbf{y}^H(\mathbf{x})$和$\mathbf{y}^L(\mathbf{x})$分别表示与高保真度和低保真度数据源相对应的结果向量。两者均是真实系统结果向量$\mathbf{y}(\mathbf{x})$的近似。我们的目标是利用这两种信息来源$\mathbf{y}^L(\mathbf{x})$和$\mathbf{y}^H(\mathbf{x})$，高效地近似$\mathbf{y}(\mathbf{x})$，然后搜索目标函数 G in (2.1)的最小化点。我们采用统计代理模型，将成本低廉的低保真输出$\mathbf{y}^L(\mathbf{x})$与成本高昂的高保真输出$\mathbf{y}^H(\mathbf{x})$相结合，以提高$\mathbf{y}(\mathbf{x})$在 $\mathcal{X}$ 上的预测精度，随后针对式（2.1）中的目标函数进行决策分析。整体框架如图1所示。

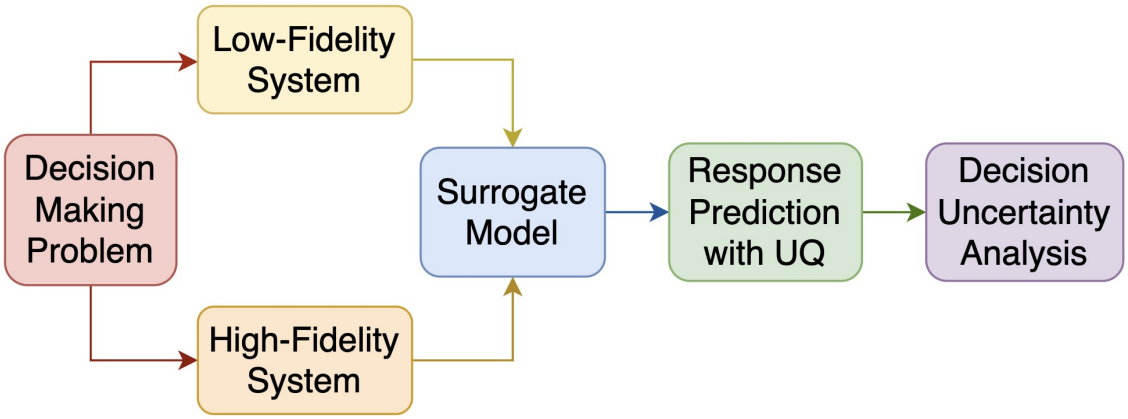

图 1：高保真与低保真系统的决策分析框架 s

3. 多保真贝叶斯校准：建模、估计与预测

3.1 联合高斯过程模型

为方便符号表示，我们针对输出 $p = 1$的维度为一这一特殊情形描述模型，即输出 $y(\mathbf{x})$是一个标量。我们将在一个案例研究中说明如何将模型用于向量结果。我们通过一种明确考虑潜在差异的校准结构，对高保真输出与低保真输出之间的依赖关系进行建模。这种方法遵循经典的KOH校准模型（Kennedy 和 O'Hagan，2002）以及多保真高斯过程扩展，例如递归共克里金法（Le Gratiet 和 Garnier，2014）。我们假设高保真模型 $y^H(\mathbf{x})$可以表示为低保真模型的缩放版本加上一个系统性差异项：

$$y^H(\mathbf{x}) = u \cdot y^L(\mathbf{x}) + b(\mathbf{x}) \tag{3.2}$$

其中， u 是用于缩放低保真输出的未知校准参数，而 $b(\mathbf{x})$表示缩放后的低保真模型与高保真模型之间的系统性差异。对于含噪声的高保真观测值，我们建模如下：

$$Y^H(\mathbf{x}) = y^H(\mathbf{x}) + \varepsilon = u \cdot y^L(\mathbf{x}) + b(\mathbf{x}) + \varepsilon \tag{3.3}$$

其中， $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma_\varepsilon^2)$表示不同实验运行之间相互独立的高斯测量误差。

遵循 KOH 模型，我们使用高斯过程模型分别为 $y^L(\mathbf{x})$ 和 $b(\mathbf{x})$ 建立代理模型。假设

$$y^L(\mathbf{x}) \sim \mathcal{GP}(\mu_L(\mathbf{x}), \Sigma_L(\mathbf{x}, \mathbf{x}')) \tag{3.4}$$

$$b(\mathbf{x}) \sim \mathcal{GP}(0, \Sigma_b(\mathbf{x}, \mathbf{x}')) \tag{3.5}$$

对于低保真模型，我们使用均值函数 $\mu_L(\mathbf{x})$ 来融入关于系统行为的先验知识，并使用协方差函数 $\Sigma_L(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ 来捕捉不同输入之间的相关结构。对于差异函数，我们假设采用零均值高斯过程先验，反映出这样的假设：缩放后的低保真模型能够捕捉高保真过程的全局趋势，而剩余偏差则由协方差结构建模。我们对两个高斯过程均采用可分离幂指数协方差函数（Santner 等人，2003）：

$$\Sigma_L(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma_L^2 \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{d}\frac{(x_i - x_i')^2}{\ell_{L,i}^2}\right) \tag{3.6}$$

$$\Sigma_b(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma_b^2 \exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{d}\frac{(x_i - x_i')^2}{\ell_{b,i}^2}\right) \tag{3.7}$$

其中，σ_L^2，σ_b^2为方差参数，而 $\ell_{L,\,i}$，$\ell_{b,\,i}$为每个输入维度对应的长度尺度参数。

根据式 (3.2) 和 (3.3) 中定义的层次结构，以及式 (3.4) 和 (3.5) 中指定的高斯过程先验，高保真度和低保真度输出 $(y^L(\mathbf{x})\ y^H(\mathbf{x}))^\top$ 服从一个联合高斯过程（Kennedy 和 O'Hagan，2002），其协方差函数定义如下：

$$\operatorname{cov}\left(\begin{pmatrix} y^L(\mathbf{x}) \\ y^H(\mathbf{x}) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} y^L(\mathbf{x}') \\ y^H(\mathbf{x}') \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} \Sigma_L(\mathbf{x}, \mathbf{x}') & u\Sigma_L(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \\ u\Sigma_L(\mathbf{x}, \mathbf{x}') & u^2\Sigma_L(\mathbf{x}, \mathbf{x}') + \Sigma_b(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \end{pmatrix}.$$

在单个输入位置 $\mathbf{x}$ 处，它们的联合分布服从二元高斯分布：

$$\begin{pmatrix} y^L(\mathbf{x}) \\ y^H(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \sim \mathcal{N}\left(\begin{pmatrix} \mu_L(\mathbf{x}) \\ u\mu_L(\mathbf{x}) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma_L(\mathbf{x}, \mathbf{x}) & u\Sigma_L(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \\ u\Sigma_L(\mathbf{x}, \mathbf{x}) & u^2\Sigma_L(\mathbf{x}, \mathbf{x}) + \Sigma_b(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \end{pmatrix}\right) \tag{3.8}$$

给定两个系统的输入和输出数据，根据 (3.2) 中的模型假设，堆叠输出服从多元正态分布。令 $\mathbf{X}_L = \{\mathbf{x}_1^L, \ldots, \mathbf{x}_{n_L}^L\}$表示 n_L 低保真输入的集合，其中每个$\mathbf{x}_i^L$ 都是 $\mathbb{R}^d$中的一个向量。令$\mathbf{Y}^L = (Y_1^L, \ldots, Y_{n_L}^L)^\top$，其中 $Y_i^L = y^L(\mathbf{x}_i^L)$，表示相应的低保真输出。类似地，

令$\mathbf{X}_H = \{\mathbf{x}_1^H, \ldots, \mathbf{x}_{n_H}^H\}$表示 n_H高保真输入位置的集合，并令$\mathbf{Y}^H = (Y_1^H, \ldots, Y_{n_H}^H)^\top$表示高保真模型在含噪观测下的输出

$$Y_j^H = y^H(\mathbf{x}_j^H) + \varepsilon_j, \quad \varepsilon_j \sim \mathcal{N}(0, \sigma_\varepsilon^2).$$

通常， $n_L \gg n_H$ 因为低保真评估的获取成本低得多。高保真设计点 $\mathbf{X}_H$ 可以是 $\mathbf{X}_L$的子集，但并非必须如此。

令 $\mathbf{Y} = ((\mathbf{Y}^L)^\top, (\mathbf{Y}^H)^\top)^\top$ 为将 $\mathbf{Y}^L$和 $\mathbf{Y}^H$ 合并后得到的输出向量。在我们的模型假设下，所有观测值的联合分布为多元高斯分布：

$$\mathbf{Y} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$$

其中，均值向量为：

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_L(\mathbf{X}_L) \\ u \cdot \boldsymbol{\mu}_L(\mathbf{X}_H) \end{pmatrix}$$

协方差矩阵具有如下分块结构：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{LL} & u \cdot \boldsymbol{\Sigma}_{LH} \\ u \cdot \boldsymbol{\Sigma}_{LH}^T & u^2 \cdot \boldsymbol{\Sigma}_{HH} + \boldsymbol{\Sigma}_{bb} + \sigma_\varepsilon^2 \mathbf{I}_{n_H} \end{pmatrix}$$

此处，各子矩阵由协方差函数按元素构造而成。具体而言， $\boldsymbol{\Sigma}_{LL}$ 表示低保真输入的协方差矩阵，其第(i, j)个元素为$\Sigma_L(\mathbf{x}_i^L, \mathbf{x}_j^L)$。矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_{LH}$ 表示低保真输入与高保真度输入之间的交叉协方差，其元素为 $\Sigma_L(\mathbf{x}_i^L, \mathbf{x}_j^H)$。需要注意的是， $\boldsymbol{\Sigma}_{HH}$ 同样使用低保真度协方差函数 $\Sigma_L(\cdot, \cdot)$计算，但在高保真输入位置$\mathbf{X}_H$处求值。矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_{bb}$表示在$\mathbf{X}_H$处求值的差异函数的协方差，其元素为 $\Sigma_b(\mathbf{x}_i^H, \mathbf{x}_j^H)$。项 $\sigma_\varepsilon^2 \mathbf{I}_{n_H}$用于刻画高保真数据中的独立观测噪声。

3.2 参数估计

我们按照（Gramacy, 2020）给出参数估计过程。首先，我们将高斯过程仿真器拟合至低保真数据 $\{\mathbf{X}_L, \mathbf{Y}^L\}$。超参数$\hat{}\ \boldsymbol{\theta}_L = \{\hat{}\sigma_L^2, \hat{}\ell_{L,1}, \ldots, \hat{}\ell_{L,d}\}$基于第3.1节中定义的协方差结构 Σ_L，通过最大似然估计进行估计。该拟合得到的高斯过程仿真器提供预测值$\hat{}y^L(\mathbf{x})$，用于在高保真输入位置处预测低保真响应。

接下来，对于给定的校准参数候选值 u，我们将高保真观测与经过缩放的低保真度预测值之间的差异视为差异过程加噪声的实现。基于差异先验 $b(\mathbf{x}) \sim \mathcal{GP}(\mathbf{0}, \Sigma_b)$，可根据多元正态分布推导出数据的边际似然函数：

$$\mathbf{Y}^H - u \cdot \hat{y}^L(\mathbf{X}_H) \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \boldsymbol{\Sigma}_{bb} + \sigma_\varepsilon^2 \mathbf{I}),$$

其中， $\boldsymbol{\Sigma}_{bb}$ 是高保真度位置处差异过程的协方差矩阵。然后，我们通过最大化该似然函数来估计差异超参数 $\boldsymbol{\theta}_{b|u}$。

通过最大化差异高斯过程的对数边际似然并结合关于 u 的先验，可以得到最优校准参数 $\hat{}u$：

$$\hat{u} = \arg\max_u \left\{ \log p(\mathbf{Y}^H - u \cdot \hat{y}^L(\mathbf{X}_H) \mid \mathbf{X}_H, \hat{\boldsymbol{\theta}}_{b|u}) + \log p(u) \right\}.$$

其中， $p(u)$ 是校准参数的先验分布。

虽然上述优化提供了一个点估计，但并未明确量化参数不确定性。为此，我们采用留一交叉验证程序。具体而言，我们逐一留出每个高保真观测值，并使用其余的 $n_H - 1$ 个数据点重新估计u。由这些 n_H估计值构成的经验分布，可作为 u 后验分布的数据驱动近似，从而捕捉在高保真数据有限的情况下其所具有的变异性。

3.3 后验预测分布

给定估计得到的校准参数 $\hat{u}$ 和拟合后的超参数，我们可以推导出任意新输入位置$\mathbf{x}_{new} \in \mathcal{X}$处高保真响应的后验预测分布。

基于第3.1节构建的联合高斯结构，在给定观测结果 $\mathbf{Y}$ 的条件下，高保真过程的条件分布服从一个高斯过程：

$$y^H(\mathbf{x}_{new}) \mid \mathbf{Y}, \hat{u} \sim \mathcal{GP}\left(\mu_{new}(\mathbf{x}_{new}), \Sigma_{new}(\mathbf{x}_{new}, \mathbf{x}'_{new})\right). \tag{3.9}$$

后验均值函数 μ_{new} 和协方差函数 Σ_{new} 可通过标准条件高斯恒等式推导得出：

$$\mu_{new}(\mathbf{x}_{new}) = \hat{u}\mu_L(\mathbf{x}_{new}) + \mathbf{k}(\mathbf{x}_{new})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{Y} - \boldsymbol{\mu}), \tag{3.10}$$

$$\Sigma_{new}(\mathbf{x}_{new}, \mathbf{x}'_{new}) = V(\mathbf{x}_{new}, \mathbf{x}'_{new}) - \mathbf{k}(\mathbf{x}_{new})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{k}(\mathbf{x}'_{new}). \tag{3.11}$$

这里， $\boldsymbol{\Sigma}$ 是第3.1节中定义的观测值联合协方差矩阵。术语$\mathbf{k}(\mathbf{x}_{new})$表示观测数据 $\mathbf{Y}$ 与$\mathbf{x}_{new}$处预测值之间的协方差向量，其构造如下：

$$\mathbf{k}(\mathbf{x}_{new}) = \begin{pmatrix} \hat{u} \cdot \Sigma_L(\mathbf{X}_L, \mathbf{x}_{new}) \\ \hat{u}^2 \cdot \Sigma_L(\mathbf{X}_H, \mathbf{x}_{new}) + \Sigma_b(\mathbf{X}_H, \mathbf{x}_{new}) \end{pmatrix}.$$

该术语 $V(\mathbf{x}_{new}, \mathbf{x}'_{new})$ 表示新位置的先验方差结构：

$$V(\mathbf{x}_{new}, \mathbf{x}'_{new}) = \hat{u}^2 \cdot \Sigma_L(\mathbf{x}_{new}, \mathbf{x}'_{new}) + \Sigma_b(\mathbf{x}_{new}, \mathbf{x}'_{new}).$$

4. 决策分析

现在我们回到式 (2.1) 中的原始问题表述，其中系统输出是一个向量 $\mathbf{y}^H(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^p$。由于真实函数 $y_k^H(\mathbf{x})$ ($k = 1, \ldots\ldots, p$) 未知，我们将其建模为高斯过程。对于多输出问题，我们将式 (3.9) 中推导出的后验预测分别应用于每个输出维度。因此，在一组候选输入 $\mathbf{X}_{cand} \in \mathbb{R}^{N\times d}$上，第 k 维的条件分布服从多元正态分布：

$$\mathbf{y}_k^H(\mathbf{X}_{cand}) \mid \mathbf{Y}_k, \hat{u}_k \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_{new,k}(\mathbf{X}_{cand}), \boldsymbol{\Sigma}_{new,k}(\mathbf{X}_{cand})), \tag{4.12}$$

其中 $\boldsymbol{\mu}_{new,k}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_{new,k}$ 分别是第 k 个输出的后验均值向量和协方差矩阵。

为量化决策不确定性，我们采用基于模拟的方法。对于每个维度，我们从这些分布中抽取相互独立的样本，计算目标函数值，并找出使其最小化的候选点。该过程详见算法 1。

算法1 面向最优输入识别的贝叶斯决策分析

输入： 校准参数的后验样本 $\{\mathbf{u}^{(s)}\}_{s=1}^{N_u}$（其中 N_u 为样本量，且$\mathbf{u}^{(s)}$ 包含全部 p个输出的参数）、低保真模拟器、高保真数据、重复试验 n_{rep}、候选项数量 N

输出： 最优输入位置 $\mathcal{X}_{opt}$

$\mathcal{X}_{opt} \leftarrow \emptyset$

对于 $s = 1$ **到** N_u **do**

为所有 p输出更新差异高斯过程超参数，条件为 $\mathbf{u}^{(s)}$

对于 $r = 1$ **至** n_{rep} **do**

通过拉丁超立方设计生成候选集 $\mathbf{X}_{cand} \in \mathbb{R}^{N \times d}$

对于 $k = 1$ **至** p，**执行**

计算 $(\boldsymbol{\mu}_{new,k}, \boldsymbol{\Sigma}_{new,k})$ 在 $\mathbf{X}_{cand}$ 上针对输出 k

绘制实现值 $\mathbf{y}_{samp,k} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_{new,k}, \boldsymbol{\Sigma}_{new,k})$

结束循环

$\mathbf{x}_{s,r}^* \leftarrow \arg\min_{\mathbf{x}_m \in \mathbf{X}_{cand}} G\left(\mathbf{y}_{samp,1}(\mathbf{x}_m), \ldots, \mathbf{y}_{samp,p}(\mathbf{x}_m)\right)$

$\mathcal{X}_{opt} \leftarrow \mathcal{X}_{opt} \cup \{\mathbf{x}_{s,r}^*\}$

结束循环

结束循环

返回 $\mathcal{X}_{opt}$

在每次迭代中，我们生成 N 个候选输入点，并将其排列成矩阵$\mathbf{X}_{cand}$，计算后验参数，然后从多元正态分布中抽取一个实现$\mathbf{y}^{samp}$。接着，我们找出$\mathbf{X}_{cand}$ 中使该实现的目标函数最小化的具体行。

所有 N_u 后验样本和 n_{rep} 次重复中的最优输入集合定义为

$$\mathcal{X}_{opt} = \{\mathbf{x}_{s,r}^* : s = 1, \ldots, N_u,\ r = 1, \ldots, n_{rep}\} \tag{4.13}$$

提供最优输入后验分布的经验近似。随后，我们可以通过绘制$\mathbf{x}$中每个变量的直方图来分析这一分布。这些分布的中位数表明了使平方响应最小化的最可能输入设置。这些分布的离散程度量化了决策不确定性。分布较宽或呈多峰形态，表明最优解的定义不明确，或者多个输入区域可能产生相近的最优结果。

5. 说明性示例

现在，我们通过一个包含两个输入变量的说明性示例，展示所提出的决策分析框架：$\mathbf{x} = (x_1, x_2) \in [-1, 1]^2$。在此示例中，我们的目标只是使高保真过程的响应最小化。因此，具体的问题实例为：

$$\min_{\mathbf{x}\in[-1,1]^2} y^H(\mathbf{x}). \tag{5.14}$$

5.1 数据生成

为评估该方法处理结构偏差的能力，我们根据两个不同的函数生成数据。低保真模型 $y^L(\mathbf{x})$ 定义如下：

$$y^L(\mathbf{x}) = (x_1 - a_{L1})^2 + (x_2 - a_{L2})^2, \tag{5.15}$$

其中，最小值位于 $a_L = (a_{L1}, a_{L2}) = (-0.6, 0.2)$。我们使用拉丁超立方设计（LHD）生成 $n_L = 200$ 个样本。

真实的高保真过程 $y^H(\mathbf{x})$ 定义如下：

$$y^H(\mathbf{x}) = (x_1 - a_{H1})^2 + (x_2 - a_{H2})^2, \tag{5.16}$$

其中，真实最小值位于 $a_H = (a_{H1}, a_{H2}) = (-0.8, 0.4)$。我们在 $n_H = 50$ 个点处生成稀疏含噪观测 $\mathbf{Y}^H$：

$$\mathbf{Y}^H = y^H(\mathbf{x}) + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma_\varepsilon^2) \text{ with } \sigma_\varepsilon = 0.02. \tag{5.17}$$

需要特别指出的是，我们有意设置了 $a_L \neq a_H$。这种差异模拟了一种常见的制造场景：计算机模型（y^L）精确（低方差），但存在结构性偏差。仅依赖 y^L 会在 a_L处导致自信却错误的决策，而仅依赖稀疏的 Y^H 数据则会带来高度不确定性。我们的目标是

结合这两种来源，找回真实最小值 a_H 。

5.2 参数估计结果

将第3.1节中描述的多保真高斯过程模型应用于生成的数据集$\mathbf{Y}^L$ 和$\mathbf{Y}^H$。由于函数形式相似，我们预期缩放参数 $u \approx 1$会由差异项 $b(\mathbf{x})$捕捉最小值位置的偏移。使用第3.2节中提到的留一法程序，我们估计了校准参数$\hat{u} = 1.0958$ ，其95%置信区间较窄，为（1.0844, 1.0958）。这表明尽管存在结构偏差，两种保真度之间仍有很强的相关性。

5.3 决策分析

我们生成了 $N_u = 100$个 u的后验样本，并针对每个样本生成 $n_{rep} = 100$个预测曲面，以找到使 y^H最小化的最优输入。此过程得到了一组包含10，000个潜在最优点，对应于公式（4.13）中定义的集合 $\mathcal{X}_{opt}$ 。我们比较了三种情景，以说明采用多保真方法的必要性。

情景1：仅低保真。 图2展示了仅使用$\mathbf{Y}^L$时的最小值分布。结果高度集中（标准差 ≈ 0.035），表明精度很高。然而，中位位置为（-0.6,0.2），与有偏模型最小值 a_L 一致，但远离真实物理最小值 a_H。这证实，仅使用低保真数据会导致精确但不正确的决策。

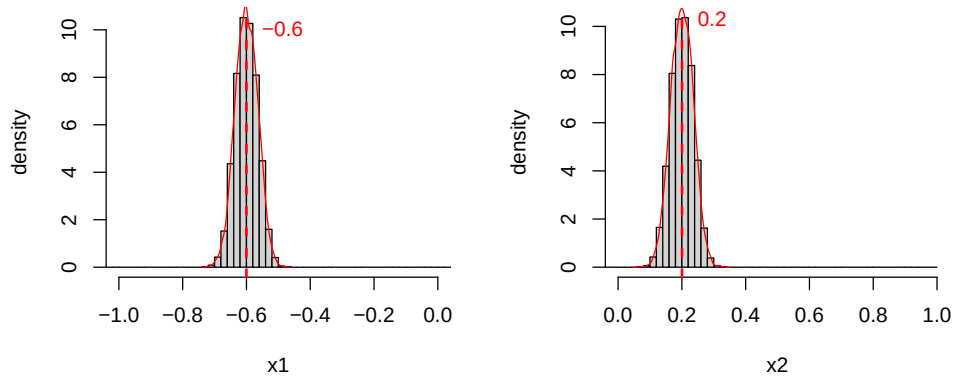

图2：仅对低保真数据拟合的高斯过程仿真器进行优化后得到的最小值位置分布。

场景 2：仅高保真。 图3展示了仅使用稀疏高保真度观测值的结果。中位位置（$-0.772, 0.474$）接近真实值 a_H，表明该方法捕捉到了正确区域。然而，由于数据稀疏且含噪声，标准差大得不可接受（0.628对应 x_1 ，0.422对应 x_2）。分布范围过宽表明无法可靠地识别最优解。

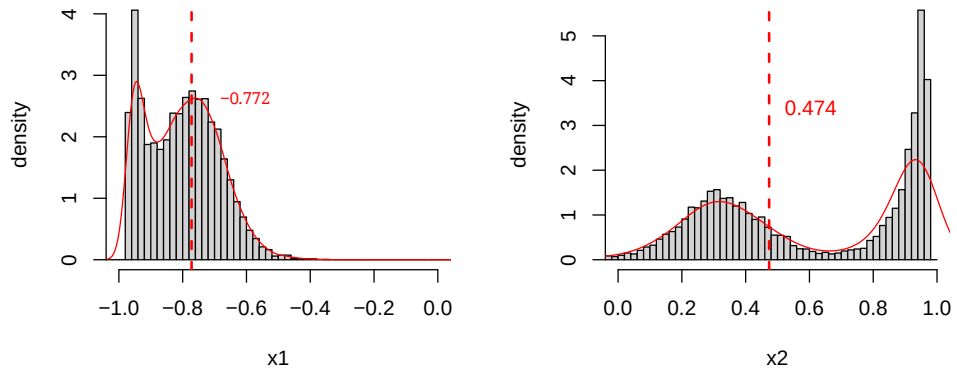

图3：仅对稀疏高保真观测拟合的高斯过程模型进行优化后得到的最小值位置分布。

场景 3：多保真校准（解决方案）。图 4 展示了通过我们提出的框架在 $\mathcal{X}_{opt}$ 中获得的最优候选解的分布。中位数

位置偏移至（-0.705，0.348），有效修正了低保真模型带来的偏差。同时，标准差降至0.170 和 0.193，与场景 2 相比，不确定性显著降低。这表明，我们的框架有效结合了仿真的精度与物理实验的准确性。

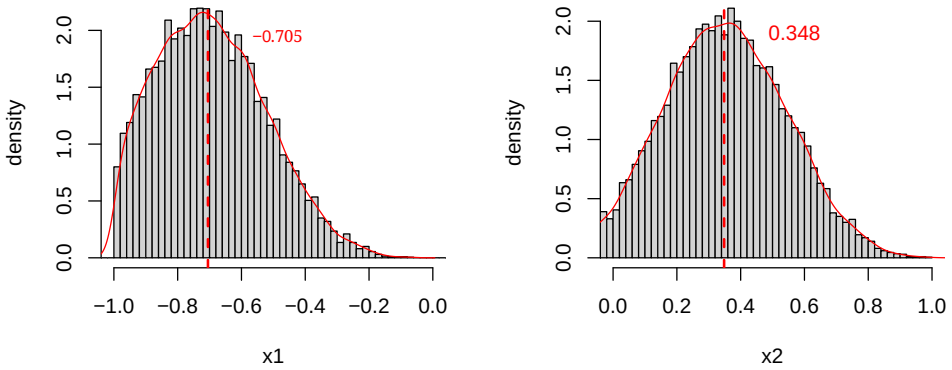

图 4：通过对低保真数据和高保真观测应用贝叶斯校准而得到的最小值位置分布。

5.4 鲁棒性

为进一步评估我们所提出框架的鲁棒性与稳定性，我们在50个独立数据集上重复了完整的数据生成与优化过程。对于每个数据集 j（$j = 1, \ldots, 50$），我们通过取 $\mathcal{X}_{opt}$（公式4.13）中最优候选解的中位数来确定鲁棒最优解，记为 $\tilde{x}_l^{*(j)}$。随后，我们使用均方误差（均方误差）在这50个数据集上评估性能：

$$\mathrm{MSE}_l = \frac{1}{50} \sum_{j=1}^{50} \left(\tilde{x}_l^{*(j)} - a_{Hl} \right)^2, \quad l = 1, 2 \tag{5.18}$$

其中 $\tilde{x}_l^{*(j)}$ 是第 j个数据集中第 l个变量的后验最优输入的中位数。

图 5 展示了 50 个数据集上的均方误差分布。低保真度方法的均方误差稳定但不为零，这是由其固有偏差导致的。高保真度方法

则表现出极不稳定的特性，均方误差方差较大。相比之下，我们的多保真方法能够保持较低且稳定的均方误差值，从定量角度证实，所提出的方法能够始终以较高置信度识别最优区域。

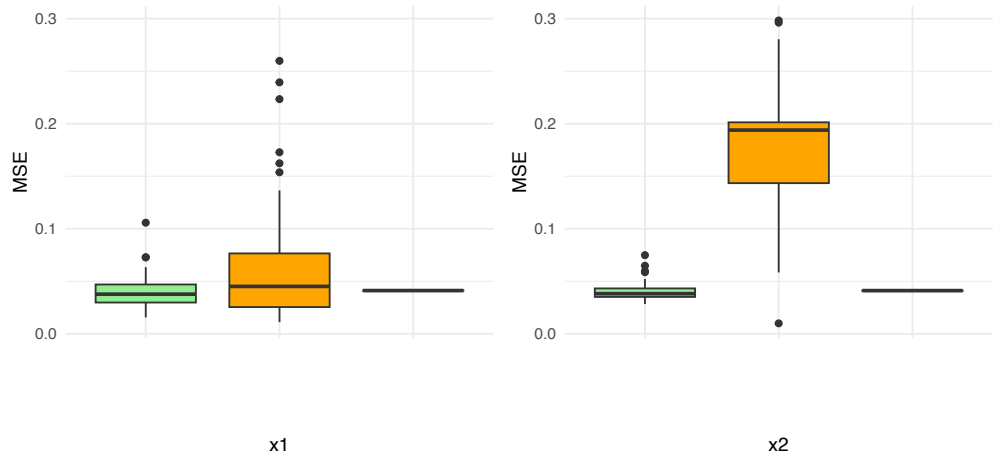

图 5：50 个数据集上的均方误差值分布。

6. 案例研究 I：固化过程模拟

在本节中，我们考虑 Limaye等人（2025）所述的固化过程仿真，该仿真使用商用有限元分析软件 ABAQUS（Dassault Syst`emes，2024）和固化仿真工具 COMPRO（Convergent Manufacturing Technologies, Inc.，2024）。固化过程是结构构件制造中的关键阶段，在此过程中，受控温度循环是关键工艺参数。目标是针对代表温度-时间循环中两个关键变化点的四维输入，尽可能减小变形输出 y 。该仿真包含两个阶段：第一阶段的热化学分析生成固化度（DoC），第二阶段将 DoC 与原始四维输入相结合，进行应力-变形分析和力学分析，从而得到最终的变形输出 y。与第一阶段相比，第二阶段的仿真更复杂，计算成本也更高。由于第二阶段的输出高度依赖第一阶段的输出，我们将第一阶段（DoC）仿真视为

低保真系统，并将完整的两阶段模拟视为高保真系统。

为满足决策分析所需的大规模采样，我们基于原始仿真数据构建了替代模型环境。我们采用逐步变量选择，将二阶多项式回归模型拟合至原始数据。以这些模型作为生成器，我们通过拉丁超立方设计（LHD）创建了包含 $n_H = 50$ 个点的高保真数据集和包含 $n_L = 200$ 个点的低保真数据集。在高保真预测值中加入标准差为0.1的高斯噪声，以模拟测量变异性，而低保真预测值则保持无噪声。四维输入参数分别表示：初始温度T_1、最终温度 T_2、升温时间 t_1和保温时间 t_2。低保真输出对应无量纲固化度，而高保真输出则表示变形量。

我们应用所提出的多保真贝叶斯校准框架，以确定最优固化设置并量化决策不确定性。按照第3.2节所述的模块化校准流程，我们获得了$\hat{u} = 9.9535$ 的点估计，其95%置信区间为（9.9216，9.9999）。该估计值反映了无量纲固化度（低保真度）与变形量（高保真度）之间的物理尺度关系。狭窄的置信区间表明对该关系的估计较为精确，并说明完整模拟与仅使用固化度的模型之间具有较强的一致性。

接下来，我们应用算法1中描述的决策分析框架，确定使变形响应最小化的最优输入设置。我们从 u的近似后验分布中生成了 $N_u = 100$个样本。对于每个抽取的校准参数$\mathbf{u}^{(s)}(s = 1,\ldots, N_u)$，我们独立进行了 $n_{rep} = 100$ 次优化重复。在每次重复中，我们使用拉丁超立方设计随机生成 $N = 200$ 个候选点，以构建候选矩阵$\mathbf{X}_{cand}$。利用第3.3节中的后验预测分布，我们为每个候选点抽取变形响应的实现值，并确定使目标函数 $G(y) = y$最小化的输入设置。将此过程重复 $N_u \times n_{rep} = 10{,}000$次后，得到一组最优输入位置$\mathcal{X}_{opt}$，用于表征决策不确定性。

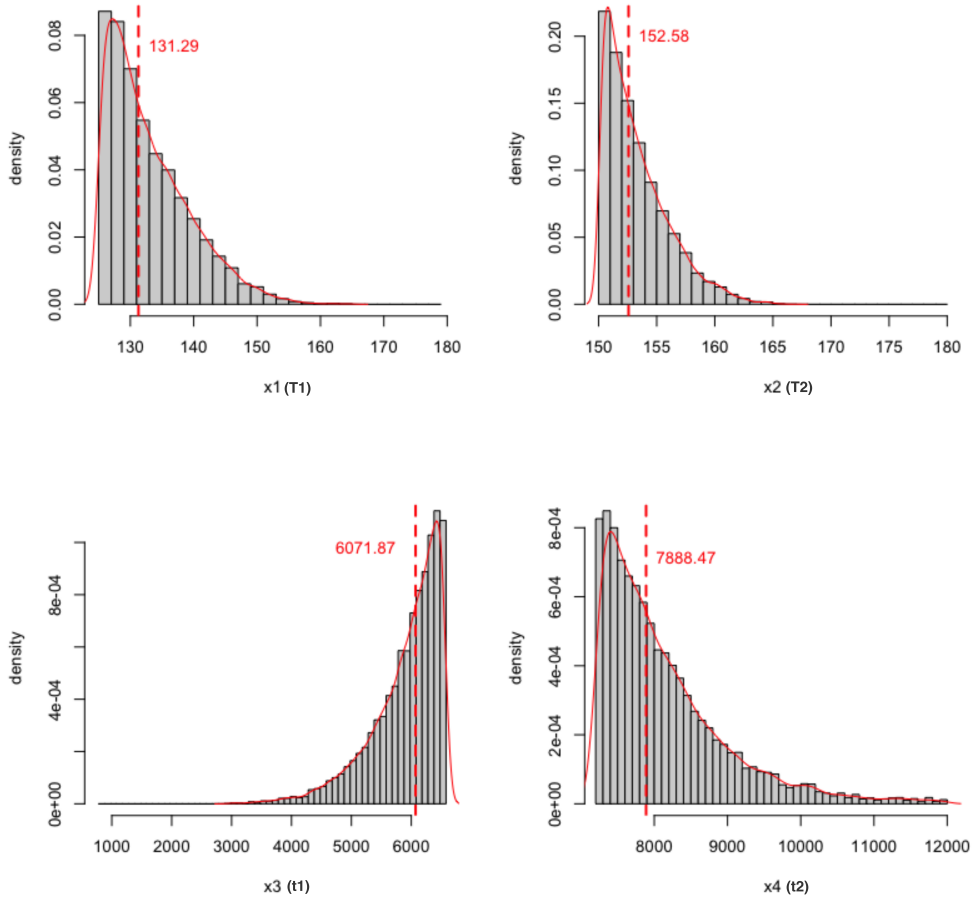

图6：已识别的极小值位置分布。

图6展示了所识别最优位置的分布。结果表明，校准后的最优位置高度集中，这说明所识别的最优设置对剩余的参数不确定性具有稳健性。这种一致性表明，经过适当校准后，低保真度 DoC 仿真能够有效捕捉变形行为的主要趋势，从而支持可靠的工艺优化。

7. 案例研究II：注塑成型

注塑成型是一种重要的制造工艺。然而，降低注塑制品的翘曲仍是一项尚未解决的挑战。在本节中，我们考虑

Li 等人（2026）中的盒状几何体示例。该系统包含四个参数（模具温度、注射速度、保压压力和保压时间）作为输入，并生成一个四维输出向量 $\boldsymbol{y} = (y_1,\ y_2,\ y_3,\ y_4)^\top$，表示盒状几何体四个壁面上的位移。目标是使四维输出的平方和最小。物理实验在 27 个独特的设计点上进行，每个设计点重复三次。Li 等人（2026）所述的注塑成型模拟作为物理实验的低保真系统。

在本研究中，我们使用了 Moldex3D 注塑成型仿真获得的 57 次低保真模拟。对于高保真数据，我们在 27 个经过精心选择的输入设计点上进行了实体注塑成型实验，每个设计点重复试验 3 次，共获得 81 个高保真实验观测值。按照第3.1节中的流程，我们针对四个输出响应（水平向左、水平向右、垂直向上和垂直向下）分别拟合独立的高斯过程模型，并将每个输出维度视为标量响应。这种方法为每个输出分别提供了校准参数 u_k ($k = 1$, 2，3，4) 和后验预测分布。随后进行多输出决策分析，通过抽取涵盖全部四个维度的联合实现值，将平方响应之和 $G(\mathbf{y}) = \sum_{k=1}^{4} y_k^2$ 最小化。

按照第 3.2 小节所述的流程，我们估计了四个输出响应（$y_1,\ y_2,\ y_3,\ y_4$）各自的校准参数 $\hat{u}$ 及其近似后验分布。表 1 列出了基于留一法样本得到的点估计及相应的 95% 后验汇总区间。

表 1 ：案例研究 I 中四个输出的校准参数估计值 $\hat{u}$ I

输出	点估计值 $\hat{u}$	95% 下界	95% 上界
y_1	-0.0123	-0.0323	0.0344
y_2	-0.0888	-0.1154	-0.0657
y_3	0.2894	0.2010	0.3586
y_4	0.2193	0.1614	0.2720

这些结果揭示了四个输出维度之间存在异质的缩放关系。对于 y_1 （水平向左），校准参数 $\hat{u}_1 = -0.0123$ 接近于零，且其

后验区间包含零。这表明，对于这一特定响应，低保真模拟与实验观测值之间缺乏明确的线性相关性。对于y_2 （水平向右），较小的负值 $\hat{u}_2 = -0.0888$ 表明模拟趋势与该壁面的实验数据不一致，这可能源于未建模的物理复杂性，或稀疏实验测量值所固有的变异性。相比之下，对于竖向位移（y_3 和 y_4），正参数（$\hat{u}_3 = 0.2894$ 和 $\hat{u}_4 = 0.2193$）表明模拟捕捉到了翘曲的一般方向，但系统性地高估了其幅度，因此需要进行缩小调整。

我们使用校准参数的近似后验分布来生成$N_u = 100$ 后验样本。由于有四个输出，每个样本表示一个向量 $\hat{\mathbf{u}}^{(s)} = (\hat{u}_1^{(s)}, \hat{u}_2^{(s)}, \hat{u}_3^{(s)}, \hat{u}_4^{(s)})^\top$。对于每个采样向量 $\hat{\mathbf{u}}^{(s)}$，我们随机生成 $n_{rep} = 100$组 200×4 拉丁超立方设计（LHD），作为候选输入矩阵 $\mathbf{X}_{cand}$。根据算法1，我们从四个输出变量的后验预测分布中抽取联合实现。对于每个实现，我们确定使目标函数 $G(\mathbf{y}) = \sum_{k=1}^{4} y_k^2$最小的输入设置。

最优输入位置近似分布的中位数约为 $(48.7, 35.5, 473.8, 2.2)$，分别对应（模具温度、注射速度、保压压力、保压时间）。根据我们的多保真贝叶斯校准框架，这代表最有可能的最优工艺参数设定。这些最优输入位置的分布提供了对决策不确定性的定量评估。图7展示了不同 $N_u \times n_{rep}$ 后验样本下最优决策的变化情况。

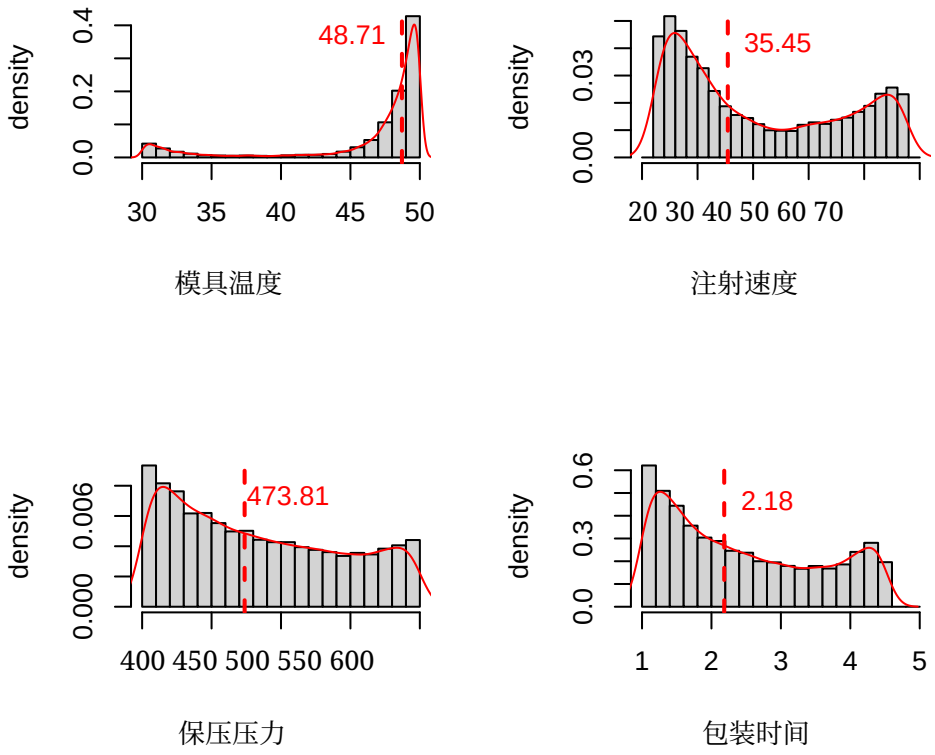

图7：通过将所提出的框架应用于注塑成型案例研究，在 $\mathcal{X}_{opt}$ 中获得的最优候选解的分布。

8. 结论

本文提出了一个用于优化制造流程的决策分析框架。该框架将大量低保真计算机模拟与有限的高保真实验数据相结合。通过采用KOH框架，我们的方法将高效模型与物理现实联系起来，并考虑了模型偏差。

我们的主要贡献是提出了一套五阶段工作流程，重点关注最优决策本身的不确定性。我们引入了一种基于仿真的算法，用于刻画最优输入设置的分布。这有助于工程师直观地查看最优区域，并检查推荐参数能否抵御模型误差和噪声的影响。

我们将这一框架应用于一个说明性示例和两个工程案例：复合材料固化优化和注塑成型。在说明性示例中，多保真方法通过校正仿真偏差并降低不确定性，表现优于单保真度方法。在实际应用中，结果表明，所提出的框架能够成功地将有限的实验数据与仿真相结合，从而识别出稳定、稳健的最优设置。这体现了该方法在真实制造约束下支持决策的实用价值。

致谢

本研究作为 AIM for Composites 项目的一部分获得支持。该项目是由美国能源部（DOE）科学办公室（Office of Science）基础能源科学（Basic Energy Sciences，BES）资助的能源前沿研究中心，资助编号为 DE-SC0023389（实验与数据分析）。Qiong Zhang 感谢美国国家科学基金会（NSF）通过资助编号 2413630 提供支持（统计方法开发）。

参考文献

Convergent Manufacturing Technologies, Inc.（2024）。*COMPRO* – 复合材料工艺建模软件。温哥华，不列颠哥伦比亚省。计算机软件。

Craig, P. S.、M. Goldstein、A. H. Seheult 和 J. A. Smith（1997）。油气藏压力匹配：贝叶斯线性策略在大型计算机实验中的应用案例研究。第 37–93 页。

Dassault Syst`emes（2024）。*ABAQUS 2024* 用户手册。美国罗得岛州普罗维登斯：Dassault Syst`emes Simulia Corp。

Forrester, A. I., A. S´obester, and A. J. Keane（2007）。基于代理模型的多保真度优化

建模。《英国皇家学会 *A* 辑：数学、物理与工程科学论文集》*463*(2088), 3251–3269.

Francom, D., J. D. Tucker, G. Huerta, K. Shuler, and D. Ries（2025）。弹性贝叶斯模型校准。*SIAM/ASA*不确定性量化期刊 *13*(1), 195–227。

Gramacy, R. B.（2020）。代理模型：应用科学的高斯过程建模、设计与优化。Chapman and Hall/CRC。

Higdon, D., M. Kennedy, J. C. Cavendish, J. A. Cafeo, and R. D. Ryne（2004）。结合场数据与计算机模拟进行校准和预测。*SIAM*科学计算期刊 *26*(2), 448–466。

Kennedy, M. C. and A. O'Hagan（2002, 01）。计算机模型的贝叶斯校准。英国皇家统计学会会刊*B*辑：统计方法学 *63*(3), 425–464。

Le Gratiet, L. and J. Garnier（2014）。用于多保真度层级计算机实验设计的递归协克里金模型。*International Journal for Uncertainty Quan-tification 4*(5)。

Li, Y., F. Zhang, D. Shinde, Q. Zhang, S. Pradeep, S. Pilla, and G. Li (2026). 降低注塑成型翘曲的实验参数不确定性分析。*arXiv* 预印本 *arXiv:2601.05396*。

Limaye, M., Y. Li, Q. Zhang, and G. Li (2025). 利用约束贝叶斯优化对复合材料结构进行数值模拟引导的快速固化工艺优化。

Marmin, S. and M. Filippone (2022). 用于计算机模型校准的深度高斯过程（附讨论）。贝叶斯分析 *17*(4), 1301 – 1350。

Myers, R. H., D. C. Montgomery, and C. M. Anderson-Cook（2016）。响应面方法：使用试验设计进行过程与产品优化。约翰·威立父子公司。

Plumlee, M.（2017）。不精确计算机模型的贝叶斯校准。美国统计学会杂志 *112*(519), 1274–1285.

Santner, T. J., B. J. Williams, W. I. Notz, 和 B. J. Williams（2003）。计算机实验的设计与分析，第1卷。Springer。

Tuo, R. 和 C. F. J. Wu（2015）。不完美计算机模型的高效校准。统计年鉴 *43*(6), 2331–2352。