

Экстремальные эллипсоиды как аппроксиматоры пространства дизайна в задачах предсказательного метамоделирования¹

Аннотация. В статье предложен подход к построению множества допустимых значений переменных оптимизации (пространства дизайна) в форме экстремальных эллипсоидов, описывающих заданное множество точек и вписанных в заданное множество линейных ограничений. Рассмотрены эллипсоид главных компонент, эллипсоид минимального объема, эллипсоид с минимальным следом его матрицы, содержащие заданные точки. Разработаны процедуры, которые позволяют трансформировать эллипсоид, построенный исключительно по выборке точек так, чтобы он принадлежал выпуклому многограннику. Эллипсоиды строятся через решение соответствующих оптимизационных задач, которые формулируются в виде задач выпуклого программирования с использованием линейных матричных неравенств.

Ключевые слова: представление данных, экстремальные эллипсоиды, выпуклая оптимизация, линейные матричные неравенства, метод главных компонент.

Введение

Математическое моделирование является одним из самых распространенных методов анализа и оптимизации проектируемых технических объектов. Математическая модель M проектируемого объекта может быть описана в виде функциональной зависимости $y = F_M(w) \in \mathbf{R}^n$, где переменная $w \in \mathbf{W} \subset \mathbf{R}^p$ описывает сам объект, а так же, если необходимо, может описывать условия его функционирования, параметры управления объектом, параметры внешней среды и т.д. Как правило, функция F_M является неизвестной, и для ее вычисления проводятся натурные или вычислительные эксперименты, имеющие значительную вычислительную трудоемкость. В результате формируется некоторое количество измерений $\Phi_N = \{(w_i, y_i = F_M(w_i), i = 1, 2, \dots, N)\}$, где значение $y_i = F_M(w_i)$ исследуемой характеристики получено для объекта, имеющего описание w_i . Предполагается, что имеющиеся измерения имеют приемлемую точность.

Для выбора наилучшего технического решения применяются алгоритмы оптимизации. Нахождение оптимального решения может потребовать большого количества вычислений значений функции $F_M(w)$. В этом случае вычислительные затраты могут стать недопустимо высокими, что существенно сокращает возможности использования моделей, основанных на «физике процессов».

В последнее десятилетие начало развиваться новое направление в моделировании – технология предсказательного моделирования, позволяющая строить новые вычислительно эффективные модели по результатам Φ_N вычислительных экспериментов с исходной моделью M [1-6].

Эта технология базируется на решении ряда задач интеллектуального анализа данных [5, 7-10], основной из которых является задача восстановления неизвестной зависимости $y = F_M(w)$ [11], т. е. задача построения по известному множеству Φ_N зависимости $y = F_{SM}(w) = F_{SM}(w | \Phi_N)$. По сравнению с точ-

¹Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №14-50-00150).

ной моделью $F_M(w)$, функции $F_{SM}(w)$ производят вычисления очень быстро, но с некоторой погрешностью. Если зависимости F_M и F_{SM} близки друг к другу в некоторой метрике, то построенная по данным Φ_N модель SM может рассматриваться как заменитель исходной модели M и называется суррогатной моделью или метамоделью.

К другим задачам, решаемым в предсказательном моделировании, относятся задачи снижения размерности [12-15], в которых по данным $W_N = \{w_i, i = 1, 2, \dots, N\}$ удается построить низкоразмерные представления $x = h(w)$, $x \in X \equiv h(W) \in \mathbf{R}^d$ при $d \ll p$, для исходных высокоразмерных входных векторов w без существенной потери информации. Построенные представления позволяют свести задачу восстановления неизвестной зависимости $y = F_M(w)$ по данным Φ_N к редуцированной низкоразмерной задаче восстановления зависимости $y = f_M(x)$ по данным $\phi_N = \{(x_i = h(w_i), y_i = f_M(w_i)), i = 1, 2, \dots, N\}$. Заметим, что при переходе к переменным x теряется информация о физических и геометрических свойствах объекта. Процедуры снижения размерности, использованные для описания аэродинамических профилей крыла [12, 16-17], позволили решить ряд сложных задач аэродинамического проектирования [18, 19].

Как отмечалось выше, базовой проблемой построения суррогатных моделей является аппроксимация по данным неизвестной зависимости $y = F_M(w)$. Однако область определения W модели $y = F_M(w)$ также обычно является неизвестной по следующим причинам.

Из предметной области могут быть известны ограничения на параметры управления объектом и внешней среды, являющиеся естественными физическими величинами (например, массами, температурами, скоростями и т.д.), для которых инженеры могут указать разумные пределы их изменения, в том числе интервалы изменения одних величин при заданных значениях других. Такого рода ограничения могут задаваться в виде набора линейных ограничений на вектор w . Если это нелинейные выпуклые ограничения, то они могут быть с необходимой степенью точности линеаризованы и представлены в виде системы линейных неравенств.

Входной вектор w может включать в себя детальное описание геометрических объектов (кривых, поверхностей) или их компонентов

[12]. В общем случае такие описания задаются набором 2D или 3D координат точек поверхности объекта, лежащих в выбранных узлах, или набором параметров аппроксимирующих сплайнов (например, кривых, поверхностей или сплайнов Безье, B-сплайнов на неравномерной сетке и др.). Такого рода детальные описания кривых и поверхностей используются в САД-системах, компьютерной графике и других приложениях. Тем самым, детальные описания геометрических объектов могут состоять из десятков тысяч чисел, каждое из которых, рассматриваемое изолированно, не несет смысловой нагрузки. Поэтому указать разумные пределы изменения каждого из этих чисел становится затруднительным или невозможным, и в лучшем случае можно указать лишь ряд линейных ограничений на область их совместного изменения.

Тем самым, можно указать лишь линейные ограничения на область изменения вектора $w \in W$, которые определяют многогранник D^* , содержащий область определения W . Однако достаточные условия того, что некоторый вектор $w \in D^*$ соответствует описанию реального, физически осмысленного, объекта и параметров его функционирования, являются трудно формализуемыми, и определить эти условия практически невозможно.

При использовании низкоразмерных представлений $x = h(w)$ вместо исходных векторов w , компоненты вектора x не имеют геометрической или физической интерпретации. Если использовать линейные процедуры снижения размерности (например, метод главных компонент [20, 21]), то многогранник D^* в высокоразмерном пространстве определяет многогранник D в низкоразмерном пространстве (как множество тех векторов $x \in D$, которые переводятся процедурой восстановления в вектора $w \in W$), содержащий область определения X . С использованием матричных неравенств многогранник D может быть записан в виде $D = \{x \in \mathbf{R}^d: Ax \leq b\}$. Здесь и далее неравенство между векторами понимается в покоординатном смысле.

Конечной целью проектирования является выбор «оптимальной» структуры объекта, доставляющий экстремум одному или нескольким заданным функционалам от вектора характеристик u при заданных ограничениях типа равенства или неравенства. Такой выбор осуществляется путем решения оптимизационных задач для построенной суррогатной модели $y =$

$F_{SM}(w)$ (или модели $y = f_{SM}(x)$ при использовании низкоразмерных представлений). Для формулировки задачи оптимизации необходимо задать пространство дизайна W (или X в низкоразмерном пространстве), из элементов которого будет выбираться наилучший вектор, удовлетворяющий заданным ограничениям.

В современной литературе уделяется много внимания как задачам построения суррогатных моделей, так и методам их оптимизации [4, 6]. В то же время такая проблема, как определение допустимого множества решений (пространства дизайна), остается практически неисследованной. Эта проблема является весьма существенной для прикладных инженерных задач, которые используют суррогатные модели.

Использование в качестве пространства дизайна многогранника D не представляется возможным, так как многие его точки, принадлежащие множеству D/X , являются «нефизичными» и не соответствуют никакому реальному объекту. Кроме того, даже если есть возможность ограничить область допустимых значений многогранником D , то чаще всего на практике определяющие его ограничения являются весьма громоздкими и усложняют решение оптимизационных задач. Кроме того, в современных технических задачах размерность описаний объектов может очень высокой и достигать тысяч.

Единственная доступная информация о пространстве дизайна заключается в том, что подмножество $X_N = \{x_i = h(w_i), i = 1, 2, \dots, N\} \subset D$, соответствующее множеству прототипов реальных объектов и параметров их функционирования, принадлежит области определения (пространства дизайна) X и может быть использовано для построения его аппроксимации.

При построении пространства дизайна, основанного на данных, необходимо принимать во внимание следующее соображение. Наиболее развитой является теория выпуклой оптимизации, в рамках которой предполагается, в том числе, выпуклость пространства дизайна; для выпуклых оптимизационных задач разработаны эффективные методы решения, и такие задачи обладают рядом практически важных свойств, среди которых глобальность локального минимума и его единственность [22, 23]. В связи с этим целесообразно строить пространство дизайна в виде выпуклого множества.

Так как каждому элементу $x \in X_N$ соответствует реальный физический объект, то интуитивно понятно, что «вероятность» найти реальный физический объект выше вблизи множества точек X_N . В качестве первого приближения пространства дизайна можно выбрать параллелепипед

$$\Pi(\Delta) = \{x \in R^d: \alpha - \Delta \leq x \leq \beta + \Delta\},$$

в котором компоненты векторов α и β являются минимумом, и, соответственно, максимумом одноименных компонент векторов из множества X_N , а векторный параметр $\Delta \geq 0$ характеризует степень удаленности от множества прототипов и выбирается эмпирически.

Параллелепипед $\Pi(\Delta)$ в d -мерном пространстве вполне подходит в качестве пространства дизайна в математической постановке задачи оптимизации, однако на практике очень редко встречается ситуация, когда множество точек X_N равномерно или достаточно плотно заполняет такой параллелепипед. Чаще это множество точек представляет собой облако точек, лишь частично заполняющих параллелепипед $\Pi(\Delta)$.

Альтернативный метод заключается в построении выпуклой оболочки множества X_N . Но эта задача является вычислительно сложной [24], а выпуклая оболочка может иметь непростую структуру, что мешает эффективно решать задачи оптимизации.

Другой возможный подход связан с построением малого шара, содержащего большинство заданных точек X_N . В работе [25] подробно анализируется следующая задача построения шара S с центром a и радиусом R :

$$\min_{R, a, \xi} \left(R^2 + C \sum_{i=1}^N \xi_i \right)$$

s.t.

$$\|x_i - a\|^2 \leq R^2 + \xi_i, \quad \xi_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, N.$$

Здесь $C > 0$ – константа, определяющая величину штрафа $C\xi_i$ на расстояние до шара S точки x_i , не принадлежащей ему. Полученный шар может рассматриваться как приближение множества данных и как описание пространства дизайна в задачах оптимизации. Построенные на основе выборки области могут применяться в задачах определения выбросов в выборке (outlier detection) [26]: если точка не

принадлежит построенному шару, она классифицируется как аномальная.

Похожий подход применяется в работе [27]. В этой статье решается задача, в которой имеется выборка с положительными (первый класс) и отрицательными (выбросы) примерами. Строятся два шара: шар минимального объема, который содержит все точки первого класса, и максимальный шар, вне которого лежат все точки-выбросы.

Также как и в случае с параллелепипедом, шар может содержать точки, сильно удаленные от описаний реальных объектов, если облако точек имеет вытянутую форму. Во-вторых, построенная без учета многогранника ограниченной D область может выходить за его пределы, нарушая необходимые условия корректности вектора описания объектов.

В статье [28] рассмотрена упрощенная задача описания множества точек эллипсоидом. Форма эллипсоида и его ориентация фиксированы: матрица эллипсоида пропорциональна матрице, обратной ковариационной матрице выборки X_N . Также авторы работы [28] не накладывают ограничений на принадлежность построенного эллипсоида допустимому множеству D .

Помимо вышеуказанного требования к выпуклости пространства дизайна желательно, чтобы оно имело не очень большой объем, чтобы не содержало точек, далеких от множества X_N , но при этом содержало как можно большее количество точек из этого множества. Дополнительным преимуществом является простое описание пространства дизайна, что позволит быстро генерировать в нем новые точки при использовании в итерационном оптимизационном процессе.

В связи с этим в данной статье предлагается описывать множество допустимых значений в виде эллипсоида, принадлежащего многограннику D [29].

Статья организована следующим образом. В разделе 2 рассматриваемая задача построения эллипсоида по множеству X_N и многограннику D сформулирована как задача двухкритериальной оптимизации, решением которой служит фронт Парето в пространстве допустимых эллипсоидов.

В разделе 3 приведены возможные подходы к точному и приближенному решению поставленной двухкритериальной задачи. Точное решение, в принципе возможно, но оно является

гипотетическим, так как требует объема вычислений, нереализуемого на практике. Более реалистичным является приближенный метод решения.

В разделах 4 и 5 рассмотрено несколько эмпирических подходов к построению экстремальных эллипсоидов, описанных около заданного множества точек и вписанных в выпуклый многогранник. Построение таких эллипсоидов делается в два этапа. На первом этапе строится эллипсоид, называемый базовым, который приближает заданное множество точек X_N без учета многогранника. В работе [22] представлено несколько подходов к построению подобных эллипсоидов с использованием различных критериев близости к дискретному множеству. Эти методы сформулированы в разделе 4. На втором этапе выполняется процедура построения искомого эллипсоида, вписанного в базовый, который одновременно принадлежит заданному многограннику. Здесь тоже возможно несколько подходов к решению задачи. Рассмотрено несколько модификаций обоих этапов с использованием различных критериев близости эллипсоида и множества точек, способов построения эллипсоида, вписанного в многогранник. Полученные эллипсоиды приближают ту часть фронта Парето сформулированной выше двухкритериальной задачи, которая отвечает рассматриваемой задаче представления и анализа данных.

Разработанные процедуры были использованы для решения конкретной инженерной задачи — построение эллипсоида вокруг выборки точек, где каждая точка есть описание профиля крыла самолета, и вписанного в выпуклый многогранник, образованный линейными ограничениями, которые отражают условия корректности формы профилей. Множество профилей для решения задачи было отобрано экспертами. В разделе 6 приводится сравнительный анализ полученных результатов. Задача описания таких профилей является существенным фрагментом при построении полной трехмерной модели крыла самолета, которая, в свою очередь, будет использоваться в метамодели аэродинамики самолета в разных условиях полета.

В последнем разделе 7 подведены итоги статьи и обозначены направления возможных дальнейших исследований, связанные с более точным приближением фронта Парето поставленной двухкритериальной задачи.

1. Постановка задачи

Имеется выборка точек

$$X_N = \{x_i \in \mathbf{R}^d, i = 1, \dots, N\}, \quad (1)$$

которые принадлежат выпуклому многограннику, заданному системой линейных неравенств:

$$D = \{x \in \mathbf{R}^d \mid Ax \leq b\}, \quad (2)$$

где A – матрица размера $M \times d$, b – вектор размерности M . Предполагается, что множество X_N лежит в многограннике: $X_N \subset D$.

Уравнение эллипсоида имеет вид:

$$E(P, x_p) = \{x : (x - x_p)^T P^{-1} (x - x_p) \leq 1\}, \quad (3)$$

где $P = P^T$ – симметричная положительно определенная матрица размера $(d \times d)$ – матрица эллипсоида, а x_p – вектор размерности d – центр эллипсоида.

Условие принадлежности точки x эллипсоиду $E(P, x_p)$ может быть записано в форме:

$$x \in E(P, x_p) \Leftrightarrow \{x \in \mathbf{R}^d : (x - x_p)^T P^{-1} (x - x_p) \leq 1\}.$$

С помощью леммы Шура [22, 30] последнее соотношение переписывается в виде следующих линейных матричных неравенств:

$$x \in E(P, x_p) \Leftrightarrow \begin{bmatrix} P & (x - x_p) \\ (x - x_p)^T & 1 \end{bmatrix} \geq 0, \quad P \geq 0.$$

Здесь запись $A \geq 0$ означает неотрицательную определенность матрицы.

Рассматриваются две функции на множестве эллипсоидов:

- объем эллипсоида, вычисляемый по формуле

$$vol(E) = w_d (\det P)^{1/2},$$

где w_d – объем единичного шара в \mathbf{R}^d ;

- количество точек из множества X_N , лежащих вне эллипсоида:

$$K(E) = \left| \{x \in X_N \mid (x - x_p)^T P^{-1} (x - x_p) > 1\} \right|.$$

Поставим следующую двухкритериальную задачу оптимизации: найти эллипсоид, лежащий в многограннике D , объем которого минимален, и вне которого находится наименьшее число точек из заданного множества X_N :

$$\begin{aligned} \min_{P, x_p} (vol(E), K(E)) \\ s.t. E \subset D \end{aligned} \quad (4)$$

Решением задачи будет множество Парето – набор эллипсоидов, в котором все эллипсоиды являются недоминируемыми, т.е. для каждого эллипсоида из этого набора не существует допустимого эллипсоида, у которого оба критерия меньше.

Отметим, что отличительной особенностью данной задачи является то, что один критерий, функция объема $vol(E)$, является непрерывной, а вторая, функция $K(E)$ – дискретной.

Решению рассматриваемой задачи представления и анализа данных соответствует часть фронта Парето, которая дает эллипсоиды с "малым" количеством точек из описываемого множества X_N , которые не принадлежат этим эллипсоидам.

2. Возможные подходы к решению

Функция $K(E)$ принимает только целочисленные значения от 0 до N . Поэтому задача (4) может быть переформулирована в виде семейства из $N-d+1$ однокритериальных задач

$$\begin{aligned} vol(E) \rightarrow \min \\ s.t. E \subset D, K(E) = j \end{aligned}$$

поиска внутри многогранника D эллипсоида E минимального объема, не содержащего ровно $j=0, \dots, N-d$ точек из множества X_N . Перебрав все варианты выбора тех j точек, которые не будут принадлежать эллипсоиду, строится минимальный по объему эллипсоид $E \subset D$, содержащий остальные точки X_N . Затем выбирается наименьший по объему среди построенных эллипсоидов.

Приведенные выше рассуждения показывают принципиальную возможность точного решения задачи (4). Однако описанный метод решения нереализуем на практике. Даже при малых объемах данных в несколько сотен точек и при значениях $K(E) \sim 0.1|X_N|$ число сочетаний $C_{K(E)}^N$ огромно, и полный перебор неосуществим за разумное время.

В данной работе предложено несколько эмпирических подходов к построению в d -мерном пространстве экстремальных эллипсоидов, описанных около заданного множества точек и вписанных в выпуклый многогранник.

Входными данными задачи являются конечное множество точек X_N (1) и многогранник линейных ограничений D (2). Общее решение задачи состоит из двух этапов. На первом этапе

строится эллипсоид $E(P(X_N), x_p)$, покрывающий заданное множество точек X_N без учета ограничений (2). Этот эллипсоид будем называть базовым. На втором этапе к базовому эллипсоиду применяются процедура построения эллипсоида, вписанного в базовый эллипсоид и удовлетворяющего линейным ограничениям D . Выходом задачи является эллипсоид $E(Q, x_q)$ такой что $E(Q, x_q) \subseteq E(P(X_N), x_p) \cap D$.

Существуют классические задачи построения эллипсоидов, описывающих множество точек (например, [22]). В данной работе были выбраны эллипсоид главных компонент, эллипсоид минимального объема и эллипсоид с минимальным следом его матрицы. Построение этих эллипсоидов кратко описано в разделе 4. В работе предложено три процедуры учета многогранника. Эти процедуры описаны в разделе 5.

3. Базовые эллипсоиды, построенные по точкам

В данной работе были выбраны следующие эллипсоиды:

- эллипсоид главных компонент;
- эллипсоид минимального объема;
- эллипсоид с минимальным следом его матрицы P .

Эллипсоид главных компонент. Центр эллипсоида есть среднее арифметическое множества X_N :

$$c = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i.$$

Матрица эллипсоида пропорциональна матрице, обратной ковариационной матрице выборки:

$$P = \gamma \text{Cov}^{-1}(X_N, X_N),$$

где $\gamma = \max_{i=1, \dots, N} (x_i - c)^T \text{Cov}^{-1}(X_N, X_N) (x_i - c)$.

Эллипсоид минимального объема. Объем эллипсоида (3) вычисляется по формуле

$$\text{vol}(E) = w_d (\det P)^{1/2},$$

где w_d – объем d -мерного единичного шара.

Для эллипсоида, заданного в форме (3) сделаем замену переменных: $V = P^{-1/2}$, $b = P^{-1/2} x_p$. Поскольку объем эллипсоида (3) пропорционален $\det P^{1/2} = \det V^{-1}$, тогда задача нахождения эллипсоида минимального объема сводится к задаче о минимизации выпуклой функции на выпуклом множестве в переменных V, b [22, 30]:

$$\log \det(B^{-1})^2 \rightarrow \min$$

$$s.t. \begin{bmatrix} 1 & (Bx_k - b)^T \\ (Bx_k - b) & I \end{bmatrix} \geq 0, \quad k = 1, \dots, N.$$

Эллипсоид с минимальным следом матрицы. В качестве критерия минимальности эллипсоида (3) можно потребовать, чтобы сумма квадратов его полуосей, то есть след $\text{Tr } P$, был минимальным. Таким образом, приходим к следующей задаче выпуклой оптимизации [22, 30]:

$$\text{Tr } P \rightarrow \min$$

$$s.t. \begin{bmatrix} 1 & (x_k - x_p)^T \\ (x_k - x_p) & I \end{bmatrix} \geq 0, \quad k = 1, \dots, N.$$

4. Процедуры построения эллипсоида в пересечении базового эллипсоида и выпуклого многогранника

Входными данными процедуры являются базовый эллипсоид $E(P, x_p)$ и многогранник D , заданный системой линейных неравенств (2). Выходом процедуры является эллипсоид лежащий в пересечении входного эллипсоида $E(P, x_p)$ и многогранника D .

Решения этой задачи зависят от того, как сформулированы требования к области пересечения входного эллипсоида и многогранника. В данной работе рассмотрены следующие алгоритмы:

- сжатие базового эллипсоида так, чтобы он касался пересекаемых граней многогранника;
- построение эллипсоида максимального объема, вписанного в пересечение базового эллипсоида и многогранника;
- построение эллипсоида максимального объема, вписанного в пересечение базового эллипсоида и эллипсоида максимального объема, вписанного в многогранник.

Процедура сжатия эллипсоида. Процедура заключается в последовательных сжатиях базового эллипсоида и состоит в следующем итеративном алгоритме:

Положим $E^0 = E$. Для $k=1, 2, \dots$ выполнять итерационный процесс $E^k = \Lambda_k(E^{k-1})$ до тех пор, пока не получим эллипсоид $E^k \subseteq D$, где k -тая итерация состоит из следующих шагов:

11. Найти линейное преобразование Ψ , при котором эллипсоид E^{k-1} отображается в единичный шар с центром в начале координат.

Применить это преобразование: $E' = \Psi(E^{k-1})$, $D' = \Psi(D)$.

12. Найти грань C многогранника D' с наименьшим расстоянием до центра шара E' .

Пусть \vec{n} вектор нормали к этой грани.

13. Найти и применить преобразование Θ выполняющее поворот системы координат так, чтобы вектор \vec{n} стал коллинеарен вектору $(1, 0, \dots, 0)$.

14. Найти преобразование Ω , сжимающее эллипсоид $\Theta(E')$ вдоль направления $(1, 0, \dots, 0)$ так, чтобы сжатый эллипсоид касался этой грани.

15. Выполнить обратные преобразования для возврата в исходную систему координат: $E^k = \Psi^{-1} \Theta^{-1}(\Omega(\Theta(\Psi(E^{k-1}))))$.

Легко видеть, что алгоритм завершится за конечное число итераций, т.к. число граней многогранника конечно.

Процедура построения эллипсоида в пересечении базового эллипсоида и многогранника. Пусть задан многогранник D , описываемый системой линейных неравенств:

$$D = \{x \in \mathbb{R}^d, a_k^T x \leq b_k, k = 1, \dots, N\} \quad (5)$$

и эллипсоид $E(P, x_p) = \{x \in \mathbb{R}^d: (x-x_p)^T P^{-1}(x-x_p) \leq 1\}$, представленный в форме:

$$E(P, x_p) = \{x \in \mathbb{R}^d: x^T P^{-1} x + 2g^T x + h \leq 0\}, \quad (6)$$

где $g = -x_p^T P^{-1}$, $h = x_p^T P^{-1} x_p - 1$.

Мы хотим найти эллипсоид $E(Q, x_q)$ максимального объема, который лежал бы в пересечении многогранника (5) и эллипсоида (6). Будем искать эллипсоид в форме $E(Q, x_q) = \{Bu + x_q : \|u\|_2 \leq 1\}$, где $B = Q^{1/2}$.

Условие принадлежности эллипсоида $E(Q, x_q)$ многограннику D (5) можно записать в виде системы линейных матричных неравенств [22, 23]:

$$\begin{bmatrix} (b_k - a_k^T x_q)I & Ba_k \\ (Ba_k)^T & (b_k - a_k^T x_q) \end{bmatrix} \geq 0, \quad k = 1, \dots, N. \quad (7)$$

В [22] доказывается утверждение о том, что эллипсоид $E(Q, x_q)$ содержится в эллипсоиде $E(P, x_p)$ (6) тогда и только тогда, когда существует $\lambda \geq 0$ такое, что:

$$\begin{bmatrix} -\lambda - x_q^T P^{-1} x_q - 2g^T x_q - h & (P^{-1} x_q + g)^T B \\ B(P^{-1} x_q + g) & \lambda I - BP^{-1} B \end{bmatrix} \geq 0$$

Тогда условие $E(Q, x_q) \subseteq E(P, x_p)$ можно записать в виде следующего линейного матричного неравенства:

$$\begin{bmatrix} -\lambda - h + g^T P g & 0 & (x_q + P g)^T \\ 0 & \lambda I & B \\ x_q + P g & B & P \end{bmatrix} \geq 0, \quad (8)$$

где $B = Q^{1/2}$.

Задача построения эллипсоида максимального объема, лежащего в пересечении многогранника (5) и эллипсоида (6) сводится к следующей выпуклой оптимизационной задаче [22, 30]:

$$\begin{aligned} & -\log \det B \rightarrow \min \\ & \text{s.t. (7), (8), } \lambda \geq 0 \end{aligned}$$

Процедура построения эллипсоида в пересечении базового эллипсоида и эллипсоида максимального объема, вписанного в многогранник. Эта процедура состоит из двух шагов. На первом шаге мы строим эллипсоид $E_m(P_m, x_m)$ максимального объема, вписанный в многогранник (5), решением задачи выпуклой оптимизации:

$$\begin{aligned} & -\log \det B \rightarrow \min \\ & \text{s.t. (7),} \end{aligned}$$

где $B = P_m^{1/2}$ [22, 30].

На втором шаге нам нужно найти эллипсоид $E(Q, x_q) = \{Bu + x_q : \|u\|_2 \leq 1\}$ максимального объема, вписанный в пересечение двух эллипсоидов $\{E_1=(P_1, c_1)$ и $E_2=(P_2, c_2)\}$, где один из эллипсоидов есть базовый эллипсоид, а второй – эллипсоид, построенный на шаге 1. Решение этой задачи сводится к задаче выпуклой оптимизации:

$$\begin{aligned} & -\log \det B \rightarrow \min \\ \text{s.t.} & \begin{bmatrix} -\lambda_i - h_i + g_i^T P_i g_i & 0 & (x_q + P_i g_i)^T \\ 0 & \lambda_i I & B \\ x_q + P_i g_i & B & P_i \end{bmatrix} \geq 0, \\ & i = 1, 2, \quad B = Q^{1/2}. \end{aligned}$$

5. Результаты применения процедур при решении инженерной задачи

Разработанные методы построения эллипсоидов были применены для решения конкретной инженерной задачи — построения эллипсоида вокруг выборки точек, где каждая точка есть описание профиля крыла самолета, и вписанно-

го в выпуклый многогранник, образованный линейными ограничениями, которые отражают условия корректности формы профилей. Варьируя тип базового эллипсоида и процедуру учета многогранника, были получены разные решения. Эти решения сравнивались по двум критериям: объему итогового эллипсоида и количеству точек множества X_N , не покрытых этим эллипсоидом.

Профиль есть сечение крыла плоскостью, перпендикулярной к размаху крыла. Типичный профиль крыла приведен на рис.1. Условно контур профиля подразделяется на две части: верхнюю и нижнюю. Все способы описания профиля представляют собой набор двумерных координат точек контура профиля. Для построения описания профиля выбирается и фиксируется множество абсцисс (t_1, t_2, \dots, t_k) , в которых определяются ординаты верхнего и нижнего контуров. Таким образом, описание профиля есть вектор ординат, записанных в определенной последовательности:

$$w = (w^l(t_k), w^l(t_{k-1}), \dots, w^l(t_1), w^u(t_1), \dots, w^u(t_{k-1}), w^u(t_k))$$

здесь $w^l(t)$ и $w^u(t)$ есть ординаты соответственно нижнего и верхнего контуров в точке t .

Профиль считается корректным, если он не содержит самопересечений. То есть

$$w^l(t_i) - w^u(t_i) \leq 0, \quad i = 1, \dots, k. \quad (9)$$

Эти ограничения могут быть записаны в виде системы линейных неравенств $Aw \leq b$ с матрицей A размером $k \times k$ и столбцом b размера k .

Работа выполнялась при следующих условиях. Экспертами было отобрано $N=206$ профилей, представленных векторами размерности $p=57$.

Для снижения размерности представления данных был выбран метод главных компонент (Principal Components Analysis, [16, 20]). В этом методе процедура сжатия представляет собой линейное отображение $x = C(w - a)$, $a \in R^{57}$ – среднее арифметическое векторов w , C – матрица размером 57×6 , а процедура восстановления – $w = a + C^T x$. Многограннику $Aw \leq b$ в исходном пространстве соответствует многогранник $AC^T x \leq b - Aa$ в пространстве меньшей размерности d . Действительно, для описания профилей годятся лишь те векторы, которые при

выполнении процедуры восстановления удовлетворяют исходным ограничениям (9). Так строится многогранник D с ограничениями (2).

В экспериментах размерность снижалась до значения $d=6$, поскольку ошибка восстановления является удовлетворительной [7, 21].

Задачи оптимизации решались с помощью пакета CVX [31].

В таблице приведены результаты работы. Строки таблицы соответствуют типу эллипсоида, построенного по точкам:

- PCA – эллипсоид главных компонент;
- MinVol – эллипсоид минимального объема;
- MinTrace – эллипсоид с минимальным следом матрицы.

Столбцы таблицы соответствуют процедурам:

- П1 – процедура сжатия эллипсоида;
- П2 – процедура построения эллипсоида максимального объема, вписанного в пересечение многогранника и базового эллипсоида;
- П3 – процедура построения эллипсоида максимального объема, вписанного в пересечение базового эллипсоида и эллипсоида максимального объема, вписанного в многогранник.

Для каждой пары (базовый эллипсоид, процедура) приводятся две характеристики:

- V – объем итогового эллипсоида, отнесенный к объему минимального эллипсоида, построенного по точкам;
- K – количество точек выборки (абсолютное и процентное значения), не покрытых итоговым эллипсоидом.

Для наглядности эти результаты представлены на графике (Рис. 1). По оси абсцисс отложена величина V, по оси ординат – процентное значение переменной K.

Из Рис. 2 видно, что некоторые точки не являются доминирующими (например, MinTrace П3 и PCA П1).

Результаты применения процедур

	П1		П2		П3	
	V	K	V	K	V	K
PCA	2.118	6 (2.9%)	2.571	2 (0.97%)	1.648	3 (1.45%)
MinVol	0.924	13 (6.3%)	0.936	13 (6.3%)	0.781	14 (6.8%)
MinTrace	1.379	13 (6.3%)	1.434	12 (5.8%)	0.913	17 (8.3%)

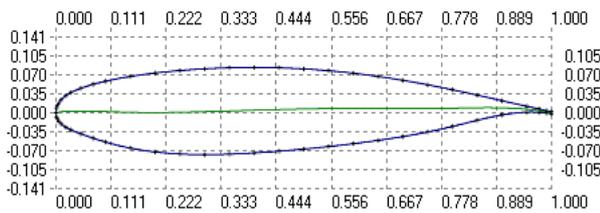


Рис. 1. Типичный профиль крыла

Заключение

Мы рассмотрели несколько эмпирических подходов к поиску «хорошего» эллипсоида, который приближает заданное множество точек в \mathbf{R}^d и принадлежит данному многограннику, и предложили метод их сравнения по двум критериям: объему эллипсоида и количеству точек, не содержащихся в эллипсоиде. Очевидно, что выбор конкретного метода существенно зависит от исходных данных и цели конкретной инженерной задачи. Отметим, что нельзя одновременно минимизировать оба критерия. Естественным продолжением работы будет изучение методов решения задачи двухкритериальной оптимизации: минимизации объема и количества точек выборки, не покрытых эллипсоидом.

Авторы выражают благодарность А.А. Ильину и А.В. Бернштейну за активное участие в обсуждении результатов и полезные замечания в ходе работы над статьей.

Литература

1. Кулешов А.П. Технология быстрого вычисления характеристик сложных технических объектов/ Информационные технологии, прил. № 3, М., 2006, с. 4 - 11.
2. Кулешов А.П. Когнитивные технологии в адаптивных моделях сложных объектов/ Информационные технологии и вычислительные системы, в. 1, 2008, с. 18 – 29.
3. Кулешов А.П. Метамодел в компьютерных системах проектирования. Труды Международной научно-технической конференции «Информационные технологии и математическое моделирование систем» (ИТММ, 19 – 26 сентября 2010 г., Франция). М.: Учреждение российской академии наук Центр информационных технологий в проектировании РАН, 2010. с. 209-210.
4. Forrester, A.I.J., Sobester A., Keane A.J. Engineering Design via Surrogate Modelling. A Practical Guide. Wiley, New-York, 2008.
5. Kuleshov A.P., Bernstein A.V. Cognitive technologies in adaptive models of complex plants. Information Control Problems in Manufacturing. 2009, Vol. 13, Part 1, pp. 1441 – 1452.

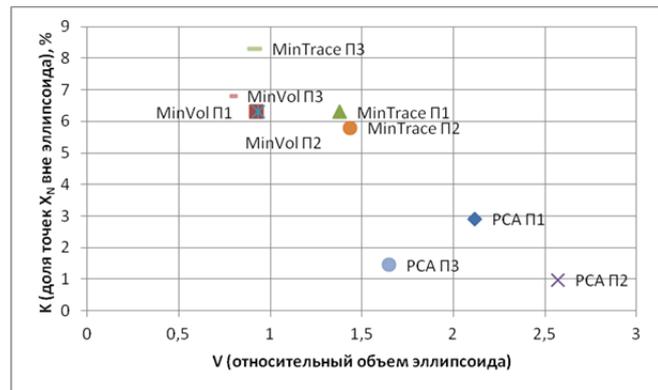


Рис. 2. Результаты работы алгоритмов

6. Wang G., Shan S. Review of Metamodeling Techniques in Support of Engineering Design Optimization. J. Mech. Des. 2007, 129(3), pp. 370-381.
7. Бернштейн А.В., Кулешов А.П. Математические методы построения метамоделей. Труды Третьей международной конференции «Системный анализ и информационные технологии» (САИТ-2009, 14-18 сентября 2009 г., Звенигород, Россия). 2009, с. 756 – 768.
8. Кулешов А.П., Бернштейн А.В. Проблемы интеллектуального анализа данных для создания метамоделей. Труды Международной научно-технической конференции «Информационные технологии и математическое моделирование систем» (ИТММ, 19 – 26 сентября 2010 г., Франция). М.: Центр информационных технологий в проектировании РАН, 2010. с. 222 - 223.
9. Бернштейн А.В., Бурнаев Е.В., Кулешов А.П. Интеллектуальный анализ данных в метамоделировании. Нейроинформатика, ее приложения и анализ данных. Материалы XVII Всероссийского семинара (2 – 4 октября 2009 г.), Красноярск, ИПК СФУ, 2009, с. 23 – 28.
10. Кулешов А.П., Бернштейн А.В. Предсказательное метамоделирование и интеллектуальный анализ данных. Двенадцатая национальная конференция по искусственному интеллекту с международным участием (КИИ-2010). Труды конференции. - Т. 1. - М.: Физматлит, 2010.
11. Бернштейн А.В., Бурнаев Е.В., Кулешов А.П. Об одной методологии построения аппроксимаций многомерных зависимостей // Труды «Пленарные и избранные доклады» IV международной конференции «Параллельные вычисления и задачи управления», Москва, С. 56 – 62, 2008.
12. А.В. Бернштейн, А.П. Кулешов. Когнитивные технологии в проблеме снижения размерности описания геометрических объектов // Информационные технологии и вычислительные системы. 2008, №2.
13. Бернштейн А.В., Бурнаев Е.В. Задача снижения размерности в предсказательном моделировании. Сборник докладов 9-й международной конференции «Интеллектуализация обработки информации» (ИОИ-9), Черногория, г. Будва, 2012. М.: Торус Пресс, 2012.
14. Бернштейн А.В. Снижение размерности в предсказательном моделировании: новые задачи и методы.

- Сборник трудов конференции "Информационные технологии и системы - 2012". 20-24 августа 2012, г. Россия, г. Петрозаводск. М.: ИППИ РАН, 2012.
15. Bernstein A.V., Kuleshov A.P. Low-Dimensional Data Representation in Data Analysis, Lecture Notes in Artificial Intelligence, Springer International Publishing, Switzerland, vol. 8774, p. 47-58, 2014.
 16. С.С. Чернова, Е.П. Иванова. Снижение размерности сложных геометрических объектов при наличии частных параметрических моделей. Искусственный интеллект и принятие решений, 2009, №3, с. 53 – 58.
 17. Bernstein A.V., Burnaev E.V., Chernova S.S., F. Zhu, N. Qin. Comparison of Three Geometric Parameterization methods and Their Effect on Aerodynamic Optimization. Proceedings of International Conference on Evolutionary and Deterministic Methods for Design, Optimization and Control with Applications to Industrial and Societal Problems (Eurogen 2011). Capua, Italy, September 14 – 16, 2011. <http://www.eurogen2011.cira.it/>
 18. Bernstein, A., Kuleshov, A., Sviridenko, Yu., Vyshinsky, V. Fast Aerodynamic Model for Design Technology. In: Proceedings of West-East High Speed Flow Field Conference. Nov. 19-22, 2007, Moscow, Russia, <http://wehsff.imamod.ru/pages/s7.htm>.
 19. А.В. Бернштейн, В.В. Вышинский, А.П. Кулешов, Ю.Н. Свириденко. Быстрый метод аэродинамического расчета для задач проектирования // Труды Центрального аэродинамического института им. проф. Н.Е. Жуковского. 2008. Выпуск №2678 «Применение искусственных нейронных сетей в задачах прикладной аэродинамики». М.: ЦАГИ.
 20. Jollie T. Principal Component Analysis. New-York, Springer, 2002.
 21. Е.В. Бурнаев, С.С. Чернова. Об итеративном алгоритме подсчета главных компонент // Информационные процессы. 2008. Том 8, №2, с. 99-107.
 22. Boyd S.. Convex Optimization. Cambridge: University Press, 2004.
 23. Ю.Е. Нестеров. Методы выпуклой оптимизации. М.: МЦМНО, 2010.
 24. C. Bradford Barber et al. The Quickhull Algorithm for Convex Hull // ACM Transactions on Mathematical Software. 1996. Vol. 22, No. 4, pp. 469-483.
 25. Wei-Cheng Chang, Ching-Pei Lee and Chih-Jen Lin, A Revisit to Support Vector Data Description. Technical report, 2013.
 26. Bo Liu et al.. SVDD-based outlier detection on uncertain data. Knowledge and Information Systems, 2013. Volume 34, Issue 3, pp. 597-618.
 27. Qing Ai, Ji Zhao, Yuping Qin. Study of Small Sphere and Large Margin Hypersphere Support Vector Machine. Journal of Convergence Information Technology(JCIT) . Volume8, Number7, April. 2013. doi:10.4156/jcit.vol8.issue7.143
 28. Y. Zhang et al., Distributed online outlier detection in wireless sensor networks using ellipsoidal support vector machine, Ad Hoc Netw. (2012), <http://dx.doi.org/10.1016/j.adhoc.2012.11.001>.
 29. Бедринцев А.А., Чепыжов В.В. Представление данных с помощью экстремальных эллипсоидов // Материалы конференции ИТиС, Калининград, 2013.
 30. Stephen Boyd et al. Linear Matrix Inequalities in System and Control Theory // SIAM studies in applied mathematics. 1994. Vol. 15.
 31. CVX: Matlab Software for Disciplined Convex Programming, <http://cvxr.com/cvx>.

Бедринцев Алексей Александрович. Аспирант ИППИ им. А.А. Харкевича РАН. Окончил МФТИ в 2012 году. Область научных интересов: математическое моделирование, анализ данных, оптимизация.

Чепыжов Владимир Викторович. Ведущий научный сотрудник ИППИ им. А.А. Харкевича РАН. Окончил МГУ им. Ломоносова в 1984 году. Доктор физико-математических наук. Автор 110 печатных работ и двух монографий. Область научных интересов: уравнения с частными производными, бесконечномерные динамические системы, аттракторы, энтальпия, размерность, теория информации.

Чернова Светлана Станиславовна. Старший научный сотрудник лаборатории динамики макросистем ИСА РАН. Окончила МГУ им. Ломоносова в 1983 году. Кандидат технических наук, лауреат премии имени Ленинского комсомола. Автор 20 печатных научных работ. Область научных интересов: математическое моделирование, анализ и компьютерная обработка данных, искусственный интеллект, системы поддержки принятия решений.