

Построение ближайшего эллипсоида в задаче описания пространства дизайна с ограничениями¹

А.А.Бедринцев, В.В.Чепыжов

Институт проблем передачи информации, Российская академия наук, Москва, Россия

Поступила в редколлегию 21.08.2018

Аннотация—В статье предложен алгоритм описания пространства дизайна на основе известного множества примеров и при наличии ограничений, которым должны удовлетворять вектора описаний объектов. Пространство дизайна описывается в виде эллипсоида и строится в два этапа. На первом этапе строится базовый эллипсоид без учёта ограничений, только по известным точкам. На втором этапе строится эллипсоид, удовлетворяющий ограничениям и ближайший в некотором смысле к базовому эллипсоиду. Данная задача сводится к решению серии задач выпуклого программирования, сформулированных с помощью линейных матричных неравенств.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: экстремальные эллипсоиды, выпуклое программирование, многокритериальная оптимизация, фронт Парето, линейные матричные неравенства, пространство дизайна.

1. ВВЕДЕНИЕ

Математическое моделирование – неотъемлемый этап проектирования сложных инженерных систем. Натурные испытания по сравнению с компьютерными экспериментами дороги, занимают большое количество времени, а подчас невозможны.

Главной целью проектирования является подбор оптимальных значений параметров моделируемого объекта. Инженеры рассматривают некоторую функцию $F(x)$ от вектора параметров x модели реального объекта, и ставят задачу оптимизации этой функции с учётом ограничений на допустимые значения компонент вектора x :

$$\begin{aligned} \min_x F(x) \\ \text{s.t. } x \in \Omega . \end{aligned}$$

Примером таких задач может быть подбор конфигурации корпуса корабля наименьшей массы при ограничениях на его прочность, оптимизация стоимости производства транспортного средства при наличии требований на грузоподъёмность или улучшение полётных характеристик пассажирского самолёта [1].

Множество Ω допустимых значений параметров модели x может задаваться как функциональными неравенствами вида $C(x) \leq 0$, с помощью которых задаются сложные ограничения, так и простыми неравенствами на значения отдельных переменных в векторе x : $a^i \leq x^i \leq b^i$, или ограничениями на несколько переменных (например, параметры соседних сечений объекта). Подобные неравенства следуют из физических или геометрических ограничений изучаемой модели.

¹ Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 14-50-00150).

Размерность вектора x может быть очень большой, и ограничений, задающих множество Ω допустимых значений, может быть очень много. Также могут быть ограничения, которые сложно формализовать.

Для формулирования задачи анализа данных очень важно задать пространство дизайна, то есть, множество допустимых значений Ω . В литературе много внимания посвящено методам оптимизации, снижения размерности и суррогатного моделирования, однако пространство дизайна предполагается известным и обычно ограничивается шаром или параллелепипедом решения системы неравенств вида $a^i \leq x^i \leq b^i$.

В настоящей статье рассматривается задача построения множества Ω на основе известного множества корректных объектов, которые удовлетворяют всем ограничениям, а также информации об известных ограничениях, описанных в виде системы линейных неравенств. К описанной задаче с помощью линеаризации с необходимой точностью может быть сведен случай, когда функциональные ограничения $C(x) \leq 0$ заданы с помощью выпуклых функций.

Множество Ω должно обладать следующими свойствами:

1. **Простое описание.** Каждое условие, задающее множество допустимых значений, увеличивает сложность решения оптимизационной задачи. Поэтому для описания множества Ω не стоит использовать большое количество неравенств.
2. **Выпуклость.** У задач выпуклой оптимизации есть несколько полезных на практике свойств, в частности, это существование и единственность решения, а также оптимальные методы решения задач, которые имеют высокую производительность [2].
3. **Лёгкость интерпретации.** Желательно, чтобы параметры множества Ω давали бы понятную информацию об этом множестве, его размерах, ориентации и положении в пространстве.

В статье рассматривается построение множества Ω в виде эллипсоида наименьшего объема, принадлежащего многограннику ограничений и содержащего наибольшее количество объектов из заданного множества.

В разделе 2 приводится формальная постановка задачи. В разделе 3 сделан обзор существующих результатов, раздел 4 содержит описание предлагаемого подхода. Результаты численных экспериментов приведены в разделе 5. Заключение 6 содержит выводы по результатам исследования.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть даны:

1. Множество точек $X = \{x_i \in \mathbf{R}^d\}_{i=1}^N$.
2. Многогранник ограничений $D = \{x \in \mathbf{R}^d | Ax \leq b\}$, заданный системой m линейных неравенств относительно d переменных, где A – матрица размера $m \times d$, а вектор $b \in \mathbf{R}^m$ – вектор правых частей неравенств.

Требуется построить эллипсоид $E(P, c) = \{x \in \mathbf{R}^d | (x - c)^T P^{-1} (x - c) \leq 1\}$, где симметричная положительно определенная матрица P размера $d \times d$ – матрица эллипсоида, а вектор $c \in \mathbf{R}^d$ – центр эллипсоида. Эллипсоид должен принадлежать многограннику D и минимизировать следующие функции:

1. Объем эллипсоида:

$$\text{Vol}(E) = w_d (\det P)^{\frac{1}{2}}, \quad (1)$$

где $w_d = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2}+1)}$ – объем d -мерного единичного шара.

2. Количество точек из X вне эллипсоида:

$$K(E) = \#\{x \in X \mid (x - c)^T P^{-1} (x - c) > 1\} . \quad (2)$$

Одновременно минимизировать оба критерия в общем случае невозможно. Решением поставленной задачи двухкритериальной оптимизации

$$\begin{aligned} \min_{P,c} (Vol(E), K(E)) \\ s.t. E \subset D \end{aligned} \quad (3)$$

будет набор оптимальных по Парето эллипсоидов (*фронт Парето*). По определению это множество эллипсоидов, таких что не существует допустимых эллипсоидов $E' \subset D$, которые лучше эллипсоидов из этого набора по обоим критериям (1) и (2).

3. ИЗВЕСТНЫЕ ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ

В статьях [3], [4] авторы предложили подход к построению эллипсоидов для решения задачи (3) в два этапа. На первом этапе с помощью эмпирических методов строятся так называемые *базовые эллипсоиды* с использованием множества известных точек множества X . При этом не используется информация об ограничениях D , и базовый эллипсоид может не полностью лежать в допустимом многограннике.

В данных статьях в качестве базовых используются следующие эллипсоиды:

1. Эллипсоид наименьшего объёма, содержащий все точки множества X :

$$\begin{aligned} \min_E (Vol(E)) \\ s.t. X \subset E . \end{aligned} \quad (4)$$

2. Эллипсоид с минимальным следом его матрицы, содержащий все точки выборки X . Объём эллипсоида связан с определителем, то есть с произведением собственных чисел матрицы эллипсоида, а след – сумма собственных чисел матрицы – другая мера величины эллипсоида.

3. Эллипсоид главных компонент, центр которого совпадает со средним арифметическим всех точек множества X , а матрица эллипсоида пропорциональна ковариационной матрице множества X . Эллипсоид гомотетично растянут так, чтобы содержать все точки из X .

На втором этапе с помощью различных процедур строится новый эллипсоид, принадлежащий многограннику D . Применяется эмпирический подход последовательного сжатия эллипсоида в направлении, перпендикулярном к грани D , которую пересекает эллипсоид, до того, как все ограничения будут удовлетворены, так и две процедуры, связанные с решением оптимизационной задачи.

Одна из них заключается в том, что строится эллипсоид \tilde{E} наибольшего объёма, содержащийся в пересечении базового эллипсоида E и многогранника ограничений:

$$\begin{aligned} \max_E (Vol(\tilde{E})) \\ s.t. \tilde{E} \subseteq E \cap D . \end{aligned}$$

Более качественные результаты показал метод «**two ellipsoids**», в котором предварительно строится эллипсоид E_{max} наибольшего объёма, содержащийся в многограннике D :

$$\begin{aligned} \max_{E_{max}} (Vol(E_{max})) \\ s.t. E_{max} \subset D . \end{aligned} \quad (5)$$

Итоговый эллипсоид строится как эллипсоид максимального объёма, содержащийся в пересечении эллипсоида максимального объёма E_{max} и базового эллипсоида E :

$$\begin{aligned} \max_{\tilde{E}} \left(Vol(\tilde{E}) \right) \\ s.t. \tilde{E} \subseteq E_{max} \cap E . \end{aligned} \quad (6)$$

Задачи (5) и (6) с помощью линейных матричных неравенств [5] (*linear matrix inequalities*) могут быть сформулированы в виде задач выпуклого программирования [2]. Метод (6) показал наилучшие результаты в терминах объёма (1) и количества точек (2) вне эллипсоида.

В работах [6], [7], [8] предложен подход к построению базового эллипсоида на основе выборки точек, подробно рассмотренный и обобщённый в работе [9]. Функция (2) заменяется суммой неотрицательных величин ξ_i , которые равны нулю, если точка $x_i \in E$, и равна расстоянию от точки x_i до эллипсоида E в обратном случае. Для решения задачи

$$\min_{E, \xi} \left(Vol(E), \sum_{i=1}^N \xi_i \right)$$

применён метод скаляризации, и объём эллипсоида заменён эффективным радиусом R . Метод, который будет обозначен как **optimal ellipsoid**, сформулирован в виде:

$$\begin{aligned} \min_{P, c, R, \xi} R + \frac{1}{N\nu} \sum_{i=1}^N \xi_i \\ s.t. (x_i - c)^T P^{-1} (x_i - c) \leq R + \xi_i, i = 1 \dots N, \\ P = P^T \succ 0, \det P \leq 1, R \geq 0, \xi_i \geq 0, i = 1 \dots N . \end{aligned} \quad (7)$$

При решении задач многокритериальной оптимизации методом скаляризации перебираются различные значения параметра ν , который, как доказывается в статье [9], является наибольшей долей точек из X , которые лежат вне получающегося эллипсоида: $K(E) \leq \nu N$.

Как показали численные эксперименты, на большинстве выборок метод (7) даёт более качественные результаты по сравнению с другими методами построения базовых эллипсоидов.

В настоящей статье обсуждается новый подход на втором этапе после построения базового эллипсоида, когда делается учёт ограничений D одновременно с учётом требования содержания большинства точек X в пространстве дизайна.

4. ПРЕДЛАГАЕМЫЙ НОВЫЙ ПОДХОД

Пусть построен базовый эллипсоид $E(P, c) = \{x \in \mathbf{R}^d \mid (x - c)^T P^{-1} (x - c) \leq 1\}$ по точкам X . Данный эллипсоид может не принадлежать многограннику D . Построим эллипсоид $\tilde{E}(\tilde{P}, \tilde{c}) = \{x \in \mathbf{R}^d \mid (x - \tilde{c})^T \tilde{P}^{-1} (x - \tilde{c}) \leq 1\}$ как ближайший эллипсоид к E , удовлетворяющий ограничениям D .

Ограничение $\tilde{E} \subset D$ принадлежности эллипсоида \tilde{E} многограннику может быть записано в виде системы линейных матричных неравенств [2]:

$$\left\| \tilde{B}a_i \right\|_2 + a_i^T \tilde{c} \leq b^i, \quad i = 1, \dots, m, \quad (8)$$

где a_i^T – строки матрицы A , b^i – компоненты столбца b свободных членов системы неравенств, задающих многогранник D . В формуле (8) сделана замена переменных: $\tilde{B} = \tilde{P}^{\frac{1}{2}}$.

Определим меру близости между эллипсоидами $E(P, c)$ и $\tilde{E}(\tilde{P}, \tilde{c})$ следующим образом. Параметрами эллипсоида являются матрица P и координаты центра c . Для матрицы и вектора существуют метрики расстояния. Взяв их линейную комбинацию, получим функцию, с помощью которой можно измерять близость эллипсоидов:

$$\rho(E, \tilde{E}) = \left\| P^{\frac{1}{2}} - \tilde{P}^{\frac{1}{2}} \right\| + \lambda \|c - \tilde{c}\|. \quad (9)$$

При больших значениях параметра λ метрика более чувствительна к изменению положения центра эллипсоида. При малых значениях параметра на значение функции $\rho(E, E')$ более существенное влияние оказывает ориентация и размер эллипсоида.

Функция (9) является выпуклой относительно переменных в ограничении (8). Поэтому итоговая задача построения эллипсоида \tilde{E} является выпуклой:

$$\begin{aligned} \min_{\tilde{B}, \tilde{c}} & \left\| B - \tilde{B} \right\| + \lambda \|c - \tilde{c}\| \\ \text{s.t.} & \|Ba_i\|_2 + a_i^T \tilde{c} \leq b^i, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned} \quad (10)$$

Ожидается, что эллипсоид \tilde{E} будет не сильно отличаться от исходного эллипсоида E , и, следовательно, при уменьшении размеров, изменении формы и сдвига с целью выполнения условия $\tilde{E} \subset D$ за пределами нового эллипсоида окажется меньше точек из множества X .

Полученные оптимизационные задачи решаются с помощью пакета CVX для MATLAB [10].

5. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

В задаче (10) используется параметр λ , который определяет баланс между сохранением формы и ориентации эллипсоида и сдвигом центра. Согласно экспериментам, эллипсоид \tilde{E} принимает главным образом два положения при малых и больших значениях λ . При достижении определённого значения эллипсоид \tilde{E} перестаёт изменяться.

Рассмотрим датасет, состоящий из 100 точек стандартного двумерного нормального распределения, заключённых в прямоугольник ограничений. На рисунке 1 показаны получающиеся эллипсоиды в зависимости от значения параметра λ . В качестве базового эллипсоида выбран эллипсоид минимального объёма, полученный с помощью решения задачи (4). На его основе при различных значениях параметра λ с помощью задачи (10) получен итоговый эллипсоид. При изменении значения параметра λ от 1 до 2 получающийся эллипсоид практически не изменился.

Для дальнейших экспериментов выбрано значение $\lambda = 1$.

В качестве базовых эллипсоидов, построенных по точкам, возьмём эллипсоиды, построенные с помощью задачи (7).

Существуют множество способов определить норму матрицы. Из них были рассмотрены следующие виды:

1. L_2 -норма (спектральная) $\|A\|_1 = \sigma_{\max}(A)$ – наибольшее сингулярное число матрицы A , подчинённая евклидовой векторной норме

$$\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^d (x^i)^2}$$

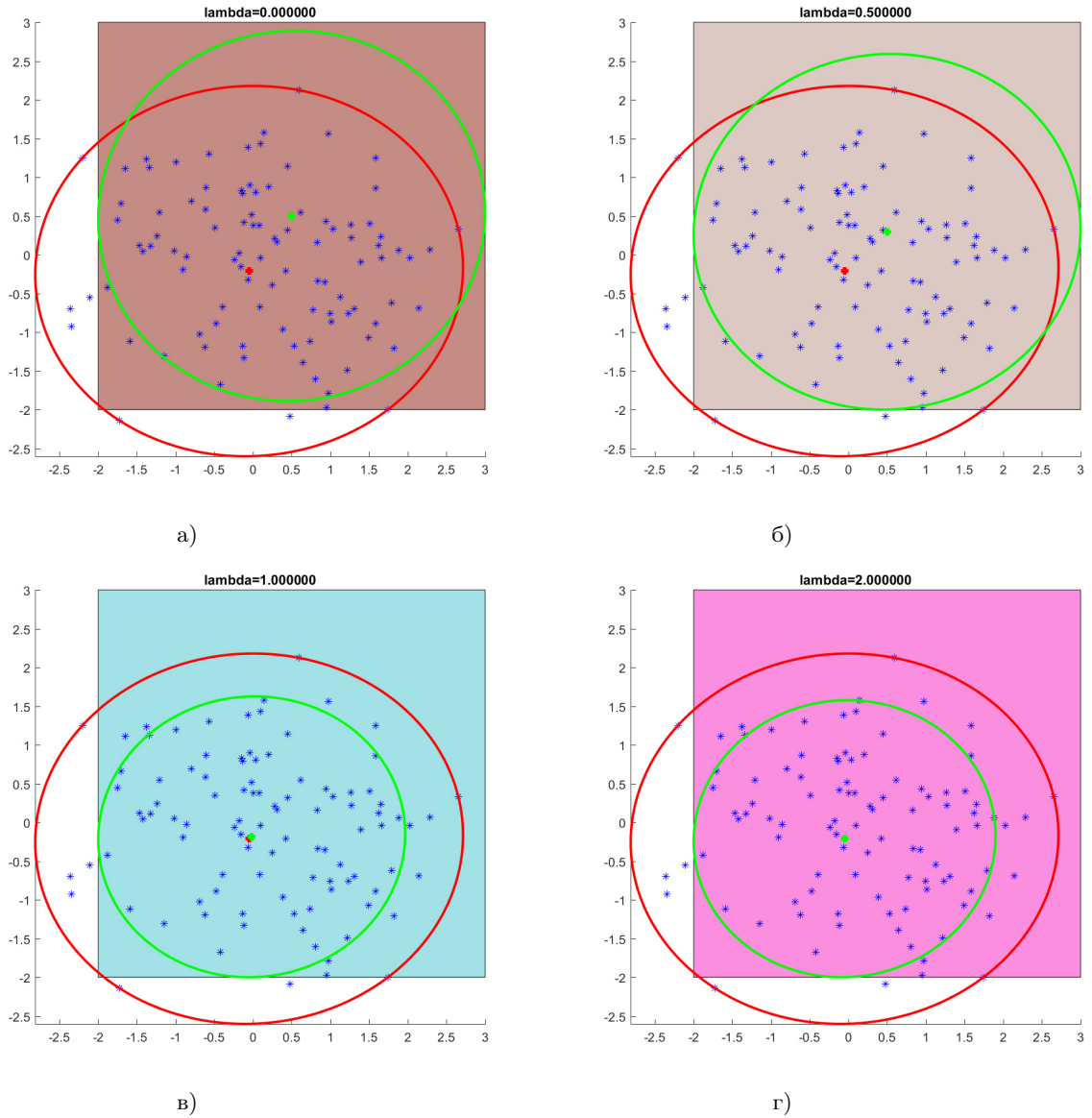


Рис. 1. Влияние значения параметра λ на решение задачи. Красной линией показан эллипсоид минимального объёма (4), построенный по точкам X . Он выходит за ограничения многогранника D . Зелёной линией – итоговый эллипсоид (10), лежащий внутри D .

2. L_1 -норма

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq d} \sum_{i=1}^d |a_{ij}|,$$

подчинённая векторной норме L_∞ $\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq d} |x^i|$.

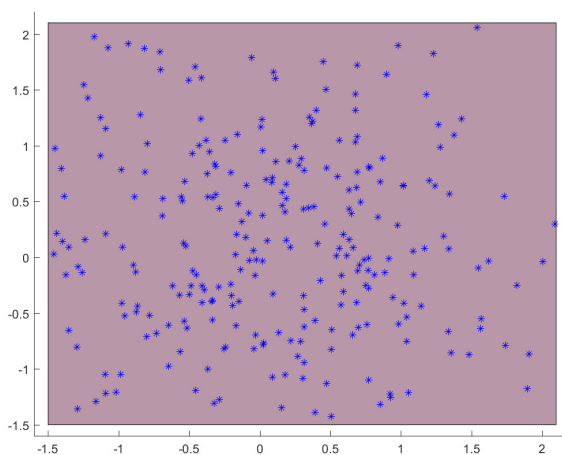
3. Норма Фробениуса (евклидовая):

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d a_{ij}^2}.$$

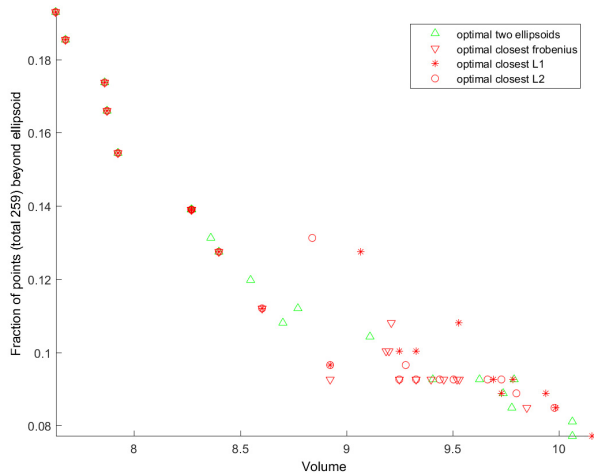
Сравним четыре процедуры изменения базового эллипсоида E , построенного по точкам, чтобы новый эллипсоид \tilde{E} лежал в многограннике D ограничений:

1. **Метод «two ellipsoids»**, сформулированный в задаче (6).
2. **Метод «closest L2»**. Строится эллипсоид \tilde{E} как ближайший к базовому эллипсоиду E . В задаче (10) используется L2-норма матрицы и евклидова норма вектора при подсчете расстояния между центрами эллипсоидов.
3. **Метод «closest L1»**. Строится эллипсоид \tilde{E} как ближайший к базовому эллипсоиду E . В задаче (10) используется L1-норма матрицы и L_∞ -норма вектора.
4. **Метод «closest frobenius»**. Строится эллипсоид \tilde{E} как ближайший к базовому эллипсоиду E . В задаче (10) используется норма Фробениуса матрицы и евклидова норма вектора.

Сравнение будет осуществляться на датасете, состоящем из 300 точек из стандартного нормального двумерного распределения, заключенных в прямоугольник ограничений, центр которого смещен относительно центра распределения точек. На рисунке 2 представлены результаты моделирования. На графике 2б отложены критерии получившихся эллипсоидов – объём (1) и доля точек вне эллипсоида $\frac{K(\tilde{E})}{N}$. По графику видно, что принципиальной разницы в использовании той или иной матричной нормы нет, и моделирование на других более сложных исходных данных подтверждает этот вывод. Поэтому далее приводятся результаты сравнения только с использованием нормы Фробениуса.



а) Множество X и многогранник D .



б) Фронты Парето.

Рис. 2. Тестовые данные (точки и многогранник ограничений) и результат моделирования с использованием различных матричных норм. Здесь и далее на аналогичных рисунку б) графиках по вертикальной оси отложена величина $\frac{K(\tilde{E})}{N}$ – доля точек из X , которые лежат вне эллипсоида, по горизонтальной – объём эллипсоида. Идентификаторы методов в легенде описаны выше.

Приведём ещё результаты применения предлагаемого подхода на двух наборах исходных данных X и D .

Рассмотрим множество из 300 точек, подчинённых стандартному нормальному распределению при ограничении вида полуплоскости $x \geq 0$ на расстоянии в 1.5 среднеквадратичных отклонения от центра распределения (см. рисунок 3а). Сравнение предлагаемого алгоритма с существовавшим ранее алгоритмом приведено на рисунке 3б. Три других ограничения, дополняющие левую вертикальную сторону до прямоугольника неактивны, но ограничивают многогранник D для возможности провести сравнение с алгоритмом (6).

В качестве примера более сложных ограничений рассмотрим следующие исходные данные. В качестве множества X возьмем 400 точек в трёхмерном пространстве, которые получены

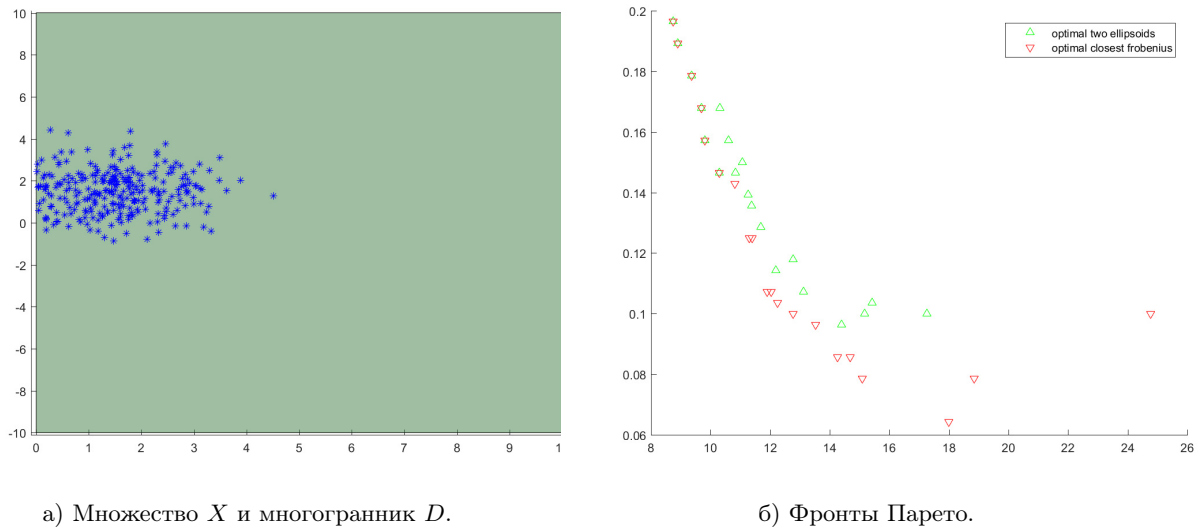


Рис. 3. Тестовые данные X из двумерного нормального распределения с ограничением D в виде полуплоскости и фронты Парето, полученные сравниваемыми методами.

с помощью двух стандартных нормальных распределений с центрами на расстоянии в $\frac{\sqrt{2}}{2}$ друг от друга в равных пропорциях. Предложены ограничения, формирующие многогранник, представленный на рисунке 4а. Результаты применения алгоритмов приведен на рисунке 4б.

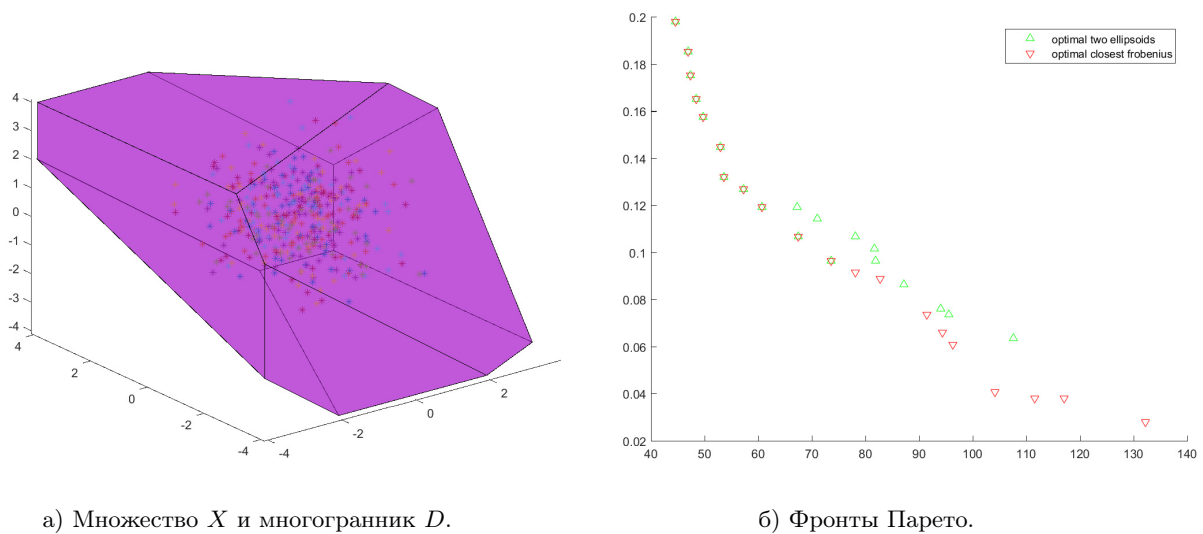


Рис. 4. Тестовые данные X из смеси двух трёхмерных нормальных распределений в многограннике D и фронты Парето, полученные сравниваемыми методами.

Анализ представленных рисунков показывает, что новый алгоритм построения ближайшего эллипсоида к базовому даёт хорошие результаты. Дополнительно получаем важное свойство, что в отличие от предыдущих методов учёта многогранника ограничений D не ставится ограничения на принадлежность нового эллипсоида базовому.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье предложен новый подход к описанию пространства дизайна с помощью экстремальных эллипсоидов с учётом известного множества точек и линейных ограничений. Подход заключается в решении серии выпуклых задач оптимизации для построения базовых эллипсоидов по точкам. Получающийся эллипсоид может не принадлежать допустимому множеству. Поэтому строится в некотором смысле ближайший к базовому эллипсоид, который лежит в допустимом многограннике.

Полученный алгоритм на многих датасетах даёт улучшенные значения критериев качества решения – объёма эллипсоида и количества точек вне эллипсоида. А на других датасетах выигрывает в некоторых частях диапазона решений или демонстрирует схожие по качеству эллипсоиды, полученные разработанными ранее методами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бедринцев А.А., Чепыжов В.В. Выпуклая оптимизация пространства дизайна в задаче оптимизации крыла самолета. *Информационные процессы*, 2016, Том 16, №2, стр. 91–102.
2. Boyd S., Vandenberghe L. *Convex Optimization*. Cambridge: University Press, 2004.
3. Бедринцев А.А., Чепыжов В.В., Чернова С.С. Экстремальные эллипсоиды как аппроксиматоры пространства дизайна в задачах предсказательного метамоделирования. *Искусственный интеллект и принятие решений*, 2015, №2, стр. 35–44.
4. Бедринцев А.А., Чепыжов В.В. Описание пространства дизайна в задачах представления и анализа данных с помощью экстремальных эллипсоидов. *Информационные технологии и системы*, 2016, г. Репино, Ленинградская обл..
5. Stephen Boyd, Laurent El Ghaoui, Eric Feron, Venkataramanan Balakrishnan. *Linear Matrix Inequalities in System and Control Theory*. SIAM studies in applied mathematics, 1994, vol. 15.
6. David T.J. Tax, Robert P.W. Duin. Support Vector Data Description. *Machine Learning*, 2004, vol. 54, pp. 45–66.
7. Wei-Cheng Chang, Ching-Pei Lee and Chih-Jen Lin. *A Revisit to Support Vector Data Description*. Technical report. National Taiwan University of Science and Technology, 2013.
8. Yang Zhang, Nirvana Meratnia, Paul J.M. Havinga. Distributed online outlier detection in wireless sensor networks using ellipsoidal support vector machine. *Ad Hoc Networks*, 2012, vol. 11, issue 3, pp. 1063–1074.
9. А.А. Бедринцев, В.В. Чепыжов, *Описание пространства дизайна с помощью экстремальных эллипсоидов в задачах представления данных*, Информационные процессы, 2015, т. 4, стр. 402–413.
10. CVX: Matlab Software for Disciplined Convex Programming. <http://cvxr.com/cvx/>

Construction of the closest ellipsoid in design space description problem with constrains

Bedrintsev A., Chepyzhov V.

An algorithm of design space description based on given set of points taking into account constraints is proposed in the article. Design space is described in form of an ellipsoid. The problem is solved in two stages. The first is to construct a base ellipsoid using points set only which may violate constraints. On the second stage an ellipsoid which is nearest to the base one and obeys the constraints is constructed. This problem is solved by series of convex optimization problems which are formulated by linear matrix inequalities.

KEYWORDS: extremal ellipsoids, convex programming, multi-objective optimization, Pareto frontier, linear matrix inequalities, design space.